



МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ имени Н. Э. Баумана (национальный  
исследовательский университет)

Представление на соискание учёной степени кандидата  
физико-математических наук по специальности 1.2.2 Математическое  
моделирование, численные методы и комплексы программ

## МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НЕЛОКАЛЬНОЙ ТЕРМОУПРУГОСТИ И ИХ ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

*Выступающий:* А. А. Соколов

*Научный руководитель:* д.ф.-м.н., доцент И. Ю. Савельева

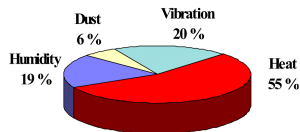
Москва, 2024

# Содержание

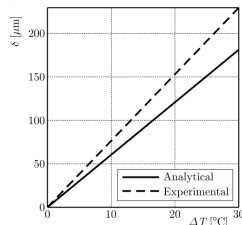
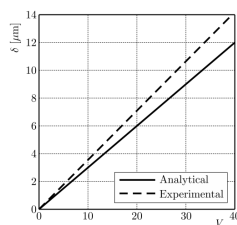
- ❶ Введение
- ❷ Математические модели
- ❸ Численный алгоритм решения
- ❹ Программный комплекс NonLocFEM
- ❺ Анализ решений
- ❻ Заключение

# Введение

## Введение



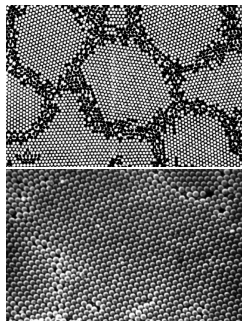
Причина выхода из строя  
микроэлектроники



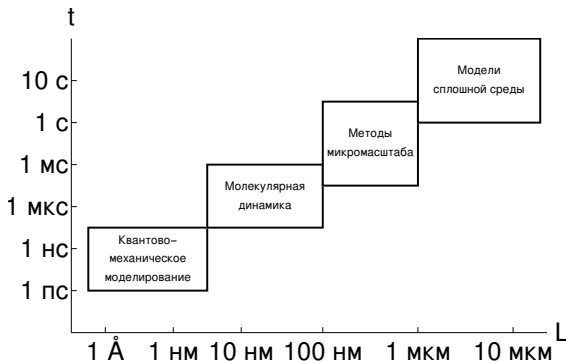
Отклонение наконечника привода при увеличении вольтажа и температуры

Изображения взяты из источников:

- Amir R. Life Expectancy of Electronic Equipment Post-Loss.
- Pourrostami, Hasan & Viliani, Navid. (2016). Study of a MEMS hybrid thermo-PZT micro actuator. Journal of Theoretical and Applied Mechanics. 54. 1309-1318. 10.15632/jtam-pl.54.4.1309.



Атомные решётки  
материалов



Иерархия моделей механики твёрдого  
тела

Изображения взяты из источников:

- Гусев А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 416 с. ISBN 5-9221-0582-5.
- Наноматериалы и нанотехнологии / В.М. Анищик [и др.] ; под ред. В.Е. Борисенко, Н.К. Толочко. Минск : Изд. центр БГУ, 2008. 375 с. ISBN 978-985-476-618-8.

# Модели обобщённой механики сплошной среды

Модели сплошной среды, учитывающие структуру материала:

- **моментные модели:**

- **микрополярные** (Eugène и François Cosserat, V. Günther, Э.Л. Аэро, Е.В. Кувшинский, Никабадзе М.У. и др.);
- **микроморфные** (R.D. Mindlin, A.C. Eringen и др.);

- **дальнодействующие эффекты:**

- **градиентные** (R.A. Toupin, R.D. Mindlin, E.C. Aifantis, С.А. Лурье, В.В. Васильев и др.);
- **нелокальные** (E. Kröner, A.C. Eringen, D. Rogula, D.G.B. Edelen, S.B. Altan, Г.Н. Кувыркин, В.С. Зарубин, И.Ю. Савельева и др.);

**Цель работы** — исследовать особенности **нелокальных** моделей теплопроводности и термоупругости, разработать собственный программный комплекс.



## Положения, выносимые на защиту

- Модели нелокальной теплопроводности и термоупругости, позволяющие описать процессы передачи теплоты и напряжённо-деформированного состояния в материалах с микро- и наноструктурой.
- Новые численные алгоритмы решения на основе метода конечных элементов, адаптированные под многопроцессорные вычислительные системы.
- Собственный программный комплекс NonLocFEM, в рамках которого реализованы все рассматриваемые в работе методы решений.

# Математические модели



# Основные соотношения

Уравнения стационарной теплопроводности и равновесия в 2D

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = q_V, \quad -\nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{b}$$

где вектор плотности теплового потока  $\mathbf{q}$  и тензор напряжений  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  определены

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = -p_1 \hat{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \nabla T - p_2 \int_{S'(\mathbf{x}) \cap S} \varphi(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \hat{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \nabla T dS'(\mathbf{x}),$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = p_1 \hat{\mathbf{C}} \cdot \cdot \left( \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}^T \Delta T \right) + p_2 \int_{S'(\mathbf{x}) \cap S} \varphi(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \hat{\mathbf{C}} \cdot \cdot \left( \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}^T \Delta T \right) dS'(\mathbf{x}),$$

$p_1 > 0$  и  $p_2 \geq 0$  — весовые параметры модели,  $p_1 + p_2 = 1$ ;

$\varphi(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$  — нормированная, положительная функция нелокального влияния, определённая на области  $S'(\mathbf{x})$ ;

$S'(\mathbf{x})$  — область нелокального влияния с центром в точке  $\mathbf{x} \in S$ ;

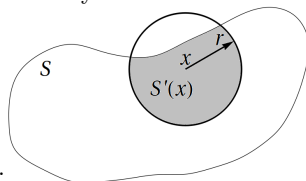
$S$  — область занимаемая рассматриваемым телом.

# Принятые гипотезы

Материал изотропный, а деформации малы, поэтому

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T}{2}, \quad \hat{\boldsymbol{\alpha}}^T = \alpha^T \hat{\mathbf{I}}_2, \quad \hat{\boldsymbol{\lambda}} = \lambda \hat{\mathbf{I}}_2,$$

$$C_{ijkl} = \frac{\nu E}{1 - \nu^2} \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{E}{2(1 + \nu)} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}).$$



Область  $S'(\mathbf{x})$ , заданная радиусом нелокальности  $r$ .

Граничные условия

$$T|_{\Gamma_1} = T_\Gamma(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}|_{\Gamma_2} = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}|_{\Gamma_3} = \alpha(T_a(\mathbf{x}) - T(\mathbf{x})),$$

$$\mathbf{u}|_{\Gamma_4} = \mathbf{d}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}|_{\Gamma_5} = \mathbf{p}(\mathbf{x}).$$

# Численный алгоритм решения

# Конечно-элементная аппроксимация уравнений

Матрично-векторные уравнения

$$\begin{aligned} \left( p_1 \hat{\mathbf{K}}_T^L + p_2 \hat{\mathbf{K}}_T^{NL} + \hat{\mathbf{K}}_T^\alpha \right) \cdot \mathbf{T} &= \mathbf{Q} + \mathbf{F} + \mathbf{T}^\alpha, \\ \left( p_1 \hat{\mathbf{K}}_E^L + p_2 \hat{\mathbf{K}}_E^{NL} \right) \cdot \hat{\mathbf{U}} &= \hat{\mathbf{B}} + p_1 \hat{\mathbf{E}}^L + p_2 \hat{\mathbf{E}}^{NL} + \hat{\mathbf{P}}. \end{aligned}$$

Ассемблирование классических матриц

$$\hat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^L = \sum_{e \in S_h} \sum_{n, m \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \mathbf{K}_{nm}^{ee}(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_q) J_q^e,$$

$\mathbf{K}_{nm}^{ee}$  — ядро интегрирование, зависящее от исследуемого уравнения.

Синий — алгоритм, формирующий портрет матрицы.

Красный — интегрирование.

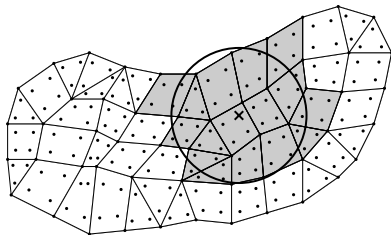
# Аппроксимация интегрального слагаемого

Квадратурная аппроксимация:

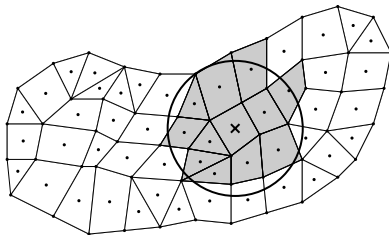
$$\hat{\mathbf{K}}_T^{NL} = \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q N_{n,i}^e(\mathbf{x}_q) J_q^e \sum_{e' \in S_h^q} \sum_{m' \in I^{e'}} \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \varphi(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) \lambda_{ij} N_{m',j}^{e'}(\mathbf{x}_{q'}) J_{q'}^{e'}.$$

Элементная аппроксимация:

$$\hat{\mathbf{K}}_T^{NL} = \sum_{n \in S_h} \sum_{e \in E^n} \sum_{e' \in S_h^e} \sum_{m' \in I^{e'}} \sum_{q \in Q^e} w_q N_{n,i}^e(\mathbf{x}_q) J_q^e \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \varphi(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) \lambda_{ij} N_{m',j}^{e'} J_{q'}^{e'}.$$



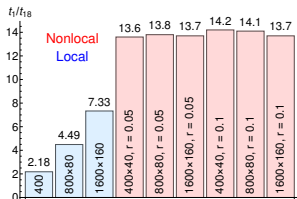
Квадратурная аппроксимация



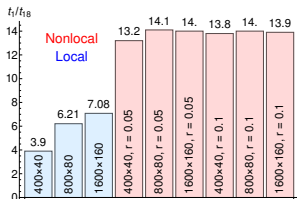
Элементная аппроксимация

# Программный комплекс NonLocFEM

# Эффективность распараллеливания



Матрица теплопроводности



Матрица жёсткости

## Эффективность распараллеливания алгоритма сборки матриц

Сетка	Радиус поиска	Используемый объём оперативной памяти		Время, с 18 потоков	
		$\bar{K}_T$	$\bar{K}_E$	$\bar{K}_T$	$\bar{K}_E$
400 × 40	0	6.2 Мб	23.8 Мб	0.028	0.048
800 × 80	0	24.5 Мб	95 Мб	0.116	0.274
1600 × 160	0	97.8 Мб	379 Мб	0.705	2.366
400 × 40	0.05	61.4 Мб	244 Мб	1.055	1.288
800 × 80	0.05	548 Мб	2.2 Гб	11.37	13.3
1600 × 160	0.05	5.5 Гб	22 Гб	132.9	155
400 × 40	0.1	133 Мб	532 Мб	2.68	3.26
800 × 80	0.1	1.34 Мб	5.4 Гб	32	37.8
1600 × 160	0.1	17 Гб	<b>68 Гб</b>	447	521

Занимаемая оперативная память и время ассемблирования матриц

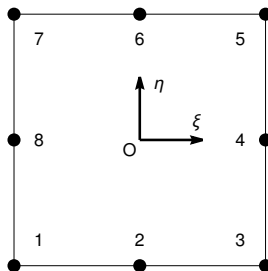
# Ускорение решения СЛАУ

Существует несколько способов, которые могут повысить эффективность итерационных решателей СЛАУ:

- Оптимизация сетки
- Предобуславливатель
- Начальное приближение
- Оптимизация базиса элементов

Число обусловленности

$$\text{cond} \hat{\mathbf{K}} = \sqrt{\frac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|}}.$$



Квадратичный серендиповый элемент



# Параметрический базис элемента

$$N_i = \frac{1}{16}(1 + \xi_i \xi)(1 + \eta_i \eta)((9s - 1)(1 - \xi_i \xi - \eta_i \eta) + (9s + 3)\xi_i \xi \eta_i \eta),$$

$$i = 1, 3, 5, 7; \xi_i, \eta_i = \pm 1,$$

$$N_i = \frac{1}{16}(1 - \xi^2)(1 + \eta_i \eta)((5 - 9s) + (9s + 3)\eta_i \eta), \quad i = 2, 6; \eta_i = \pm 1,$$

$$N_i = \frac{1}{16}(1 - \eta^2)(1 + \xi_i \xi)((5 - 9s) + (9s + 3)\xi_i \xi), \quad i = 4, 8; \xi_i = \pm 1.$$

Выбор параметра  $s$  был основан на следующих предположениях

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 N_i(\xi, \eta) d\xi d\eta = s, \quad i = 1, 3, 5, 7, \quad \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 N_i(\xi, \eta) d\xi d\eta = 1 - s, \quad i = 2, 4, 6, 8.$$

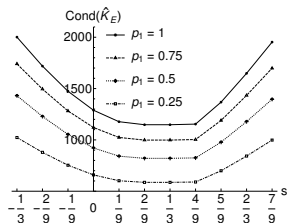
Классический базис получаем при  $s = -1/3$ .

Минимальный след матрицы оценим следующим образом

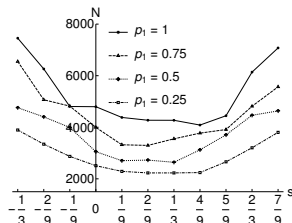
$$\min_s \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \sum_{i=0}^8 \sum_{j=0}^2 c_j N_{i,j}^2(\xi, \eta) d\xi d\eta = \min_s C(27s^2 - 12s + 19) \rightarrow s = \frac{2}{9}.$$

# Скорость сходимости решателя СЛАУ

Связь собственных чисел:  $\lambda_{\max}^{NL} = p_1 \lambda_{\max}^L$ ;  $\lambda_{\min}^{NL} \approx \lambda_{\min}^L$ .



(а) число обусловленности



(б) количество итераций

$p_1$	Id	$\text{ILLT}(\hat{K}_E^L)$	$\text{ILLT}(\hat{K}_E^L) + T_0$
0.75	6330	2902	2736
0.5	5167	2290	2389
0.25	3779	1718	1740

Id — единичный предобуславливатель;

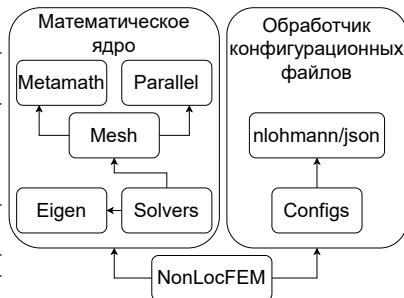
$\text{ILLT}(\hat{K}_E^L)$  — неполное разложение Холецкого классической матрицы;

$T_0$  — решение классической задачи при тех же граничных условиях.

# Структура программного комплекса NonLocFEM

## Возможные постановки:

- стационарная и нестационарная теплопроводность (1D, 2D);
- статические задачи несвязанной термоупругости (2D);
- граничные условия I, II, III родов и излучение;
- кинематические и силовые граничные условия;
- задачи идеального контакта с использованием произвольного количества материалов;
- возможность использовать изотропные и ортотропные материалы.



Структура программы  
NonLocFEM\*

\* Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021661966. NonLocFEM / А. А. Соколов, И. Ю. Савельева. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 20.07.2021.

# Анализ решений

# Принципы Сен-Венана и стабильности тепловых потоков

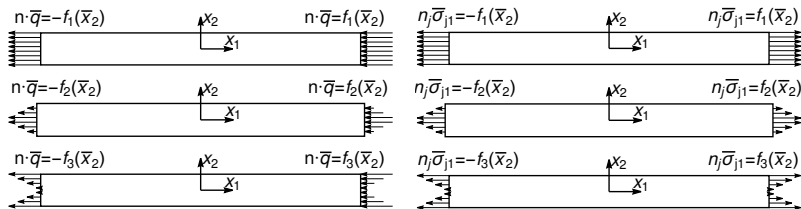
Область  $S = [-5, 5] \times [-0.5, 0.5]$ , сетка  $S_h$  включает  $1500 \times 150$  элементов. Рассмотрим граничные, геометрические и интегральные условия

$$\mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{\bar{x}_1=-5} = f(\bar{x}_2), \quad \mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{\bar{x}_1=5} = -f(\bar{x}_2), \quad \int_S T dS = 0,$$

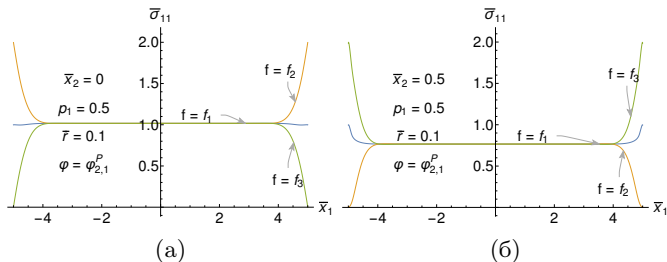
$$\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}|_{x_1=0} = -f(x_2), \quad \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}|_{x_1=10} = f(x_2), \quad u_1|_{x_1=0.5} = 0, \quad u_2|_{x_2=5} = 0.$$

В качестве  $f$  возьмём одно из трёх нагружений

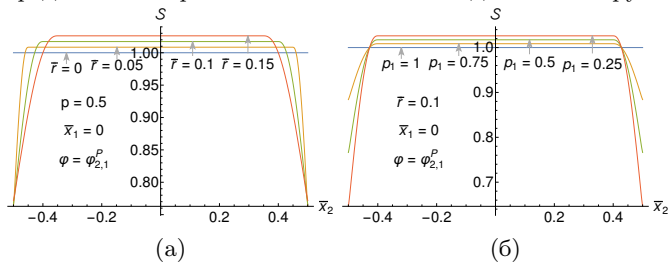
$$f_1(x) = 1, \quad f_2(x) = 2 - 4|x|, \quad f_3(x) = 4|x|,$$



Тепловые и механические нагружения, прикладываемые к пластине на левой и правой границах



Распределения напряжения  $\bar{\sigma}_{11}$  в сечениях вдоль оси нагружения



Распределение напряжения  $\bar{\sigma}_{11}$  в сечении поперёк оси нагружения

# Задача Кирша с обобщением на эллиптические вырезы

Граничные и геометрические условия

$$n_j \bar{\sigma}_{j2}|_{x_1=-1} = -1, \quad n_j \bar{\sigma}_{j2}|_{x_1=1} = 1, \quad u_1|_{x_2=0} = 0, \quad u_2|_{x_1=0} = 0.$$

Координаты на дуге АВ

$$\begin{cases} x_1(\theta) = R_1 \cos \theta, \\ x_2(\theta) = R_2 \sin \theta. \end{cases}$$

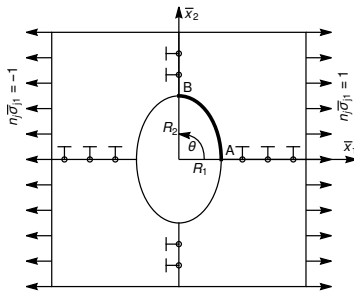
Натуральный параметр длины

$$l(\theta) = \int_0^\theta \sqrt{\left(\frac{\partial x_1}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_2}{\partial \varphi}\right)^2} d\varphi.$$

Обезразмерим параметр длины

$$\bar{l}(\theta) = \frac{l(\theta)}{l\left(\frac{\pi}{2}\right)}, \quad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}.$$

Область  $S \subset [-1, 1] \times [-1, 1]$ , сетка  $S_h$ , где  $h \approx 0.005$ .



Область с эллиптическим вырезом

Отношение длин полуосей

$$\rho = R_2/R_1.$$

Максимальные напряжения

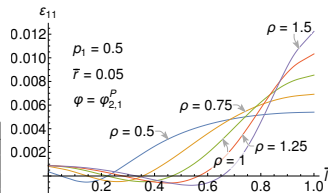
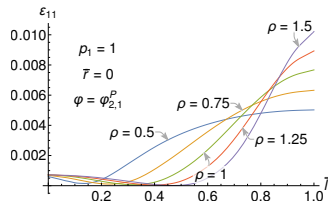
$$\bar{\sigma}_{11}^{\max} = \kappa(p_1) (1 + 2\rho) \sigma_0.$$

Множитель зависящий от  $p_1$

$$\kappa(p_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n \frac{\bar{\sigma}_{11}^{\max}(\rho_i, p_1)}{\bar{\sigma}_{11}^{\max}(\rho_i, 1)}.$$

$\rho$	Весовые параметры			
	$p_1 = 1$	$p_1 = 0.75$	$p_1 = 0.5$	$p_1 = 0.25$
0.5	2.012	1.783	1.537	1.510
0.75	2.578	2.235	1.919	1.727
1	<b>3.053</b>	2.696	2.308	1.937
1.25	3.532	3.123	2.670	2.139
1.5	4.012	3.551	3.031	2.404
$\kappa$	1	0.881	0.755	0.652

Максимальный уровень напряжения  $\bar{\sigma}_{11}$  при вариации отношения длин полуосей  $\rho$  и весового параметра  $p_1$ , где  $\bar{\tau} = 0.05$



Распределение деформации  
в локальном и нелокальном  
случаях



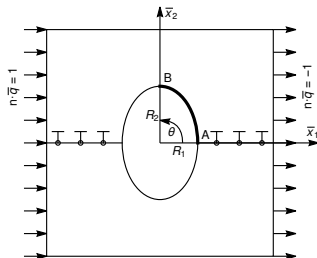
# Температурные деформации на области с вырезом

Рассмотрим ту же область, что была на задаче Кирша, но поставим тепловое нагружение на границах

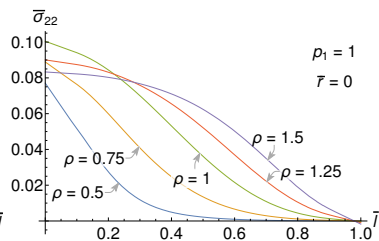
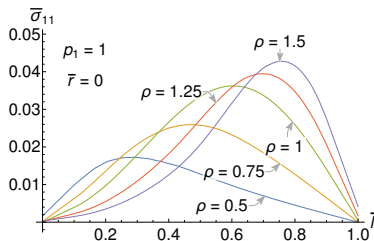
$$\mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{\bar{x}_1=-1} = 1, \quad \mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{\bar{x}_1=1} = -1, \quad \bar{u}_2|_{\bar{x}_1=0} = 0.$$

Для единственности решения поставим интегральные условия на температуру и первую компоненту перемещения

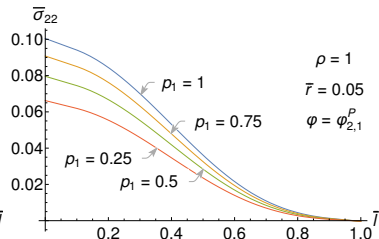
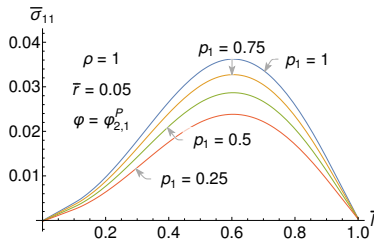
$$\int_S \bar{T} dS = 0, \quad \int_S \bar{u}_1 dS = 0.$$



Область с эллиптическим вырезом  
и тепловыми граничными  
условиями



Распределение напряжений  $\bar{\sigma}_{11}$  и  $\bar{\sigma}_{22}$  при вариации соотношения  $\rho$



Распределение напряжений  $\bar{\sigma}_{11}$  и  $\bar{\sigma}_{22}$  при вариации параметра  $p_1$

# Заключение

## Результаты работы и научная новизна

- Предложены новые эффективные численные алгоритмы для задач нелокальной теплопроводности и нелокальной термоупругости на основе метода конечных элементов, которые обладают хорошей масштабируемостью и предназначены для вычислений на многопроцессорных вычислительных машинах с общей и распределённой памятью.
- Разработан собственный программный комплекс NonLocFEM, в котором реализованы все представленные в работе алгоритмы и методы для моделирования эффектов встречающихся на микро- и наномасштабах.
- Получены новые результаты в задачах с известными для классической постановки решениями, установлены закономерности, свидетельствующие о снижении роли концентраторов в распределениях полей напряжений и плотности теплового потока.
- Исследованы границы спектров собственных чисел матриц и установлены новые связи между спектрами матриц, ассемблированных в классической и нелокальной постановках.

## Список публикаций

- ❶ Kuvyrkin G. N., Savelyeva I. Y., Sokolov A. A. Features of the software implementation of the numerical solution of stationary heat equation taking into account the effects of nonlocal finite element method // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1479. No. 1.
- ❷ Kuvyrkin G. N., Savelyeva I. Y., Sokolov A. A. 2D nonlocal elasticity: Investigation of stress and strain fields in complex shape regions // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 2023. Vol. 103. No. 3.
- ❸ Кувыркин Г. Н., Соколов А. А. Принцип Сен-Венана в задачах нелокальной теории упругости // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2023. Т. 109. № 4. С. 4—17.
- ❹ Mathematical modeling of insulating coating of thermal conductivity in cluding body's own radiation and non-local spatial effects / A. A. Sokolov [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. 2024. Vol. 2817. No. 1. P. 12—28.
- ❺ Кувыркин Г. Н., Соколов А. А. Решение задачи о напряженно-деформированном состоянии пластины с эллиптическим вырезом при механических и температурных нагружениях в нелокальной постановке // Прикладная механика и техническая физика. 2024. № 4. С. 193—203.

# Свидетельство о регистрации программы



Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021661966. NonLocFEM / А. А. Соколов, И. Ю. Савельева. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 20.07.2021.

## Участие в конференциях

- Международная научно-техническая конференция «Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики» (Воронеж, 2019, 2021);
- Международная конференция «International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics» (Родос, Греция, 2021);
- Международная научная конференция «Фундаментальные и прикладные задачи механики» (Москва, 2021);
- Всероссийская конференция по численным методам решения задач теории упругости и пластичности (Красноярск, 2023);
- Международная конференция «Математическое моделирование, численные методы и инженерное программное обеспечение» (Москва, 2023).

## Участие в грантах

- 0705-2020-0047 «Теория дифференциальных уравнений, краевые задачи, связанные задачи анализа и теории приближений и некоторые их приложения».
- FSN-2023-0012 «Разработка математических моделей и методов проектирования изделий ракетно-космической техники из перспективных конструкционных и функциональных материалов».
- FSN-2024-0004 «Разработка математических моделей и методов проектирования изделий ракетно-космической техники из перспективных конструкционных и функциональных материалов».



Спасибо за внимание!

## Ответы на замечания ведущей организации

- Замечание 1
- Замечание 2
- Замечание 3
- Замечание 4
- Замечание 5

## Ответы на замечания оппонента Бураго Н. Г.

- Не ясна причина использования именно квадратичных серендиповых элементов. Например, если проводить расчёты билинейными элементами, будет ли большая разница между решениями? Или, если использование квадратичных элементов необходимо, то почему использованы восьмиузловые серендиповы, а не девятиузловые лагранжевы элементы?
- В работе был проведён анализ с исследованием поведения решений при использовании двух семейств функций нелокального влияния. Однако неясно, из каких соображений следует выбирать то или иное.

- Для предобуславливания системы линейных алгебраических уравнений конечно-элементных аппроксимаций использован алгоритм неполного разложения Холецкого. Детали его реализации не приводятся. Вместе с тем, в настоящее время существуют достаточно эффективные параллельные (MPI, OpenMP) реализации неполного разложения Холецкого, например, в свободной и бесплатной библиотеке SuperLU. Использование подобных библиотек сделало бы параллельной самую вычислительно «тяжелую» часть программной реализации и позволило бы рассматривать задачи существенно большей сеточной размерности. Так же автору следует рассмотреть возможность использования предобуславливателей на основе многосеточного метода, имеющих практически идеальную масштабируемость и «по-элементных» («element-by-element») предобуславливателей.

## Ответы на замечания оппонента Савенкова Е. Б.

- Основное назначение предложенных автором моделей – это моделирование процессов в микро- и нано-неоднородных средах и материалах. Вместе с тем, связь между параметрами использованных феноменологических моделей и параметрами первичными, «микро-неоднородных» моделей в работе не показана и не анализируется.
- Предложенный в работе алгоритм численного решения оперирует блочными матрицами и в работе были введены определения блоков, из которых ассемблируются матрицы теплопроводности (2.9) и жёсткости (2.10). Однако процедура, при которой были получены именно такие определения блоков, не до конца изложена.