

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

На правах рукописи

Соколов Андрей Александрович

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НЕЛОКАЛЬНОЙ
ТЕРМОУПРУГОСТИ И ИХ ЧИСЛЕННАЯ
РЕАЛИЗАЦИЯ**

1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы
программ

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук



Научный руководитель:
д.ф.-м.н., доцент
Савельева Инга Юрьевна

Москва — 2024

Оглавление

| | Стр. |
|---|-----------|
| Список сокращений и обозначений | 4 |
| Введение | 5 |
| Глава 1. Основные соотношения | 16 |
| 1.1. Определение нелокального оператора | 16 |
| 1.2. Уравнение стационарной теплопроводности | 16 |
| 1.3. Уравнение равновесия | 17 |
| 1.4. Определение области и функции нелокальности | 19 |
| 1.5. Основные результаты и выводы по главе 1 | 25 |
| Глава 2. Численная схема решения на основе метода конечных элементов | 26 |
| 2.1. Общие сведения о методе конечных элементов | 26 |
| 2.2. Аппроксимация уравнений | 27 |
| 2.3. Ассемблирование систем уравнений | 31 |
| 2.4. Вычисление производных величин | 34 |
| 2.5. Основные результаты и выводы по главе 2 | 35 |
| Глава 3. Реализация программного комплекса | 36 |
| 3.1. Общая структура программного комплекса | 36 |
| 3.2. Параллельный алгоритм ассемблирования матриц | 42 |
| 3.3. Алгоритм аппроксимации области нелокального влияния | 47 |
| 3.4. Оптимизация базисных функций конечных элементов | 47 |
| 3.5. Основные результаты и выводы по главе 3 | 51 |
| Глава 4. Анализ результатов расчётов | 52 |
| 4.1. Стратегия исследования и обезразмеривание | 52 |

| | |
|--|------------|
| 4.2. Основные особенности решений | 53 |
| 4.3. Исследование функций нелокального влияния | 57 |
| 4.4. Принципы Сен-Венана и стабильности теплового потока | 59 |
| 4.5. Растяжение пластины со ступенчатым переходом | 64 |
| 4.6. Задача Кирша с обобщением на эллиптические вырезы | 70 |
| 4.7. Тепловые деформации в областях с эллиптическими вырезами . . | 74 |
| 4.8. Основные результаты и выводы по главе 4 | 78 |
| Глава 5. Анализ эффективности программного комплекса | |
| NonLocFEM | 80 |
| 5.1. Тестирование алгоритма ассемблирования матриц | 80 |
| 5.2. Анализ скорости сходимости при оптимизации базиса конечных элементов | 83 |
| 5.3. Предобуславливание и выбор начального приближения | 89 |
| 5.4. Основные результаты и выводы по главе 5 | 91 |
| Общие выводы и заключение | 92 |
| Список литературы | 93 |
| Приложение | 109 |

Список сокращений и обозначений

Серендиповый конечный элемент: конечный элемент, все узлы которого находятся на границе элемента.

СЛАУ: Система линейных алгебраических уравнений.

ЭВМ: Электронная вычислительная машина.

MPI: Message Passing Interface.

OpenMP: Open Multi-Processing.

Введение

Задачи термоупругости очень популярны в различных инженерных приложениях, так как температурные деформации могут существенным образом повлиять на функциональные свойства рассматриваемых объектов, вплоть до их полного выхода из строя. Особенно популярны такого рода задачи в аэрокосмической отрасли при моделировании поведения обшивок корпусов и двигателей летательных аппаратов [33, 92, 118], так как они подвержены очень высоким и в то же время неравномерным нагрузкам [32, 91, 97, 109]. Помимо аэрокосмической отрасли такие задачи могут быть востребованы в строительстве, особенно в строительстве критической инфраструктуры, такой, например, как атомные электростанции [29, 61]. В гражданской инфраструктуре актуален анализ влияния таких разрушительных явлений как пожары [59, 100] или обычная циклическая смена сезона [127, 128], при воздействии которых конструкция не должна потерять устойчивость. В микроэлектронике эти задачи также не остаются без внимания [62, 129], а учитывая возрастающее количество вычислительных мощностей и популярность микро- и наноэлектромеханических систем (МЭМС/НЭМС), возникают задачи об эффективном отводе тепловой энергии [28].

Все перечисленные ранее и многие другие задачи объединяет потребность в создании новых материалов, которые будут отвечать соответствующим их использованию требованиям. На сегодняшний день в некоторых отраслях требования к свойствам материалов становятся уже настолько высокими, что при их создании необходимо учитывать молекулярную структуру материала на микро- и наноуровне [35, 126, 132], так как их свойства могут напрямую зависеть от этого. Такие материалы принято называть структурно-чувствительными, а создание материалов с наперёд заданными свойствами на сегодняшний день

является одной из сложнейших, но вместе с этим крайне актуальной областью материаловедения [43].

Вместе с проблемой создания структурно-чувствительных материалов многие исследователи сталкиваются с проблемой моделирования их поведения. При рассмотрении наномасштабных структур отсутствует возможность использовать гипотезу сплошности среды, из-за чего классические модели механики сплошной среды не могут даже на качественном уровне передать все особенности их поведения. Так, например, в наномасштабе перестаёт работать гипотеза Био — Фурье [76, 137] и наблюдается пониженная чувствительность к концентраторам напряжений [102, 112]. Этому способствуют такие эффекты, как микровращения отдельных зёрен материала, микродислокации, различные дальнодействующие и многие другие масштабные эффекты, которые могут быть смоделированы только при помощи новых математических моделей.

На сегодняшний день существует большое количество моделей способных описать различные масштабные эффекты. Однако подходы моделирования могут достаточно сильно различаться между собой при рассмотрении разных линейных размеров и временных отрезков. Таким образом, возникают иерархии моделей, способных качественно и количественно описать различные аспекты поведения материала на разных масштабах. Это, в свою очередь, приводит к идее многомасштабного моделирования [17], где, например, некоторые характеристики материала можно вычислять при помощи моделей, находящихся ниже по иерархии, и передавать полученные в расчётах параметры в вышестоящие модели или наоборот.

Для механики твёрдого тела одна из возможных иерархий моделей проиллюстрирована на Рис. 1. Согласно такому представлению модели, использующие аппарат квантовой механики [79, 107], находятся на первой ступени иерархии, их применение ограничено масштабами сопоставимыми с ядрами атомов и простейших молекулярных соединений, состоящих из небольшого числа

атомов, то есть в диапазоне от нескольких ангстрем до нескольких нанометров. На второй ступени иерархии находятся модели молекулярной динамики [57, 60, 94, 106], такие модели могут описывать поведение сложных соединений, например, больших полимерных молекул и прочих наномасштабных объектов, размеры которых не превосходят нескольких десятков нанометров. На третьей ступени располагаются статистические модели, в частности модели, в основе которых лежит метод Монте-Карло [111, 136]. В таких моделях расчёты проводят многократно, а структуру рассматриваемого объекта генерируют случайным образом по определённым правилам, после чего полученные таким способом результаты осредняют или вычисляют на их основе вероятностные характеристики материала. И на последней — четвёртой ступени иерархии стоят континуальные модели, в частности модели механики сплошной среды [34]. Такие модели оперируют гипотезами сплошности среды и абсолютности времени, то есть не учитывают дискретность рассматриваемого вещества.

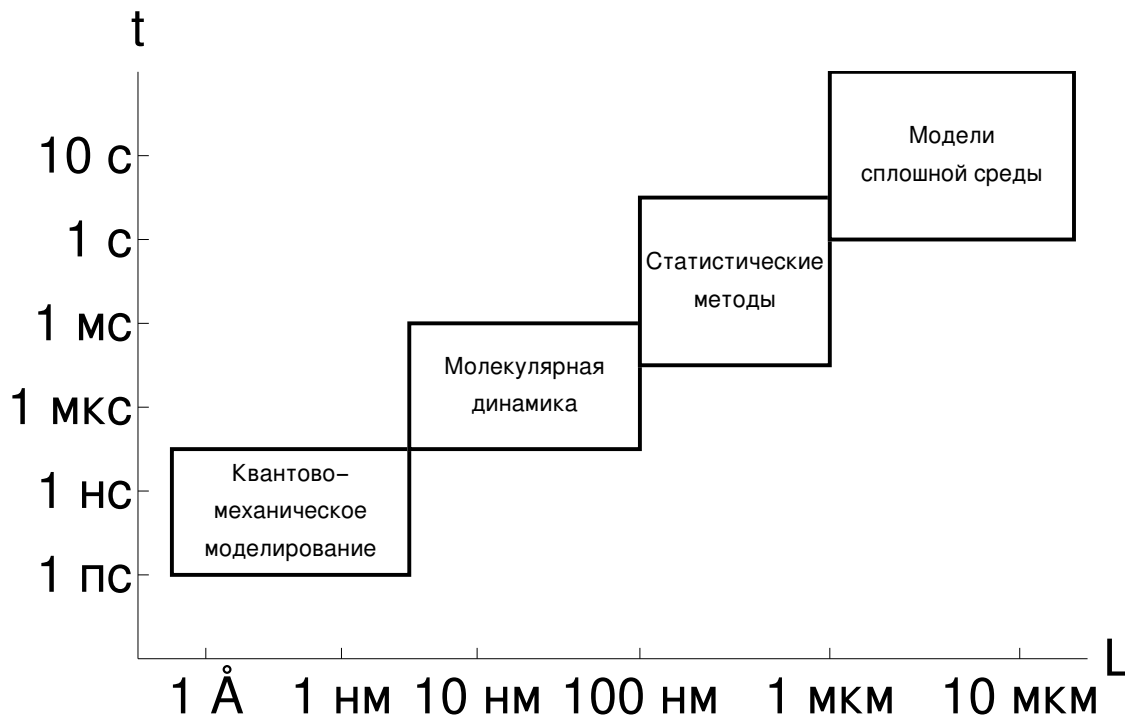


Рис. 1. Иерархия моделей

Однако у статистических моделей и моделей молекулярной динамики есть недостаток — анализ объектов при помощи этих моделей без численных экс-

периментов крайне ограничен [98]. Поэтому с середины XX века набирают популярность модели обобщённой механики сплошной среды, которые распространяют применение моделей высшего уровня на области применения моделей низшего уровня. Одна из первых таких моделей была предложена в работе братьев Eugène и François Cosserat [77], где помимо трансляционных степеней свободы также были учтены и вращательные компоненты движения, которые связаны с трансляционными рядом соотношений, из-за чего тензор напряжений перестаёт быть симметричным. Позже, спустя пол века, эта теория была связана с теорией дислокаций в работе V. Günther [96] и дополнена законом сохранения микроинерции в работе А.С. Eringen [85, 88], в связи с чем теорию начали называть микрополярной теорией упругости. Также к работам, в которых исследована микрополярная теория упругости, можно отнести работы R.D. Mindlin [113, 115, 117], D.B. Bogy [75] и Y.C. Hsu [99]. В них авторы рассматривали применение этой теории в задачах с концентраторами, возникающим в углах и отверстиях соответственно. В то же время теория нашла своё отражение в работах советских учёных Э.Л. Аэро и Е.В. Кувшинского [21, 22], а также была рассмотрена в работах Н.Ф. Морозова [45] и Г.Н. Савина [55].

Дальнейшее развитие микрополярной теории упругости привело к появлению микроморфных моделей [44, 86, 135], в которые помимо вращательных компонент движения могут быть включены дополнительные переменные, связанные с деформацией материала, при этом микрополярная теория упругости является лишь частным случаем микроморфных моделей. Но стоит учесть тот факт, что использование таких моделей сопряжено с трудностью определения материальных коэффициентов.

Список рассмотренных моделей, учитывающих микровращение, а также авторов, которые занимались их развитием и исследованием, далеко не исчерпывающий. Однако стоит также уделить внимание другому классу моделей обобщённой механики сплошной среды, описывающих дальнodelействующие эф-

факты. Это градиентные модели, которые получили своё развитие в 60-х годах XX века. Эти модели оперируют высшими производными деформаций, в связи с чем они и получили такое название. Первые модели градиентной теории упругости были сформулированы в работах Toupin R.A. [130] и Mindlin R.D. [114, 116], которые сейчас в литературе принято называть моделями Миндлина — Тупина [24, 83, 105]. В работе G. Ahmadi и K. Firoozbakhsh [66] эти модели получили обобщение на температурные деформации. Как и микроморфные, градиентные модели обладают тем же недостатком — большое количество материальных констант, которые необходимо определить, поэтому в 90-х годах XX века в работах E.C. Aifantis и его соавторов [67, 125] была рассмотрена упрощённая модель градиентной теории упругости, в которой напряжения связаны с деформацией и её вторым градиентом, и, по сравнению с классической моделью, был добавлен всего один дополнительный материальный параметр внутренней длины.

Существует ещё один класс моделей, описывающих дальнodelействующие эффекты, — это нелокальные модели, которые в отличие от градиентных оперируют интегральными выражениями типа свёртки. Впервые описание таких моделей было представлено в работе E. Kröner [101], где были рассмотрены упругие среды с дальнodelействующими силами сцепления. Модели нелокальной упругости в термодинамическом контексте были рассмотрены в работах D.G.B. Edelen, A.E. Green и N. Laws [81, 82], позже к их работе присоединился и A.C. Eringen [84, 89]. Исследование условий, обеспечивающих существование фундаментальных решений было проведено в работе D. Rogula [124]. Вопросы, связанные с существованием и единственностью решений начально-краевых задач теории нелокальной упругости были рассмотрены в работах S.B. Altan [69, 71], позже он рассмотрел этот вопрос и для задач нелокальной термоупругости [70, 133]. В конечном итоге, в начале XXI века, A.C. Eringen представил работу [87], в которой описан единый подход к построению нелокальных теорий для упругих тел, в связи с чем в литературе нелокальные модели часто назы-

вают моделями Эрингена и их исследованию посвящено достаточно большое количество работ [64, 90, 131]. При этом между нелокальными и градиентными моделями существует связь, которая была рассмотрена в работах S.B. Altan и E.C. Aifantis [68], J. Gao [95] и др.

У нелокальных моделей также есть свои недостатки. Главный из них — необходимость введения дополнительных условий, так как обычных граничных условий будет недостаточно [121]. Поэтому в прикладных исследованиях используют регуляризованные модели, в которых рассматривают комбинированные среды, состоящие из локальной и нелокальной фаз. Первые примеры рассмотрения такого рода сред можно найти в работах С. Polizzoto [122, 123], где были проанализированы одномерные задачи упругости, а также разработан численный метод решения на основе метода конечных элементов. Развитие этих идей в рамках двумерных задач нелокальной упругости было описано в работе А.А. Pisano [120].

Анализ моделей нелокальной теплопроводности на примере решения одномерных задач был проведён в работе Г.Н. Кувыркина и И.Ю. Савельевой [40]. В это же время Г.Н. Кувыркиным были рассмотрены нелокальные модели термовязкоупругости в работах [37—39]. Позже в работах И.Ю. Савельевой были рассмотрены задачи термоудара [51, 54] и вариационные постановки задачи [50, 52]. Построение термомеханических моделей, оценка тепловых и термоупругих свойств дисперсных структур, а также вариационные формулировки моделей были представлены в диссертационной работе И.Ю. Савельевой [53]. К исследованиям нелокальных моделей были подключены и ученики Г.Н. Кувыркина в том числе и автор данной диссертационной работы [41, 42, 103, 104, 110].

Решение задач в нелокальных постановках вызывает достаточно много сложностей, так как приходится иметь дело с интегро-дифференциальными уравнениями, которые не всегда имеют аналитические решения даже на простых областях. В этом случае необходимо использовать различные численные

методы, специально адаптированные под данный класс уравнений. В этом направлении есть уже достаточно большое количество работ, предлагающих использовать различные методы решения. Наиболее общим и популярным является метод конечных элементов (FEM), который применительно к данному классу уравнений иногда ещё называют методом нелокальных конечных элементов (NL-FEM) [120, 123]. Однако его использование сопряжено с большой вычислительной сложностью. Поэтому некоторые исследователи используют его модификацию на основе быстрого преобразования Гаусса (FEMFGT) [74]. Но использование такого подхода сопряжено с проблемами контроля точности. Для того, чтобы избежать осцилляций, необходимо решать задачи на достаточно подробных сетках, что в некоторых ситуациях лишает данный подход ожидаемых преимуществ перед прямым методом решения. Помимо сеточных методов большой популярностью пользуются и бессеточные подходы на основе радиальных базисных функций [134], безэлементный метод Галёркина (EFG) и метод конечных точек (FPM) [65]. Также были предложены подходы с использованием пограничного слоя [64] и на основе полиномов Чебышёва [63], однако на практике этот метод не применяется в силу своей трудоёмкости, но он может быть использован для оценки качества решения другими методами.

В рамках текущей работы было принято решение использовать метод нелокальных конечных элементов, так как данный метод достаточно хорошо изучен и его легко использовать на областях со сложной геометрией, а большое количество редакторов и генераторов сеток упрощает процесс моделирования. Также в работе проведена большая работа по ускорению данного метода, но чтобы в полной мере реализовать весь потенциал предложенных алгоритмов был реализован свой собственный программный комплекс NonLocFEM [56] на языке программирования C++. Такое решение связано с тем, что многие современные коммерческие программные комплексы, например Abaqus [1], Ansys [2], TFlex [16] и др., имеют закрытый программный код. С другой стороны суще-

ствуют открытые программные комплексы, например, Deal.II [6], FEniCS [8], FreeFEM [9] и многие другие. Однако использование открытых программных комплексов так же может повлечь за собой определённый ряд проблем. Например, одной из проблем может стать невозможность эффективно реализовать тот или иной алгоритм в силу базовых принципов, которые заложены в программный комплекс. Вторая, наверное даже более серьёзная проблема, связана с потенциальным конфликтом интересов, так как многие программные комплексы созданы при поддержке зарубежных инвесторов, которые в любой момент могут ограничить к ним доступ и поэтому важно иметь собственные отечественные наработки.

Целью исследования является изучение особенностей разработанных двумерных моделей нелокальной теплопроводности и термоупругости, а также сравнительный анализ решений в случае классических и нелокальных моделей механики сплошной среды.

Для достижения поставленной цели потребовалось решить **задачи**.

1. Разработать определяющие соотношения двумерных моделей теплопроводности и термоупругости нелокальной среды в интегро-дифференциальной форме, а также реализовать эффективные алгоритмы численного решения на основе метода конечных элементов с последующей реализацией в виде собственного программного комплекса.
2. Разработать экономичные способы предобуславливания получаемых при аппроксимации систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с целью ускорения сходимости итерационных методов решения.
3. Исследовать особенности нелокальных моделей, сопоставить полученные результаты в задачах с известными решениями в классической постановке, определить закономерности.

Научная новизна:

1. 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.
2. Разработан собственный программный комплекс NonLocFEM, в котором реализованы все представленные в работе алгоритмы и методы для моделирования поведения структурно-чувствительных материалов.
3. 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.
4. Исследованы границы спектров собственных чисел матриц и установлены связи между спектрами матриц, ассемблированных в классической и нелокальной постановках.

Практическая значимость моделей, рассмотренных в диссертации, состоит в возможности описания поведения термомеханических состояний структурно-чувствительных материалов. Параметры модели очевидным образом влияют на решения, что дает возможность точно настраивать модель для применения на практике. Разработанный программный комплекс, в котором реализованы численные алгоритмы исследования разработанных моделей, позволит проводить расчёты на произвольных областях со всеми рассматриваемыми в модели параметрами, а благодаря открытому исходному коду и модульной структуре существует возможность редактировать существующие постановки и добавлять новые типы расчётов при модификации математической модели.

Методы исследования. В диссертации использованы как классические принципы механики деформируемого твёрдого тела, так и новые, относящиеся к нелокальным теориям теплопроводности и термоупругости, а также численные методы, в основе которых лежит метод конечных элементов.

Основные положения, выносимые на защиту:

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

Достоверность результатов гарантирована строгостью и полнотой использования возможностей математического аппарата, сравнением результатов многочисленных проведенных расчетов с известными аналитическими решениями и данными, полученными ранее другими авторами.

Апробация работы проводилась в обсуждениях на следующих конференциях:

1. Международная научно-техническая конференция «Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики» (Воронеж, 2019, 2021);
2. Международная конференция «International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics» (Родос, Греция, 2021);
3. Международная научная конференция «Фундаментальные и Прикладные Задачи Механики» (Москва, 2021);
4. Всероссийская конференция по численным методам решения задач теории упругости и пластичности (Красноярск, 2023);

5. Международная конференция «Математическое моделирование, численные методы и инженерное программное обеспечение» (Москва, 2023).

Тема диссертации согласована с тематикой грантов, выделенных на фундаментальные исследования.

1. 0705-2020-0047 «Теория дифференциальных уравнений, краевые задачи, связанные задачи анализа и теории приближений и некоторые их приложения».
2. FSFN-2023-0012 «Разработка математических моделей и методов проектирования изделий ракетно-космической техники из перспективных конструкционных и функциональных материалов».
3. FSFN-2024-0004 «Разработка математических моделей и методов проектирования изделий ракетно-космической техники из перспективных конструкционных и функциональных материалов».

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 5 печатных изданиях, 2 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК РФ, 3 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus. Зарегистрирована 1 программа для ЭВМ.

Личный вклад соискателя. Все исследования, представленные в диссертационной работе, а также разработка программного комплекса выполнены лично соискателем в процессе научной деятельности. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который принадлежит соискателю, заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения и 1 приложения. Полный объем диссертации составляет 111 страниц, включая 37 рисунков и 9 таблиц. Список литературы содержит 138 наименований.

Глава 1. Основные соотношения

1.1. Определение нелокального оператора

Определим линейный интегральный оператор \mathcal{N} , который представим в виде взвешенной суммы, где первое слагаемое — это подставляемое в оператор выражение с весовым множителем p_1 , а второе — это же выражение, но взвешенное по области $S'(\mathbf{x})$ с весовой функцией φ и весовым параметром p_2 ,

$$\mathcal{N}[f(\mathbf{x})] = p_1 f(\mathbf{x}) + p_2 \int_{S'(\mathbf{x}') \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}') dS'(\mathbf{x}'), \quad \mathbf{x}' \in S'(\mathbf{x}). \quad (1.1)$$

Здесь $f(\mathbf{x})$ — выражение, описывающее сохраняющуюся физическую субстанцию; $p_1 > 0$ и $p_2 \geq 0$ — весовые параметры модели такие, что $p_1 + p_2 = 1$; φ — функция нелокального влияния, нормированная положительная монотонно убывающая функция в области $S'(\mathbf{x})$; \mathbf{x}' — точка в области $S'(\mathbf{x})$, в которой вычисляется влияние на величины находящиеся в точке \mathbf{x} ; $S'(\mathbf{x})$ — область нелокального влияния с центром в точке $\mathbf{x} \in S$; S — область занимаемая рассматриваемым телом.

Отметим, что для каждого отдельно взятого физического процесса \mathcal{F} можно определить свой собственный оператор $\mathcal{N}_{\mathcal{F}}$ со своим набором весовых констант p_1 и p_2 , функцией нелокального влияния φ и областью нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$. Однако для упрощения дальнейших выкладок, без потери общности, ограничимся гипотезой, что для тепловых и механических моделей параметры нелокальности одинаковые.

1.2. Уравнение стационарной теплопроводности

В произвольной замкнутой области $S \subset \mathbb{R}^2$ с кусочно-гладкой границей ∂S уравнение стационарной теплопроводности имеет вид [34]

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = q_V, \quad (1.2)$$

где q_V — объёмная плотность мощности внутренних источников и стоков теплоты; \mathbf{q} — вектор плотности теплового потока, который определим как обобщение гипотезы Био — Фурье [37—39], подставив её в оператор (1.1)

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \mathcal{N} \left(-\hat{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \nabla T \right), \quad (1.3)$$

где $\hat{\boldsymbol{\lambda}} = \lambda_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ — тензор коэффициентов теплопроводности; $T = T(\mathbf{x})$ — поле температуры.

Граничные условия первого, второго и третьего родов для уравнения (1.2) имеют вид [34]

$$T|_{\Gamma_1} = T_\Gamma(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}|_{\Gamma_2} = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}|_{\Gamma_3} = \alpha(T_a(\mathbf{x}) - T(\mathbf{x})), \quad (1.4)$$

где $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 = \partial S$, $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \Gamma_1 \cap \Gamma_3 = \Gamma_2 \cap \Gamma_3 = \emptyset$; $T_\Gamma(\mathbf{x})$ и $f(\mathbf{x})$ — функции, задающие температуру и плотность теплового потока на границах Γ_1 и Γ_2 соответственно; α — коэффициент конвективного теплообмена с внешней средой; $T_a(\mathbf{x})$ — температура внешней среды вблизи границы Γ_3 . Для простоты дальнейшего изложения будем предполагать, что функции $T_\Gamma(\mathbf{x})$, $f(\mathbf{x})$ и $T_a(\mathbf{x})$ равны нулю во множествах, где они не определены.

1.3. Уравнение равновесия

В произвольной замкнутой области $S \subset \mathbb{R}^2$ с кусочно-гладкой границей ∂S определим уравнение равновесия сплошной среды [34]

$$\nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{b}, \quad (1.5)$$

где $\mathbf{b} = b_i \mathbf{e}_i$ — вектор плотности объёмных сил; $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \sigma_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ — тензор напряжений. В работе рассматриваем случай несвязанной термоупругой задачи, поэтому определим тензор напряжений $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ через обобщение закона Дюамеля — Неймана с использованием оператора (1.1) [37—39]

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \mathcal{N} \left(\hat{\mathbf{C}} \cdot \cdot \left(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}^T \Delta T \right) \right). \quad (1.6)$$

Здесь $\hat{\varepsilon} = \varepsilon_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ — тензор деформации; $\hat{\mathbf{C}} = C_{ijkl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l$ — тензор коэффициентов упругости; $\hat{\alpha}^T = \alpha_{ij}^T \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ — тензор температурных коэффициентов линейного расширения; $\Delta T = T - T_0$ — разница между текущим распределением температуры T и распределением T_0 при котором отсутствуют температурные деформации.

Далее будем считать, что тело является линейно-упругим и изотропным. В случае плоского напряжённого состояния, компоненты тензора упругости $\hat{\mathbf{C}}$ будут определены следующим образом [34]

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

где E — модуль Юнга; ν — коэффициент Пуассона; δ_{ij} — дельта Кронекера. Если же рассмотрен случай плоского деформированного состояния, то компоненты тензора упругости имеют аналогичную форму записи

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

однако, здесь $\tilde{E} = E/(1 - \nu^2)$ и $\tilde{\nu} = \nu/(1 - \nu)$. Также будем считать, что тело расширяется равнонаправлено, поэтому тензор температурных коэффициентов линейного расширения будет диагональным и иметь всего один коэффициент α^T , то есть [34]

$$\hat{\alpha}^T = \alpha^T \hat{\mathbf{I}}_2.$$

Примем гипотезу, что деформации достаточно малы, поэтому для определения компонент тензора деформации $\hat{\varepsilon}$ воспользуемся соотношениями Коши [34]

$$\hat{\varepsilon} = \frac{\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T}{2} = \frac{u_{i,j} + u_{j,i}}{2} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j,$$

где \mathbf{u} — вектор перемещения.

Будем рассматривать граничные условия первого и второго родов [34], также именуемые кинематическими и силовыми соответственно,

$$\mathbf{u}|_{\Gamma_4} = \mathbf{d}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}|_{\Gamma_5} = \mathbf{p}(\mathbf{x}), \quad (1.7)$$

где $\mathbf{d}(\mathbf{x}) = d_i(\mathbf{x})\mathbf{e}_i$ — вектор перемещений на границе Γ_4 ; $\mathbf{p}(\mathbf{x}) = p_i(\mathbf{x})\mathbf{e}_i$ — вектор плотности поверхностного нагружения на границе Γ_5 . Помимо этого будем рассматривать комбинированные граничные условия, когда по одной компоненте задано перемещение, а по другой поверхностное нагружение. Как и в случае с граничными условиями уравнения теплопроводности, для простоты будем считать, что функции задающие граничные условия уравнения равновесия (1.6) будут равны нулю на границах, на которых они не определены.

1.4. Определение области и функции нелокальности

В определении оператора (1.1) нет ограничения на выбор области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$. Она может быть как неограниченной и включать в себя всю расчётную область, так и замкнутой, покрывая лишь часть рассматриваемого тела. В любом случае, выбор области $S'(\mathbf{x})$ подразумевает так же и выбор функции нелокального влияния $\boldsymbol{\varphi}$. С практической точки зрения, следует выбирать такую функцию $\boldsymbol{\varphi}$, чтобы интеграл от неё по области $S'(\mathbf{x})$ был в рамках заданной точности близким к единице [85]. Вместе с этим область $S'(\mathbf{x})$ должна быть достаточной для аппроксимации наблюдаемых явлений, но в то же время, она не должна покрывать всю область занимаемую телом, так как на практике при аппроксимации уравнений это позволит использовать разреженные матрицы для хранения коэффициентов СЛАУ [47] и значительно облегчит численные расчёты, повысив общую эффективность использования вычислительных ресурсов.

Выбор области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$ является нетривиальной задачей, где в первую очередь стоит опираться на структуру рассматриваемого

материала [85]. Поэтому рассмотрим наиболее общий (пусть и не исчерпывающий) случай и представим $S'(\mathbf{x})$ в виде фигуры ограниченной кривой Ламэ [49], изображённой на Рис. 1.1 при различных параметрах $n > 0$. У такого семейства фигур есть также параметры, отвечающие за длины главных полуосей $r_1 > 0$ и $r_2 > 0$. На основе этих параметров можем определить метрическую функцию

$$\rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \left(\left| \frac{x_1 - x'_1}{r_1} \right|^n + \left| \frac{x_2 - x'_2}{r_2} \right|^n \right)^{\frac{1}{n}}, \quad (1.8)$$

использовав которую приступим к построению всевозможных функций нелокального влияния φ , соблюдая правило, что функция φ должна монотонно убывать по мере роста функции ρ_n .

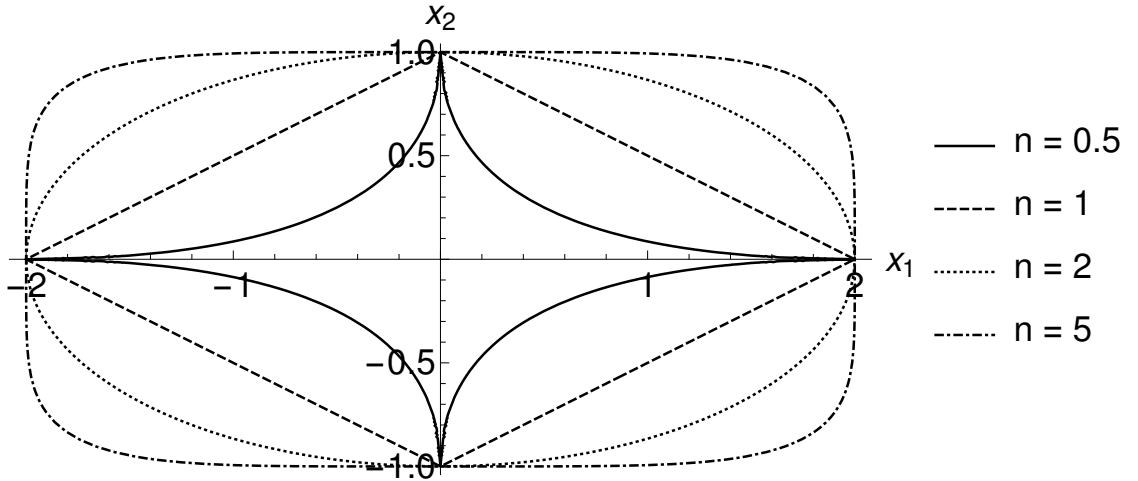


Рис. 1.1. Кривые Ламэ при различных параметрах n

Воспользовавшись метрической функцией ρ_n (1.8), построим семейство полиномиальных функций нелокального влияния, определённых в ограниченной области [93],

$$\varphi_{p,q}^P(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{cases} A(1 - \rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}')^p)^q, & \rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \leq 1, \\ 0, & \rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') > 1, \end{cases} \quad (1.9)$$

где $p > 0$ и $q > 0$ — параметры управляющие плотностью распределения функции; A — нормирующий множитель. Для определения нормирующего множителя A проведём нормировку области $S'(\mathbf{x})$ вдоль каждой из осей таким

образом, чтобы исключить параметры r_1 и r_2 из метрической функции ρ_n (1.8). Далее на получившейся безразмерной области $\tilde{S}'(\tilde{\mathbf{x}}')$ введём аналог полярной системы координат с обобщением на параметр n , где координату радиуса ρ и угла θ вычислим по следующим формулам

$$\begin{cases} \rho = (|\tilde{x}_1|^n + |\tilde{x}_2|^n)^{\frac{1}{n}}, \\ \theta = \operatorname{arctg} \left(\frac{\tilde{x}_2}{\tilde{x}_1} \right). \end{cases}$$

Тогда обратная зависимость координат принимает вид

$$\begin{cases} \tilde{x}_1 = \frac{\rho}{(1 + \operatorname{tg}^n(\theta))^{\frac{1}{n}}}, \\ \tilde{x}_2 = \frac{\rho \operatorname{tg}(\theta)}{(1 + \operatorname{tg}^n(\theta))^{\frac{1}{n}}}, \end{cases}$$

на основе которой можем вычислить якобиан необходимый для интегрирования внутри области $\tilde{S}'(\mathbf{x})$

$$J_n = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{x}_1}{\partial \rho} & \frac{\partial \tilde{x}_1}{\partial \theta} \\ \frac{\partial \tilde{x}_2}{\partial \rho} & \frac{\partial \tilde{x}_2}{\partial \theta} \end{pmatrix} = \frac{\rho}{\cos^2 \theta (1 + \operatorname{tg}^n(\theta))^{\frac{2}{n}}}.$$

Теперь проинтегрируем по области $\tilde{S}'(\mathbf{x})$ полиномиальную функцию нелокального влияния $\varphi_{p,q}^P$ (1.9)

$$\int_0^{2\pi} \int_0^1 A(1 - \rho_n^p)^q J_n d\rho d\theta = 1,$$

откуда, перейдя обратно к размерной области $S'(\mathbf{x})$, можем установить, что величина нормировочного параметра A равна выражению

$$A = \frac{np}{4r_1 r_2 \operatorname{B} \left(\frac{1}{n}, \frac{1}{n} \right) \operatorname{B} \left(\frac{2}{p}, q + 1 \right)},$$

где B — бета функция Эйлера [18]. Отдельно отметим, что при стремлении параметра n к бесконечности, нормировочный множитель принимает значение

$$A = \frac{p}{8r_1 r_2 \operatorname{B} \left(\frac{2}{p}, q + 1 \right)},$$

а метрическая функция ρ_n (1.8) вырождается в следующую

$$\rho_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \max \left(\left| \frac{x_1 - x'_1}{r_1} \right|, \left| \frac{x_2 - x'_2}{r_2} \right| \right). \quad (1.10)$$

Далее при использовании данного семейства функций, в случае когда длины полуосей r_1 и r_2 равны, будем обозначать их одним символом r и называть его радиусом нелокальности.

На Рис. 1.2 представлены распределения полиномиальных функций нелокального влияния (1.9) в сечении вдоль оси x_1 , где показано, что увеличение параметра p делает распределение функции более равномерным и в пределе такое распределение стремится к константе обратно пропорциональной площади заключённой в область $S'(\mathbf{x})$. Увеличение параметра q концентрирует распределение в центре области и в пределе распределение стремится к дельта-функции Дирака.

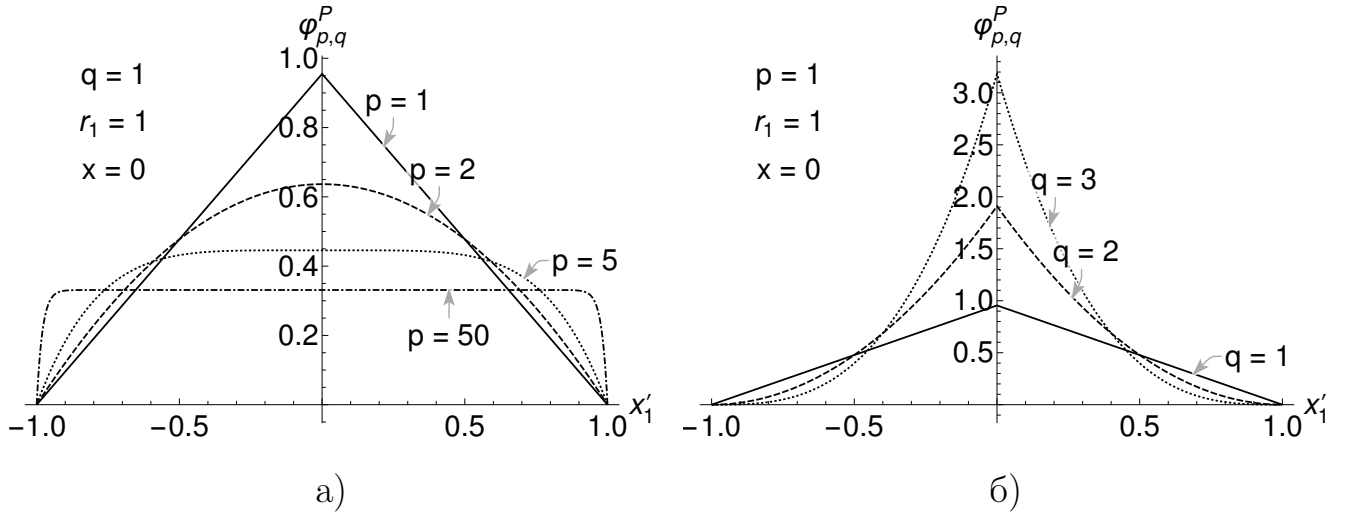


Рис. 1.2. Портреты полиномиальных функций влияния в сечении вдоль оси x'_1 при вариации (а) параметра p и (б) параметра q

Аналогично можем определить семейство экспоненциальных функций, для которых область влияния бесконечная

$$\phi_{p,q}^E(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = A \exp(-q\rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}')^p). \quad (1.11)$$

Параметры $p > 0$ и $q > 0$ — параметры плотности распределения; A — нормировочный коэффициент. Для определения параметра A проделаем аналогичную

процедуру, которая была рассмотрена в полиномиальном семействе функций, но область интегрирования неограничена, поэтому при переходе в новую систему координат необходимо вычислить несобственный интеграл

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} A \exp(-q\rho^p) J_n d\rho d\theta = 1,$$

откуда находим, что значение нормировочного множителя A равно следующему выражению

$$A = \frac{4^{\frac{1}{n}} n p q^{\frac{2}{p}}}{8 r_1 r_2 \text{B}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{n}\right) \Gamma\left(\frac{2}{p}\right)},$$

а при стремлении n к бесконечности он принимает следующую форму

$$A = \frac{p q^{\frac{2}{p}}}{8 r_1 r_2 \Gamma\left(\frac{2}{p}\right)},$$

где Γ — гамма-функция [18]. Обратим внимание, что при $q = 0.5$, $p = 2$ и $n = 2$ получаем функцию нормального распределения Гаусса, для которой параметры r_1 и r_2 можем определить по правилу «3 сигма» [46]. Здесь, как и в случае с полиномиальным семейством функций, в случае равенства r_1 и r_2 , будем обозначать их одним символом r , но называть его будем дисперсионным параметром нелокальности.

На Рис. 1.3 представлены распределения экспоненциальных функций нелокального влияния (1.11) в сечениях вдоль оси x_1 . Здесь параметры p и q имеют тот же смысл, что и у полиномиального семейства.

Для экспоненциального семейства функций при заданой ограниченной области $S'(\mathbf{x})$ возникает потребность в определении параметров r_1 и r_2 таких, чтобы нормировка функции была в рамках заданного квантиля $0 < Q < 1$. Для этого снова применим процедуру перехода к обобщённой полярной системе координат, исключим параметры r_1 и r_2 из метрической функции (1.8) путём

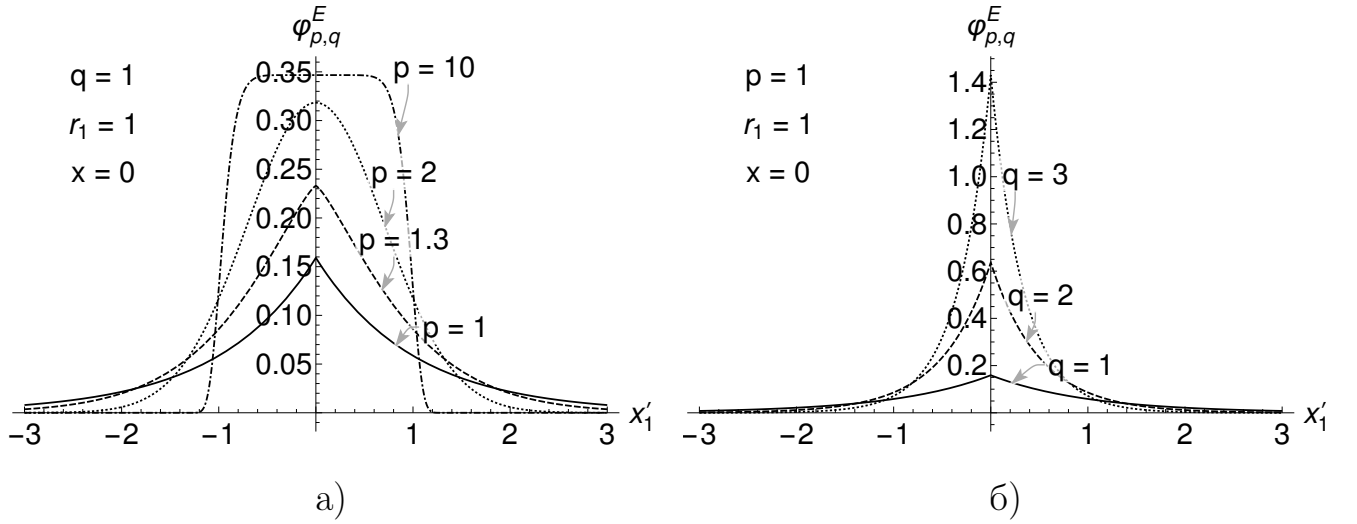


Рис. 1.3. Портреты экспоненциальных функций влияния в сечении вдоль оси x'_1 при вариации (а) параметра p и (б) параметра q

её обезразмеривания, тогда верхний предел интегрирования будем считать переменным и равным R

$$\int_0^{2\pi} \int_0^R A \exp(-q\rho^p) J_n d\rho d\theta = Q.$$

После интегрирования приходим к уравнению

$$1 - \frac{\Gamma\left(\frac{2}{p}, qR^p\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{p}\right)} = Q, \quad (1.12)$$

из которого путём численного решения можем найти длину R при заданных параметрах p , q и квантиля Q . Отметим, что данное уравнение не зависит от параметра n , что упрощает анализ при выборе функций влияния. Кроме того в практических расчётах значение параметра Q следует выбирать достаточно близким к 1. Так, например, для функции нормального распределения, при условии $Q = 0.99$ получим значение $R = 3.03485$, что соответствует известному правилу «3 сигма» [46]. После нахождения параметра R , значения параметров r_1 и r_2 можем найти просто поделив соответствующую длину полуоси области $S'(\mathbf{x})$ на величину R .

Отметим, что параметр q в экспоненциальном семействе функций (1.11) является избыточным, так как его вариация напрямую связана с параметрами r_1 и r_2 . При подборе параметров r_1 и r_2 по вышеизложенному алгоритму при различных q , распределения функций будут одинаковыми. Однако этот параметр введён намеренно, так как он упрощает управление распределением функций и с некоторыми оговорками будет использован в дальнейших исследованиях при сравнении с полиномиальным семейством функций.

1.5. Основные результаты и выводы по главе 1

1. Определён интегральный нелокальный оператор; с его помощью определены уравнения стационарной теплопроводности и равновесия в нелокальных постановках, которые представлены в интегро-дифференциальной форме.
2. Предложены два семейства функций нелокального влияния: полиномиальное семейство функций, с ограниченной областью определения, и экспоненциальное семейство функций, с неограниченной областью определения.

Глава 2. Численная схема решения на основе метода конечных элементов

2.1. Общие сведения о методе конечных элементов

В качестве численного метода решения для уравнений (1.2) и (1.5) выберем метод конечных элементов с использованием изопараметрических конечных элементов [72, 138]. Для этого на области S введём сетку конечно-элементной модели S_h , которая включает в себя множества номеров узлов и связей между ними, образующих непосредственно сами элементы. Каждый элемент $e \in S_h$ содержит в себе множества узлов $\{x_i\}_{i \in I^e}$ и базисных функций $\{N_i^e\}_{i \in I^e}$ таких, что

$$\begin{aligned} N_i^e(\mathbf{x}_j) &= \delta_{ij}, \quad i, j \in I^e, \\ N_i^e(\mathbf{x}) &= 0, \quad \mathbf{x} \notin S^e, \\ \sum_{i \in I^e} N_i^e(\mathbf{x}) &= 1, \quad \mathbf{x} \in S^e, \end{aligned}$$

где I^e — множество индексов узлов элемента e ; δ_{ij} — дельта Кронекера; \mathbf{x}_j — значения глобальных координат в узлах сетки; S^e — область элемента e .

Для каждого конечного элемента e введём локальную систему координат $O\xi_1^e\xi_2^e$. Отображение из локальной системы координат $O\xi_1^e\xi_2^e$ в глобальную Ox_1x_2 будем строить следующим образом

$$\mathbf{x}(\xi^e) = N_i^e(\xi^e) \mathbf{x}_i, \quad i \in I^e, \quad e \in S_h.$$

Тогда матрицу Якоби перехода из локальной системы координат в глобальную можем представить в виде

$$\widehat{\mathbf{J}}^e = \left(\frac{\partial \xi^e}{\partial \mathbf{x}} \right) = \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi^e} \right)^{-1} \approx \left(\mathbf{x}_i \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi^e} \right)^{-1},$$

а вычисление производных функций форм относительно глобальных координат примет следующий вид

$$\frac{\partial N_i^e}{\partial x_k} = \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi_j^e} \frac{\partial \xi_j^e}{\partial x_k}.$$

Аппроксимированную границу $\Gamma_h \subset S_h$ представим в виде набора одномерных элементов, располагающихся на гранях двумерных элементов. При интегрировании внешних воздействий на границах области также возникает необходимость в аппроксимации якобиана, формулу которого можно определить в следующем виде

$$J^e = \sqrt{\sum_{j=1}^2 \left(x_{ji} \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi_j^e} \right)^2}, \quad i \in I^e, \quad e \in \Gamma_h.$$

2.2. Аппроксимация уравнений

Спроецируем уравнения (1.2) и (1.5) на функцию N_n^e , где $n \in I^e, e \in S_h$

$$\begin{aligned} \int_S N_n^e (\nabla \cdot \mathbf{q} - q_V) dS &= 0, \\ \int_S N_n^e (\nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{b}) dS &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Проинтегрируем по частям первое слагаемое каждого уравнения, тогда пользуясь формулой Грина получаем следующие равенства

$$\begin{aligned} \int_S \nabla N_n^e \cdot \mathbf{q} dS - \int_{\partial S} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} d\Gamma &= \int_S N_n^e q_V dS, \\ \int_S \nabla N_n^e \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} dS - \int_{\partial S} \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} d\Gamma &= \int_S N_n^e \mathbf{b} dS. \end{aligned}$$

Подставим определения граничных условий в уравнения теплопроводности (1.4) и равновесия (1.7). Интегралы по границе ∂S разбиваем на суммы ин-

тегралов

$$\begin{aligned} \int_S \nabla N_n^e \cdot \mathbf{q} dS + \int_{\Gamma_3} \alpha N_n^e T d\Gamma &= \int_S N_n^e q_V dS + \int_{\Gamma_2} N_n^e f d\Gamma + \int_{\Gamma_3} \alpha N_n^e T_a d\Gamma, \\ \int_S \nabla N_n^e \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} dS &= \int_S N_n^e \mathbf{b} dS + \int_{\Gamma_5} N_n^e \mathbf{p} d\Gamma. \end{aligned}$$

Воспользовавшись определениями вектора плотности теплового потока (1.3) и тензора напряжений (1.6), а также определением оператора (1.1), приходим к следующим равенствам относящимся к уравнению теплопроводности

$$\begin{aligned} \int_S \nabla N_n^e \cdot \left(-p_1 \hat{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \nabla T dS - p_2 \int_{S'(\mathbf{x}) \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \hat{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \nabla T dS'(\mathbf{x}) \right) dS + \\ + \int_{\Gamma_3} \alpha N_n^e T d\Gamma = \int_S N_n^e q_V dS + \int_{\Gamma_2} N_n^e f d\Gamma + \int_{\Gamma_3} \alpha N_n^e T_a d\Gamma, \end{aligned} \quad (2.1)$$

и уравнению равновесия

$$\begin{aligned} \int_S \nabla N_n^e \cdot \left(p_1 \hat{\mathbf{C}} \cdot \cdot \left(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}^T \Delta T \right) dS + \right. \\ \left. + p_2 \int_{S'(\mathbf{x}) \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \hat{\mathbf{C}} \cdot \cdot \left(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}^T \Delta T \right) dS'(\mathbf{x}) \right) dS = \\ = \int_S N_n^e \mathbf{b} dS + \int_{\Gamma_5} N_n^e \mathbf{p} d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Аппроксимируем температуру T и вектор перемещения \mathbf{u} на элементе

$$T(\mathbf{x}) = T_m N_m^e(\mathbf{x}), \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_m N_m^e(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in S^e,$$

где T_m и \mathbf{u}_m — искомые значения температуры и вектора перемещения в узле $m \in I^e$. Тогда аппроксимация градиента температуры и тензора деформации $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ примут следующий вид

$$\nabla T = T_m N_{m,k}^e \mathbf{e}_k, \quad (2.3)$$

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{u}_m \nabla N_m^e + (\mathbf{u}_m \nabla N_m^e)^T \right) = \frac{1}{2} (u_{mk} N_{m,l}^e + u_{ml} N_{m,k}^e) \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l. \quad (2.4)$$

Подставим аппроксимированные значения (2.3) и (2.4) в уравнения (2.1) и (2.2) соответственно и перейдём к индексной форме записи. Разделив локальные и нелокальные слагаемые получим системы уравнений для уравнения теплопроводности

$$\begin{aligned} & -p_1 T_m \int_S \lambda_{ij} N_{n,i}^e N_{m,j}^e dS - p_2 T_{m'} \int_S N_{n,i}^e \int_{S'(\mathbf{x}') \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \lambda_{ij} N_{m',j}^{e'} dS'(\mathbf{x}) dS + \\ & + T_m \int_{\Gamma_3} \alpha N_n^e N_m^e d\Gamma = \int_S N_n^e q_V dS + \int_{\Gamma_2} N_n^e f d\Gamma + \int_{\Gamma_3} \alpha N_n^e T_a(\mathbf{x}) d\Gamma, \quad (2.5) \end{aligned}$$

и уравнения равновесия

$$\begin{aligned} & p_1 \int_S N_{n,i}^e C_{ijkl} \epsilon_{kl} dS + p_2 \int_S N_{n,i}^e \int_{S'(\mathbf{x}) \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') C_{ijkl} \epsilon_{kl} dS'(\mathbf{x}) dS = \\ & = p_1 \int_S N_{n,i}^e C_{ijkl} \alpha_{kl} \Delta T dS + p_2 \int_S N_{n,i}^e \int_{S'(\mathbf{x}) \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') C_{ijkl} \alpha_{kl} \Delta T dS'(\mathbf{x}) dS + \\ & + \int_S N_n^e b_j dS + \int_{\Gamma_5} N_n^e p_j d\Gamma, \quad (2.6) \end{aligned}$$

где $i, j, k, l = \overline{1, 2}$; $m, n \in I^e$; $m' \in I^{e'}$; $e \in S_h$; $e' \in S'_h$; S'_h — аппроксимированная зона нелокального влияния, детали аппроксимации которой рассмотрим далее в следующей главе.

Введём понятия вектора \mathbf{E}_n — единичный вектор размерности M , где M — количество узлов в сетке S_h . Переобозначим слагаемые уравнения теплопроводности (2.5) при помощи символов

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{K}}_T^L &= \int_S \lambda_{ij} N_{n,i}^e N_{m,j}^e \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_m dS, \\ \hat{\mathbf{K}}_T^{NL} &= \int_S N_{n,i}^e \int_{S'(\mathbf{x}') \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \lambda_{ij} N_{m',j}^{e'} \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_{m'} dS'(\mathbf{x}) dS, \\ \hat{\mathbf{K}}_T^\alpha &= \int_{\Gamma_3} \alpha N_n^e N_m^e \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_m d\Gamma, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{Q} &= \int_S N_n^e q_V \mathbf{E}_n dS, \\ \mathbf{F} &= \int_{\Gamma_2} N_n^e f \mathbf{E}_n d\Gamma, \\ \mathbf{T}^\alpha &= \int_{\Gamma_3} \alpha N_n^e T_a(\mathbf{x}) \mathbf{E}_n d\Gamma.\end{aligned}$$

Аналогичную процедуру сделаем и для уравнения равновесия (2.6)

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{K}}_E^L &= \int_S N_{n,i}^e C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_m dS, \\ \widehat{\mathbf{K}}_E^{NL} &= \int_S N_{n,i}^e \int_{S'(\mathbf{x}) \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') C_{ijkl} \varepsilon_{kl} dS'(\mathbf{x}) \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_{m'} dS, \\ \widehat{\mathbf{E}}^L &= \int_S N_{n,i}^e C_{ijkl} \alpha_{kl} \Delta T \mathbf{E}_n dS, \\ \widehat{\mathbf{E}}^{NL} &= \int_S N_{n,i}^e \int_{S'(\mathbf{x}) \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') C_{ijkl} \alpha_{kl} \Delta T \mathbf{E}_n dS'(\mathbf{x}) dS, \\ \widehat{\mathbf{B}} &= \int_S N_n^e b_j \mathbf{E}_n dS, \\ \widehat{\mathbf{P}} &= \int_{\Gamma_5} N_n^e p_j \mathbf{E}_n d\Gamma.\end{aligned}$$

Тогда после интегрирования, о котором пойдёт речь в следующем разделе, итоговые системы можно записать в матрично-векторном виде

$$\left(p_1 \widehat{\mathbf{K}}_T^L + p_2 \widehat{\mathbf{K}}_T^{NL} + \widehat{\mathbf{K}}_T^\alpha \right) \cdot \mathbf{T} = \mathbf{Q} + \mathbf{F} + \mathbf{T}^\alpha, \quad (2.7)$$

$$\left(p_1 \widehat{\mathbf{K}}_E^L + p_2 \widehat{\mathbf{K}}_E^{NL} \right) \cdot \widehat{\mathbf{U}} = p_1 \widehat{\mathbf{E}}^L + p_2 \widehat{\mathbf{E}}^{NL} + \widehat{\mathbf{B}} + \widehat{\mathbf{P}}. \quad (2.8)$$

Здесь $\widehat{\mathbf{K}}_T^L$ и $\widehat{\mathbf{K}}_T^{NL}$ — матрицы локальной и нелокальной теплопроводности; $\widehat{\mathbf{K}}_T^\alpha$ — матрица теплообмена; \mathbf{T} — вектор искоемых узловых значений температуры; \mathbf{Q} и \mathbf{F} — векторы дискретизированных внутренних и внешних источников и стоков теплоты; \mathbf{T}^α — вектор дискретизированного теплообмена; $\widehat{\mathbf{K}}_E^L$ и $\widehat{\mathbf{K}}_E^{NL}$ — матрицы локальной и нелокальной жёсткости; $\widehat{\mathbf{U}}$ — вектор искоемых узловых

перемещений; $\widehat{\mathbf{V}}$ и $\widehat{\mathbf{P}}$ — векторы дискретизированных плотностей объёмных и поверхностных сил; $\widehat{\mathbf{E}}^L$ и $\widehat{\mathbf{E}}^{NL}$ — векторы локального и нелокального температурного линейного расширения. В силу того, что матрицы $\widehat{\mathbf{K}}_E^L$ и $\widehat{\mathbf{K}}_E^{NL}$ имеют блочную структуру, с размером блока 2×2 , для удобства дальнейшего изложения будем представлять их в виде аналогов (по количеству индексов) тензоров четвёртого ранга, где первые два индекса обозначают строку и столбец с указанием блока, а вторые — строку и столбец внутри блока. Аналогично представим векторы $\widehat{\mathbf{U}}, \widehat{\mathbf{B}}, \widehat{\mathbf{P}}, \widehat{\mathbf{E}}^L$ и $\widehat{\mathbf{E}}^{NL}$ в виде тензоров второго ранга, где первый индекс соответствует номеру узла, а второй — номеру координатной компоненты.

2.3. Ассемблирование систем уравнений

Рассмотрим более подробно вопрос ассемблирования систем уравнений (2.7) и (2.8), которые получены после интегрирования систем (2.5) и (2.6). Для удобства рассмотрим каждое слагаемое отдельно. Но прежде, чем это сделать введём определения блоков матрицы теплопроводности $\widetilde{\mathbf{K}}_{nm}^{e_1 e_2}$ и жёсткости $\widehat{\mathbf{K}}_{nm}^{e_1 e_2}$, стоящих в n -ой строке и m -ом столбце соответствующих матриц,

$$\widetilde{\mathbf{K}}_{nm}^{e_1 e_2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \lambda_{ij} N_{n,i}^{e_1}(\mathbf{x}) N_{m,j}^{e_2}(\mathbf{y}) \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_m, \quad (2.9)$$

$$\widehat{\mathbf{K}}_{nm}^{e_1 e_2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = C_{ijkl} N_{n,k}^{e_1}(\mathbf{x}) N_{m,l}^{e_2}(\mathbf{y}) \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_m \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \quad (2.10)$$

где $i, j, k, l = \overline{1, 2}$; $n, m = \overline{1, M}$. Далее для общности записи будем использовать блок $\mathbf{K}_{nm}^{e_1 e_2}$, который будет играть роль блока матрицы теплопроводности или жёсткости в зависимости от контекста.

Рассмотрим матричные слагаемые с множителем p_1 , которые достаточно легко могут быть аппроксимированы классической конечно-элементной процедурой [72, 138]. После её применения ассемблированную матрицу запишем следующим образом

$$\widehat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^L = \sum_{e \in S_h} \sum_{n, m \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \mathbf{K}_{nm}^{ee}(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_q) J_q^e. \quad (2.11)$$

Здесь w_q — весовой множитель в квадратурном узле q ; J_q^e — аппроксимированный якобиан в квадратурном узле q на элементе e ; \mathbf{x}_q — координата квадратурного узла под номером q ; Q^e — набор номеров квадратурных узлов на элементе e .

Аппроксимацию интегральных слагаемых, стоящих у множителей p_2 уравнений (2.5) и (2.6), следует начать с аппроксимации зоны нелокального влияния S'_h , для которой необходимо вначале аппроксимировать внешние интегралы, где приходим к промежуточным выражениям следующего вида

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{K}}_T^{NL} &= \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q N_{n,i}^e(\mathbf{x}_q) J_q^e \int_{S'(\mathbf{x}') \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \lambda_{ij} N_{m',j}^{e'} dS'(\mathbf{x}) \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_{m'}, \\ \widehat{\mathbf{K}}_E^{NL} &= \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q N_{n,i}^e(\mathbf{x}_q) J_q^e \int_{S'(\mathbf{x}') \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') C_{ijkl} \varepsilon_{kl} dS'(\mathbf{x}) \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_{m'}.\end{aligned}$$

Далее в каждом квадратурном узле \mathbf{x}_q необходимо аппроксимировать область нелокального влияния S_h^q [120], которую можно представить в виде множества элементов, квадратурные узлы которых хотя бы частично попали в область $S'(\mathbf{x}_q)$. На Рис. 2.1 крестом указан узел относительно которого проводится аппроксимация, область нелокального влияния ограничена окружностью, точками отмечены квадратурные узлы элементов, а серым цветом выделены элементы, которые были учтены в аппроксимированной области нелокального влияния S_h^q . Такой способ аппроксимации будем называть квадратурной аппроксимацией. Тогда ассемблирование матрицы соответствующей нелокальному слагаемому запишем следующим образом

$$\widehat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^{NL} = \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q J_q^e \sum_{e' \in S_h^q} \sum_{m' \in I^{e'}} \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \varphi(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) \mathbf{K}_{nm'}^{ee'}(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) J_{q'}^{e'}. \quad (2.12)$$

Ассемблирование остальных слагаемых уравнения теплопроводности (2.7) происходит без каких-либо особенностей, поэтому просто выпишем их без по-

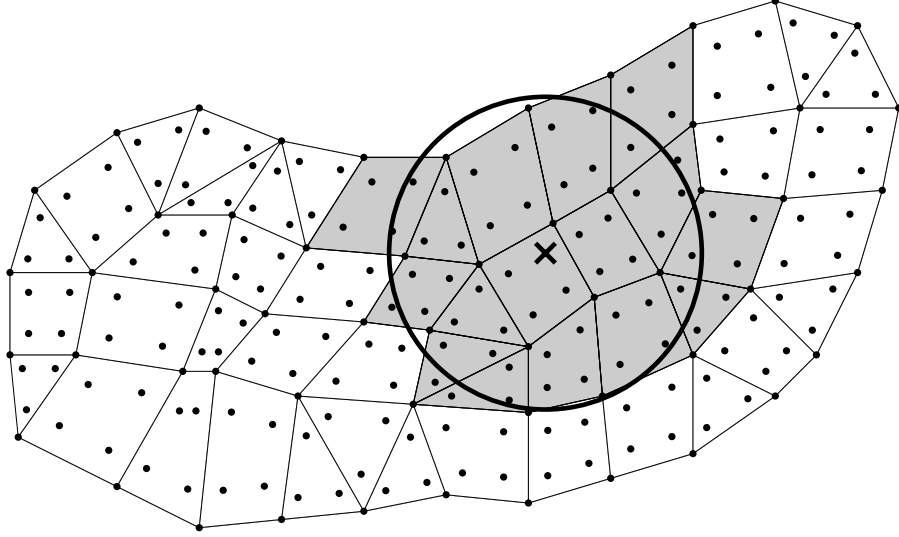


Рис. 2.1. Квадратурная аппроксимация области нелокального влияния

дробного разъяснения деталей

$$\hat{\mathbf{K}}_T^\alpha = \sum_{e \in \Gamma_h} \sum_{n, m \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \alpha N_n^e(\mathbf{x}_q) N_m^e(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_m, \quad (2.13)$$

$$\mathbf{T}^\alpha = \sum_{e \in \Gamma_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \alpha N_n^e(\mathbf{x}_q) T_\alpha(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n, \quad (2.14)$$

$$\mathbf{Q} = \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q q_V(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n, \quad (2.15)$$

$$\mathbf{F} = \sum_{e \in \Gamma_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q f(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n. \quad (2.16)$$

Аналогично запишем ассемблирование остальных слагаемых и для уравнения равновесия (2.8)

$$\hat{\mathbf{B}} = \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \mathbf{b}(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n, \quad (2.17)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{e \in \Gamma_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \mathbf{p}(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n, \quad (2.18)$$

$$\hat{\mathbf{E}}^L = \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \nabla N_n^e(\mathbf{x}_q) \hat{\mathbf{C}} \cdot \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} \Delta T(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n, \quad (2.19)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{E}}^{NL} = & \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \nabla N_n^e(\mathbf{x}_q) J_q^e \times \\ & \times \sum_{e' \in S_h^q} \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \varphi(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) \hat{\mathbf{C}} \cdot \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} \Delta T(\mathbf{x}_{q'}) J_{q'}^{e'} \mathbf{E}_n. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Отметим, что при ассемблировании $\hat{\mathbf{E}}^{NL}$ был использован метод квадратурной аппроксимации области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$, который ранее применялся к матрицам нелокальной теплопроводности и жёсткости (2.12).

2.4. Вычисление производных величин

После решения СЛАУ (2.7) и (2.8) на основе полученных сеточных функций температуры \mathbf{T} и перемещения $\hat{\mathbf{U}}$ можем найти их производные величины, такие как вектор плотности теплового потока \mathbf{q} и тензор напряжений $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ соответственно. Для этого вычислим градиенты сеточных функций в квадратурных узлах, пользуясь при этом формулами (2.3) и (2.4). Далее аппроксимируем интегралы (1.3) и (1.6), для этого снова воспользуемся процедурой квадратурной аппроксимации области нелокального влияния, после чего получаем формулы для вычисления вектора плотности теплового потока

$$\mathbf{q}_q = \left(-p_1 \lambda T_m N_{m,k}^e(\mathbf{x}_q) - p_2 \sum_{e' \in S_h^q} \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \lambda T_{m'} N_{m',k}^e(\mathbf{x}_{q'}) J_{q'}^{e'} \right) \mathbf{e}_k \quad (2.21)$$

и тензора напряжений

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_q = & \left(p_1 C_{ijkl} (\varepsilon_{kl}(\mathbf{x}_q) - \alpha_{kl} \Delta T_q) + \right. \\ & \left. + p_2 \sum_{e' \in S_h^q} \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} C_{ijkl} (\varepsilon_{kl}(\mathbf{x}_{q'}) - \alpha_{kl} \Delta T_{q'}) J_{q'}^{e'} \right) \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l, \quad (2.22) \end{aligned}$$

где \mathbf{q}_q , $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_q$ и ΔT_q — значения вектора плотности теплового потока, тензора напряжений и разницы температур в квадратурном узле q соответственно.

Для дальнейшего анализа переинтерполируем решения из квадратурных узлов в регулярные узлы сетки. Для этого, при рассмотрении конкретного узла сетки, определим ближайшие квадратурные узлы каждого из элементов, в состав которых входит этот узел, после чего вычислим среднюю величину с учётом площадей элементов. Другими словами, вначале для каждого элемента

е необходимо решить задачу минимизации с поиском нужного индекса квадратного узла на элементе q^e

$$\min_{q \in Q^e} \rho(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_q) \rightarrow q^e, \quad n \in S_h.$$

После чего проводим процедуру осреднения с весами, где в качестве весовых множителей используем площади элементов

$$|S^n| = \sum_{e \in E^n} |S^e|, \quad \mathbf{q}_n = \sum_{e \in E^n} \frac{\mathbf{q}_{q^e} |S^e|}{|S^n|}, \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}}_n = \sum_{e \in E^n} \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{q^e} |S^e|}{|S^n|},$$

где \mathbf{q}_n и $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n$ — значения плотности теплового потока и напряжений в регулярных узлах сетки соответственно.

2.5. Основные результаты и выводы по главе 2

1. На основе метода конечных элементов, разработана численная схема аппроксимации уравнений теплопроводности и равновесия в нелокальных постановках.
2. Предложен способ квадратурной аппроксимации области нелокального влияния, суть которого заключена в аппроксимации области нелокального влияния относительно каждого квадратурного узла.
3. Представлен алгоритм аппроксимации производных величин, таких как вектор плотности теплового потока и тензор напряжений, с учётом пространственной нелокальности.

Глава 3. Реализация программного комплекса

3.1. Общая структура программного комплекса

В рамках диссертационной работы был реализован конечно-элементный программный комплекс NonLocFEM [56]. Основная задача комплекса — эффективное решение термомеханических задач в нелокальных постановках на современных вычислительных системах с использованием технологий параллельных вычислений OpenMP [13] и MPI [12]. Все описанные далее методы и алгоритмы реализованы в рамках данного комплекса, а именно: аппроксимация области нелокального влияния; параллельные алгоритмы ассемблирования конечно-элементных матриц; алгоритмы балансировки данных между процессами и потоками исполнения; интегрирование с использованием нестандартных базисов конечных элементов; решатели СЛАУ с использованием специально разработанных предобуславливателей; а также многие другие алгоритмы и методы, на которых не будем заострять слишком много внимания.

Глобальная структура программного комплекса включает в себя математическое ядро и обработчик конфигурационных файлов. Математическое ядро, в свою очередь, также состоит из нескольких взаимосвязанных библиотек, где в качестве основных можно выделить следующие: *metamath*, *parallel*, *mesh* и *solvers*. В них находятся необходимые примитивы и алгоритмы для конечно-элементных расчётов. Обработчик конфигурационных файлов работает со структурами, представленными в формате JSON [10] и на их основе формирует запросы для математического ядра, которое проводит необходимые расчёты и возвращает результаты в форматах, которые можно прочитать популярными программами для визуализации данных, например Paraview [14]. Помимо собственных разработок в зависимости комплекса входят две сторонние библиотеки: библиотека линейной алгебры Eigen [7] и библиотека для работы со

структурами в формате JSON N. Lohmann [11]. Схема взаимосвязи модулей программы представлена на Рис. 3.1, где зависимый модуль указывает стрелкой на модуль от которого он зависит.

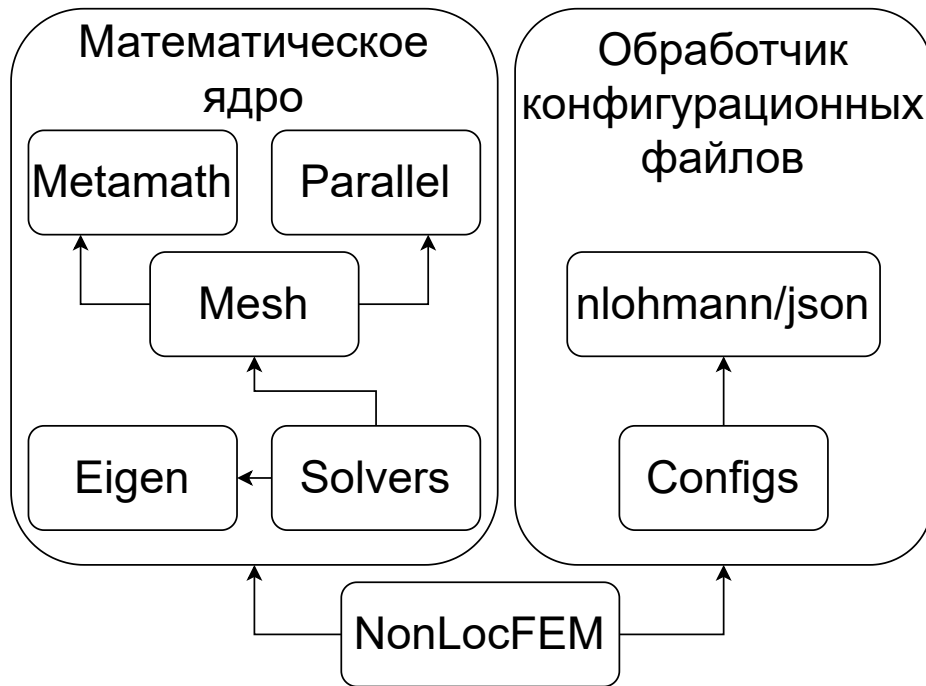


Рис. 3.1. Структура программы NonLocFEM

Программный комплекс NonLocFEM реализован на языке программирования C++ [3]. Выбор в пользу этого языка был обоснован его популярностью, богатой стандартной библиотекой, а главное производительностью итоговых программ. Помимо этого, язык предоставляет широкий спектр возможностей в реализации своих идей, особенно если говорить про актуальный на сегодняшний день стандарт языка C++23, возможности которого повсеместно использованы в программном комплексе. Язык C++ мультипарадигменный, поэтому в нём существует возможность совмещать объектно-ориентированные и функциональные подходы к программированию. Объектно-ориентированный подход выражен в виде возможности создания достаточно сложных иерархий классов, в которых могут быть использованы виртуальные методы. Это в свою очередь подразумевает позднее связывание кода программы, то есть объекты с разной логикой обработки тех или иных данных, имеющие при этом единый интерфейс,

могут быть созданы динамически во время выполнения программы. Функциональная парадигма в контексте языка программирования C++ выражена в виде метапрограммирования шаблонов [19, 26], то есть статична, где часть вычислений можно вынести на этап компиляции программы, на основе результатов которых генерируется конечный исполняющий файл. Комбинирование двух парадигм открывает возможность совместить такие, порой несовместимые, аспекты программы, как гибкость исходного кода с его производительностью. Учитывая специфику вычислительных программ, в разработке программного комплекса NonLocFEM в большей степени было отдано предпочтение функциональным подходам к программированию.

Наибольшее количество приёмов метапрограммирования было задействовано в библиотеке `metamath`, за счёт чего она и получила такое название. В этой библиотеке реализованы различные математические примитивы и функции, а также представлена адаптированная версия библиотеки символьного дифференцирования на этапе компиляции `syndiff`, основную концепцию которой можно найти в монографии Краснова М.М. [36]. Библиотека `syndiff` содержит в себе базовые примитивы: константа, переменная; математические операции, такие как, сложение, вычитание, умножение, деление; ряд математических функций, включающих в себя экспоненту, логарифм, тригонометрические функции и многие другие. Благодаря этим примитивам можно строить выражения любой сложности, а также комбинировать эти выражения между собой. Каждое такое выражение образует уникальный тип данных. Все эти типы данных объединяет общий интерфейс, предоставляющий возможность вычислить значение этого выражения в точке и посчитать его производную по заданной переменной, при этом вычисление производной порождает новый тип данных, который регистрируется на этапе компиляции программы и соответствует выражению, являющимся производной исходного выражения. При этом были

предприняты меры по оптимизации конечных выражений, сокращающие количество операций, которые необходимы при вычислении значения в точке.

На основе библиотеки `syndiff`, в рамках библиотеки `metamath`, была построена библиотека конечных элементов `finite_elements`, в которой `syndiff` использована при описании базисных функций форм элементов и вычислении их производных компилятором. Такой подход значительно упрощает процесс добавления новых элементов, а также сокращает время отладки программы, так как большая часть ошибок, как правило, происходит именно при ручном дифференцировании базисов элементов. Помимо этого такой подход ещё сокращает исходный код программы, так как при добавлении нового конечного элемента прикладному программисту необходимо всего лишь описать базис нового элемента в терминах библиотеки `syndiff` и записать координаты его узлов в локальной системе координат элемента. Для некоторых семейств элементов такой процесс можно автоматизировать, например, для семейства лагранжевых элементов, где базисы элементов построены по определённому алгоритму. Таким образом, можно указать порядок элемента, после чего компилятор сгенерирует необходимый базис в виде набора выражений, которые в дальнейшем могут быть им же и продифференцированы. Помимо дифференцирования базисов, в этой библиотеке также представлен функционал, связанный с процедурой интегрирования. Интегрирование, в отличие от дифференцирования, здесь реализовано численно. Библиотека содержит в себе наборы квадратур разного порядка, при помощи которых выполняется процедура интегрирования. Все элементы и квадратуры, описанные в рамках данной библиотеки, имеют единый интерфейс, поэтому дальнейшие конечно-элементные алгоритмы могут быть записаны в обобщённой форме.

Библиотека `mesh` предназначена для работы с конечно-элементными сетками. Основным классом данной библиотеки является класс хранилище, объекты которого могут читать файлы с сетками и представлять их в виде,

с которым взаимодействуют алгоритмы программы, в том числе и алгоритмы модуля `solvers`. Схема хранения подразумевает, что элементы образованы путём перечисления номеров узлов, которые им принадлежат, а также ссылкой на объект библиотеки `finite_elements`, в котором определены функции формы и квадратурные узлы в локальной системе координат элемента. Также в схеме хранения участвуют координаты узлов сетки и именованные группы элементов, образующих подобласти для определения границ, на которых далее можно задать разные граничные условия. Также было принято решение о том, что в случае использования распределённых вычислений, при помощи библиотеки `MPI`, сетка представлена целиком на каждом отдельном процессе выполнения программы. Такое решение связано с желанием не усложнять схему хранения, ведь для задач в нелокальных постановках, как правило, используются достаточно грубые сетки, содержащие малое количество элементов. Однако, это не касается алгоритмов аппроксимации области нелокального влияния, в котором задействован алгоритм поиска ближайших соседей. В результате алгоритма поиска ближайших соседей хранятся только те данные, которые необходимы для ассемблирования куска матрицы, обрабатываемой конкретным процессом.

Помимо класса хранилища, в библиотеке `mesh` также реализованы алгоритмы для работы с конечно-элементными сетками. Здесь реализованы алгоритмы вычисления квадратурных узлов в глобальной системе координат, вычисления в них якобианов и производных функций форм относительно глобальных переменных. Здесь реализован шаблонный параллельный алгоритм обхода по сетке, на базе которого построены алгоритмы балансировки данных, алгоритм перенумерации узлов Катхилла — Макки [78], алгоритм аппроксимации области нелокального влияния и алгоритмы формирования и заполнения портрета конечно-элементных матриц из модуля `solvers`. Также в библиотеке `mesh` реализован функционал сохранения результатов расчётов.

В библиотеке `solvers` реализованы алгоритмы ассемблирования матриц и правых частей, а также решатели СЛАУ. Алгоритмы ассемблирования включают в себя алгоритмы формирования портрета матриц и его заполнения, при этом алгоритмы работают построчно, что обеспечивает хорошую масштабируемость на многопроцессорных системах. Здесь же представлены обобщённые решатели задач теплопроводности и равновесия, на вход которым подаются расчётная сетка, параметры материала и граничные условия. После чего данные решатели возвращают решения, содержащие искомые величины, такие как температуру и перемещения, и производные от них тепловые потоки, деформации и напряжения.

Продолжая обзор библиотек программы следует поговорить о библиотеке `parallel`. Во многом эта библиотека является «обёрткой» над библиотеками параллельного программирования `OpenMP` и `MPI`. Она служит двум основным принципам: во-первых — оmodernить и обобщить интерфейсы давно устоявшихся функций из ранее упомянутых библиотек, которые в современном `C++` выглядят весьма громоздко, а во-вторых — собрать все параллельные вызовы в одном месте, что даёт возможность легко отключать параллелизм без дополнительных сложностей связанных с компиляцией программы. Кроме того эта библиотека содержит в себе основы для алгоритмов балансировки данных, которые затем используются в более общих алгоритмах библиотеки `mesh`, и удобные примитивы для работы с параллельным кодом.

Для связи структур описанных в формате `JSON` с математическим ядром была разработана библиотека `configs`. Она содержит в себе примитивы, которые вычисляются на основе `JSON` и интерпретируются конечной программой в терминах представленных в математическом ядре программы. В случае несоответствия структуры описанной в `JSON` с ожидаемой библиотека генерирует сообщения об ошибках с указанием места в конфигурационном файле,

где возникла эта ошибка. Пример конфигурационного файла с описанием его структуры представлен в Приложении.

Для переносимости кода были использованы такие инструменты, как пакетный менеджер Conan [5] и система автоматизации сборки CMake [4]. Данные инструменты являются кроссплатформенными и распространяются бесплатно, что позволяет легко переносить проект с компьютера на компьютер, а также обеспечивает гибкость в выборе версий сторонних библиотек и настройке компиляции проекта.

3.2. Параллельный алгоритм ассемблирования матриц

Задачи в нелокальных постановках обладают достаточно большой вычислительной сложностью. Матрицы, получаемые после конечно-элементной аппроксимации, значительно более плотные по сравнению с их классическими аналогами, а также требуют огромных вычислительных ресурсов для их ассемблирования [104]. Поэтому возникает спрос на использование всех возможностей современных компьютеров, а именно параллельные вычисления на машинах с общей и распределённой памятью. Но для того, чтобы полностью задействовать все вычислительные ресурсы, необходимо разработать алгоритм пригодный для распараллеливания.

Для начала упростим аппроксимацию области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$, так как рассматриваемый ранее способ квадратурной аппроксимации, описанный формулой (2.12) и представленный на Рис. 2.1, крайне неудобен для практической реализации. Поэтому возникает идея упростить его и проводить аппроксимацию не относительно квадратурных узлов сетки, а относительно центров элементов. На Рис. 3.2 крестом обозначен центр элемента относительно которого проводится аппроксимация, область нелокального влияния ограничена окружностью, точками обозначены центры элементов, а серым цветом выделены элементы образующие аппроксимированную область нелокального

влияния S_h^e . Такой способ аппроксимации будем называть элементной аппроксимацией. Тогда в алгоритме ассемблирования нелокальной матрицы (2.12) сможем поменять местами знаки суммирования, после чего сможем преобразовать его к следующему виду

$$\hat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^{NL} = \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{e' \in S_h^e} \sum_{m \in I^{e'}} \sum_{q \in Q^e} w_q J_q^e \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \varphi(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) \mathbf{K}_{nm}^{ee'}(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) J_{q'}^{e'}. \quad (3.1)$$

Также можем упростить и алгоритм вычисления нелокального температурного линейного расширения (2.20)

$$\hat{\mathbf{E}}^{NL} = \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{e' \in S_h^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \nabla N_n^e(\mathbf{x}_q) J_q^e \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \varphi(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) \hat{\mathbf{C}} \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} \Delta T(\mathbf{x}_{q'}) J_{q'}^{e'} \mathbf{E}_n. \quad (3.2)$$

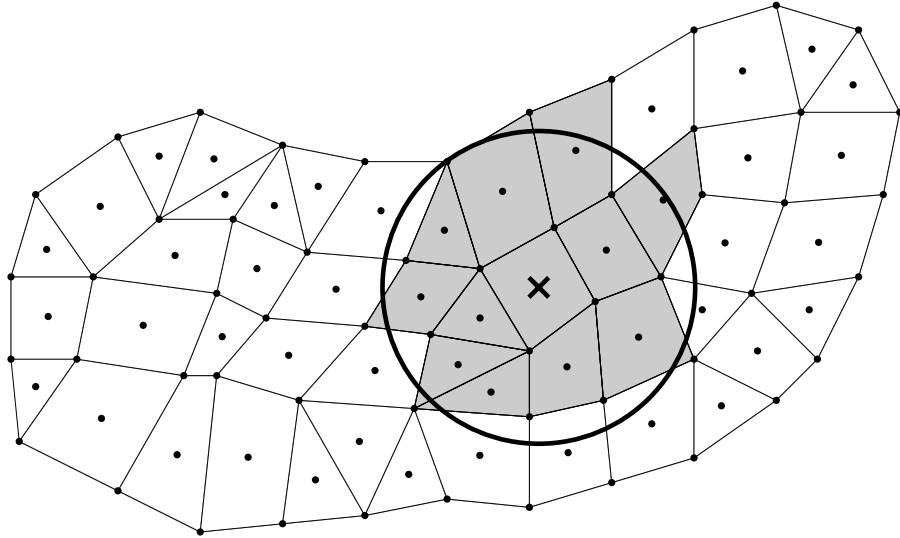


Рис. 3.2. Элементная аппроксимация области нелокального влияния

Такой подход позволяет разделить алгоритм обхода по сетке, ответственного за формирование портрета матрицы, от алгоритма интегрирования, однако, он обладает дефектом, который заключается в том, что не все квадратурные узлы, попадающие в область $S'(\mathbf{x}_q)$, центр которой находится в некотором квадратурном узле под номером q , попадают под покрытие аппроксимированной области нелокального влияния S_h^e . Это может приводить к нарушениям баланса, что в свою очередь приводит к менее точному решению и даже осциляциям.

Для решения данной проблемы, радиус поиска соседних элементов нужно брать больше радиуса нелокальности r , например, на величину максимального расстояния между центрами двух смежных элементов, где под смежными элементами подразумеваем элементы обладающие хотя бы одним общим узлом. Таким образом, все необходимые квадратурные узлы будут учтены в расчёте.

После разделения алгоритма обхода сетки и алгоритма интегрирования, можем изменить первый таким образом, чтобы сделать его пригодным для параллельных вычислений. Главной проблемой алгоритма (3.1) остаётся зависимость номера узла сетки от номера текущего элемента из-за чего при использовании параллельных вычислений существует вероятность возникновения гонки данных, что, в зависимости от подхода к распараллеливанию, может приводить к неправильному решению задачи, или частым барьерным синхронизациям, которые в свою очередь снижают эффективность использования параллельных вычислений. Поэтому возникает идея изменить порядок суммирования таким образом, чтобы такой зависимости не было. Для этого определим для каждого узла сетки $n \in S_h$ множество элементов E^n , которым он принадлежит и изменим порядок суммирования так, чтобы под первым знаком суммы были номера узлов, а под вторым номера элементов которым он принадлежит

$$\hat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^{NL} = \sum_{n \in S_h} \sum_{e \in E^n} \sum_{e' \in S_h^e} \sum_{m \in I^{e'}} \sum_{q \in Q^e} w_q J_q^e \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \varphi(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) \mathbf{K}_{nm}^{ee'}(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) J_{q'}^{e'}. \quad (3.3)$$

Такой алгоритм сборки матрицы является построчным, соответственно каждую строку матрицы можно собирать независимо в своём исполняемом потоке, а также распределить вычисление строк между вычислительными узлами.

Полученный алгоритм (3.3) пригоден для параллельных вычислений на машинах с общей и распределённой памятью, однако, возникает проблема балансировки данных и объёма вычислений. При решении этих проблем стоит начинать с проблемы балансировки данных, так как из-за неё есть вероятность возникновения ситуации, когда задача не может быть решена, в силу того, что

на одном из вычислительных узлов может не хватить оперативной памяти, в то время как при балансировке данных такой проблемы можно было бы избежать.

При балансировке данных будем исходить из гипотезы, что на каждом вычислительном узле $p \in P$ установлено одинаковое количество оперативной памяти и данные нужно распределить равномерно между всеми вычислительными узлами P . Для этого необходимо найти общее число элементов матрицы M , затем найти среднее $M_m = M/|P|$ и распределить строки матрицы между вычислительными узлами таким образом, чтобы в каждой группе строк количество элементов матрицы было приблизительно равным $M_p \approx M_m$. На практике удобнее всего брать группы последовательных строк. Причём при балансировке нет необходимости формировать полный портрет матрицы, это также можно делать построчно, что гораздо эффективнее и легко реализовать. Также при балансировке необходимо учесть симметрию полученной матрицы, так как из-за достаточно больших объёмов выгодно хранить лишь её половину.

После балансировки данных между вычислительными узлами, можем также провести балансировку объёмов вычислений между вычислительными потоками. Для этого необходимо проделать ту же процедуру, что и при балансировке данных, но осреднять не по количеству элементов матрицы, а по количеству вызовов функции интегрирования. В некоторых ситуациях такая балансировка может быть полезна и между вычислительными узлами, например, когда сборка матрицы занимает гораздо больше времени, чем решение итоговой СЛАУ.

Вместе с параллельным алгоритмом ассемблирования нелокальных матриц (3.3), можем также выписать параллельный алгоритм ассемблирования локальных матриц (2.11)

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

Аналогично можно поступить и с ассемблированием матрицы теплообмена (2.13), а также векторами в правой части (2.14) — (2.16) уравнения теплопроводности (2.7)

$$\mathbf{Q} = \sum_{n \in S_h} \sum_{e \in E^n} \sum_{q \in Q^e} w_q q_V(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n,$$

$$\mathbf{F} = \sum_{n \in \Gamma_h} \sum_{e \in E^n} \sum_{q \in Q^e} w_q f(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n,$$

$$\hat{\mathbf{K}}_T^\alpha = \sum_{n \in \Gamma_h} \sum_{e \in E^n} \sum_{m \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \alpha N_n^e(\mathbf{x}_q) N_m^e(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n \otimes \mathbf{E}_m,$$

$$\mathbf{T}^\alpha = \sum_{n \in \Gamma_h} \sum_{e \in E^n} \sum_{q \in Q^e} w_q \alpha N_n^e(\mathbf{x}_q) T_\alpha(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n.$$

Проделаем те же выкладки и для векторов правой части (2.17) — (2.19) и (3.2) уравнения равновесия (2.8)

$$\hat{\mathbf{B}} = \sum_{n \in S_h} \sum_{e \in E^n} \sum_{q \in Q^e} w_q \mathbf{b}(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n,$$

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{e \in \Gamma_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \mathbf{p}(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n,$$

$$\hat{\mathbf{E}}^L = \sum_{n \in S_h} \sum_{e \in E^n} \sum_{q \in Q^e} w_q \nabla N_n^e(\mathbf{x}_q) \cdot \hat{\mathbf{C}} \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} \Delta T(\mathbf{x}_q) J_q^e \mathbf{E}_n,$$

$$\hat{\mathbf{E}}^{NL} = \sum_{n \in S_h} \sum_{e \in E^n} \sum_{e' \in S_h^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \nabla N_n^e(\mathbf{x}_q) J_q^e \cdot \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \varphi(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) \hat{\mathbf{C}} \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} \Delta T(\mathbf{x}_{q'}) J_{q'}^{e'} \mathbf{E}_n,$$

Отметим, что при ассемблировании векторов на каждом вычислительном узле можем также ограничиться только теми строками, которые были получены при балансировке.

3.3. Алгоритм аппроксимации области нелокального влияния

При аппроксимации области нелокального влияния необходимо использовать метод поиска ближайших соседей, однако, важно выбрать оптимальный для рассматриваемых задач алгоритм. Наивный алгоритм линейного поиска имеет квадратичную сложность $O(N^2)$, в связи с чем на достаточно подробных сетках время поиска может быть весьма существенным. Поэтому построим алгоритм поиска в основе которого лежит k-d дерево [73].

Суть метода на основе k-d дерева заключается в разделении пространства занимаемого телом на равномерные ячейки, после разбиения на которые необходимо составить списки узлов соответствующие ячейкам, в которых они оказались. Размер ячеек следует брать равным радиусу поиска, тогда при поиске ближайших соседей поиск можно ограничить до ячейки в которой находится этот узел и смежных ей ячеек. В качестве алгоритма поиска внутри ячеек можно использовать обычный линейный поиск, тогда сложность такого алгоритма можно оценить как $O(N \log N)$, что на подробных сетках заметно быстрее линейного поиска. Пример разбиения представлен на Рис. 3.3, где крестом указан рассматриваемый узел, тёмно-серым цветом выделена ячейка, которой принадлежит этот узел, а светло-серым смежные ей ячейки, область нелокального влияния ограничена окружностью.

3.4. Оптимизация базисных функций конечных элементов

Помимо эффективных алгоритмов сборки матрицы жёсткости, также возникает потребность в эффективном решении итоговых СЛАУ. Прямые методы, применённые к разреженным матрицам, как правило требуют значительных затрат оперативной памяти, поэтому возникает спрос на использование итерационных методов решения [31]. Однако итерационные методы могут иметь слишком медленную сходимость, которая в первую очередь обусловлена самой

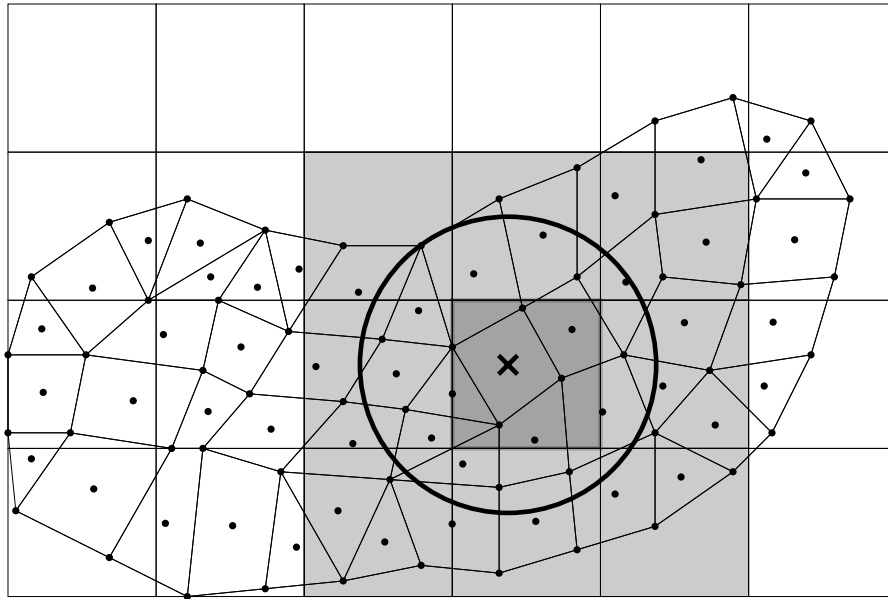


Рис. 3.3. K-d дерево для поиска ближайших соседей

системой. Таким образом возникает идея уменьшить число обусловленности системы и как правило для этого используют разного рода предобуславливатели и адаптируют сетку таким образом, чтобы элементы были ближе к своим исходным формам [108, 119]. Также для ускорения сходимости можно подобрать начальные данные, чтобы они были как можно точнее к искомому решению. Но в случае, когда для вычислений используют элементы высшего порядка, появляется дополнительная возможность оптимизировать базис элемента под конкретную задачу.

Обычно использование элементов высшего порядка может быть связано с желанием более точно аппроксимировать искомые величины или производные от этих величин, такие как тепловые потоки или деформации [30, 80]. Также они могут понадобиться для решения специфических задач, где могут встречаться производные высшего порядка. В задачах не обладающих такой спецификой большой популярностью обладают квадратичные серендиповые элементы, так как они позволяют достаточно точно аппроксимировать градиенты искомых функций и при этом, как показано на Рис. 3.4, не имеют внутренних узлов, что заметно упрощает расчёты.

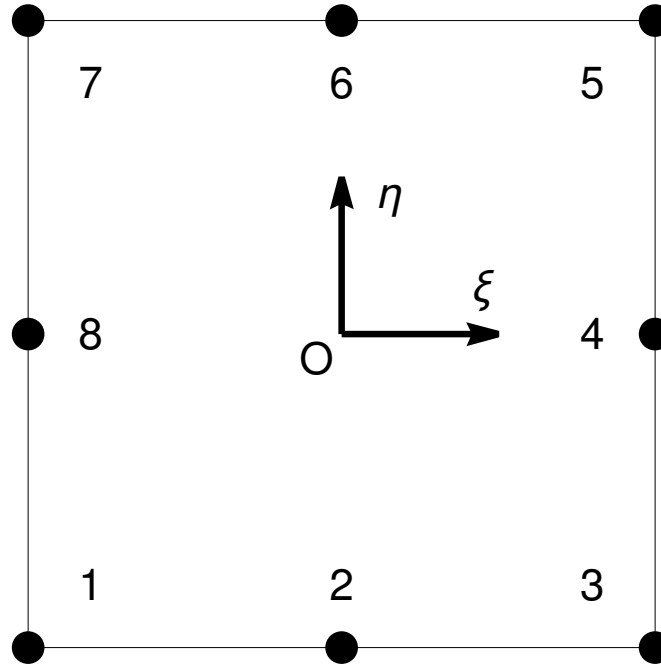


Рис. 3.4. Квадратичный серендиповый элемент в локальной системе координат $O\xi\eta$

Набор базисных функций для квадратичного серендипового элемента, которые предложил О. Zienkiewicz [138], не единственный и к тому же обладает рядом дефектов, которые повышают число обусловленности итоговой системы уравнений. Поэтому рассмотрим семейство базисных функций с дополнительным параметром s [48]

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

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

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

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

Выбор параметра s был основан на следующих предположениях

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

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

Таким образом, классический базис можно получить при $s = -1/3$.

Теперь можем перейти к задаче минимизации числа обусловленности матриц теплопроводности $\hat{\mathbf{K}}_T$ и жёсткости $\hat{\mathbf{K}}_E$, которые для удобства дальнейшего изложения будем обозначать одной буквой $\hat{\mathbf{K}}$. Для этого введём понятие числа обусловленности, как квадратный корень отношения максимального по модулю собственного числа λ_{\max} к минимальному по модулю собственному числу λ_{\min} матрицы $\hat{\mathbf{K}}$

$$\text{cond } \hat{\mathbf{K}} = \sqrt{\frac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|}}. \quad (3.4)$$

Воспользуемся гипотезой, что минимальное по модулю собственное число λ_{\min} слабо зависит от параметров модели и дополнительного параметра базиса. Так как след матрицы равен сумме её собственных значений, а сама матрица симметричная и положительно определённая, то задача минимизации числа обусловленности эквивалентна задаче минимизации следа матрицы

$$\min_s \text{tr } \hat{\mathbf{K}} = \min_s \sum_{e \in S_h} \int_{S_e} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^2 c_j N_{i,j}^e dS^e,$$

где k — количество функций форм элемента, c_j — постоянные коэффициенты, зависящие от свойств материала. Но, как легко заметить, результат задачи оптимизации не зависит от количества элементов и их геометрических свойств (считаем, что сетка состоит из однородных элементов), поэтому можем упростить задачу и рассмотреть лишь один элемент в локальной системе координат. Таким образом, для квадратичного серендипового элемента задача оптимизации сводится к поиску минимума квадратичной параболы

$$\min_s \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \sum_{i=0}^8 \sum_{j=0}^2 c_j N_{i,j}^2(\xi, \eta) d\xi d\eta = \min_s C(27s^2 - 12s + 19) \rightarrow s = \frac{2}{9}, \quad (3.5)$$

где C — константа. Исходя из полученной оценки, ожидаемый минимум числа обусловленности, а также наибольшая скорость сходимости итерационных методов решения СЛАУ должна быть в окрестности точки $s = 2/9$.

3.5. Основные результаты и выводы по главе 3

1. Представлена общая структура программного комплекса NonLocFEM, взаимосвязь модулей программы и их предназначение.
2. Предложен способ элементной аппроксимации области нелокального влияния, суть которого заключена в аппроксимации области нелокального влияния относительно центров элементов. При помощи данного способа был построен параллельный алгоритм ассемблирования матриц теплопроводности и жёсткости.
3. На основе k-d дерева построен быстрый алгоритм аппроксимации области нелокального влияния. Суть метода заключена в разделении области на квадратные ячейки, не превышающие радиус нелокальности, для того, чтобы сузить область поиска и за счёт этого ускорить общее время работы алгоритма аппроксимации.
4. Рассмотрено семейство базисов квадратичного серендипового элемента; получена оценка параметра базиса, при которой достигается минимальное число обусловленности матриц теплопроводности и жёсткости.

Глава 4. Анализ результатов расчётов

4.1. Стратегия исследования и обезразмеривание

В дальнейших расчётах, для изучения качественных различий между классической (локальной) и нелокальной моделями, проведём процедуру обезразмеривания основных расчётных параметров уравнений теплопроводности (1.2) и равновесия (1.5), где безразмерные параметры будем обозначать теми же символами, но с чертой над ними

$$\bar{x} = \frac{x}{L}, \quad \bar{T} = \frac{T}{T_0}, \quad \bar{\lambda} = \frac{\hat{\lambda}}{\lambda_0}, \quad \bar{E} = \frac{E}{\sigma_0}, \quad \bar{\alpha}^T = \alpha^T T_0.$$

Здесь L — характерный размер области; T_0 — нормализующий множитель для температуры; λ_0 — нормализующий множитель для тензора теплопроводности; σ_0 — нормализующий множитель для напряжений. Также чертой сверху будем обозначать безразмерные величины, которые образуются посредством комбинации приведённых выше безразмерных параметров. В расчётах, если не оговорено иначе, примем безразмерный тензор теплопроводности $\bar{\lambda} = \hat{\mathbf{I}}_2$, безразмерный модуль Юнга $\bar{E} = 400$, коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$ и безразмерный температурный коэффициент линейного расширения $\bar{\alpha}^T = 2.5 \cdot 10^{-3}$.

Стратегия исследования модели подразумевает вариацию основных параметров при фиксации всех остальных. Весовой параметр p_1 и радиус нелокальности \bar{r} будем варьировать линейно, причём для параметра p_1 будут рассмотрены четыре сценария: отсутствие нелокальных эффектов ($p_1 = 1$); локальное слагаемое преобладает над нелокальным ($p_1 = 0.75$); локальное и нелокальное слагаемые имеют одинаковый вес ($p_1 = 0.5$); и нелокальное слагаемое преобладает над локальным ($p_1 = 0.25$). Полностью нелокальную постановку ($p_1 = 0$) рассматривать не будем, так как это приводит к некорректно поставленным краевым задачам, что требует дополнительных рассуждений при их решении.

Все дальнейшие расчёты будем проводить с использованием квадратичных серендиповых элементов, где характерный размер элемента будет указан отдельно для каждой решаемой задачи. Также, по возможности, для наглядности все расчётные параметры модели будут указаны прямо на рисунках с решениями. С целью уменьшения дублирования полученных выводов, некоторые промежуточные результаты будут учтены при решении последующих задач.

4.2. Основные особенности решений

Рассмотрим изучение нелокальных моделей теплопроводности и упругости с решения серии задач на единичном квадрате $S = \{\bar{\mathbf{x}} \mid -0.5 \leq \bar{x}_1, \bar{x}_2 \leq 0.5\}$. Решения будем искать на равномерной сетке S_h с характерным размером элементов $h = 0.004$. Поставим граничные и интегральные условия для уравнения теплопроводности

$$\mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{\bar{x}_1=-0.5} = 1, \quad \mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{\bar{x}_1=0.5} = -1, \quad \int_S T dS = 0,$$

а также сформулируем граничные и геометрические условия для уравнения равновесия

$$n_j \bar{\sigma}_{j1}|_{\bar{x}_1=-0.5} = -1, \quad n_j \bar{\sigma}_{j1}|_{\bar{x}_1=0.5} = 1, \quad \bar{u}_1|_{\bar{x}_1=0} = 0, \quad \bar{u}_2|_{\bar{x}_2=0} = 0.$$

Для определения относительного отклонения будем рассматривать нормированную разность нелокального и локального решений в сечениях вдоль оси нагружения, где в качестве нормировочного множителя будет выступать максимальное по модулю значение локального решения

$$\tilde{T} = \frac{\bar{T}^{NL} - \bar{T}^L}{\max_{\mathbf{x} \in S} |\bar{T}^L|}, \quad \tilde{u}_1 = \frac{\bar{u}_1^{NL} - \bar{u}_1^L}{\max_{\mathbf{x} \in S} |\bar{u}_1^L|}.$$

Сравнительный анализ для уравнения теплопроводности и равновесия будем проводить одновременно, так как наблюдаемые в решениях явления весьма похожи.

Начнём изучение решений с вариации весового параметра модели p_1 . Как показано на Рис. 4.1, увеличение вклада нелокального влияния увеличивает отклонение решений относительно классического. Причём при параметре $p_1 = 0.25$ наблюдаем осцилляции решения вблизи границ области, где также наблюдаем кромочный эффект, характеризующийся резкими изменениями решения.

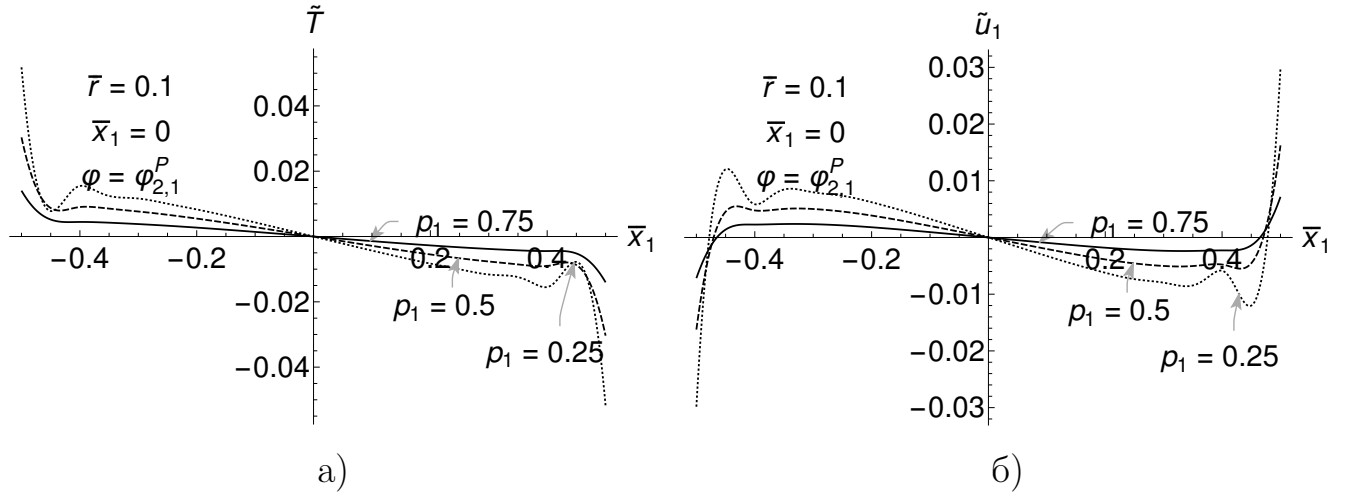


Рис. 4.1. Решения при вариации весового параметра параметра p_1

Вариация радиуса нелокальности, представленная на Рис. 4.2, также увеличивает отклонения, но вместе с тем и ширину кромочного эффекта пропорционально радиусу.

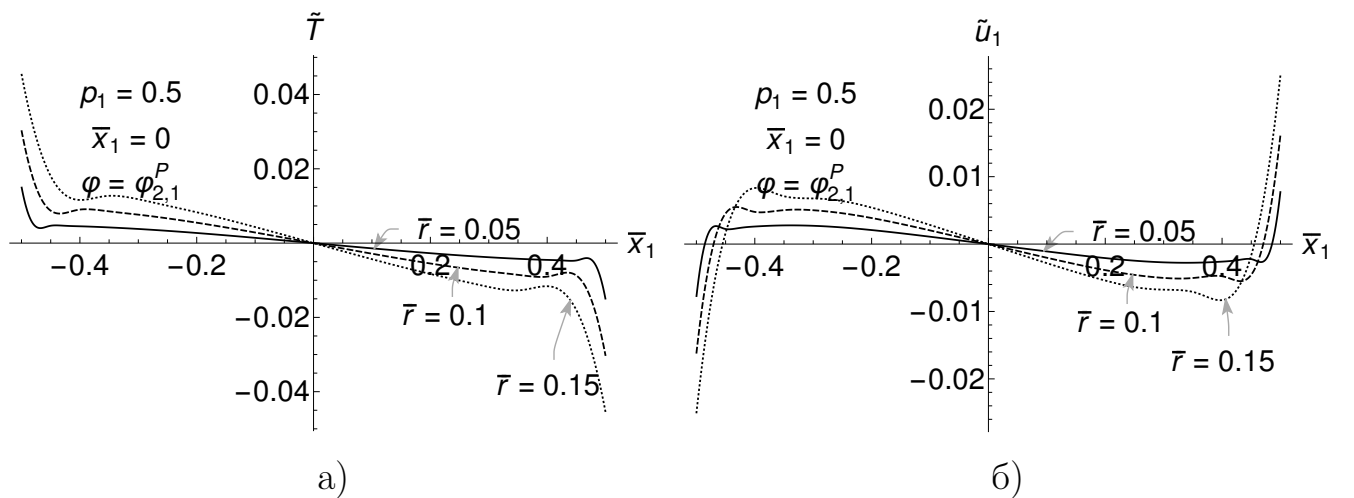


Рис. 4.2. Решения при вариации радиуса нелокальности \bar{r}

Заметим, что в двумерном случае, отклонения также зависят и от рассматриваемого сечения. На Рис. 4.3 представлены распределения температуры и

перемещения в различных сечениях и при приближении к свободным от условий границам отклонения возрастают, так как на них решение также подвержено кромочному эффекту. Наибольшие отклонения решений находятся в углах области, где кромочные эффекты двух границ складываются, и отклонения достигают 0.06 для уравнения теплопроводности и 0.15 для уравнения равновесия относительно классического решения при параметрах модели $p_1 = 0.5$ и $\bar{r} = 0.1$.

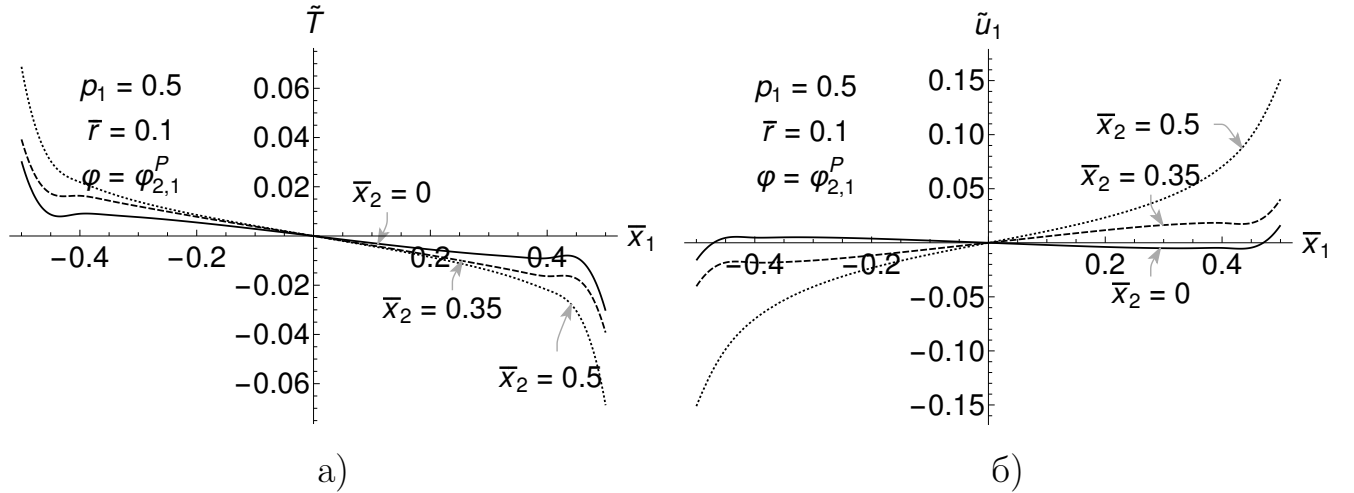


Рис. 4.3. Нормированная разница решений в разных сечениях

Помимо уже рассмотренного, решения в нелокальной постановке также обладают и другими интересными особенностями. Например, в отличие от классического решения, компонента теплового потока \bar{q}_2 не равна нулю вблизи границ, где задан ненулевой тепловой поток, причём, как показано на Рис. 4.4, решения обладают симметрией и также зависят от основных параметров модели. В отличие от температуры, увеличение радиуса нелокальности \bar{r} не влияет на величину отклонений, но увеличивает размах кромочного эффекта, который здесь характеризуется увеличением площади областей, окружённых линиями уровней. Внутри области и на свободных от условий границах компонента плотности теплового потока \bar{q}_2 равна нулю.

Для уравнения равновесия в нелокальной постановке ненулевой становится компонента тензора напряжений $\bar{\sigma}_{12}$, а заодно и компонента тензора деформаций ε_{12} . Её распределение имеет более сложную, но при этом также

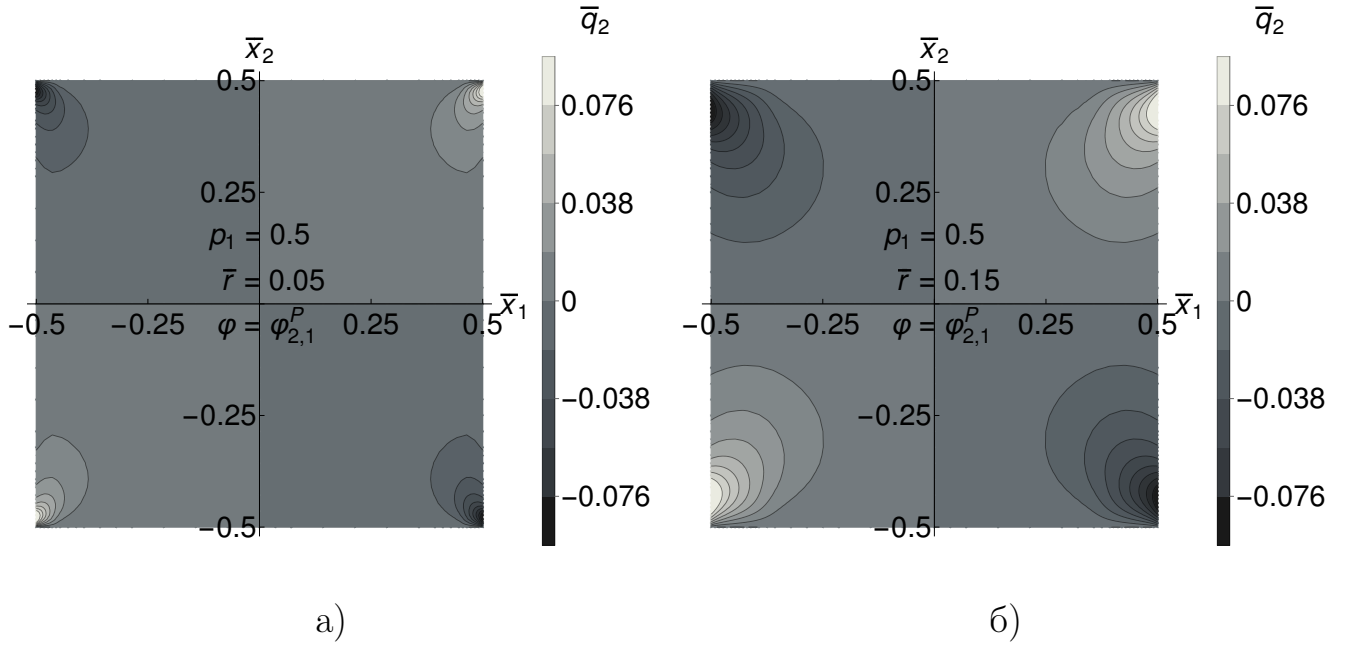


Рис. 4.4. Распределение компоненты \bar{q}_2 при вариации \bar{r}

симметричную форму и представлено на Рис. 4.5. Здесь, как и в случае с компонентой плотности теплового потока \bar{q}_2 , вариация радиуса практически не оказывает влияния на максимальные значения напряжения и также увеличивает размах линий уровня. Отметим ещё, что на всех границах, включая те, где заданы нагрузки, а также в центре области, значения $\bar{\sigma}_{12}$ равны нулю.

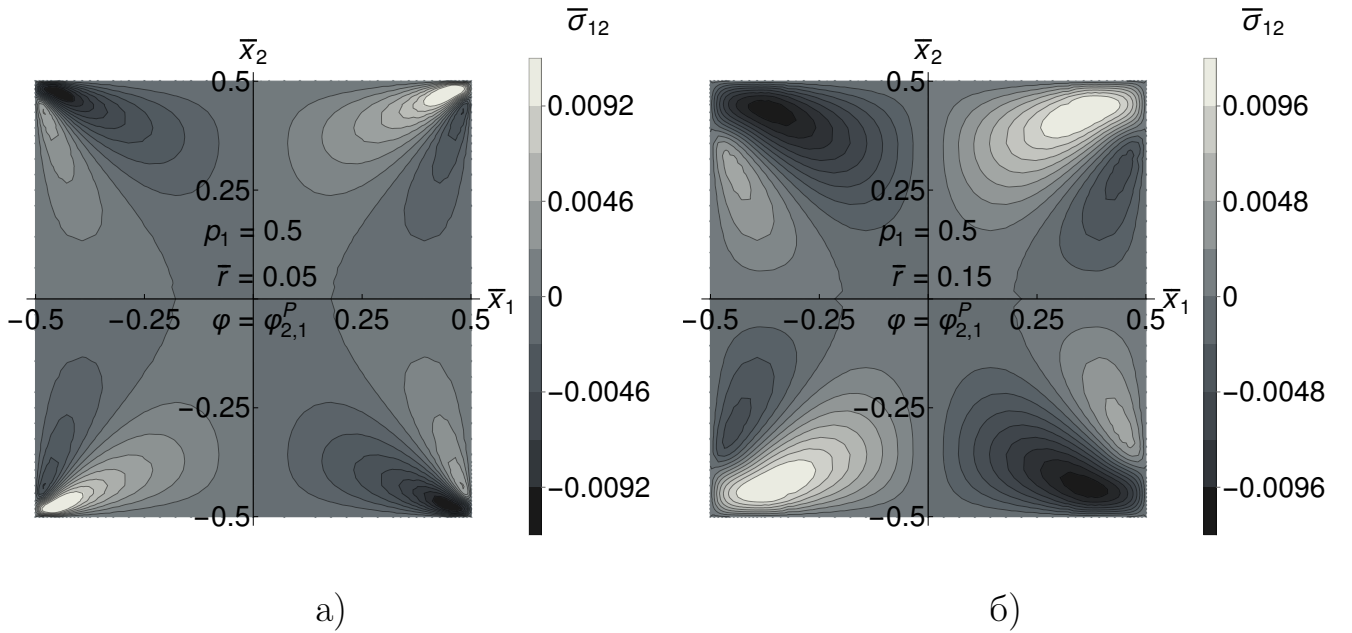


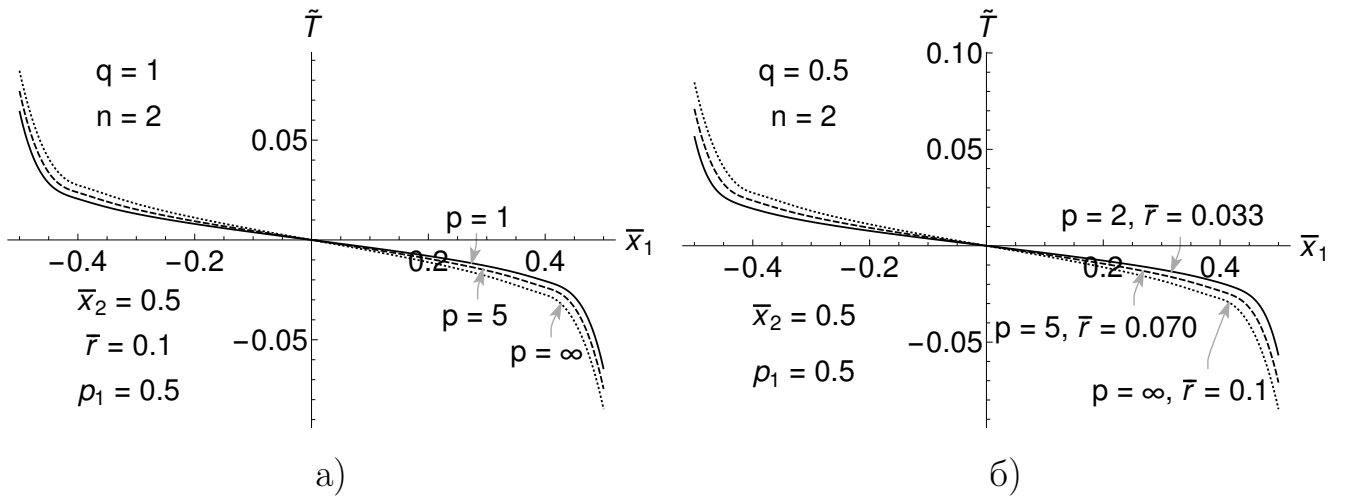
Рис. 4.5. Распределение компоненты $\bar{\sigma}_{12}$ при вариации \bar{r}

4.3. Исследование функций нелокального влияния

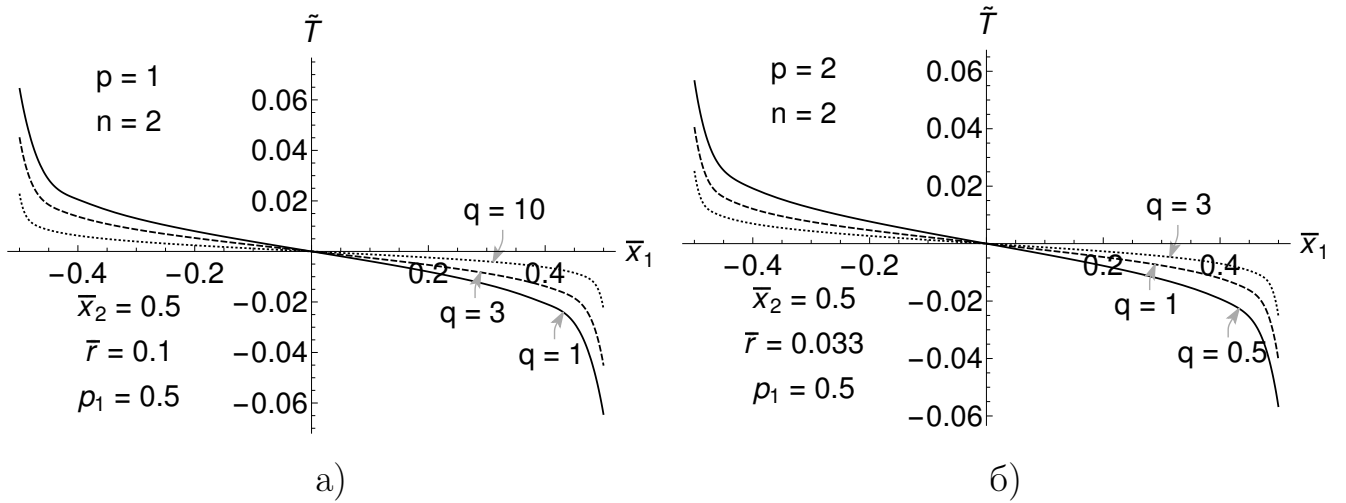
Изучим теперь влияние выбора функции нелокального влияния φ . Ранее уже были определены два параметрических семейства функций: полиномиальные $\varphi_{p,q}^P$ (1.9) и экспоненциальные $\varphi_{p,q}^E$ (1.11). На их примере покажем как вариация основных параметров влияет на результаты решений. Не теряя общности исследования ограничимся решением только уравнения теплопроводности, но при этом будем сравнивать семейства функций между собой одновременно, так как их параметры, обозначенные одинаковыми символами, имеют одинаковый смысл. Рассматриваемую область и постановку задачи оставим той же, что уже была рассмотрена в предыдущем разделе.

Начнём исследование с вариации параметра p . Данный параметр отвечает за равномерность распределения функции влияния по заданной области $S'(\mathbf{x})$. Как показано на Рис. 4.6, отклонения решения растут вместе с параметром p и достигают своего максимума, когда функция влияния вырождается в константу при $p \rightarrow \infty$. Здесь в качестве области нелокального влияния $S'(\bar{\mathbf{x}})$ был выбран круг с радиусом 0.1, поэтому для экспоненциального семейства функций был подобран и дисперсионный параметр нелокальности \bar{r} при заданном квантиле $Q = 0.99$. Добавим ещё одно замечание, что для того, чтобы поведение экспоненциального семейства совпадало с полиномиальным, то есть увеличение параметра p приводило к строгому увеличению отклонений, необходимо, чтобы параметр $p \geq n$.

Увеличение параметра q концентрирует распределение функции нелокального влияния φ в центре области $S'(\mathbf{x})$. Соответственно, при его увеличении отклонения решений относительно классического уменьшаются, что продемонстрировано на Рис. 4.7. Здесь важно отметить, что для экспоненциальных функций дисперсионный параметр нелокальности \bar{r} был выбран на основе функции с наименьшим значением параметра q , то есть для всех функций

Рис. 4.6. Вариация параметра p

он совпадает. Сделано это по причине того, что данные параметры связаны между собой и если при изменении параметра q подобрать подходящий под установленный квантиль Q величину \bar{r} , распределения функций для всех q будут совпадать.

Рис. 4.7. Вариация параметра q

Параметр n является геометрическим, поэтому его изменение влияет на форму области $S'(\mathbf{x})$. Вместе с его увеличением увеличивается и покрываемая областью нелокального влияния площадь и, как показано на Рис. 4.8, отклонение решений. В силу независимости величины дисперсионного параметра \bar{r} от параметра n в уравнении (1.12), параметр \bar{r} подбирался по правилу «3 сигма» на основе длины главной полуоси области $S'(\mathbf{x})$. Для экспоненциальных

функций при заданных параметрах p и q влияние параметра n становится несущественным, когда он больше 2.

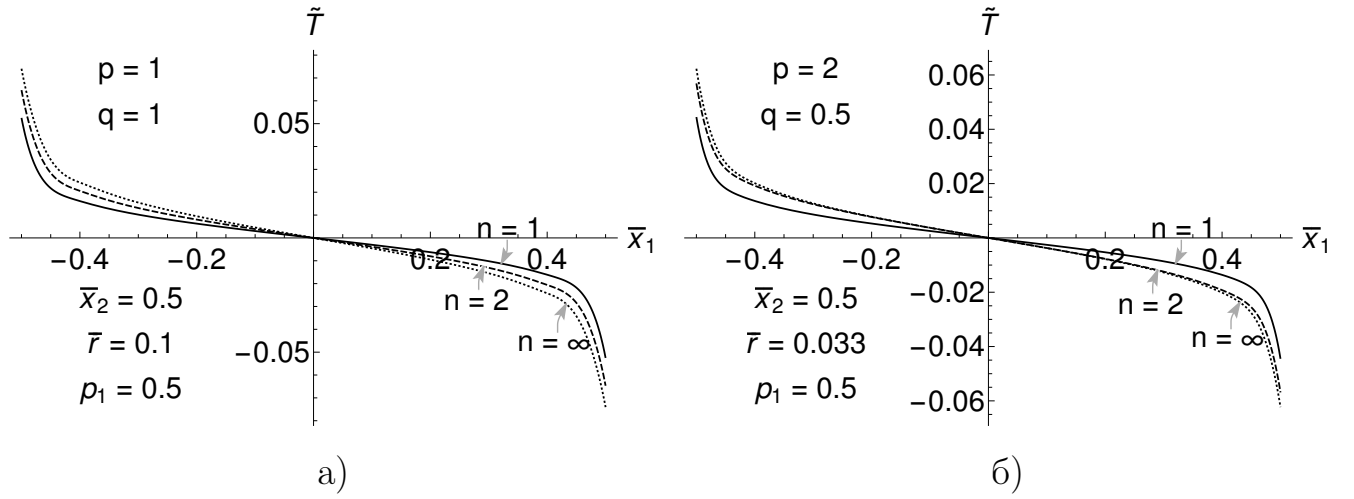


Рис. 4.8. Вариация параметра n

Подведём промежуточный итог касательно выбора функции нелокального влияния φ . Было продемонстрировано, что её выбор может повлиять на степень отклонения решения, но качественных различий между решениями при различных параметрах функций нет. Также выбор семейства функций не оказывает существенного влияния на итоговые результаты. В связи с этими обстоятельствами, дальнейшие расчёты были проведены только с использованием квадратичных парабол $\varphi_{2,1}^P$ при $n=2$, в силу того, что расчёты с использованием этой функции требуют наименьшего количества вычислительных ресурсов и этапы ассемблирования матрицы, вычисления тепловых потоков и напряжений происходят гораздо быстрее. Конечно, ещё меньше вычислительных операций требует функция $\varphi \equiv \text{const}$, но такая функция является предельной и не обладает свойством монотонного убывания из-за чего её использование формально является некорректным.

4.4. Принципы Сен-Венана и стабильности теплового потока

Изучение свойств нелокальной теплопроводности и упругости следует начинать с простых задач, на примере которых можно исследовать основные

принципы и положения присущие классическим моделям. К таким положениям можно отнести принцип стабильности теплового потока [27] и принцип Сен-Венана [58], согласно которым любые интегрально эквивалентные возмущения поля являются локальными и вызывают одинаковые распределения поля вдали от точек приложения возмущения. В частности, для уравнения теплопроводности (1.2) таким полем является поле плотности теплового потока \mathbf{q} , а для уравнения равновесия (1.5) — поле напряжений $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$.

Для проверки этого высказывания проведём серию расчётов на прямоугольной области $S = \{\mathbf{x} | -5 \leq x_1 \leq 5, -0.5 \leq x_2 \leq 0.5\}$, с введённой на ней равномерной сеткой S_h состоящей из 1500×150 элементов. Сформулируем граничные и интегральное условия для уравнения теплопроводности

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

а также сформулируем граничные и геометрические условия для уравнения равновесия

$$n_j \bar{\sigma}_{j1}|_{\bar{x}_1=-5} = -f(\bar{x}_2), \quad n_j \bar{\sigma}_{j1}|_{\bar{x}_1=5} = f(\bar{x}_2), \quad \bar{u}_1|_{\bar{x}_1=0} = 0, \quad \bar{u}_2|_{\bar{x}_2=0} = 0,$$

где f — функция задающая возмущение поля. Будем рассматривать три интегрально эквивалентных варианта возмущения

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

приложение которых, в виде теплового потока и давления заданных на левой и правой границах области S , изображено на Рис. 4.9.

Вначале рассмотрим распределение компоненты теплового потока \bar{q}_1 в локальной и нелокальной постановках. Для этого на Рис. 4.10 рассмотрим сечения $\bar{x}_2 = 0$ и $\bar{x}_2 = 0.5$, где можем увидеть, что несмотря на различные тепловые потоки подведённые к левой и правой границам, при удалении от точек приложения потоки сливаются в единую поверхность, которая в локальном случае является плоскостью $\bar{q}_1 = 1$, а в нелокальном представляет более сложную поверхность.

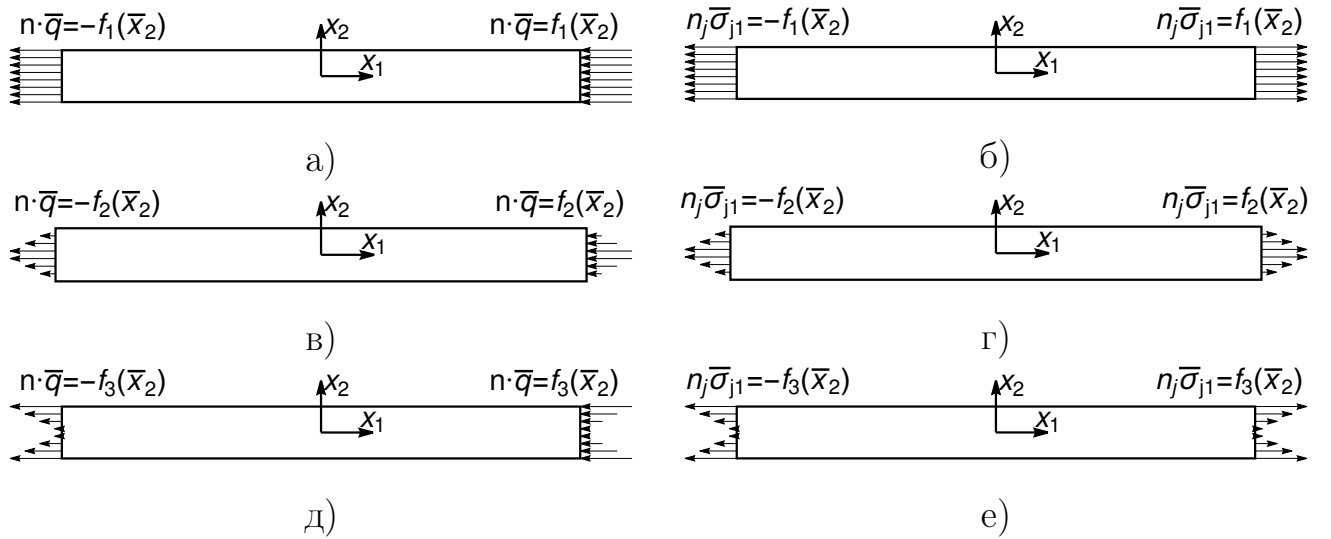


Рис. 4.9. Тепловые (а, в, д) и механические (б, г, е) нагрузки, прикладываемые к пластине на левой и правой границах

Теперь рассмотрим распределение компоненты тензора напряжений $\bar{\sigma}_{11}$. Здесь аналогично ранее рассмотренной компоненте плотности теплового потока \bar{q}_1 решения сливаются в общую поверхность, которая, как и в предыдущем случае, в локальной постановке является плоскостью $\bar{\sigma}_{11} = 1$, а в нелокальной представляет некоторую поверхность. На Рис. 4.11 представлены распределения компоненты тензора напряжений $\bar{\sigma}_{11}$ в сечениях $\bar{x}_2 = 0$ и $\bar{x}_2 = 0.5$ в локальной и нелокальной постановках.

Рис. 4.10 и 4.11 имеют похожие кривые, однако, стабилизация теплового потока происходит заметно быстрее стабилизации напряжений. Для иллюстрации на Рис. 4.12 представим логарифмическую разницу решений полученных при нагрузениях с использованием функций f_1 и f_2 , где для обобщения обозначений по оси ординат решения будем обозначать символами \mathcal{S}_1 и \mathcal{S}_2 соответственно. В полученных распределениях локальные и нелокальные решения имеют одинаковый характер сходимости, но в центре области расхождения между ними начинают возрастать, причём в случае тепловых потоков разница достигает около двух порядков, однако, учитывая порядок величин, такое расхождение можно связать с погрешностями вычислений. Также стоит отметить, что стабилизация теплового потока происходит монотонно, в то время как ста-

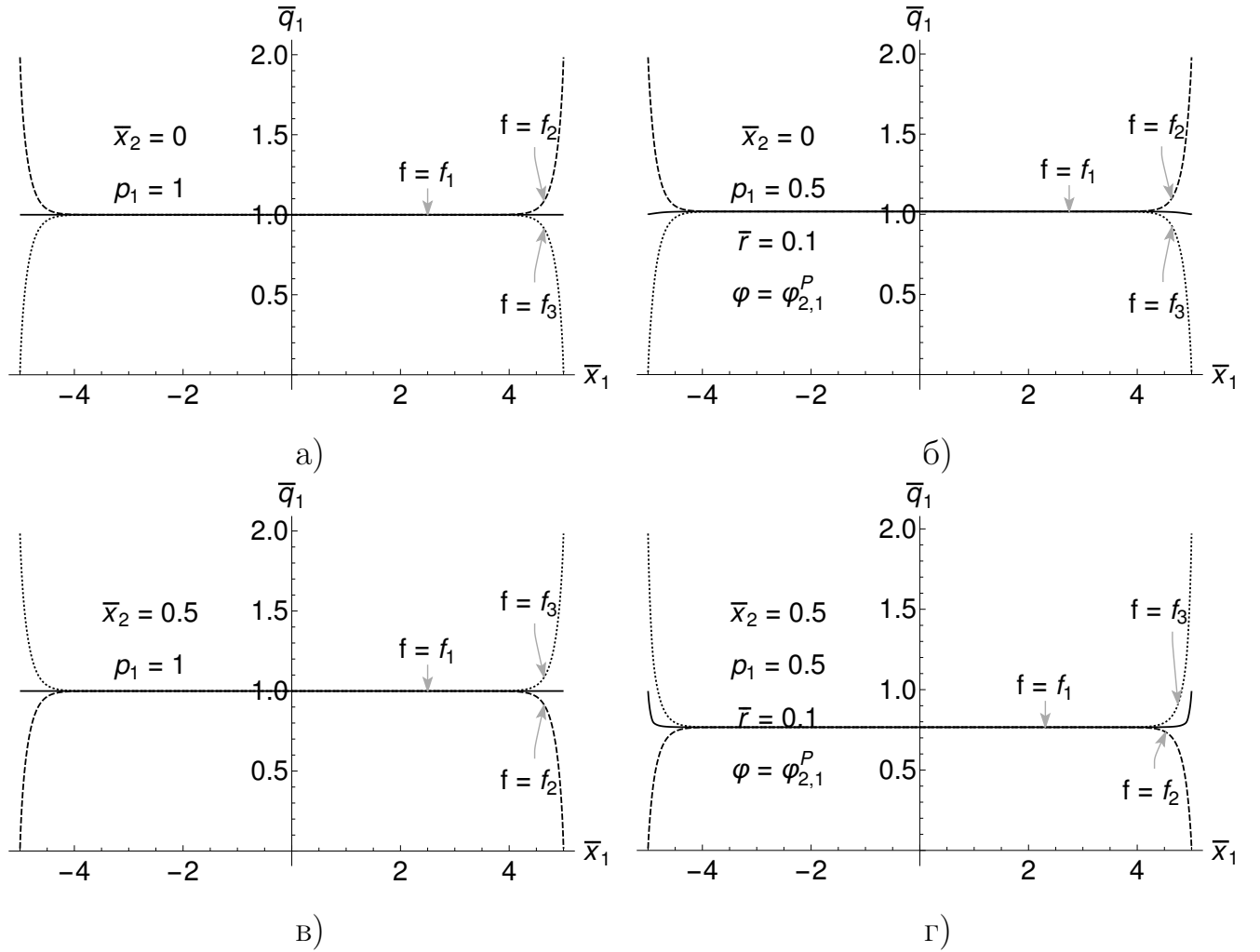


Рис. 4.10. Распределение компоненты плотности теплового потока \bar{q}_1 в сечениях (а, б) $\bar{x}_2 = 0$ и (в, г) $\bar{x}_2 = 0.5$ в (а, в) локальном и (б, г) нелокальном случаях

близация напряжений имеет осцилирующий характер. Это можно понять по изломам графика, то есть в этих точках происходит пересечение кривых.

Теперь рассмотрим сечение вдоль оси $O\bar{x}_2$. В этом сечении решения обладают кромочным эффектом, который проявляется в снижении уровня рассматриваемой величины на свободных границах области и компенсирующим это снижение повышением этой величины в центре. Вариация радиуса нелокального влияния \bar{r} увеличивает размах кромочного эффекта, а вариация весового параметра p_1 влияет на величину отклонения. При этом заметим, что при фиксированном радиусе нелокальности \bar{r} все решения, при различных значениях параметра p_1 , пересекаются в общих точках. В силу того, что графики компоненты теплового потока \bar{q}_1 и компоненты напряжений $\bar{\sigma}_{11}$ в этом сечении не

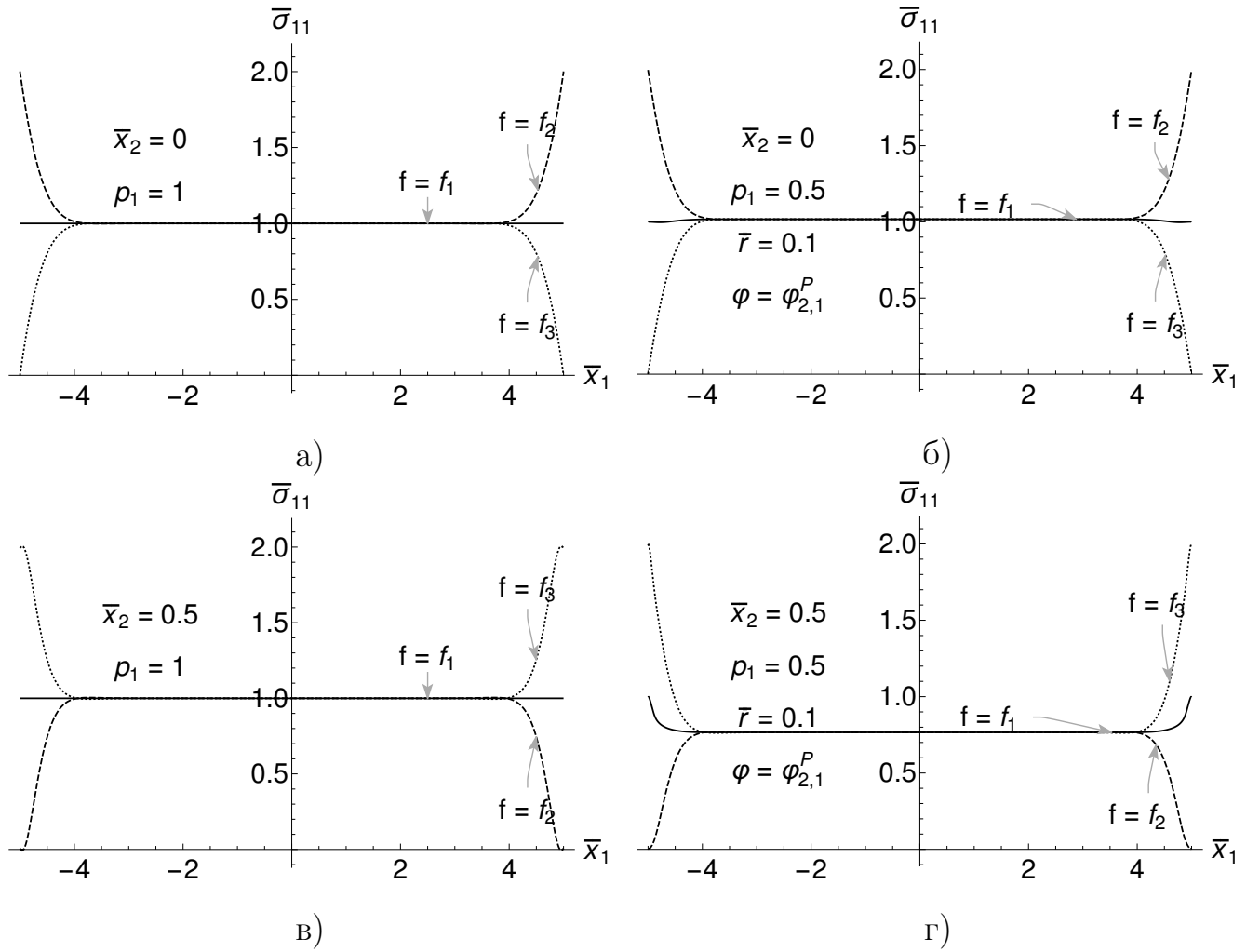


Рис. 4.11. Распределение компоненты тензора напряжений $\bar{\sigma}_{11}$ в сечениях (а, б) $\bar{x}_2 = 0$ и (в, г) $\bar{x}_2 = 0.5$ в (а, в) локальном и (б, г) нелокальном случаях

отличаются, изобразим их на общем Рис. 4.13, указав по оси ординат обобщающий их символ \mathcal{S} .

Во всех сечениях равнодействующие компоненты теплового потока \bar{q}_1 и напряжения $\bar{\sigma}_{11}$ сохраняются и равны приложенным нагрузкам:

$$\int_{-0.5}^{0.5} \bar{q}_1 d\bar{x}_2 = \int_{-0.5}^{0.5} f_i(\bar{x}_2) d\bar{x}_2, \quad \int_{-0.5}^{0.5} \bar{\sigma}_{11} d\bar{x}_2 = \int_{-0.5}^{0.5} f_i(\bar{x}_2) d\bar{x}_2, \quad i = \overline{1,3}.$$

Это свидетельствует о выполнении принципов стабильности теплового потока и Сен-Венана, а также сохранении балансных соотношений.

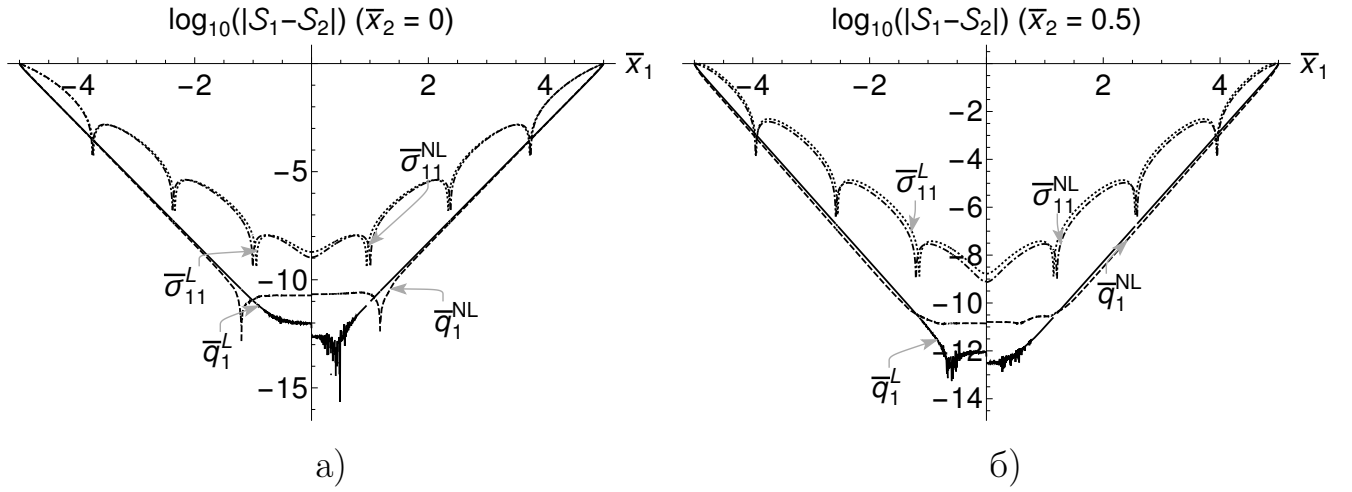


Рис. 4.12. Логарифмическая разность решений при различных нагружениях в сечениях (а) $\bar{x}_2 = 0$ и (б) $\bar{x}_2 = 0.5$

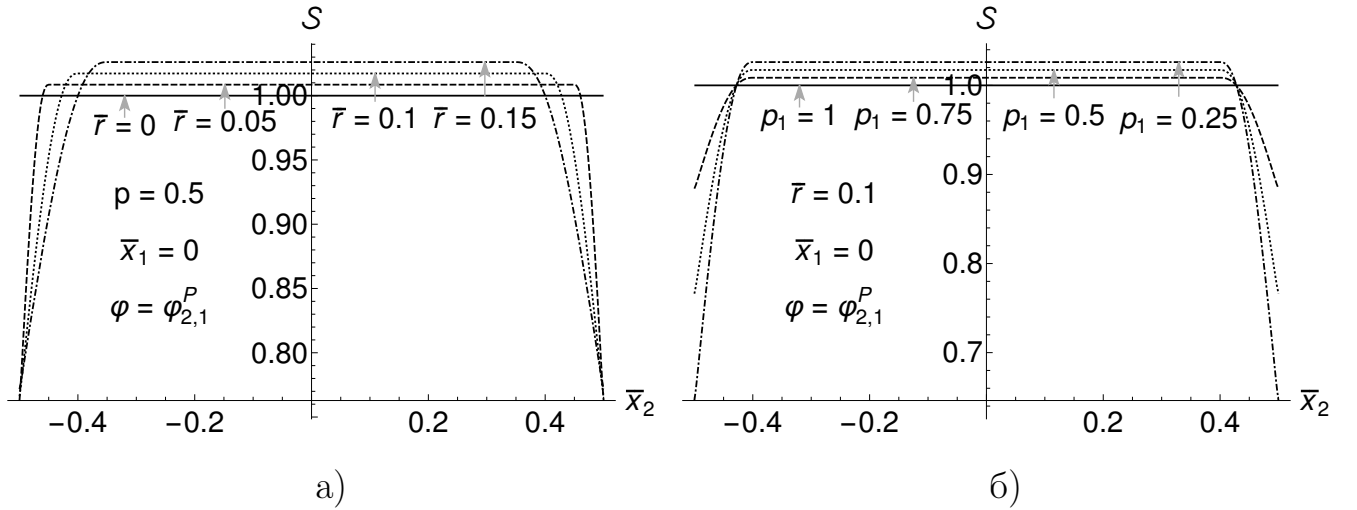


Рис. 4.13. Распределение компоненты теплового потока \bar{q}_1 и компоненты тензора напряжений $\bar{\sigma}_{11}$ в сечении $\bar{x}_1 = 0$ при вариации (а) \bar{r} и (б) p_1

4.5. Растяжение пластины со ступенчатым переходом

Большой интерес представляет поведение модели на областях с сингулярными точками, где решения стремятся к бесконечности при дроблении сетки. К таким областям относятся области со ступенчатыми переходами, часто возникающими в различных конструкциях и деталях. Для изучения особенностей будет достаточно одного перехода, поэтому рассмотрим простейшую Т-образную область S заключённую в единичный квадрат $\bar{S} = \{\mathbf{x} \mid 0 \leq x_1, x_2 \leq 1\}$.

Приложим следующие граничные и геометрические условия

$$n_j \bar{\sigma}_{j2}|_{\bar{x}_2=0} = -1, \quad \bar{u}_2|_{\bar{x}_2=1} = 0, \quad \bar{u}_1|_{\bar{x}_1=0.5} = 0.$$

Область с проиллюстрированными граничными условиями и интересующими сечениями AB, CD, EF и GH представлена на Рис. 4.14. Решение будем искать на равномерной сетке S_h с характерным размером элементов $h = 1/300$.

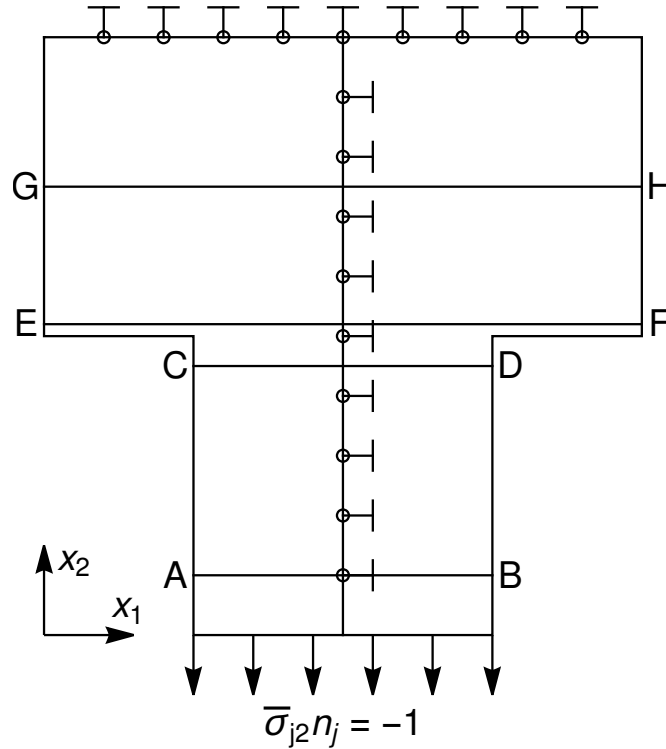


Рис. 4.14. Т-образная область с приложенной нагрузкой

Распределение полей компоненты деформации ε_{22} в локальном и нелокальном случаях при различных радиусах нелокального влияния \bar{r} представлены на Рис. 4.15. В нелокальном случае линии уровня изменяют свой характер вблизи границ области, особенно в области ступенчатого перехода, где помимо прочих искажений наблюдаем увеличение деформаций, причём как положительных, так и отрицательных. Линии уровня в областях с отрицательной деформацией становятся более выраженными и их размах увеличивается вместе с радиусом нелокальности \bar{r} . В отличие от классического случая, в нелокальном в точках приложения нагружения поле деформации ε_{22} неравномерно, несмотря на

равномерный характер нагружения. Это характеризуется повышенными значениями деформации в углах кромки, к которой приложена нагрузка. Вблизи точек закрепления линии уровня терпят излом, характеризующийся резкой сменой направления линии, которая по итогу, в отличие от классического случая, выходит на границу области не под прямым углом. Крутизна излома уменьшается при увеличении радиуса нелокальности, а расстояние от границы до излома увеличивается.

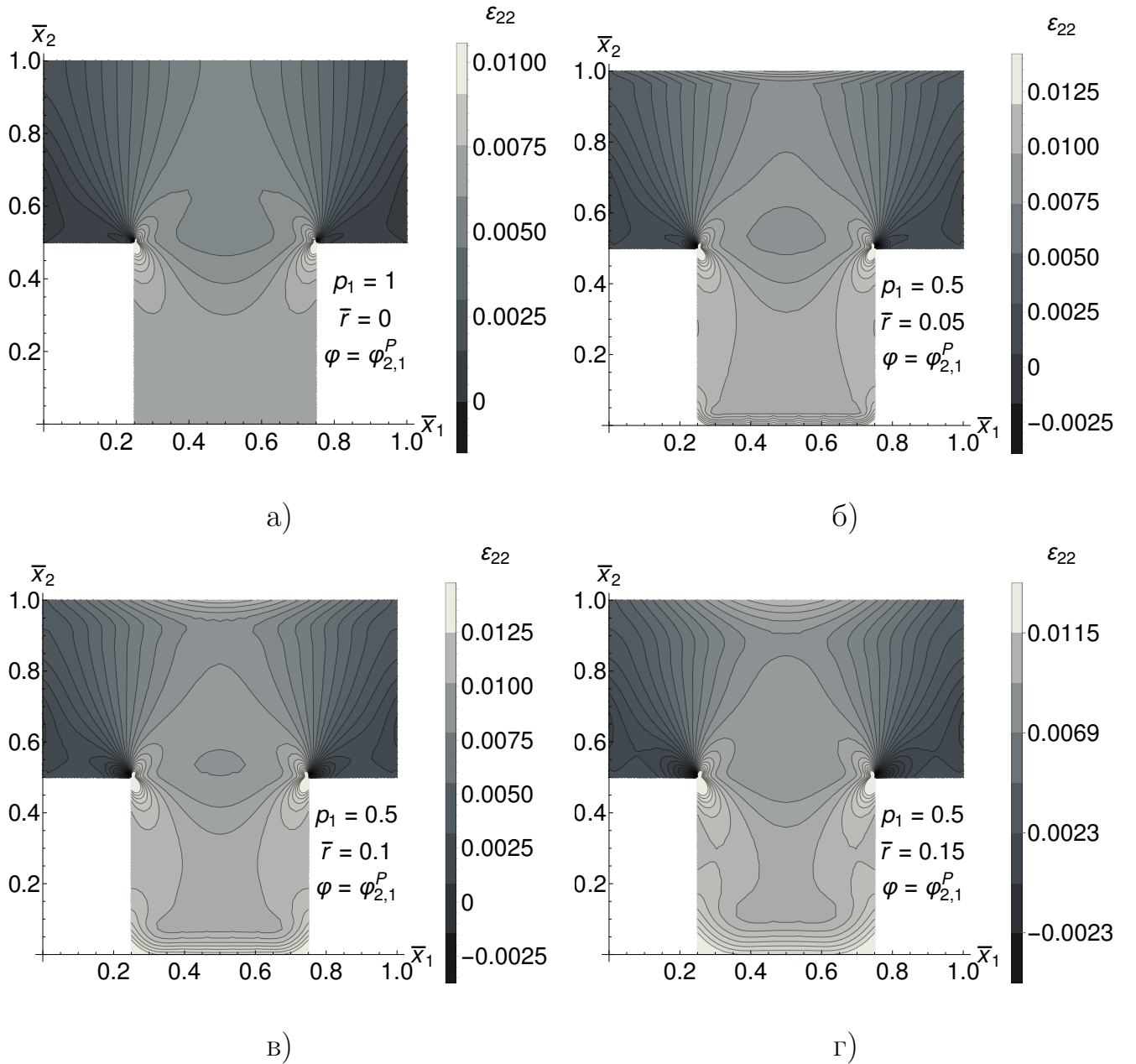


Рис. 4.15. Распределение компоненты тензора деформации ε_{22} при различных радиусах нелокальности \bar{r}

Аналогичные распределения деформации в областях со ступенчатыми переходами были получены в результате серии экспериментов под руководством А.В. Андреева с точным измерением деформаций на пластинах из оптически активных материалов [20]. Деформации измерялись в различных сечениях пластины с использованием 120 тензородатчиков с однокровным механическим сопротивлением. Также был использован альтернативный метод измерения деформации с использованием оптических приборов, где при помощи нанесённой на пластину сетки измерялись перемещения её узлов. При помощи закона Гука и экспериментальных данных о деформациях были определены напряжения и найдены их равнодействующие в сечениях. В работе А.В. Андреева было показано, что на участке, отстоящем от ступенчатого перехода примерно на четверть ширины ступени, наблюдались наиболее резкие изменения полей деформации и напряжений. Кроме того, в результате экспериментов было установлено, что равнодействующая напряжений, рассчитанная по формуле

$$\bar{\sigma}_{22}^* = \int_{l_1}^{l_2} \bar{\sigma}_{22} d\bar{x}_1,$$

в сечениях, достаточно удалённых от ступенчатого перехода, равна приложенной нагрузке, а результирующие напряжения в сечениях близких к ступенчатому переходу, оказались в среднем на 30% меньше приложенного нагружения. Эффект сохранялся при различных значениях нагрузки, а также при двух предельных формах закона Гука, соответствующих плоскому деформированному и плоскому напряжённому состояниям. Объяснением подобного эффекта в работе А.В. Андреева вероятно является тот факт, что классическая теория упругости при расчёте напряжений не позволяет учесть структурных особенностей материала, что и привело к неправильной интерпретации полученных данных.

Действительно, если подставить значения деформации, представленные на Рис. 4.15, в классический закон Гука, то получим результаты похожие на

те, что были описаны в эксперименте. Распределения результирующего напряжения $\bar{\sigma}_{22}^*$, представленные на Рис. 4.16, также демонстрируют снижение напряжения сразу после ступенчатого перехода, но не на 30%, как это было описано в экспериментах. В нижней части области ситуация обратная, результирующее напряжение выше приложенной нагрузки, а в области стыковки двух частей области наблюдаем резкий перепад напряжений. Максимум отклонения находится на нижней и верхней границах области. Отметим, что наибольший вклад на величину отклонения вблизи границ области оказывает весовой параметр p_1 , а на величину отклонения внутри области, а также на ширину отклонения, радиус нелокального влияния \bar{r} . При расчёте напряжений по формуле (1.6) равнодействующая напряжений во всех сечениях равна постоянной, интегрально совпадающей с приложенной нагрузкой.

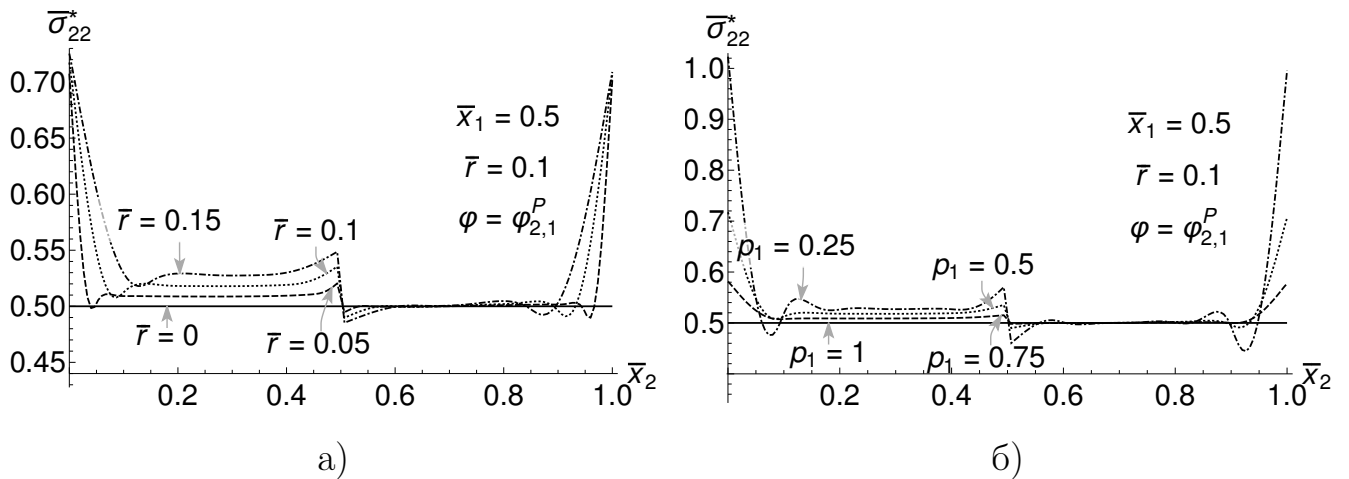


Рис. 4.16. Равнодействующая напряжения $\bar{\sigma}_{22}^*$ при вариации (а) \bar{r} и (б) p_1

На Рис. 4.17 представлены распределения компоненты напряжения $\bar{\sigma}_{22}$ в сечениях, указанных на Рис. 4.14, при различных весовых параметрах p_1 и фиксированном радиусе нелокального влияния $\bar{r} = 0.1$. Во всех сечениях увеличение вклада нелокального влияния увеличивает отклонение решения относительно классического. При этом в нижней части области отклонения гораздо более заметные, чем в верхней. Как и в задаче о растяжении прямоугольной пластины, на примере которой ранее был рассмотрен принцип

Сен-Венана, здесь наблюдаем существенное снижение напряжения $\bar{\sigma}_{22}$ на свободных от условий границах области. Внутри области напротив происходит повышение уровня напряжений. Отдельно стоит отметить сечение АВ, в котором у нелокальных решений образуются «горбы» отстоящие на радиус нелокальности \bar{r} от границ. В сечениях близких к концентратору CD и EF наблюдаем существенное снижение максимального уровня напряжений. А в сечении EF различия в решениях не настолько существенные, как в других сечениях, но также подчиняются всем ранее описанным особенностям. Дополнительно отметим, что при фиксированном радиусе нелокального влияния \bar{r} все решения пересекаются в общих точках.

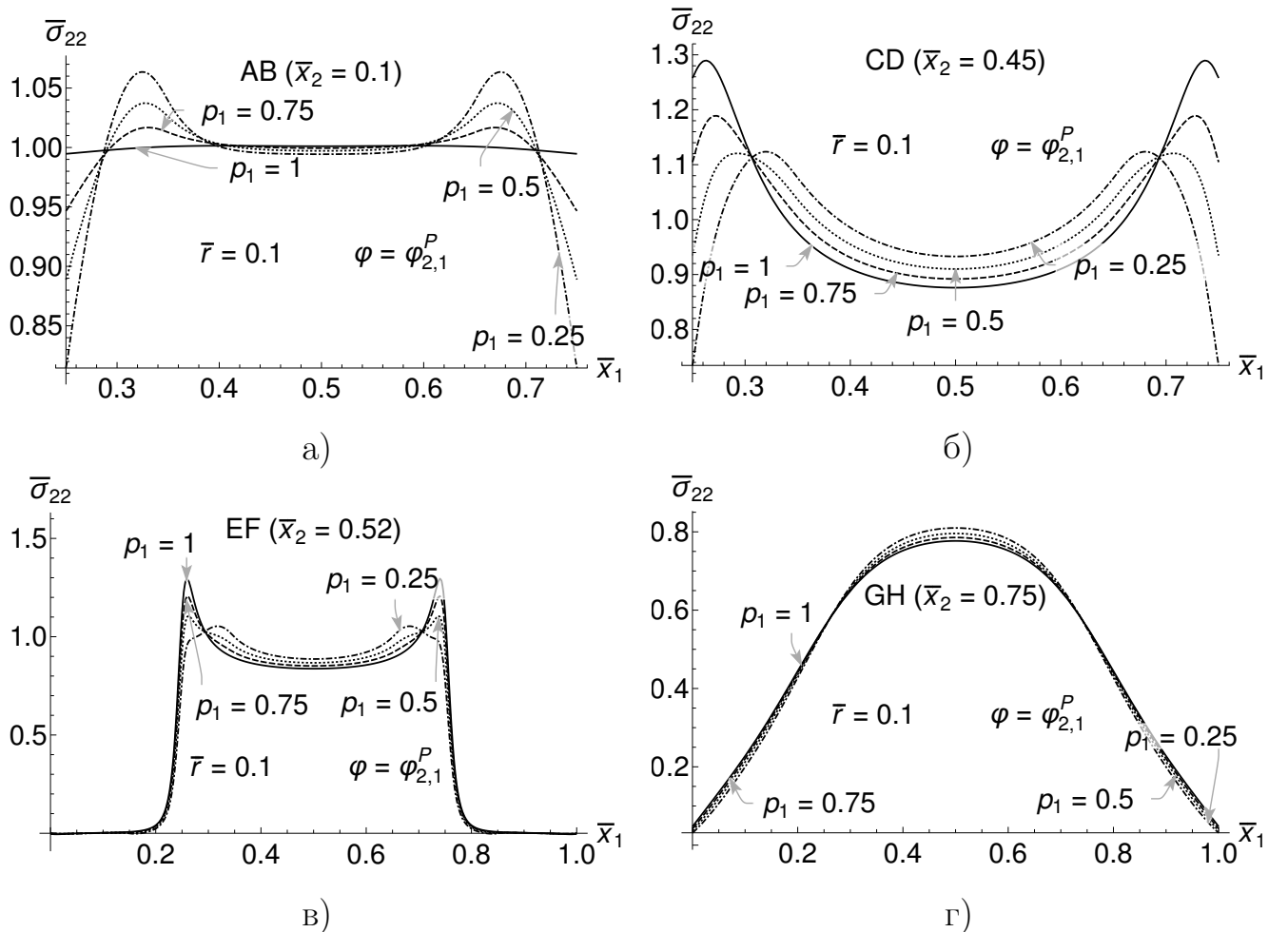


Рис. 4.17. Распределение напряжений $\bar{\sigma}_{22}$ при различных весовых параметрах p_1

4.6. Задача Кирша с обобщением на эллиптические вырезы

Продолжим изучение модели на примере решения задачи Кирша с обобщением на эллиптические вырезы. Для этого рассмотрим область S , заключённую в квадратную область $\bar{S} = \{\bar{\mathbf{x}} \mid -1 \leq \bar{x}_1, \bar{x}_2 \leq 1\}$, с эллиптическим вырезом по центру, где главные оси выреза сонаправлены с осями координат и имеют длины R_1 и R_2 соответственно. Поставим граничные и геометрические условия

$$n_j \bar{\sigma}_{j1}|_{\bar{x}_1=-1} = -1, \quad n_j \bar{\sigma}_{j1}|_{\bar{x}_1=1} = 1, \quad \bar{u}_1|_{\bar{x}_1=0} = 0, \quad \bar{u}_2|_{\bar{x}_2=0} = 0.$$

Схематичное представление области и приложенных нагрузжений изображены на Рис. 4.18, где также введена дополнительная угловая координата θ необходимая для анализа распределения интересующих величин на кромке АВ. Решение будем искать на структурированной сетке S_h , построенной при помощи программного комплекса Abaqus [1], пример которой при $R_1 = 0.2$ и $R_2 = 0.4$ с характерным размером элементов $h = 0.05$ представлен на Рис. 4.19. Расчёты описанные далее были проведены на более подробных сетках с характерным размером элементов $h = 0.005$ при различных параметра R_1 и R_2 не превышающих 0.1.

Наибольший интерес исследования представляет распределение деформации и напряжений на кромке эллиптического выреза, но так как задача обладает симметрией, сократим рассматриваемую область до дуги АВ. Для удобства исследования введём угловой параметр θ , относительно которого параметризуем координаты дуги следующим образом

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

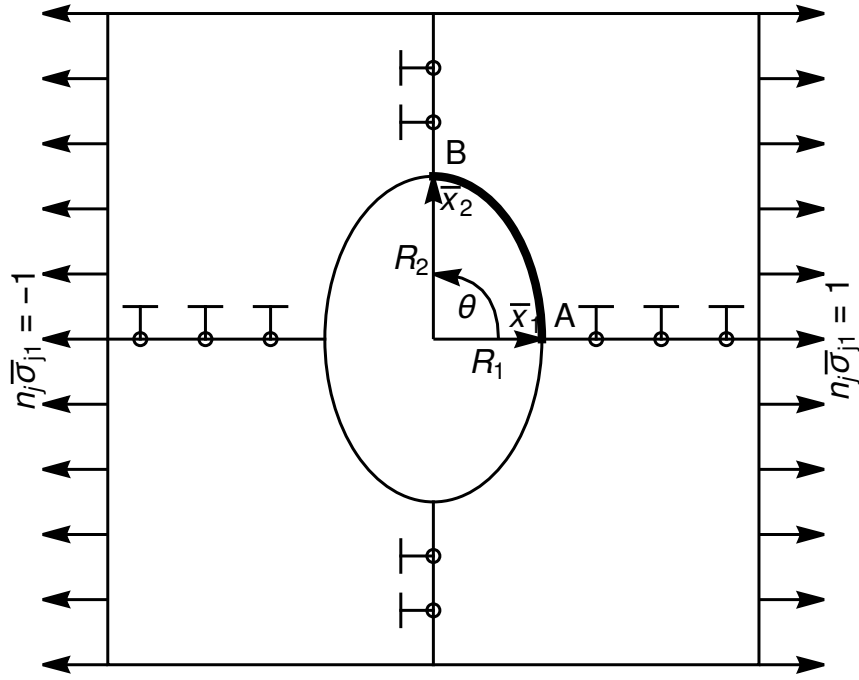


Рис. 4.18. Постановка задачи Кирша

где угол θ принимает значения от 0 до $\pi/2$. Затем вычислим длину дуги l с зависимостью от угла θ

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

и наконец обезразмерим этот параметр

$$\bar{l}(\theta) = \frac{l(\theta)}{l\left(\frac{\pi}{2}\right)}. \quad (4.1)$$

Дальнейшие результаты на кромке АВ будем рассматривать в координатах безразмерного параметра длины \bar{l} . В расчётах будем варьировать отношение длин полуосей выреза таким образом, чтобы максимальная длина была равна 0.1, т.е. $\max(R_1, R_2) = 0.1$. Также для дальнейшего анализа введём величину отношения длин полуосей $\rho = R_2/R_1$.

Для данной постановки задачи известно, что максимальные значения компоненты тензора напряжений $\bar{\sigma}_{11}^{\max}$ находятся в верхней и нижней точках эллипса и образуют линейную зависимость относительно параметра ρ и при-

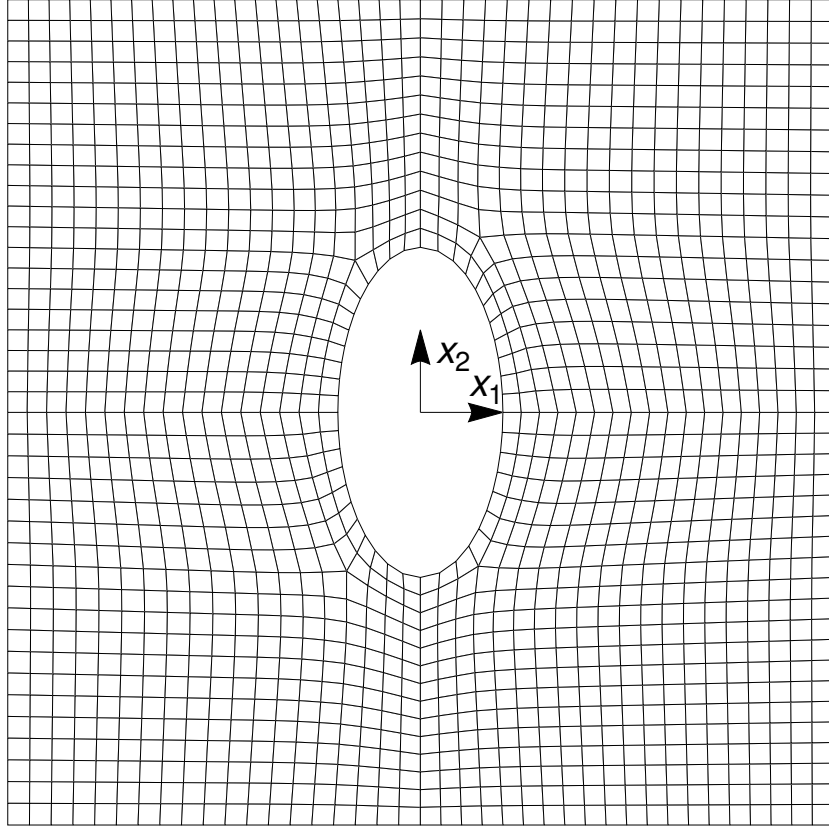


Рис. 4.19. Пример конечно-элементной сетки на области с эллиптическим вырезом

кладываемого нагружения σ_0 [23, 25]

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

Однако в нелокальном случае максимальный уровень напряжения снижается и начинает зависеть ещё и от весового параметра p_1 . Рассмотрим результаты представленные в Таб. 4.1, где выписаны значения $\bar{\sigma}_{11}^{\max}$ при различных значениях параметра ρ и весового параметра p_1 . Заметим, что данные в локальном случае ($p_1 = 1$) хорошо согласуются с представленной выше зависимостью, а в нелокальном необходимо добавить дополнительный множитель κ , зависящий от весового параметра p_1 ,

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

Такая зависимость не имеет строгого теоретического доказательства и получена эвристически, однако, она может быть полезна для оценки максимальных

значений напряжений в практических расчётах. Для оценки параметра κ при фиксированном значении p_1 необходимо провести n расчётов при различных соотношениях длин полуосей и выполнить осреднение согласно следующей формуле

$$\kappa(p_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n \frac{\bar{\sigma}_{11}^{\max}(\rho_i, p_1)}{\bar{\sigma}_{11}^{\max}(\rho_i, 1)}, \quad (4.2)$$

где ρ_i — отношение длин полуосей в i -ом расчёте. По результатам, представленным в Таблице 4.1, значения κ линейно зависят от весового параметра p_1 .

Таблица 4.1. Максимальный уровень напряжения $\bar{\sigma}_{11}$ при вариации отношения длин полуосей ρ и весового параметра p_1 , где $\bar{r} = 0.05$

| Отношение длин полуосей ρ | 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 | 3.053 | 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 |
| κ | 1 | 0.881 | 0.755 | 0.652 |

Согласно результатам из Таблицы 4.1, при $p_1 = 0.75$ и $p_1 = 0.5$ осреднение параметра κ (4.2) не нужно, так как результаты отношений напряжений в локальном и нелокальном случаях близки при любых значениях ρ , представленных в таблице, но при $p_1 = 0.25$ такая зависимость нарушается, однако, при осреднении зависимость параметра κ от весового параметра p_1 становится близкой к линейной. Разумеется все эти рассуждения требуют более детального теоретического рассмотрения, так как имеющихся эмпирических данных недостаточно для утверждения явных зависимостей.

Вместе с напряжением $\bar{\sigma}_{11}$ при увеличении значения ρ увеличивается и максимальный уровень деформации ε_{11} . Причём если обратить внимание на

Рис. 4.20 то можем заметить, что помимо повышения максимального уровня деформации она также становится более сконцентрированной в верхней и соответственно нижней точках выреза. В нелокальном случае наблюдаем похожий эффект, однако, здесь также появляется область с отрицательными значениями деформации, которая находится рядом с концентратором. Такой же эффект можно наблюдать при решении нелокальных задач на других областях с концентраторами [103] и экспериментах [20].

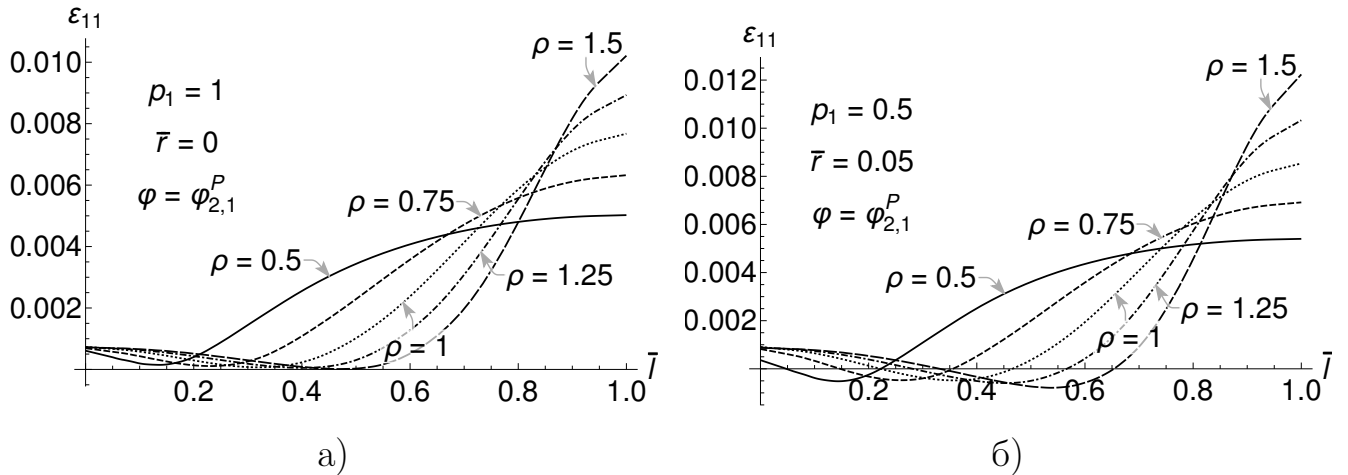


Рис. 4.20. Распределение компоненты деформации ε_{11} на кромке АВ в (а) локальном и (б) нелокальном случаях при различных соотношениях длин полуосей выреза

При уменьшении параметра ρ_1 , в отличие от напряжения $\bar{\sigma}_{11}$, деформация ε_{11} увеличивается в зоне концентрации. Также увеличивается и смежная с ней зона с отрицательными значениями деформации, а сами значения в ней увеличиваются по модулю. Увеличение радиуса нелокального влияния \bar{r} оказывает похожий, но менее выраженный эффект. Результаты представлены на Рис. 4.21. В дополнение отметим, что вариация \bar{r} практически не оказывает влияния на величину максимального значения напряжения $\bar{\sigma}_{11}$.

4.7. Тепловые деформации в областях с эллиптическими вырезами

Рассмотрим задачу на той же области, что и задачу Кирша, но сменим тип нагружений с механических на тепловые, то есть поставим следующие гра-

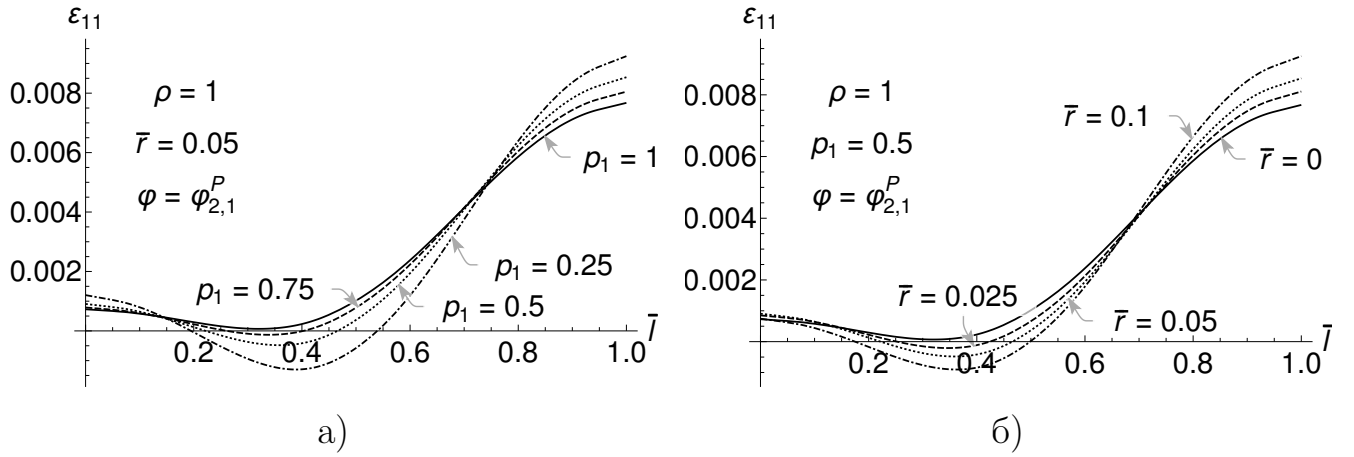


Рис. 4.21. Распределение компоненты деформации ε_{11} на кромке АВ при вариации (а) весового параметра p_1 и (б) радиуса нелокальности \bar{r}

ничные и геометрические условия

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

Графическое изображение постановки задачи представлено на Рис. 4.22. Также, для достижения единственности решения, добавим интегральные условия на искомую температуру и первую компоненту вектора перемещения

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

Такая постановка удобна тем, что позволяет качественно изучить поведение температурных напряжений без появления дополнительных напряжений со стороны возможных концентраторов, обусловленных граничными или геометрическими условиями.

Перед изучением полей температурных напряжений обратим внимание, что аналогично компоненте тензора напряжения $\bar{\sigma}_{11}$ максимальные значения компоненты вектора плотности теплового потока \bar{q}_1^{\max} находятся на верхней и нижней точках эллиптического выреза и они подчинены следующей закономерности

$$\bar{q}_1^{\max} = (1 + \rho)q_o,$$

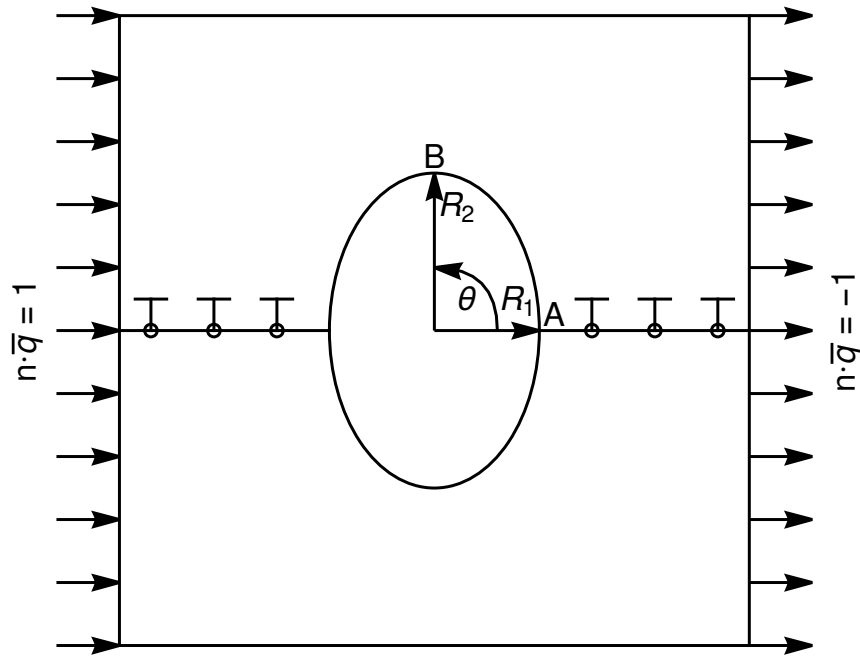


Рис. 4.22. Постановка задачи с тепловыми нагрузками на области с эллиптическим вырезом

где q_0 — величина подаваемого теплового потока. В нелокальном случае аналогично напряжениям величина \bar{q}_1^{\max} снижается при увеличении вклада нелокального влияния, однако, по результатам представленным в Таблице 4.2 не удаётся также легко определить получившуюся зависимость от весового параметра p_1 , так как при весах $p_1 = 0.5$ и $p_1 = 0.25$ и значении $\rho \leq 1$ величины \bar{q}_1^{\max} достаточно близки и линейная зависимость от p_1 наблюдается только при $\rho = 1.5$.

Таблица 4.2. Максимальное значение компоненты теплового потока \bar{q}_1 при вариации отношения длин полуосей ρ и весового параметра p_1 , где $\bar{r} = 0.05$

| Отношение длин полуосей ρ | Весовые параметры | | | |
|-----------------------------------|-------------------|--------------|-------------|--------------|
| | $p_1 = 1$ | $p_1 = 0.75$ | $p_1 = 0.5$ | $p_1 = 0.25$ |
| 0.5 | 1.501 | 1.333 | 1.316 | 1.326 |
| 0.75 | 1.753 | 1.556 | 1.457 | 1.462 |
| 1 | 2.001 | 1.781 | 1.597 | 1.591 |
| 1.25 | 2.252 | 2.002 | 1.734 | 1.644 |
| 1.5 | 2.494 | 2.222 | 1.927 | 1.681 |

Рассмотрим теперь температурные напряжения. Благодаря интегральным условиям, решения симметричны и все напряжения сконцентрированы вокруг выреза. Относительно верхней и нижней половин области функции решений чётные, а относительно левой и правой половин нечётные. Зная эти особенности, ограничимся изучением распределения полей напряжения лишь на дуге АВ. Для удобства изучения также воспользуемся обезразмеренным параметром длины \bar{l} (4.1).

При вариации параметра ρ кривые $\bar{\sigma}_{11}$ и $\bar{\sigma}_{22}$ существенно изменяют свои формы. На Рис. 4.23 представлены распределения этих кривых при различных параметрах ρ в классическом случае ($p_1 = 1$). У кривой $\bar{\sigma}_{11}$ вместе с увеличением ρ пиковое значение смещается право вдоль оси $O\bar{l}$. Помимо этого оно также растёт в абсолютных значениях. Максимальная величина $\bar{\sigma}_{22}$ также меняется, но основная закономерность заключается в увеличении площади под кривой при росте ρ . Важно отметить, что для обеих кривых в точке $\bar{l} = 1$ их величины равны 0, так как в ней происходит смена знака.

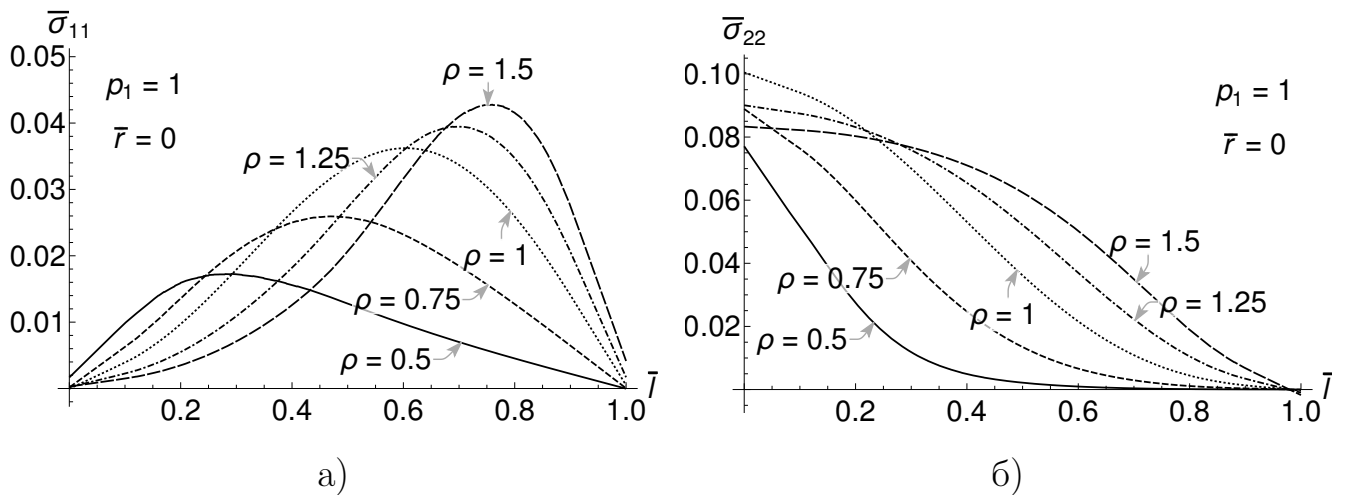


Рис. 4.23. Распределение напряжения (а) $\bar{\sigma}_{11}$ и (б) $\bar{\sigma}_{22}$ на кромке АВ при вариации соотношения длин полуосей

Другими словами, сужение эллиптического выреза вдоль оси $O\bar{x}_1$ приводит к смещению пиковых значений компоненты напряжений $\bar{\sigma}_{11}$ к верхней и нижней точкам выреза, а также увеличению их абсолютных значений. Пиковое

значение компоненты напряжений $\bar{\sigma}_{22}$ напротив уменьшается, но при этом занимаемые площади с ненулевыми напряжениями увеличиваются. Таким образом, эллиптические вырезы большая ось которых располагается вдоль линии тока теплового потока дают меньшие напряжения, чем тем, у которых большая ось располагается поперёк.

Учёт нелокальных свойств среды приводит к снижению напряжений $\bar{\sigma}_{11}$ и $\bar{\sigma}_{22}$. Как и во всех расчётах до этого, вариация параметра \bar{r} влияет лишь на форму распределения полей напряжений, а вариация весового параметра p_1 на величину отклонения. Распределение полей $\bar{\sigma}_{11}$ и $\bar{\sigma}_{22}$ вдоль кривой АВ при вариации p_1 представлено на Рис. 4.24.

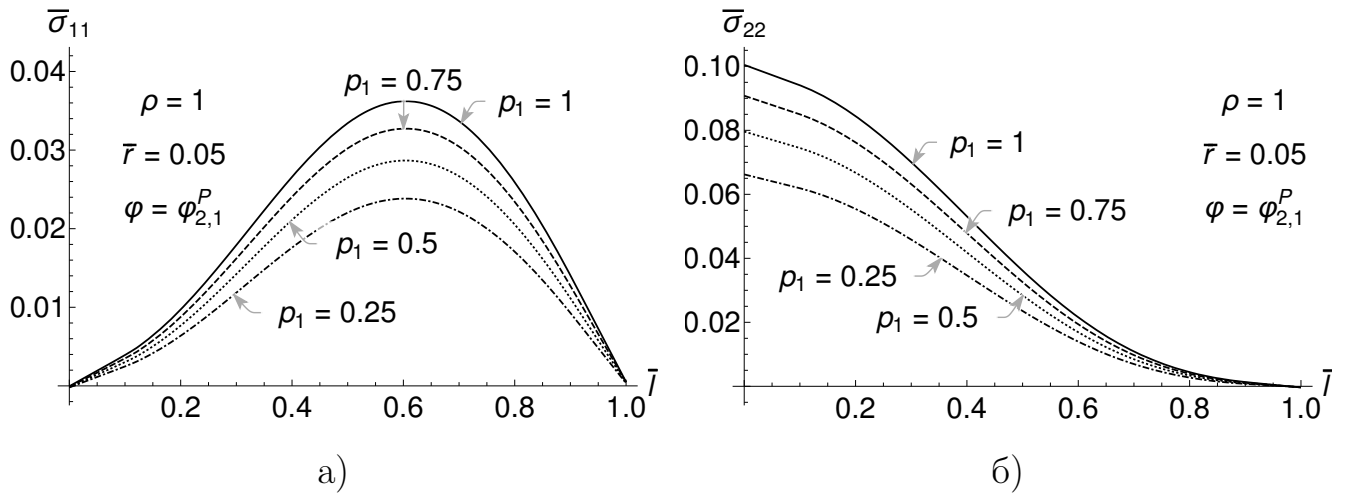


Рис. 4.24. Распределение напряжения (а) $\bar{\sigma}_{11}$ и (б) $\bar{\sigma}_{22}$ на кромке АВ при вариации весового параметра p_1

4.8. Основные результаты и выводы по главе 4

1. Исследованы основные особенности получаемых распределений температуры и перемещений на примере решения задач о прохождении теплового потока и растяжении квадратной пластины при вариации основных параметров модели. Показано, что в нелокальном случае решения обладают кромочным эффектом, который характеризуется отклонением исследуемых распределений относительно классических на границах области, на которых заданы нагрузки.

2. Исследованы полиномиальные и экспоненциальные семейства функций нелокального влияния. Показано, что вариация основных параметров функций не даёт качественных различий между решениями, в связи с чем для остальных расчётов было решено выбрать в качестве функции нелокального влияния квадратичную параболу.
3. Продемонстрирована применимость принципов Сен-Венана и стабильности теплового потока в контексте нелокальных постановок уравнений равновесия и стационарной теплопроводности соответственно. Показано, что вдали от точек приложения нагрузжений, поля напряжений и плотности теплового потока сливаются в единую поверхность, независимо от вида нагружения. Эти поверхности обладают кромочным эффектом на свободных от нагружений границах, который характеризуется снижением значения рассматриваемой величины.
4. На примере растяжения Т-образной пластины проиллюстрировано снижение роли концентратора напряжений в нелокальной постановке, по сравнению с классической.
5. Исследована задача Кирша с обобщением на эллиптические вырезы. В нелокальной постановке установлена связь между максимальным уровнем напряжения, приложенного нагружения и формы выреза.
6. Исследована задача о температурных напряжениях на области с эллиптическим вырезом. Результаты демонстрируют существенное снижение уровня напряжения в концентраторах.

Глава 5. Анализ эффективности программного комплекса NonLocFEM

5.1. Тестирование алгоритма ассемблирования матриц

Оценим масштабируемость полученного алгоритма ассемблирования матриц теплопроводности и жёсткости (3.3). Для этого проведём серию расчётов на вычислительном кластере, в состав которого входит 6 вычислительных узлов. На каждом узле кластера установлен 18-ядерный процессор Intel Core i9 10980XE и 128 ГБ оперативной памяти DDR4. Будем рассматривать тестовые задачи на прямоугольной области $S = \{\mathbf{x} \mid -5 \leq x_1 \leq 5, -0.5 \leq x_2 \leq 0.5\}$, с введённой на ней равномерной сеткой S_h . Как и в предыдущей главе, все вычисления проведены с использованием квадратичных серендиповых элементов, интегрирование выполнено гауссовыми квадратурами 3-го порядка (9 квадратурных узлов), а в качестве функции нелокального влияния выбрана $\varphi = \varphi_{2,1}^P$, выбор которой также обоснован в предыдущей главе. Хранение разреженных матриц организовано в формате CSR [47], где для хранения индексов использовались 64-битные целые числа, а для хранения коэффициентов числа с плавающей точкой двойной точности. Также была учтена симметрия матрицы, то есть для хранения и вычисления использовалась только верхняя половина матрицы.

Начнём исследование масштабируемости алгоритмов на машинах с общей памятью, то есть задействуем только один узел кластера и технологию параллельного программирования OpenMP. Для этого проведём серию расчётов варьируя разбиение сетки h и радиус нелокальности r , который в данном исследовании совпадает с радиусом поиска. Результаты, представленные в Таблице 5.1, свидетельствуют о том, что для хранения матрицы жёсткости $\hat{\mathbf{K}}_E$ требуется в 4 раза больше оперативной памяти, чем для матрицы теплопроводности $\hat{\mathbf{K}}_T$ на аналогичной сетке, что было ожидаемо, учитывая размерности

блоков матриц теплопроводности (2.9) и жёсткости (2.10). В обоих случаях, темпы роста занимаемой оперативной памяти относительно разбиения сетки линейные в классическом случае и квадратичные в нелокальном. При сравнении времён сборки матриц можем отметить, что в классическом случае время ассемблирования матрицы жёсткости $\hat{\mathbf{K}}_E$ приблизительно в 3 раза дольше, чем матрицы теплопроводности $\hat{\mathbf{K}}_T$, однако, в нелокальном случае эта разница сокращается до 1.2, чего удалось достичь за счёт оптимизации вычислений с использованием блочного подхода в ассемблировании.

Таблица 5.1. Требуемая оперативная память и затрачиваемое время при ассемблировании матриц теплопроводности и жёсткости с использованием технологии OpenMP

| Количество элементов | Радиус поиска | Требуемая оперативная память | | Время, с 1 поток | | Время, с 18 потоков | |
|----------------------|---------------|------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|
| | | $\hat{\mathbf{K}}_T$ | $\hat{\mathbf{K}}_E$ | $\hat{\mathbf{K}}_T$ | $\hat{\mathbf{K}}_E$ | $\hat{\mathbf{K}}_T$ | $\hat{\mathbf{K}}_E$ |
| 400×40 | 0 | 6.2 Мб | 23.8 Мб | 0.061 | 0.187 | 0.028 | 0.048 |
| 800×80 | 0 | 24.5 Мб | 95 Мб | 0.521 | 1.701 | 0.116 | 0.274 |
| 1600×160 | 0 | 97.8 Мб | 379 Мб | 5.17 | 16.76 | 0.705 | 2.366 |
| 400×40 | 0.05 | 61.4 Мб | 244 Мб | 14.4 | 17.06 | 1.055 | 1.288 |
| 800×80 | 0.05 | 548 Мб | 2.2 Гб | 157 | 187 | 11.37 | 13.3 |
| 1600×160 | 0.05 | 5.5 Гб | 22 Гб | 1825 | 2166 | 132.9 | 155 |
| 400×40 | 0.1 | 133 Мб | 532 Мб | 38 | 44.9 | 2.68 | 3.26 |
| 800×80 | 0.1 | 1.34 Мб | 5.4 Гб | 450 | 529 | 32 | 37.8 |
| 1600×160 | 0.1 | 17 Гб | 68 Гб | 6134 | 7266 | 447 | 521 |

Обращаясь к результатам из Таблицы 5.1, можем построить диаграммы эффективности распараллеливания алгоритмов ассемблирования матриц теплопроводности и жёсткости. Исходя из полученных результатов, представленных на Рис. 5.1, отметим достаточно хорошую эффективность распараллеливания, которая в нелокальном случае достигает 14 раз при использовании всех 18 ядер процессора. Однако ускорение в классическом случае не такое высокое, что можно объяснить обобщённостью используемых алгоритмов формирова-

ния портрета матрицы, которые недостаточно эффективно работают на малых объёмах данных.

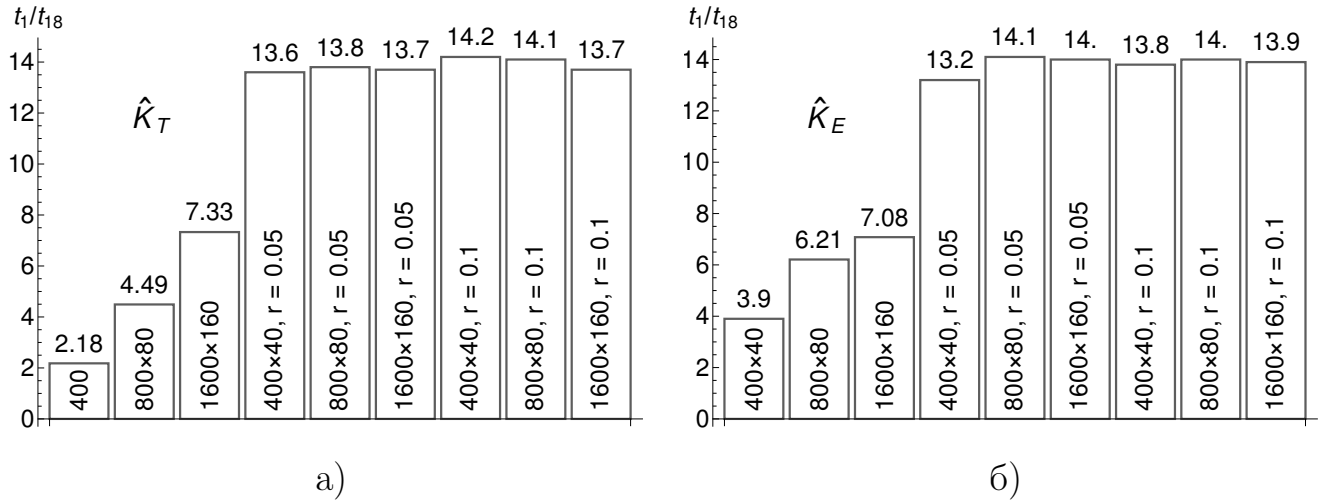


Рис. 5.1. Эффективность распараллеливания алгоритма сборки матриц (а) теплопроводности и (б) жёсткости при использовании технологии OpenMP

Теперь исследуем масштабируемость алгоритма ассемблирования матриц на примере использования технологии MPI. Здесь сконцентрируем внимание на алгоритме балансировки данных между процессами, так как вопрос хранения матриц в классе нелокальных задач стоит наиболее остро. Для этого будем рассматривать ту же область, но возьмём более подробную сетку S_h , состоящую из 3200×320 элементов. Радиус нелокальности r выберем равным 0.1. С целью исключения дублирования результатов, остановимся на рассмотрении лишь матрицы теплопроводности.

Проведём сравнение двух запусков на 6 вычислительных узлах кластера. Первый запуск осуществим без балансировки данных, то есть распределения узлов сетки между процессами оставим равномерным. Второй запуск осуществим с балансировкой данных между процессами, которая выполняется по алгоритму описанному в третьей главе. На Рис. 5.2 представлены полученные распределения затрачиваемой оперативной памяти для хранения блоков матрицы на каждом узле. В варианте без балансировки данные распределены не равномерно и некоторым узлам кластера достался объём данных больше, чем другим. В

варианте с балансировкой данные распределены, в рамках допустимой погрешности, равномерно. Из чего можно сделать вывод, что алгоритм балансировки данных работает корректно.

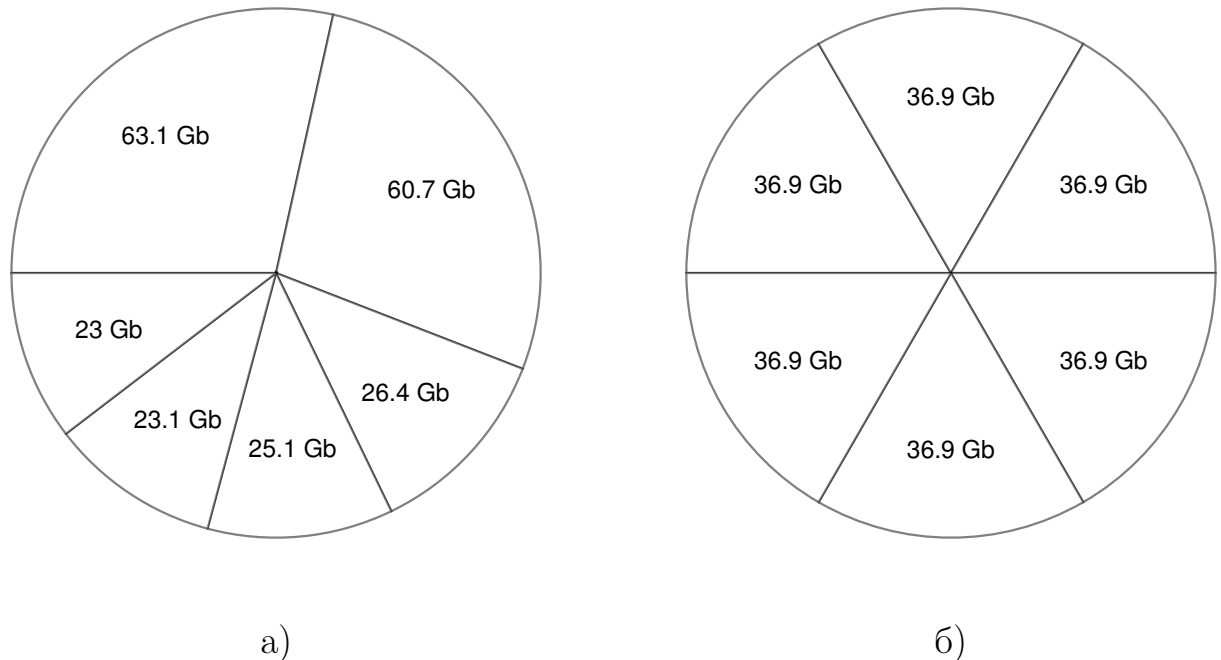


Рис. 5.2. Распределение размеров блоков матрицы теплопроводности между 6 процессами в случае (а) без балансировки и (б) с балансировкой данных

В качестве замечания можно ещё отметить, что алгоритм балансировки данных также ускоряет работу метода сопряжённых градиентов, так как операция умножения матрицы на вектор становится одинаковой по трудозатратам на каждом узле кластера. Более подробно про другие возможные методы ускорения сходимости решателей СЛАУ обсудим в последующих разделах.

5.2. Анализ скорости сходимости при оптимизации базиса конечных элементов

В работе повсеместно использовались квадратичные серендиповые элементы, в связи с чем возникла потребность оптимизации их базиса для ускорения сходимости итерационных методов решения СЛАУ. Отметим, что у квадратичного серендипового элемента есть целое параметрическое семейство базисов,

представленное в третьей главе диссертации. В той же главе была получена оценка оптимального значения параметра s (3.5) согласно которой скорость сходимости должна быть максимальной в точке $s = 2/9$. Проверим эту оценку на практике, а заодно исследуем влияние других параметров модели.

Для проверки корректности оценки решим серию задач варьируя параметр s . Расчёты снова будем проводить на прямоугольной области $S = \{\mathbf{x} \mid -5 \leq x_1 \leq 5, -0.5 \leq x_2 \leq 0.5\}$, с введённой на этой области равномерной сеткой $S_h = 1000 \times 100$. Обезразмерим уравнения (1.2) и (1.5) относительно коэффициента теплопроводности λ и модуля Юнга E соответственно

$$\bar{\mathbf{q}} = \frac{\mathbf{q}}{\lambda}, \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{E},$$

так как параметры λ и E в данном случае выступают в роли масштабирующих множителей для собственных чисел матриц $\hat{\mathbf{K}}_T$ и $\hat{\mathbf{K}}_E$ соответственно. Коэффициент Пуассона ν примем равным 0.3. Поставим граничные условия для уравнения теплопроводности

$$\mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{x_1=-5} = -1, \quad \mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{x_1=5} = 1, \quad \int_S T dS = 0,$$

и для уравнения равновесия

$$n_j \bar{\sigma}_{j1}|_{x_1=-5} = -1, \quad n_j \bar{\sigma}_{j1}|_{x_1=5} = 1, \quad u_1|_{x_1=0} = 0, \quad u_2|_{x_2=0} = 0.$$

Решение СЛАУ будем искать методом сопряжённых градиентов без использования каких-либо дополнительных предобуславливателей.

Для определения числа обусловленности (3.4) необходимо вычислить максимальное и минимальное собственные числа матрицы. Для их вычисления к программному комплексу NonLocFEM была подключена библиотека Spectra [15], которая позволяет вычислять собственные числа разреженных матриц и совместима с библиотекой линейной алгебры Eigen [7].

В ходе экспериментов было установлено, что минимальное собственное число λ_{\min} не зависит от параметра базиса s и вариаций функции нелокальности φ , но при этом имеет зависимость от вклада нелокального влияния и радиуса нелокальности r , где при их увеличении величина собственного числа λ_{\min} начинает уменьшаться. Однако исходя из результатов, представленных в Таблицах 5.2 и 5.3, можем сделать вывод, что зависимость от параметров модели весьма слабая, так как величина изменений не достигает и десятой доли от числа полученного в классическом случае, то есть минимальное собственное число не оказывает серьёзного влияния на число обусловленности. Также можно отметить, что минимальные собственные числа матриц теплопроводности и жёсткости при одинаковых параметрах модели достаточно близки по значениям.

Таблица 5.2. Зависимость минимального собственного числа матрицы теплопроводности $\hat{\mathbf{K}}_T$ от параметров модели p_1 и r

| $r \backslash p_1$ | 1 | 0.75 | 0.5 | 0.25 |
|--------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| 0 | $3.2637 \cdot 10^{-6}$ | — | — | — |
| 0.05 | — | $3.2429 \cdot 10^{-6}$ | $3.2181 \cdot 10^{-6}$ | $3.1793 \cdot 10^{-6}$ |
| 0.1 | — | $3.2231 \cdot 10^{-6}$ | $3.1750 \cdot 10^{-6}$ | $3.0997 \cdot 10^{-6}$ |
| 0.15 | — | $3.2032 \cdot 10^{-6}$ | $3.1319 \cdot 10^{-6}$ | $3.0218 \cdot 10^{-6}$ |

Таблица 5.3. Зависимость минимального собственного числа матрицы жёсткости $\hat{\mathbf{K}}_E$ от параметров модели p_1 и r

| $r \backslash p_1$ | 1 | 0.75 | 0.5 | 0.25 |
|--------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| 0 | $3.2614 \cdot 10^{-6}$ | — | — | — |
| 0.05 | — | $3.2471 \cdot 10^{-6}$ | $3.2328 \cdot 10^{-6}$ | $3.1958 \cdot 10^{-6}$ |
| 0.1 | — | $3.2336 \cdot 10^{-6}$ | $3.1911 \cdot 10^{-6}$ | $3.1191 \cdot 10^{-6}$ |
| 0.15 | — | $3.2183 \cdot 10^{-6}$ | $3.1489 \cdot 10^{-6}$ | $3.0435 \cdot 10^{-6}$ |

Максимальные собственные числа λ_{\max} матриц теплопроводности $\hat{\mathbf{K}}_T$ и жёсткости $\hat{\mathbf{K}}_E$ напротив имеют достаточно сильную зависимость как от параметра базиса s , так и от весового параметра модели p_1 . При этом зависимость от весового параметра p_1 удаётся установить эмпирически, она в точности равна $\lambda_{\max}^{NL}(s) = p_1 \lambda_{\max}^L(s)$. Зависимость от радиуса нелокальности r и функции нелокальности $\boldsymbol{\varphi}$ у максимальных собственных чисел отсутствует. Результаты представлены в Таблицах 5.4 и 5.5, где также представлены данные о количествах итераций метода сопряжённых градиентов.

Таблица 5.4. Зависимости количества итераций N и максимального собственного числа λ_{\max} матрицы теплопроводности $\hat{\mathbf{K}}_T$ от вариации параметров p_1 и s

| Значение параметра s | $p_1 = 1$ | | $p_1 = 0.75$ | | $p_1 = 0.5$ | | $p_1 = 0.25$ | |
|---------------------------|-----------|------------------|--------------|------------------|-------------|------------------|--------------|------------------|
| | N | λ_{\max} | N | λ_{\max} | N | λ_{\max} | N | λ_{\max} |
| -1/3 | 6961 | 15.997 | 8724 | 11.997 | 5036 | 7.9980 | 3549 | 3.9984 |
| -2/9 | 5600 | 11.198 | 5110 | 8.3986 | 4341 | 5.5987 | 2948 | 2.7990 |
| -1/9 | 4540 | 7.4660 | 4095 | 5.5993 | 3367 | 3.7327 | 2360 | 1.8663 |
| 0 | 3868 | 5.3332 | 3640 | 3.9997 | 2891 | 2.6662 | 1961 | 1.3328 |
| 1/9 | 3885 | 5.3332 | 3442 | 3.9997 | 2861 | 2.6662 | 1947 | 1.3328 |
| 2/9 | 4000 | 5.3332 | 3600 | 3.9997 | 2826 | 2.6662 | 2003 | 1.3328 |
| 1/3 | 3889 | 5.3332 | 3567 | 3.9997 | 2778 | 2.6662 | 1948 | 1.3328 |
| 4/9 | 3786 | 5.3332 | 3474 | 3.9997 | 2835 | 2.6662 | 1982 | 1.3328 |
| 5/9 | 4719 | 7.4660 | 4415 | 5.5993 | 3525 | 3.7327 | 2353 | 1.8663 |
| 2/3 | 5761 | 11.198 | 6887 | 8.3986 | 4134 | 5.5987 | 2982 | 2.7990 |
| 7/9 | 7218 | 15.997 | 6349 | 11.997 | 5285 | 7.9980 | 3720 | 3.9984 |

Теперь рассмотрим данные из таблиц 5.2-5.5 в графическом представлении. На Рис. 5.3 представлены зависимости числа обусловленности и количества итераций метода сопряжённых градиентов от параметра базиса s и весового параметра модели p_1 . Обратим внимание, что кривые числа обусловленности симметричны относительно точки $s = 2/9$, а также, что число обусловленности снижается по мере уменьшения весового параметра p_1 . Также

Таблица 5.5. Зависимости количества итераций N и максимального собственного числа λ_{\max} матрицы жёсткости $\hat{\mathbf{K}}_E$ от вариации параметров p_1 и s

| Значение параметра s | $p_1 = 1$ | | $p_1 = 0.75$ | | $p_1 = 0.5$ | | $p_1 = 0.25$ | |
|---------------------------|-----------|------------------|--------------|------------------|-------------|------------------|--------------|------------------|
| | N | λ_{\max} | N | λ_{\max} | N | λ_{\max} | N | λ_{\max} |
| -1/3 | 7454 | 13.061 | 6549 | 9.7954 | 4758 | 6.5298 | 3893 | 3.2650 |
| -2/9 | 6261 | 9.6366 | 5066 | 7.2272 | 4402 | 4.8178 | 3344 | 2.4090 |
| -1/9 | 4805 | 7.0840 | 4820 | 5.3128 | 3992 | 3.5416 | 2870 | 1.7707 |
| 0 | 4797 | 5.4194 | 3996 | 4.0643 | 3053 | 2.7094 | 2509 | 1.3545 |
| 1/9 | 4380 | 4.5195 | 3320 | 3.3897 | 2703 | 2.2602 | 2289 | 1.1306 |
| 2/9 | 4272 | 4.2968 | 3296 | 3.2222 | 2727 | 2.1476 | 2229 | 1.0730 |
| 1/3 | 4270 | 4.2970 | 3551 | 3.2224 | 2641 | 2.1477 | 2229 | 1.0731 |
| 4/9 | 4085 | 4.3423 | 3772 | 3.2566 | 3124 | 2.1709 | 2242 | 1.0852 |
| 5/9 | 4446 | 6.1015 | 3911 | 4.5760 | 3704 | 3.0504 | 2659 | 1.5249 |
| 2/3 | 6138 | 8.8614 | 4814 | 6.6458 | 4464 | 4.4302 | 3203 | 2.2147 |
| 7/9 | 7076 | 12.436 | 5567 | 9.3273 | 4634 | 6.2178 | 3802 | 3.1083 |

стоит отметить, что на интервале $0 \leq s \leq 4/9$ кривые числа обусловленности выходят на плато, центром которого по прежнему является точка $s = 2/9$. Кривые зависимости числа итераций хорошо коррелируют с кривыми числа обусловленности и минимум числа итераций находится в окрестностях точки $s = 2/9$, а увеличение вклада нелокального влияния ускоряет сходимость метода при заданных параметрах.

Результаты, представленные на Рис. 5.4, для матрицы жёсткости аналогичны результатам, представленным на Рис. 5.3, для матрицы теплопроводности, однако, здесь графики зависимости числа обусловленности от параметра s уже не являются симметричными и плато на них уже менее выражено, а графики зависимости числа итераций хуже коррелируют с графиками числа обусловленности. Тем ни менее, минимум числа обусловленности и числа итераций по прежнему находится в окрестностях точки $s = 2/9$ из чего можно сделать вывод, что оценка (3.5) пригодна для практического использования.

Также важно отметить, что несмотря на то, что количество итераций в нелокальном случае становится меньше, время затрачиваемое на решение СЛАУ в нелокальном случае может быть на несколько порядков больше, чем для аналогичной задачи в классическом случае. Это связано с объёмами данных, которые занимают матрицы в нелокальном случае и главным сдерживающим фактором в скорости решения СЛАУ выступает скорость работы оперативной памяти, а не процессора.

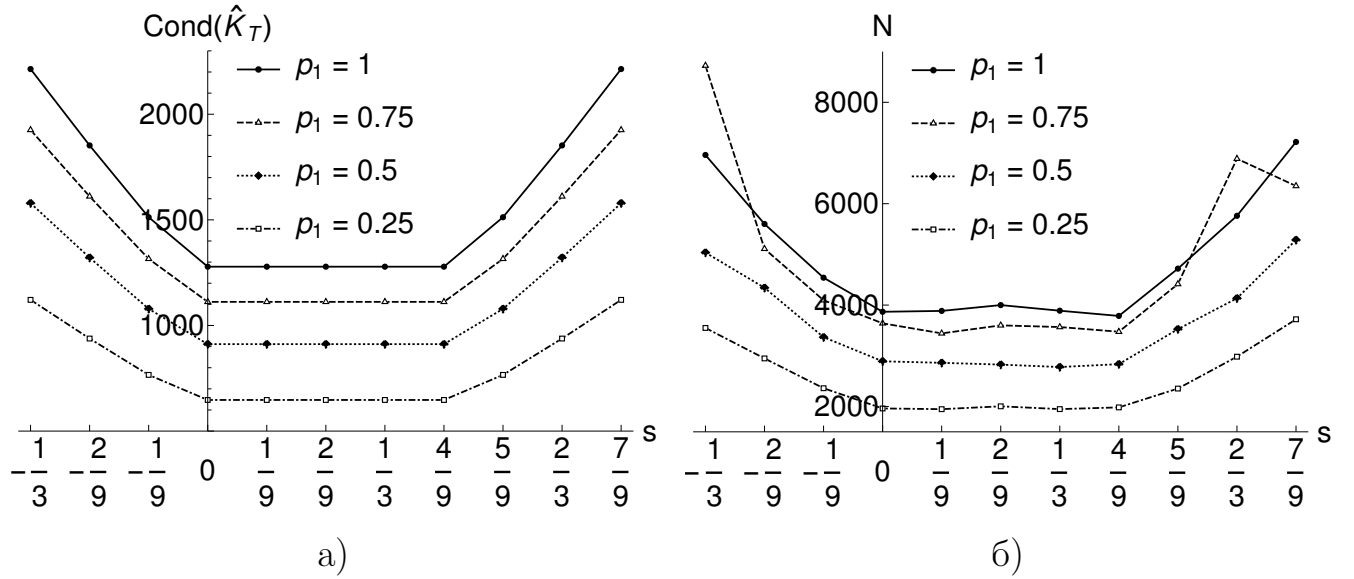


Рис. 5.3. Зависимость (а) числа обусловленности и (б) количества итераций N для матрицы теплопроводности \hat{K}_T от параметров s и p_1 при $r = 0.1$

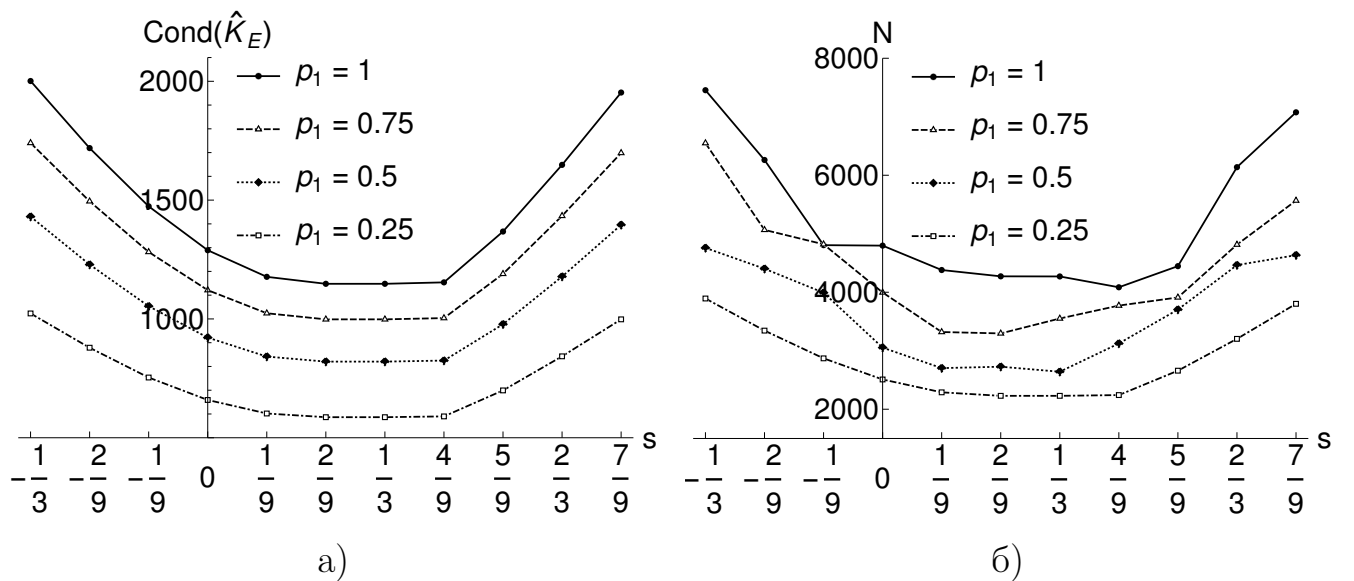


Рис. 5.4. Зависимость (а) числа обусловленности и (б) количества итераций N для матрицы жёсткости \hat{K}_E от параметров s и p_1 при $r = 0.1$

5.3. Предобуславливание и выбор начального приближения

Оптимизированный базис квадратичных серендиповых элементов позволил ускорить сходимость метода сопряжённых градиентов при решении СЛАУ более чем в 1.5 раза по сравнению со случаем, когда используется классический базис. Однако существует возможность добиться ещё большей скорости сходимости за счёт использования предобуславливателей или более подходящих начальных условий.

При разработке предобуславливателя важно учитывать специфику задачи, так как универсальных способов эффективного предобуславливания не существует. Также важно учитывать возможности современных вычислительных машин: параллельные вычисления зачастую дают заметно больший выигрыш во времени, в отличие от предобуславливания в силу того, что многие популярные методы предобуславливания используют обратный алгоритм Гаусса, который не всегда возможно эффективно распараллелить, а накладные расходы при этом могут значительно увеличить цену одной итерации.

Пожалуй основной спецификой рассматриваемого класса уравнений является их матрично-векторное представление (2.7) и (2.8), где матричные выражения представлены в виде взвешенных сумм локальных $\hat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^L$ и нелокальных $\hat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^{NL}$ матриц. При этом локальные слагаемые обладают заметно меньшей плотностью заполнения, чем нелокальные. Учитывая эту специфику, а также уже рассмотренный анализ границ спектров матриц $\hat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}$, можем построить предобуславливатель используя для этого лишь локальное слагаемое.

Как правило для построения предобуславливателей необходимы данные о максимальных и минимальных собственных числах, однако, процесс нахождения границ спектра, даже для локальной матрицы, является слишком медленным. Поэтому примем во внимание полученные знания о связи спектров локальной и полной матриц и в качестве предобуславливателя возьмём непол-

ное разложение Холецкого локальной матрицы $\widehat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^L$, так как оно не требует непосредственного поиска собственных чисел.

Теперь проведём серию расчётов и на её основе определим эффективность использования предобуславливателя. В этом же исследовании проверим гипотезу о выборе начального приближения, где в качестве начального приближения выберем результат решения СЛАУ $\widehat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^L \cdot \mathbf{X}_0 = \mathbf{F}$, где \mathbf{F} — вектор правой части, на основе которого будем решать полную СЛАУ и \mathbf{X}_0 — вектор искомого начального приближения. Для теста будем рассматривать задачи из предыдущего раздела, а базис элементов выберем оптимальным с параметром $s = 2/9$.

По результатам, представленным в Таблицах 5.6 и 5.7 для уравнений теплопроводности и равновесия соответственно, можем сделать вывод, что использование предобуславливателя позволяет ускорить решение СЛАУ в N раз. При этом весовые параметры модели на это не оказывают серьёзного влияния. Вместе с этим можно сделать вывод касательно выбора начального приближения. Однако предложенная гипотеза не даёт ожидаемого эффекта, количество итераций сокращается несущественно, а время затрачиваемое на решение СЛАУ для классической задачи не всегда меньше получаемого выигрыша. В качестве замечания стоит добавить, что для краткости записи формулировка в таблице $\text{ILLT}(\widehat{\mathbf{K}}_T^L)$ означает использование предобуславливателя, а $\text{ILLT}(\widehat{\mathbf{K}}_T^L) + X_0$ подразумевает комбинацию предобуславливания и начального приближения.

Таблица 5.6. Количество итераций и затрачиваемое время при решении СЛАУ уравнения теплопроводности

| p_1 | Без предобуславливания | | $\text{ILLT}(\widehat{\mathbf{K}}_T^L)$ | | $\text{ILLT}(\widehat{\mathbf{K}}_T^L) + X_0$ | |
|-------|------------------------|---------------|---|---------------|---|---------------|
| | N | $t, \text{с}$ | N | $t, \text{с}$ | N | $t, \text{с}$ |
| 0.75 | 5364 | 2970 | 2111 | 1181 | 2086 | 1238 (1167) |
| 0.5 | 4558 | 2527 | 1740 | 972 | 1742 | 1045 (974) |
| 0.25 | 3020 | 1673 | 1250 | 657 | 1265 | 779 (708) |

Таблица 5.7. Количество итераций и затрачиваемое время при решении СЛАУ уравнения равновесия

| p_1 | Без предобуславливания | | ILLT($\widehat{\mathbf{K}}_T^L$) | | ILLT($\widehat{\mathbf{K}}_T^L$) + X_0 | |
|-------|------------------------|---------|------------------------------------|---------|--|-------------|
| | N | t , с | N | t , с | N | t , с |
| 0.75 | 6330 | 13238 | 2902 | 6217 | 2736 | 6223 (5967) |
| 0.5 | 5167 | 10811 | 2290 | 4915 | 2389 | 5442 (5203) |
| 0.25 | 3779 | 7888 | 1718 | 3695 | 1740 | 4032 (3793) |

5.4. Основные результаты и выводы по главе 5

1. Исследована масштабируемость программного комплекса NonLocFEM на машинах с общей и распределённой памятью. Представленные результаты демонстрируют хорошую эффективность распараллеливания, выполненную средствами OpenMP, и балансировку данных между процессами, при использовании технологии MPI.
2. Проведён анализ скорости сходимости метода сопряжённых градиентов при вариации базиса квадратичного серендипового элемента. Показано, что оценка, предложенная в разделе 3.4, даёт корректный результат и минимум числа обусловленности матриц теплопроводности и жёсткости, а также наибольшая скорость сходимости метода сопряжённых градиентов, находятся в окрестности точки $s = 2/9$.
3. Предложенный способ предобуславливания на основе неполного разложения Холецкого локальных матриц, продемонстрировал существенный прирост в скорости сходимости метода сопряжённых градиентов, при решении уравнений теплопроводности и равновесия в нелокальных постановках.

Общие выводы и заключение

1. Рассмотрена иерархия моделей нелокальной теплопроводности и термоупругости, предложено и проанализировано два семейства возможных функций нелокального влияния, заданных на областях, ограниченных кривыми Ламэ.
2. Разработан численный алгоритм решения интегро-дифференциальных уравнений на основе метода конечных элементов, проведена работа над его оптимизацией и подготовкой к использованию в параллельной среде вычислений.
3. Разработан собственный программный комплекс NonLocFEM, в рамках которого реализованы все предложенные алгоритмы; параллельные реализации алгоритмов задействуют технологии параллельного программирования OpenMP и MPI, все исследования и расчёты проведены в рамках программного комплекса.
4. Проведён качественный анализ сравнения классических теорий теплопроводности и термоупругости с их нелокальными постановками, полученные результаты свидетельствуют о снижении роли концентраторов в распределениях полей напряжений и плотности теплового потока и в возникновении краевых эффектов на свободных от граничных условий границах, а также определены основные зависимости отклонений нелокальных решений относительно классическим путём вариации параметров модели.
5. Исследован вопрос сходимости итерационных методов решения СЛАУ применительно к задачам в нелокальных постановках, предложены способы ускорения сходимости с применением альтернативных базисов конечных элементов и предобуславливателей.

Список литературы

1. Abaqus. URL: <https://www.3ds.com/products/simulia/abaqus> (дата обр. 19.07.2024).
2. Ansys. URL: <https://www.ansys.com/> (дата обр. 19.07.2024).
3. C++ Reference. URL: <https://en.cppreference.com/> (дата обр. 19.07.2024).
4. CMake. URL: <https://cmake.org/> (дата обр. 19.07.2024).
5. Conan. URL: <https://conan.io/> (дата обр. 19.07.2024).
6. Deal.II. URL: <https://www.dealii.org/> (дата обр. 19.07.2024).
7. Eigen. URL: <https://eigen.tuxfamily.org/> (дата обр. 19.07.2024).
8. FEniCS. URL: <https://fenicsproject.org/> (дата обр. 19.07.2024).
9. FreeFEM. URL: <https://freefem.org/> (дата обр. 19.07.2024).
10. JSON. URL: <https://json-schema.org/> (дата обр. 19.07.2024).
11. Lohmann N. nlohmann/json. URL: <https://json.nlohmann.me/> (дата обр. 19.07.2024).
12. MPI. URL: <https://www.mpi-forum.org/> (дата обр. 19.07.2024).
13. OpenMP. URL: <https://www.openmp.org/> (дата обр. 19.07.2024).
14. Paraview. URL: <https://www.paraview.org/> (дата обр. 19.07.2024).
15. Spectra. URL: <https://spectralib.org/> (дата обр. 19.07.2024).
16. TFlex. URL: <https://www.tfex.ru/> (дата обр. 19.07.2024).
17. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения: монография. Москва : МАКС Пресс, 2017. 284 с. ISBN 978-5-317-05707-7.
18. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / под ред. П. с англ. под ред. В.А. Диткина и Л.Н. Карамзиной. Москва : Наука, 1979. 832 с.
19. Александреску А. Современное проектирование на C++. Москва : Издательский дом «Вильямс», 2008. 336 с. ISBN 978-0201704310.

20. Андреев А. В. Инженерные методы определения концентрации напряжений в деталях машин. Москва : Машиностроение, 1976. 72 с.
21. Аэро Э. Л., Кувшинский Е. В. Континуальная теория асимметрической упругости // Физика твердого тела. 1964. Т. 10, № 9. С. 2689—2699.
22. Аэро Э. Л., Кувшинский Е. В. Основные уравнения теории упругости сред с вращательным взаимодействием частиц // Физика твердого тела. 1960. Т. 2, № 7. С. 1399—1409.
23. Безухов Н. И. Основы теории упругости и пластичности. Москва : Издательство «Высшая школа», 1968. 512 с.
24. Белов П. А., Лурье С. А. Векторная градиентная теория упругости // Композиты и наноструктуры. 2023. С. 1—15. DOI: 10.36236/1999-7590-2022-14-1-1-15.
25. Биргер И. А., Шорр Б. Ф., Иосилевич Г. Б. Расчет на прочность деталей машин: Справочник. 4-е изд., перераб. и доп. Москва : Машиностроение, 1993. 640 с. ISBN 5-217-01304-0.
26. Вандевурд Д., Джосаттис Н. М., Д. Г. Шаблоны C++. Справочник разработчика, 2-е изд. Санкт-Петербург : Альфа-книга, 2018. 848 с. ISBN 978-5-9500296-8-4.
27. Вейник А. И. Приближенный расчет процессов теплопроводности. Москва : Госэнергоиздат, 1959. 184 с.
28. Влияние конфигурации и формы внешних ребер герметичных корпусов технических средств на эффективность отведения тепла от процессора / П. Г. Адамович [и др.] // Известия вузов России. Радиоэлектроника. 2023. Т. 26, № 5. С. 63—75.
29. Галанин М. П., Родин А. С. Решение связанной задачи о термомеханическом контакте элементов твэла // Прикладная механика и техническая физика. 2024. Т. 65, № 2. С. 99—109. DOI: 10.15372/PMTF202315387.

30. Гусев А. А. Метод конечных элементов высокого порядка точности решения краевых задач для эллиптического уравнения в частных производных. // Вестник РУДН. Серия МИФ. 2017. Т. 25, № 3. С. 217—233. DOI: 10.22363/2312-9735-2017-25-3-217-233.
31. Деммель Д. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. Москва : Мир, 2001. 430 с. ISBN 5-03-003402-1.
32. Донской А. А., Баритко Н. В. Кремнийорганические эластомерные теплозащитные материалы низкой плотности // Каучук и Резина. 2003. № 2. URL: <https://viam.ru/sites/default/files/scipub/2003/2003-203795.pdf>.
33. Евстафьев В. А. Конструирование космических аппаратов. Ч. 1: учебное пособие. Санкт-Петербург : Балтийский государственный технический университет, 2018. 99 с.
34. Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. Москва : Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с. ISBN 978-5-7038-3162-5.
35. Классман Е. Ю., Лутфуллин Р. Я. Влияние температуры нагрева заготовки перед теплой прокаткой на структуру и свойства титанового сплава BT22 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 1811—1416. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.008.
36. Краснов М. М. Метапрограммирование шаблонов C++ в задачах математической физики. Москва : ИПМ им. М.В. Келдыша, 2017. DOI: 10.20948/mono-2017-krasnov.
37. Кувыркин Г. Н. Математическая модель нелокальной термовязкоупругой среды. Ч. 1. Определяющие уравнения // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2013. Т. 48, № 1. URL: <https://vestniken.bmstu.ru/articles/13/13.pdf>.
38. Кувыркин Г. Н. Математическая модель нелокальной термовязкоупругой среды. Ч. 2. Уравнение теплопроводности // Вестник МГТУ им. Н.Э. Ба-

- умана. Сер. Естественные науки. 2013. Т. 49, № 2. URL: <https://vestniken.bmstu.ru/articles/30/30.pdf>.
39. Кувыркин Г. Н. Математическая модель нелокальной термовязкоупругой среды. Ч. 3. Уравнения движения // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2013. Т. 50, № 3. URL: <https://vestniken.bmstu.ru/articles/119/119.pdf>.
 40. Кувыркин Г. Н., Савельева И. Ю. Численное решение интегро-дифференциального уравнения теплопроводности для нелокальной среды // Математическое моделирование. 2013. Т. 25, № 5. С. 99—108.
 41. 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. DOI: 10.18698/1812-3368-2023-4-4-17.
 42. 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. DOI: 10.15372/PMTF202315385.
 43. Лисовенко Д. С. Ауксетическая механика изотропных материалов, кристаллов и анизотропных композитов : дис. ... д-ра физ.-мат. наук : 01.02.04. Москва: Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского Российской Академии Наук, 2019. 392 с.
 44. Лычев С. А. Законы сохранения недиссипативной микроморфной термоупругости // Вестник СамГУ. Естественнонаучная серия. 2007. Т. 54, № 4. С. 225—262.
 45. Морозов Н. Ф. Избранные двумерные задачи теории упругости. Ленинград : Издательство Ленинградского университета, 1978. 182 с.

46. Печинкин А. В., Тескин О. И., Цветкова Г. М. Теория вероятностей : учебник для втузов. Москва : Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2006. 455 с. ISBN 5-7038-2485-0.
47. Писсанецки С. Технология разреженных матриц. Москва : Мир, 1988. 410 с. ISBN 5-03-000960-4.
48. Применение альтернативных серендиповых моделей при решении задач о кручении призматических стержней. / И. А. Астионенко [и др.] // Вестник ХНТУ. 2013. Т. 46, № 1. С. 356—361.
49. Савелов А. А. Плоские кривые: Систематика, свойства, применения. Справочное руководство. Москва : URSS, 2020. 294 с. ISBN 978-5-397-07388-2.
50. Савельева И. Ю. Вариационная формулировка математической модели процесса стационарной теплопроводности с учетом пространственной нелокальности // Вестник МГТУ им.Н.Э.Баумана. Естественные науки. 2022. № 2. С. 68—86.
51. Савельева И. Ю. Влияние нелокальности среды на распределения температуры и напряжений в упругом теле при импульсном нагреве // Известия РАН. Механика твердого тела. 2018. № 3. С. 45—52.
52. Савельева И. Ю. Двойственная вариационная модель стационарного процесса теплопроводности, учитывающая пространственную нелокальность // Вестник МГТУ им.Н.Э.Баумана. Естественные науки. 2022. № 5. С. 45—61.
53. Савельева И. Ю. Разработка и анализ математических моделей термомеханики структурно-чувствительных материалов : дис. ... д-ра физ.-мат. наук : 1.2.2. Москва: Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), 2023. 375 с.

54. Савельева И. Ю. Численное моделирование термоудара в упругом теле с учетом эффектов нелокальности среды // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. 2020. № 3. С. 20—29.
55. Савин Г. Н. Распределение напряжений около отверстий. Киев : Наукова Думка, 1968. 890 с.
56. Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ. NonLocFEM / А. А. Соколов ; А. А. Соколов, И. Ю. Савельева. № 2021661966 ; заявл. 20.07.2021 ; опубл. 22.09.2022, РД040930 (Рос. Федерация).
57. Северюхин А. В., Северюхина О. Ю., Вахрушев А. В. Расчет коэффициента теплопроводности нанокристаллов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2022. № 1. С. 115—122. DOI: 10.15593/perm.mech/2022.1.10.
58. Сен-Венан Б. Мемуар о кручении призм. Мемуар об изгибе призм. / под ред. Г. Джанелидзе. Москва : Физматлит, 1961. 519 с.
59. Тамразян А. Г., Черник В. И. Жесткость поврежденной пожаром железобетонной колонны при разгрузке после высокоинтенсивного горизонтального воздействия // Вестник МГСУ. 2023. Т. 18, № 9. С. 1369—1382. DOI: 10.22227/1997-0935.2023.9.1369-1382.
60. Трубицын В. Ю., Долгушева Е. Б. Особенности решеточной теплопроводности наноструктурированных материалов на основе титана и алюминия. Метод молекулярной динамики // Химическая физика и мезоскопия. 2019. Т. 21, № 4. С. 541—550. DOI: 10.15350/17270529.2019.4.57.
61. Численное моделирование задач термоупругости для конструкции с внутренним источником / М. В. Васильева [и др.] // Математические заметки СВФУ. 2018. Т. 24, № 3. С. 52—64. DOI: 10.25587/SVFU.2018.3.10889.
62. A novel stochastic photo-thermoelasticity model according to a diffusion interaction processes of excited semiconductor medium / K. Lotfy [et al.] //

- The European Physical Journal Plus. 2022. Vol. 137. P. 721—738. DOI: 10.1140/epjp/s13360-022-03185-6.
63. Abdollahi R., Boroomand B. Benchmarks in nonlocal elasticity defined by Eringen's integral model // International Journal of Solids and Structures. 2013. Vol. 50, No. 18. P. 2758—2771. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2013.04.027.
 64. Abdollahi R., Boroomand B. Nonlocal elasticity defined by Eringen's integral model: Introduction of a boundary layer method // International Journal of Solids and Structures. 2014. Vol. 51, No. 9. P. 1758—1780. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2014.01.016.
 65. Abdollahi R., Boroomand B. On using mesh-based and mesh-free methods in problems defined by Eringen's non-local integral model: issues and remedies // An International Journal of Theoretical and Applied Mechanics. 2019. Sept. Vol. 54. P. 1801—1822. DOI: 10.1007/s11012-019-01048-6.
 66. Ahmadi G., Firoozbakhsh K. First strain gradient theory of thermoelasticity // International Journal of Solids and Structures. 1975. Vol. 11, No. 3. P. 339—345. DOI: 10.1016/0020-7683(75)90073-6.
 67. Aifantis E. On the role of gradients in the localization of deformation and fracture // International Journal of Engineering Science. 1992. Vol. 30, No. 10. P. 1279—1299. DOI: 10.1016/0020-7225(92)90141-3.
 68. Altan B. S., Aifantis E. C. On some aspects in the special theory of gradient elasticity // Journal of Mechanical Behavior of Materials. 1997. Vol. 8, No. 3. P. 31—282. DOI: 10.1515/JMBM.1997.8.3.231.
 69. Altan S. B. Existence in nonlocal elasticity // Archive Mechanics. 1989. Vol. 41. P. 25—36.
 70. Altan S. B. Uniqueness in nonlocal thermoelasticity // Journal of Thermal Stresses. 1991. Vol. 14. P. 121—128.

71. Altan S. B. Uniqueness of initial-boundary value problems in nonlocal elasticity // International Journal of Solids and Structures. 1989. Vol. 25, No. 11. P. 1271—1278. DOI: 10.1016/0020-7683(89)90091-7.
72. Bathe K.-J. Finite Element Procedures. Second edition. 2014. 1065 p. URL: https://web.mit.edu/kjb/www/Principal_Publications/FEP_Binder.2nd_Edition_7th_Printing%20_1-2021.hybrid.pdf.
73. Bentley J. L. Multidimensional binary search trees used for associative searching // Communications of the Association for Computing Machinery. New York, USA, 1975. Vol. 18, No. 9. P. 509—517. DOI: 10.1145/361002.361007.
74. Benvenuti E., Tralli A. The fast Gauss transform for non-local integral FE models // Communications in Numerical Methods in Engineering. 2006. Vol. 22. P. 505—533. DOI: 10.1002/cnm.827.
75. Bogy D. B., Sternberg E. The effect of couple-stresses on the corner singularity due to an asymmetric shear loading // International Journal of Solids and Structures. 1968. Vol. 4, No. 2. P. 159—174.
76. Breakdown of Fourier's Law in Nanotube Thermal Conductors / C. W. Chang [et al.] // Physical review letters. 2008. Sept. Vol. 101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.101.075903.
77. Cosserat E., Cosserat F. Theory of Deformable Bodies // A. Hermann et Fils. 1909. P. 226.
78. Cuthill E., McKee J. Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices. 1969. DOI: 10.1145/800195.805928.
79. Determining the Elasticity of Materials Employing Quantum-mechanical Approaches: From the Electronic Ground State to the Limits of Materials Stability / M. Friák [et al.] // steel research int. 2011. Vol. 82. P. 86—100. DOI: 10.1002/srin.201000264.

80. Duczek S. Higher order finite elements and the fictitious domain concept for wave propagation analysis. Magdeburg, Germany : Otto von Guericke University Library, 2014. P. 458. DOI: 10.25673/4151.
81. Edelen D. G. B., Green A. E., Laws N. Nonlocal continuum mechanics // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1971. Vol. 43. P. 36—44. DOI: 10.1007/BF00251544.
82. Edelen D. G. B., Laws N. On the thermodynamics of systems with nonlocality // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1971. Vol. 43. P. 24—35. DOI: 10.1007/BF00251543.
83. Eremeyev V. A., Lazar M. Strong ellipticity within the Toupin–Mindlin first strain gradient elasticity theory // Mechanics Research Communications. 2022. Vol. 124. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2022.103944.
84. Eringen A. C. Linear theory of nonlocal elasticity and dispersion of plane waves // International Journal of Engineering Science. 1972. Vol. 10, No. 5. P. 425—435. DOI: 10.1016/0020-7225(72)90050-X.
85. Eringen A. C. Mechanics of micromorphic materials // Applied Mechanics / ed. by H. Görtler. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1966. P. 131—138. ISBN 978-3-662-29364-5. DOI: 10.1007/978-3-662-29364-5_12.
86. Eringen A. C. Microcontinuum field theories: foundations and solids. New York : Springer-Verlag, 1999. 325 p. ISBN 978-0-387-98620-3. DOI: 10.1007/978-1-4612-0555-5.
87. Eringen A. C. Nonlocal continuum field theories. New York-Berlin-Heidelberg : Springer-Verlag, 2002. P. 376. ISBN 978-0-387-95275-8. DOI: 10.1007/b97697.
88. Eringen A. C. Simple microfluids // International Journal of Engineering Science. 1964. Vol. 2, No. 2. P. 205—217. DOI: 10.1016/0020-7225(64)90005-9.

89. Eringen A. C., Edelen D. G. B. On nonlocal elasticity // International Journal of Engineering Science. 1972. Vol. 10, No. 3. P. 233—248. DOI: 10.1016/0020-7225(72)90039-0.
90. Eringen's nonlocal and modified couple stress theories applied to vibrating rotating nanobeams with temperature effects / A. Rahmani [et al.] // Mechanics of Advanced Materials and Structures. 2021. Vol. 29, No. 26. P. 4813—4838. DOI: 10.1080/15376494.2021.1939468.
91. Erosion behaviour of platinum aluminide bond coat on directionally solidified CM247 and AM1 single crystal superalloys / S. L. Gokul [et al.] // Surface and Coatings Technology. 2022. Vol. 429. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2021.127941.
92. Fazilati J., Khalafi V., Shahverdi H. Three-dimensional aero-thermo-elasticity analysis of functionally graded cylindrical shell panels // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering. 2019. Vol. 233, No. 5. DOI: 10.1177/0954410018763861.
93. Flatten A. Lokale und nicht-lokale Modellierung und Simulation thermo-mechanischer Lokalisierung mit Schädigung für metallische Werkstoffe unter Hochgeschwindigkeitsbeanspruchungen. Berlin : der Bundesanstalt für Materialforschung, 2008. P. 199.
94. Flaw Insensitive Fracture in Nanocrystalline Graphene / T. Zhang [et al.] // Nano letters. 2012. Aug. Vol. 12. P. 4605—10. DOI: 10.1021/nl301908b.
95. Gao J. An asymmetric theory of nonlocal elasticity—Part 2. Continuum field // International Journal of Solids and Structures. 1999. Vol. 36, No. 20. P. 2959—2971. DOI: 10.1016/S0020-7683(97)00322-3.
96. Günther W. Zur Statik und Kinematik des Cosseratschen Kontinuums // Abhandlungen der Braunschweigischen Wissenschaftlichen Gesellschaft Band. 1958. Vol. 10. P. 195—213. DOI: 10.24355/dbbs.084-201212211408-0.

97. High Temperature Resistant Coatings for Strategic Aero space Applications / Z. Alam [et al.] // Defence Science Journal. 2023. Vol. 73, No. 2. P. 171—181. DOI: 10.14429/dsj.73.18638.
98. Hirschfelder J., Eyring H., Topley B. Reactions Involving Hydrogen Molecules and Atoms // The Journal of Chemical Physics. 1936. Vol. 4, No. 3. P. 170—177. DOI: 10.1063/1.1749815.
99. Hsu Y. C., Wang W. J. Couple-stress effects near an interior hole of an infinite elastic plane subjected to a concentrated force // Journal of the Franklin Institute. 1973. Vol. 295, No. 5. P. 411—421.
100. Impact of time after fire on post-fire seismic behavior of RC columns / U. Demir [et al.] // Structures. 2020. Vol. 26. P. 537—548. DOI: 10.1016/j.istruc.2020.04.049.
101. Kröner E. Elasticity theory of materials with long range cohesive forces // International Journal of Solids and Structures. 1967. Vol. 3, No. 5. P. 731—742. DOI: 10.1016/0020-7683(67)90049-2.
102. Kumar S., Haque A., Gao H. Notch insensitive fracture in nanoscale thin films // Applied Physics Letters. 2009. June. Vol. 94. P. 253104—253104. DOI: 10.1063/1.3157276.
103. 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. DOI: 10.1002/zamm.202200308.
104. 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. DOI: 10.1088/1742-6596/1479/1/012034.

105. Lazar M., Agiasofitou E. Toupin–Mindlin first strain-gradient elasticity for cubic and isotropic materials at small scales // *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics*. 2023. Vol. 23. DOI: 10.1002/pamm.202300121.
106. Lei L., Pengfei L., Markus O. A molecular dynamics simulation study on enhancement of thermal conductivity of bitumen by introduction of carbon nanotubes // *Construction and Building Materials*. 2022. Vol. 353. P. 129—166. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2022.129166.
107. Li X. The Coupling between Quantum Mechanics and Elasticity. the Faculty of the Department of Mechanical Engineering University of Houston, 05/2016. P. 110.
108. Madan G. K., Ronald L. H., Oswald B. Finite-element grid improvement by minimization of stiffness matrix trace // *Computers & Structures*. 1989. Vol. 31, No. 6. P. 891—896. DOI: 10.1016/0045-7949(89)90274-5.
109. Malvi B., Roy M. Elevated Temperature Erosion of Plasma Sprayed Thermal Barrier Coating // *Therm Spray Tech*. 2021. Vol. 30. P. 1028—1037. DOI: 10.1007/s11666-021-01189-9.
110. Mathematical modeling of insulating coating of thermal conductivity including 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. DOI: 10.1088/1742-6596/2817/1/012028.
111. Maugis P. Nonlinear elastic behavior of iron-carbon alloys at the nanoscale // *Computational Materials Science*. 2019. Vol. 152. P. 460—469. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.12.024.
112. Microstructure vs. Flaw: Mechanisms of Failure and Strength in Nanostructures. / W. Gu [et al.] // *Nano letters*. 2013. Oct. Vol. 13. DOI: 10.1021/nl403453h.

113. Mindlin R. D. Microstructure in Linear Elasticity // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1964. Vol. 16. P. 51—78. DOI: 10.1007/BF00248490.
114. Mindlin R. D. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity // International Journal of Solids and Structures. 1965. Vol. 1. P. 417—438. DOI: 10.1016/0020-7683(65)90006-5.
115. Mindlin R. D. Stress function for a cosserat continuum // International Journal of Engineering Science. 1965. Vol. 1, No. 3. P. 265—271.
116. Mindlin R. D., Eshel N. N. On first strain-gradient theories in linear elasticity // International Journal of Solids and Structures. 1968. Vol. 4. P. 109—124. DOI: 10.1016/0020-7683(68)90036-X.
117. Mindlin R. D., Tierstin H. F. Effects of couple-stress in linear elasticity // Experimental Mechanics. 1962. Vol. 11. P. 415—488.
118. Moosazadeh H., Mohammadi M. M. Time domain aero-thermo-elastic instability of two-dimensional non-linear curved panels with the effect of in-plane load considered // SN Applied Sciences. 2020. Vol. 2. DOI: 10.1007/s42452-020-03411-9.
119. Patrick M. K. Achieving finite element mesh quality via optimization of the Jacobian matrix norm and associated quantities. Part I—a framework for surface mesh optimization // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2000. No. 48. P. 401—420. DOI: 10.1002/(SICI)1097-0207(20000530)48:3<401::AID-NME880>3.0.CO;2-D.
120. Pisano A. A., Sofi A., Fuschi P. Nonlocal integral elasticity: 2D finite element based solutions // International Journal of Solids and Structures. 2009. Vol. 46. P. 3836—3849. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2009.07.009.

121. Pisano A. A., Fuschi P., Polizzotto C. Integral and differential approaches to Eringen's nonlocal elasticity models accounting for boundary effects with applications to beams in bending // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. 2021. Vol. 101, No. 8. DOI: 10.1002/zamm.202000152.
122. Polizzotto C. Nonlocal elasticity and related variational principles // *International Journal of Solids and Structures*. 2001. Vol. 38, No. 42. P. 7359—7380. DOI: 10.1016/S0020-7683(01)00039-7.
123. Polizzotto C., Fuschi P., Pisano A. A. A nonhomogeneous nonlocal elasticity model // *European Journal of Mechanics - A/Solids*. 2006. Vol. 25, No. 2. P. 308—333. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2005.09.007.
124. Rogula D. Introduction to Nonlocal Theory of Material Media //. Vienna : Springer Vienna, 1982. P. 123—222. ISBN 978-3-7091-2890-9. DOI: 10.1007/978-3-7091-2890-9_3.
125. Ru C. Q., Aifantis E. C. A simple approach to solve boundary-value problems in gradient elasticity // *Acta Mechanica*. 1993. Vol. 101. P. 59—68. DOI: 10.1007/BF01175597.
126. Structural Factors of Hardening of U8A Carbon Tool Steel under Cyclic Heat Exposure / A. M. Guryev [et al.] // *Technical Physics*. 2023. Vol. 68, No. 8. P. 171—176. DOI: 10.1134/S1063784223700020.
127. Sydnaoui I., Mohamed R., Ab Kadir M. A. Design Engineering The Effects of Seasonal Thermal Stresses at Concrete Buildings in the Arabic Area // *Design Engineering (Toronto)*. 2022. Oct. Vol. 6. P. 721—738.
128. Temperature Stress Analysis of Super-Long Frame Structures Accounting for Differences in the Linear Expansion Coefficients of Steel and Concrete / Y. Jia [et al.] // *Processes*. 2021. Vol. 9, No. 9. DOI: 10.3390/pr9091519.

129. Thermoelastic with photogenerated model of rotating microstretch semiconductor medium under the influence of initial stress / A. Saeed [et al.] // Results in Physics. 2021. Nov. Vol. 31. DOI: 10.1016/j.rinp.2021.104967.
130. Toupin R. A. Elastic materials with couple stresses. // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1962. Vol. 11. P. 385—414. DOI: 10.1007/BF00253945.
131. Tuna M., Kirca M. Exact solution of Eringen's nonlocal integral model for bending of Euler–Bernoulli and Timoshenko beams // International Journal of Engineering Science. 2016. Vol. 105. P. 80—92. DOI: 10.1016/j.ijengsci.2016.05.001.
132. Türkmen İ., Yalamaç E. Effect of Alternative Boronizing Mixtures on Boride Layer and Tribological Behaviour of Boronized SAE 1020 Steel // Metals and Materials International. 2022. Vol. 28. P. 1—15. DOI: 10.1007/s12540-021-00987-8.
133. Wang J., Altan S. B. Uniqueness in generalized nonlocal thermoelasticity // Journal of Thermal Stresses. 1993. Vol. 16. P. 71—78.
134. Wen P., Huang X., Aliabadi M. Two Dimensional Nonlocal Elasticity Analysis by Local Integral Equation Method // Computer Modeling in Engineering and Sciences. 2013. Vol. 96, No. 3. P. 199—225. DOI: 10.3970/cmesci.2013.096.199.
135. Xianqiao W., James D. L. Micromorphic theory: a gateway to nano world // International Journal of Smart and Nano Materials. 2010. Vol. 1, No. 2. P. 115—135. DOI: 10.1080/19475411.2010.484207.
136. Yan Z., Cheng E. A Novel Monte Carlo Method to Calculate the Thermal Conductivity in Nanoscale Thermoelectric Phononic Crystals Based on Universal Effective Medium Theory // Mathematics. 2023. Vol. 11, No. 5. DOI: <https://doi.org/10.3390/math11051208>.

137. Yang N., Zhang G., Li B. Violation of Fourier's law and anomalous heat diffusion in silicon nanowires // Nano Today. 2010. Vol. 5, No. 2. P. 85—90. DOI: 10.1016/j.nantod.2010.02.002.
138. Zienkiewicz O., Taylor R., Zhu J. Z. The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals. Seventh edition. 2013. ISBN 978-1-85617-633-0. DOI: 10.1016/C2009-0-24909-9.

Приложение

Ниже представлен Листинг 1 конфигурационного файла, на основе которого был произведён расчёт комбинированной задачи теплопроводности и термоупругости из раздела 4.7. Конфигурационный файл выполнен в виде структуры, описанной в формате JSONSchema, и содержит 6 основных полей: `task`, `save`, `mesh`, `thermal_boundaries`, `mechanical_boundaries` и `materials`.

В поле `task` описаны основные характеристики запускаемой задачи: её размерность, тип расчёта и зависимость расчёта от времени. В поле `save` содержатся параметры сохранения результатов расчётов, указан путь сохранения результатов, а также названия сохраняемых файлов и точность с которой записывать результаты расчётов. В разделе `mesh` указан путь по которому находится файл содержащий конечно-элементную сетку. Поля `thermal_boundaries` и `mechanical_boundaries` содержат граничные условия для температурной и механической задач соответственно. Здесь важно отметить, что граничные условия заданы на именованных границах, поэтому важно, чтобы сетка содержала информацию об этих границах в виде групп элементов. В разделе `materials` указаны физические параметры материала и модельные параметры отдельно для уравнения теплопроводности и уравнения равновесия. Здесь также важно отметить, что информация о материале задана на именованной группе элементов, которые обозначают определённый материал. Таких групп может быть несколько, где для каждого материала могут быть заданы свои параметры.

Листинг 1 Конфигурационный файл для комбинированной задачи теплопроводности и термоупругости

```

5 | {
   |   "task": {
   |     "dimension": 2,
   |     "problem": "thermomechanical",
   |     "time_dependency": false

```

```

},
"save": {
    "folder": "/path/to/save/folder",
    "config": "config",
    "csv": "solution_2d",
    "vtk": "solution_2d",
    "precision": 7
},
"mesh": {
    "path": "/path/to/mesh.su2"
},
"thermal_boundaries": {
    "Left": {
        "kind": "flux",
        "flux": -1
    },
    "Right": {
        "kind": "flux",
        "flux": 1
    }
},
"mechanical_boundaries": {
    "Left": [
        { "pressure": -1 },
        null
    ],
    "Right": [
        { "pressure": 1 },
        null
    ],
    "Horizontal": [
        null,
        { "displacement": 0 }
    ]
},

```

```
45  "materials": {  
    "Material_Name": {  
      "physical": {  
        "conductivity": 1.0,  
        "youngs_modulus": 400.0,  
        "poissons_ratio": 0.3,  
        "thermal_expansion": 2.5e-3  
      },  
      "thermal_model": {  
50        "local_weight": 0.5,  
        "nonlocal_radius": 0.2  
      },  
      "mechanical_model": {  
55        "local_weight": 0.75,  
        "nonlocal_radius": 0.1  
      }  
    }  
  }  
}
```