

На правах рукописи

Соколов Андрей Александрович

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

1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2024

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана)

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент
Савельева Инга Юрьевна

Официальные оппоненты: **Фамилия Имя Отчество,**
доктор физико-математических наук, профессор,
Название для места работы,
старший научный сотрудник

Фамилия Имя Отчество,
кандидат физико-математических наук,
Основное место работы,
старший научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Защита состоится «_» ____ 2024 года в _ часов на заседании диссертационного совета Д24.2.331.05 при МГТУ им. Н.Э. Баумана по адресу: Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Баумана и на сайте www.bmstu.ru.

Автореферат разослан «_» ____ 2024 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат технических наук, доцент

Аттетков
Александр
Владимирович

Общая характеристика работы

Актуальность исследования. Задачи термоупругости возникают в самых разных областях инженерного дела: аэрокосмической отрасли, строительстве, микроэлектронике и многих других. Передовые технологии таких отраслей, как правило, тесно связаны с созданием новых материалов. При этом часто требования уже настолько высоки, что при их создании необходимо учитывать молекулярную структуру материала, напрямую влияющую на свойства среды. Такие материалы принято называть структурно-чувствительными.

Важным этапом в создании новых материалов является построение математической модели, способной адекватно описывать их поведение. Классические материалы можно описать моделями механики сплошной среды, однако, когда речь идет о структурно-чувствительных материалах, где величина структуры не превышает нескольких десятков нанометров, гипотеза сплошности нарушается, из-за чего приходится прибегать к другим моделям, например, моделям молекулярной динамики или статистическим моделям. Анализ такого рода моделей очень ограничен без численного эксперимента, а для проведения полноценного эксперимента необходимы большие вычислительные мощности, которые не всегда доступны исследователю. В связи с этим в середине XX века набирают популярность модели обобщённой механики сплошной среды, которые могут учесть такие явления, как микровращения отдельных зёрен материала, микродислокации, различные дальнodelствующие и многие другие масштабные эффекты.

В диссертационной работе рассмотрен класс моделей, обеспечивающих описание дальнodelствующих эффектов путём обобщения классических уравнений механики сплошной среды и представлении их в интегро-дифференциальной форме. Такие модели принято называть нелокальными, а их разработка активно велась в рамках работ следующего списка авторов: E. Kröner, D.G.B. Edelen, A.C. Eringen, D. Rogula, S.B. Altan, C. Polizzotto, A.A. Pisano, B.B. Васильев, С.А. Лурье, С.Л. Соболев, В.С. Зарубин, Г.Н. Кувыркин, И.Ю. Савельева и многие другие.

В практических приложениях на основе математической модели необходимо решать большую серию задач, не все из них обладают аналитическими решениями. В связи с этим необходимо развивать подходы с использованием численных методов решения уравнений с последующей реализацией в виде программного комплекса. В диссертационной работе этому аспекту уделено особое внимание. За основу численной схемы был взят метод конечных элементов, его реализация стала частью программного комплекса NonLocFEM.

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

Диссертация является составной частью фундаментальных исследований, выполненных в рамках грантов: 0705-2020-0047 «Теория дифференциальных уравнений, краевые задачи, связанные задачи анализа и теории приближений и некоторые их приложения»; FSFN-2023-0012 «Разработка математических моделей и методов проектирования изделий ракетно-космической техники из перспективных конструкционных и функциональных материалов»; 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 объём диссертации составляет 110 страниц, включая 37 рисунков и 9 таблиц. Список литературы содержит 137 наименований.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приведён обзор научной литературы, сформулированы цели исследования, поставлены задачи, а также изложена научная новизна и практическая значимость.

Первая глава посвящена описанию основных соотношений моделей нелокальной теплопроводности и термоупругости.

В разделе 1.1 представлен интегральный нелокальный оператор

$$\mathcal{N}[f(\mathbf{x})] = p_1 f(\mathbf{x}) + p_2 \int_{S'(\mathbf{x}') \cap S} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}') dS'(\mathbf{x}'), \quad \mathbf{x}' \in S'(\mathbf{x}). \quad (1)$$

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

В разделе 1.2 представлено описание уравнения стационарной теплопроводности

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = q_V, \quad (2)$$

где q_V — объёмная плотность мощности внутренних источников и стоков теплоты, а вектор плотности теплового потока \mathbf{q} определён как обобщённый закон Био — Фурье с использованием нелокального оператора (1)

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

Здесь $\hat{\lambda}$ — тензор теплопроводности; $T = T(\mathbf{x})$ — поле температуры.

В разделе 1.3 представлено описание уравнения равновесия

$$-\nabla \cdot \hat{\sigma} = \mathbf{b}, \quad (3)$$

где \mathbf{b} — вектор плотности объёмных сил; тензор напряжений $\hat{\sigma}$, определён, как обобщённый закон Дюамеля — Неймана с использованием нелокального оператора (1)

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

где $\hat{\varepsilon} = (\mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)/2$ — тензор деформации; \mathbf{u} — вектор перемещений; $\hat{\mathbf{C}}$ — тензор коэффициентов упругости; $\hat{\alpha}^T$ — 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.

В разделе 1.4 определены два семейства функций нелокального влияния φ : полиномиальное семейство функций на ограниченных областях нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$

$$\varphi_{p,q}^P(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{cases} A(1 - \rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}')^p)^q, & \rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \leq 1, \\ 0, & \rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') > 1, \end{cases} \quad (4)$$

и экспоненциальное семейство функций на неограниченных областях нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$

$$\varphi_{p,q}^E(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = A \exp(-q\rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}')^p). \quad (5)$$

Параметры для обеих семейств функций имеют одинаковый смысл: p и q — параметры плотности распределения; A — нормировочный множитель; $\rho_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ — метрическая функция.

Вторая глава посвящена построению численных схем решения уравнений стационарной теплопроводности и равновесия. В основе численных схем использован метод конечных элементов.

В разделе 2.1 очень кратко изложены базовые соотношения метода конечных элементов: определено понятие конечного элемента, свойства базиса конечного элемента, способ перехода от локальной системы координат элемента к глобальной и применение конечных элементов для аппроксимации функций.

В разделе 2.2 описан способ аппроксимации уравнений стационарной теплопроводности (2) и равновесия (3), а также приведена последовательность преобразований, после которых приходим к СЛАУ, соответствующим уравнению стационарной теплопроводности и уравнению равновесия

$$\left(p_1 \hat{\mathbf{K}}_T^L + p_2 \hat{\mathbf{K}}_T^{NL} + \hat{\mathbf{K}}_T^\alpha \right) \cdot \mathbf{T} = \mathbf{Q} + \mathbf{F} + \mathbf{T}^\alpha, \quad (6)$$

$$\left(p_1 \hat{\mathbf{K}}_E^L + p_2 \hat{\mathbf{K}}_E^{NL} \right) \cdot \hat{\mathbf{U}} = p_1 \hat{\mathbf{E}}^L + p_2 \hat{\mathbf{E}}^{NL} + \hat{\mathbf{B}} + \hat{\mathbf{P}}. \quad (7)$$

Здесь $\hat{\mathbf{K}}_T^L$ и $\hat{\mathbf{K}}_T^{NL}$ — матрицы локальной и нелокальной теплопроводности; $\hat{\mathbf{K}}_T^\alpha$ — матрица теплообмена; \mathbf{T} — вектор искомых узловых значений температуры; \mathbf{Q} и \mathbf{F} — векторы дискретизированных внутренних и внешних источников и стоков теплоты; \mathbf{T}^α — вектор дискретизированного теплообмена; $\hat{\mathbf{K}}_E^L$ и $\hat{\mathbf{K}}_E^{NL}$ — матрицы локальной и нелокальной жёсткости; $\hat{\mathbf{U}}$ — вектор искомых узловых перемещений; $\hat{\mathbf{B}}$ и $\hat{\mathbf{P}}$ — векторы дискретизированных плотностей объёмных и поверхностных сил; $\hat{\mathbf{E}}^L$ и $\hat{\mathbf{E}}^{NL}$ — векторы локального и нелокального температурного линейного расширения. В силу того, что матрицы $\hat{\mathbf{K}}_E^L$ и $\hat{\mathbf{K}}_E^{NL}$ 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 $\hat{\mathbf{U}}$, $\hat{\mathbf{B}}$, $\hat{\mathbf{P}}$, $\hat{\mathbf{E}}^L$ и $\hat{\mathbf{E}}^{NL}$ в виде тензоров второго ранга, где первый индекс соответствует номеру узла, а второй — номеру координатной компоненты.

В разделе 2.3 описаны алгоритмы ассемблирования слагаемых СЛАУ, а также представлен способ квадратурной аппроксимации области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$. При данном способе аппроксимации область S_h^q с центром в квадратурном узле \mathbf{x}_q стоит аппроксимировать путём включения тех элементов, квадратурные узлы которых хотя бы частично попали в область $S'(\mathbf{x}_q)$. Иллюстрация способа представлена на Рис. 1, где крестом отмечен квадратурный узел, относительно которого происходит аппроксимация, точками — все остальные квадратурные узлы, кругом очерчена область нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$, а серым цветом выделены элементы, образующие аппроксимированную область нелокального влияния S_h^q .

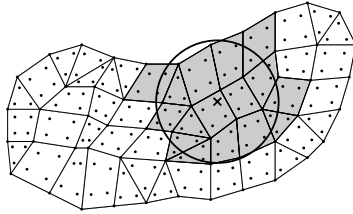


Рис. 1. Квадратурная аппроксимация области нелокального влияния

Матрицы СЛАУ имеют блочную структуру, поэтому введены понятия блоков матриц для уравнения теплопроводности

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

и уравнения равновесия

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

где \mathbf{E}_n — единичный вектор размерности M ; \mathbf{e}_i — единичный вектор размерности 2; $i, j, k, l = \overline{1, 2}$; $n, m = \overline{1, M}$; M — количество узлов в сетке S_h . Для общности алгоритмов обозначим блок матрицы одним символом $\mathbf{K}_{nm}^{e_1 e_2}$. Тогда алгоритм ассемблирования локальной матрицы принимает форму

$$\hat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^L = \sum_{e \in S_h} \sum_{n, m \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q \mathbf{K}_{nm}^{ee}(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_q) J_q^e. \quad (8)$$

Применим квадратурную аппроксимацию области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$, тогда алгоритм ассемблирования нелокальной матрицы представим в следующем виде

$$\hat{\mathbf{K}}_{\mathcal{F}}^{NL} = \sum_{e \in S_h} \sum_{n \in I^e} \sum_{q \in Q^e} w_q J_q^e \sum_{e' \in S_h^q} \sum_{m' \in I^{e'}} \sum_{q' \in Q^{e'}} w_{q'} \varphi(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) \mathbf{K}_{nm'}^{ee'}(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_{q'}) J_{q'}^{e'}. \quad (9)$$

Здесь w_q — весовой множитель в квадратурном узле под номером q ; J_q^e — якобиан преобразования из локальной системы в глобальную, аппроксимированный в квадратурном узле под номером q на элементе под номером e .

Далее по аналогии выписаны алгоритмы ассемблирования матрицы теплообмена и векторов правой части для уравнения теплопроводности

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

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

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

а также алгоритмы ассемблирования векторов правой части для уравнения равновесия

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

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

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

Отметим, что при аппроксимации вектора нелокального температурного линейного расширения $\hat{\mathbf{E}}^{NL}$ также был применён способ квадратурной аппроксимации области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$.

В разделе 2.4 описаны алгоритмы вычисления производных величин, таких как вектор плотности теплового потока \mathbf{q} и тензор напряжений $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$. После решения СЛАУ уравнения теплопроводности (6) получаем сеточную функцию температуры \mathbf{T} , используя которую можем вычислить величину вектора плотности теплового потока \mathbf{q} в квадратурном узле q

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

Аналогично после решения СЛАУ уравнения равновесия (7) получаем сеточную функцию вектора перемещений $\hat{\mathbf{U}}$, используя которую можем вычислить деформации $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$, а затем и напряжения

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

Третья глава посвящена описанию реализации программного комплекса NonLocFEM.

В разделе 3.1 описана общая схема программного комплекса NonLocFEM, рассмотрена его структура, взаимосвязь модулей и их предназначение. Иллюстрация структуры в виде схемы представлена на Рис. 2, где зависимый модуль указывает стрелкой на модуль от которого он зависит.

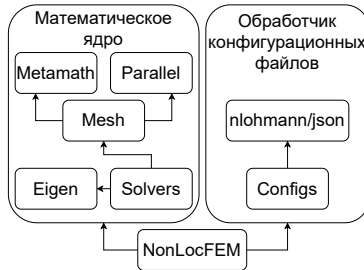


Рис. 2. Структура программы NonLocFEM

В разделе 3.2 описаны способы оптимизации и распараллеливания алгоритмов ассемблирования матриц и правых частей.

Оптимизация алгоритма ассемблирования была осуществлена путём изменения способа аппроксимации области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$. Вместо квадратурной аппроксимации предложен элементный способ аппроксимации области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$. Основным отличием данного способа от квадратурной аппроксимации является смена набора точек, по которым происходит аппроксимация области. Вместо аппроксимации относительно квадратурных узлов, поиск осуществляется относительно центров элементов. Такой подход дает возможность разделить алгоритмы заполнения матриц и интегрирования, что позволяет оптимизировать их независимо друг от друга. Иллюстрация способа представлена на Рис. 3, где крестом отмечен центр элемента, относительно которого происходит аппроксимация, точками отмечены центры элементов, кругом очерчена область нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$, а серым цветом выделены элементы образующие аппроксимированную область нелокального влияния S_h^e .

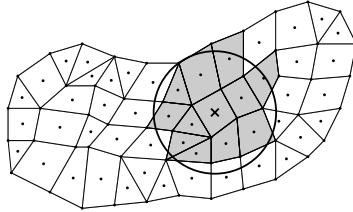


Рис. 3. Элементная аппроксимация области нелокального влияния

Распараллеливание алгоритмов выполнено посредством изменения порядка суммирования по элементам и проекционным узлам в алгоритмах ассемблирования (8) и (9), но чтобы это сделать, необходимо для каждого узла составить список элементов E^n , которым он принадлежит. В результате алгоритмы принимают вид

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

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

(10)

При таком подходе сборка матриц происходит построчно, что открывает широкие возможности для распараллеливания. Каждая строка может быть обработана независимо в отдельном потоке исполнения, а вычисление группы строк легко распределить между процессами.

В разделе 3.3 приведено описание алгоритма аппроксимации области нелокального влияния $S'(\mathbf{x})$ на основе k-d дерева. Суть алгоритма заключается в дроблении области на равномерные ячейки, где длина стороны ячейки равна радиусу поиска. Затем каждой ячейке присваивают узлы, которые находятся в её области, после чего поиск соседних узлов относительно текущего рассматриваемого узла сужается до ячейки, в которой он находится, и смежных с ней ячеек, где уже используется алгоритм линейного поиска. Сложность итогового алгоритма можно оценить как $O(N \log N)$, где N — количество узлов.

В разделе 3.4 описано семейство базисных функций квадратичного серендипового (8-узлового) элемента. Данное семейство базисов обладает свободным параметром s , вариация которого приводит к изменению числа обусловленности матриц теплопроводности и жёсткости. Путём минимизации следа матрицы была предложена оценка, согласно которой числа обусловленности должны быть минимальными при $s = 2/9$.

Четвёртая глава посвящена результатам расчётов с проведением сравнительного анализа представленных в работе моделей.

В разделе 4.1 описана стратегия исследования, принятые гипотезы, а также проведено обезразмеривание моделей теплопроводности и термоупругости. Далее все безразмерные параметры и величины будем обозначать теми же символами, что и в исходных уравнениях, но с чертой над символом.

В разделе 4.2 представлены основные особенности решений. Сравнения локальной и нелокальной теорий при различных параметрах моделей проводились на области $S = \{\bar{\mathbf{x}} \mid -0.5 \leq \bar{x}_1, \bar{x}_2 \leq 0.5\}$, где были решены задача о прохождении сквозь неё теплового потока и задача об одноосном растяжении. Было установлено, что решения в нелокальном случае обладают кромочным эффектом, который характеризуется увеличенными значениями температуры и перемещений на кромках, где заданы нагружения. Также было установлено появление ненулевых полей компоненты вектора плотности теплового потока \bar{q}_2 и касательной компоненты тензора напряжений $\bar{\sigma}_{12}$. Установлены зависимости влияния основных параметров модели на распределения полей решений.

В разделе 4.3 проведён сравнительный анализ полиномиального (4) и экспоненциального (5) семейств функций нелокального влияния. Показано, что оба семейства имеют одинаковое поведение при вариации параметров, обозначенных одними и теми же символами. В заключении раздела был сделан вывод, что качественных различий между решениями при различных функциях нелокального влияния нет и выбор функции влияет лишь на величину отклонений, поэтому дальнейшие исследования были проведены с использованием квадратичной параболы, то есть была выбрана функция полиномиального семейства (4) с параметрами $n = 2$, $p = 2$ и $q = 1$.

В разделе 4.4 изучены принципы стабильности теплового потока и Сен-Венана. Для их изучения была рассмотрена прямоугольная область $S = \{\mathbf{x} | -5 \leq x_1 \leq 5, -0.5 \leq x_2 \leq 0.5\}$, на которой при изучении принципа стабильности тепловых потоков для уравнения теплопроводности были поставлены следующие граничные условия Неймана и, для единственности решения, дополнительное интегральное условие:

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

Аналогично при изучении принципа Сен-Венана были поставлены граничные и геометрические условия для уравнения равновесия:

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

Здесь f — нормированная функция. Исследованы три варианта нагружения: равномерное и два треугольных, развёрнутых в разные стороны, которые определены при помощи следующих функций

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

Анализ решений показал, что при различных нагружениях первая компонента вектора плотности теплового потока \bar{q}_1 и компонента тензора напряжений $\bar{\sigma}_{11}$ сливаются в общую поверхность вдали от точек приложения нагружений. В классическом случае решения сливаются в плоскость, равную 1, нелокальные образуют более сложную поверхность. На Рис. 4 представлены распределения \bar{q}_1 и $\bar{\sigma}_{11}$ в сечении $\bar{x}_1 = 0$, где из-за равенства обозначены по оси ординат общим символом \mathcal{S} . Нелокальные решения имеют кромочный эффект, характеризующийся снижением рассматриваемой величины на свободных от условий границах и её увеличением внутри области. При этом увеличение радиуса нелокальности \bar{r} приводит к увеличению размаха кромочного эффекта, а уменьшение параметра p_1 — к увеличению отклонений.

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

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

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

В разделе 4.5 решена задача о растяжении пластины со ступенчатым переходом. Здесь к Т-образной области были приложены граничные и геометрические условия

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

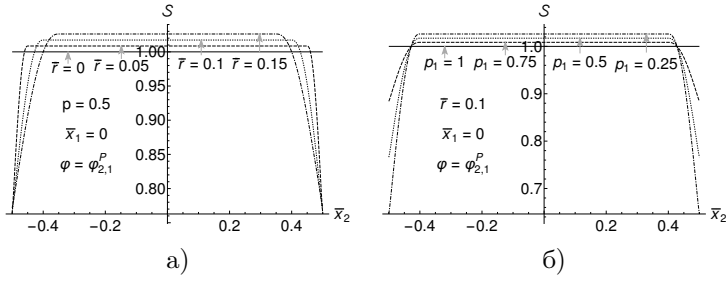


Рис. 4. Распределение компоненты теплового потока \bar{q}_1 и компоненты тензора напряжений $\bar{\sigma}_{11}$ в сечении $\bar{x}_1 = 0$ при вариации $\bar{\tau}$ (а) и p_1 (б)

Проведённый анализ решений показал, что в нелокальном случае решения обладают особенностями в углах между верхней и нижней частями области, где в смежной с концентратором верхней части области наблюдаем области с отрицательными значениями деформации. Также отметим, что в нелокальном случае линии уровней обладают изломом вблизи верхней границы, а вблизи с кромкой, к которой приложена нагрузка, появляются дополнительные линии уровней.

В разделе 4.6 решена задача Кирша с обобщением на эллиптические вырезы (Рис. 5). Были поставлены следующие граничные и геометрические условия

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

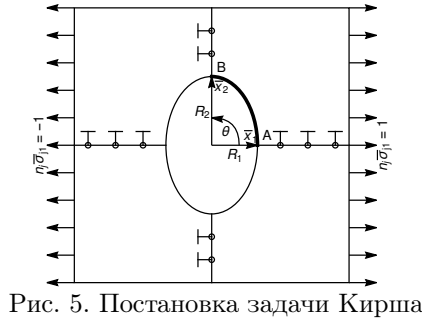


Рис. 5. Постановка задачи Кирша

Известно, что максимальные напряжения находятся в верхней и нижней точках выреза, а их величина в классическом случае подчиняется следующей закономерности

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

где σ_0 — равнодействующая величина прикладываемого нагружения, а $\rho = R_2/R_1$. В диссертации показано, что в нелокальном случае появляется дополнительный множитель κ , который зависит от весового параметра модели p_1 . В этом случае

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

Такая зависимость не имеет строго теоретического подтверждения и получена эвристически, однако, она может быть полезна для оценок в практических расчётах. Дополнительно отметим лишь, что параметра κ уменьшается вместе с параметром p_1 , то есть максимальный уровень напряжения в нелокальных постановках ниже, чем в классической.

В разделе 4.7 решена задача термоупругости в областях с эллиптическими вырезами (Рис. 6). Для этого были поставлены следующие граничные и интегральные условия:

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{\bar{x}_1=-1} = 1, \quad \mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{q}}|_{\bar{x}_1=1} = -1, \quad \bar{u}_2|_{\bar{x}_1=0} = 0, \\ \iint_S \bar{T} dS = 0, \quad \iint_S \bar{u}_1 dS = 0. \end{aligned}$$

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

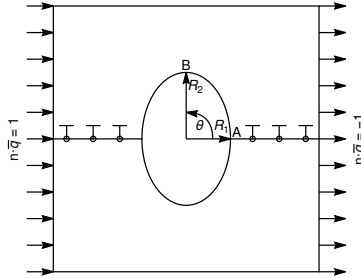


Рис. 6. Тепловые нагружения в области с эллиптическим вырезом

Здесь, аналогично задаче Кирша, максимальные значения компоненты вектора плотности теплового потока \bar{q}_1 находятся в верхней и нижней точках выреза и они подчиняются зависимости

$$\bar{q}_1^{\max} = (1 + \rho) q_0.$$

В нелокальном случае это значение уменьшается, но установить такую же прочную связь, как и в случае с уравнением равновесия, не удаётся.

Решения относительно напряжений обладают симметрией, причём относительно верхней и нижней частей области решения чётные, а относительно правой и левой нечётные. Напряжения в нелокальном случае, как и во всех предыдущих случаях, становятся ниже, чем в классическом случае (Рис. 7).

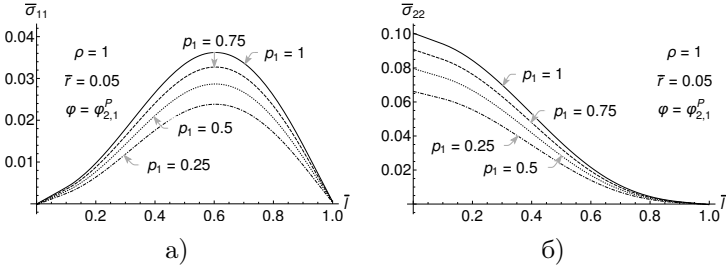


Рис. 7. Распределение напряжения $\bar{\sigma}_{11}$ (а) и $\bar{\sigma}_{22}$ (б) на кромке АВ при вариации весового параметра ρ_1

Пятая глава посвящена исследованию эффективности реализации программного комплекса NonLocFEM.

В разделе 5.1 проведено исследование масштабируемости алгоритмов ассемблирования матриц теплопроводности и жёсткости (10). На Рис. 8 представлены столбцовые диаграммы эффективности ускорения на 18 ядерном процессоре Intel Core i9 10980XE при использовании технологии OpenMP, где ускорение времени ассемблирования матриц в нелокальных постановках достигает 14 раз при использовании всех ядер процессора.

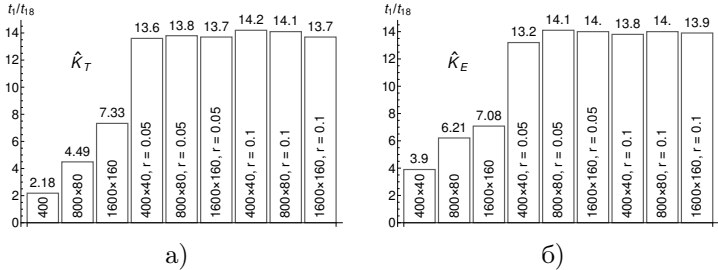


Рис. 8. Эффективность распараллеливания алгоритма сборки матриц (а) теплопроводности и (б) жёсткости при использовании OpenMP

Также в этом разделе был изучен вопрос эффективности алгоритмов балансировки данных между процессами при использовании технологии MPI. Показано, что использование этого алгоритма даёт равномерное распределение данных между процессами.

В разделе 5.2 проведено исследование скорости сходимости метода сопряжённых градиентов при решении СЛАУ (7). Была поставлена задача равновесия на сетке S_h , состоящей из 1000×100 элементов, после чего была вычислена связь между параметром базиса s и весовым параметром модели p_1 с числом обусловленности матрицы жёсткости (Рис. 9). Графики сходимости метода сопряжённых градиентов хорошо коррелируют с графиками числа обусловленности, кроме того они демонстрируют корректность оценки, полученной в разделе 3.4, согласно которой минимум числа обусловленности находится в окрестностях точки $s = 2/9$.

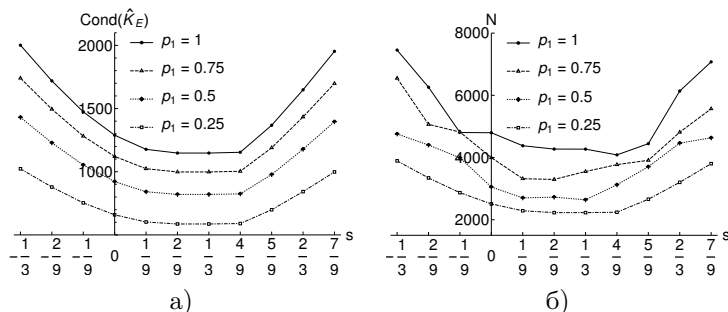


Рис. 9. Зависимость числа обусловленности (а) и количества итераций N (б) для матрицы жёсткости \hat{K}_E от параметров s и p_1 при $r = 0.1$

В разделе 5.3 исследована возможность предобуславливания СЛАУ, полученных в нелокальных задачах, при помощи неполного разложения Холецкого локальной матрицы. Результаты показали, что ускорение сходимости метода сопряжённых градиентов достигает 2.5 раз. При этом объём затрачиваемой оперативной памяти, который занимает локальная матрица, достаточно мал по сравнению с нелокальной матрицей, что делает такой способ предобуславливания экономичным с точки зрения использования вычислительных ресурсов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

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.

Основные результаты диссертации отражены в работах

1. 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. (0,4 п.л./0,2 п.л.)

2. Kuvyrkin G. N., Savelyeva I. Y., Sokolov A. A. 2D nonlocal elasticity: In vestigation of stress and strain fields in complex shape regions // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 2023. Vol. 103. No. 3. (0,6 п.л./0,3 п.л.)

3. 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. (0,55 п.л./0,3 п.л.)

4. Mathematical modeling of insulating coating of thermal conductivity in cluding body's own radiation and non-local spatial effects / A. A. Sokolov [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. 2024. Vol. 2817. No. 1. P. 12—28. (0,35 п.л./0,1 п.л.)

5. 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. (0,4 п.л./0,2 п.л.)

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

Соколов Андрей Александрович

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НЕЛОКАЛЬНОЙ ТЕРМОУПРУГОСТИ И
ИХ ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать _____._____._____. Заказ № _____

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография _____

