

УДК 519.6

Алгоритмы численного анализа неклассических математических моделей термомеханики

Попов А. Ю.^{1,*}

[*andreypopov@live.ru](mailto:andreypopov@live.ru)

¹МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Предложены различные алгоритмы численного анализа математических моделей термомеханики с нелокальностью. Отмечены основные постулаты и гипотезы механики сплошной среды с нелокальностью. Отдельно рассмотрены случаи нелокальности по времени и пространству. Для каждой математической модели приведены соответствующие уравнения в частных производных и способы их численной аппроксимации. Отмечены особенности программной реализации предложенных алгоритмов в рамках пакета OpenFOAM. Указан широко применяемый в задачах подобного класса особый тип граничного условия. Описаны возможные подходы по распараллеливанию разработанных алгоритмов.

Ключевые слова: параллельные вычисления; уравнение теплопроводности; неклассические модели; механика сплошной среды с нелокальностью

Введение

Существует определенный круг задач физики и механики сплошной среды (МСС), к которым в чистом виде неприменимы классические методы решения. Последние основаны на принципе локальности. Его использование позволяет получить определяющие соотношения в виде системы дифференциальных уравнений в частных производных. Более точно, принцип локальности в МСС постулирует, что значения активных переменных (которые характеризуют внутреннее состояние материала; например, тензор напряжений $\hat{\sigma}$, вектор теплового потока $\mathbf{q}$) в окрестности рассматриваемой точки зависят только от значений реактивных переменных (отражают реакцию материала на внешние воздействия; например, температура, электрический заряд) *в окрестности этой точки* [1, 2].

В частности, классические подходы МСС зачастую неприменимы при теоретическом прогнозировании свойств современных конструкционных и функциональных материалов. Для производства таких материалов используются специальные методы, позволяющие достичь предельных значений их характеристик: высокой прочности, теплоемкости, низкой теплопроводности и пр. Особенностью материалов с такими свойствами является микро- или наноструктура, в отличие от материалов с крупнозернистой или аморфной структурой.

Адекватные оценки характеристик таких материалов можно получить при помощи т.н. математических моделей сплошной среды с нелокальностью. В работе речь идет об алгоритмах численного анализа математических моделей теплопроводности, учитывающих нелокальность сплошной среды, а также о их программной реализации в рамках пакета OpenFOAM.

1. Область применения классических методов

Вообще говоря, применимость классической методологии МСС определяется соотношением параметров задачи: внешнего L (например, размер области) и внутреннего l (межатомное расстояние, параметр кристаллической решетки) характерных размеров. Оценки на основании классических подходов остаются довольно точными при условии $L/l \gg 1$. Однако в той области, где $L/l \sim 1$, расхождение с экспериментальными данными становится значительным из-за возрастающего влияния межатомных взаимодействий. В таком случае необходимо обращаться к использованию методов молекулярной динамики. Однако существует и другой, менее трудоемкий с вычислительной точки зрения, подход — *метод непрерывной аппроксимации*. Он заключается в распространении методов МСС, описывающих поведение материала на макроуровне, на микроуровень и последующем установлении связи между характеристиками макро- и микро- (или нано-) уровня. На применении метода непрерывной аппроксимации основана область науки, называемая *обобщенной механикой сплошной среды* [3]. Вместо классических (локальных) математических моделей, в ней широко используются модели сплошной среды с нелокальностью, выступающие обобщением первых. Учитываемая при таком подходе нелокальность называется *пространственной*.

Аналогично, динамические процессы характеризуются внешним T (например, время, течение которого действуют внешние нагрузки) и внутренним τ (например, время релаксации) временными параметрами. Тогда классические методы МСС применимы только пока $T/\tau \gg 1$, а при $T/\tau \sim 1$ целесообразно использовать математические модели сплошной среды с нелокальностью, которая в таком случае называется *временной*. Также в подобных случаях говорят о моделях сплошной среды с *памятью*.

2. Основные положения механики сплошной среды с нелокальностью

При построении моделей сплошной среды с нелокальностью основываются на следующих положениях, являющихся обобщением соответствующих локальных принципов [4]:

1. Закон сохранения энергии (1) выполняется только в интегральной форме (для всего тела):

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \left(\varepsilon + \frac{1}{2} v_i v_i \right) dV = \int_S (\sigma_{kl} v_l + q_k) n_k dS + \int_V \rho (f_k v_k + h) dV, \quad (1)$$

где ε — массовая плотность внутренней энергии тела; v_i — компоненты поля скоростей; f_k — компоненты вектора массовой плотности внешних сил; h — массовая плотность источников теплоты.

2. Состояние (т.е. значения активных переменных) произвольной точки тела в данный момент зависит от состояния всех остальных точек тела в текущий момент, а также во все предыдущие.

В дополнение к основным определяющим соотношениям и положениям механики сплошной среды с нелокальностью предложен [4] набор принципов, используемых для распространения методологии континуума на микроуровень. Среди этих принципов отметим принцип соседства и принцип памяти. Согласно первому, чем дальше некоторая точка $\mathbf{r}'$ от рассматриваемой $\mathbf{r}$, тем слабее влияние состояния тела в $\mathbf{r}'$ на его состояние в $\mathbf{r}$. Аналогично, согласно второму принципу, чем дальше некоторый момент времени t' от текущего t , тем меньше влияние состояния тела в t' на текущее.

Далее будем рассматривать математические модели сплошной среды с нелокальностью применительно к моделированию теплопроводности в твердом теле. В таком случае пространственная нелокальность означает учет влияния на температуру в точке температуры всех остальных точек тела, а временная — учет конечной скорости распространения теплоты (в противоположность бесконечной скорости при классическом подходе) и эффекта запаздывания при аккумуляции теплоты.

3. Математическая модель теплопроводности, учитывающая нелокальность по времени

Основные соотношения. Распределение температуры в твердом теле в модели сплошной среды с внутренними параметрами состояния может быть описано следующим уравнением [5, 6]:

$$\begin{aligned} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} - \int_0^t \frac{\partial^2 T}{\partial t'^2} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' \right) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{ij}^{(T)} \left(\frac{\partial T}{\partial x_j} - \int_0^t \frac{\partial}{\partial t'} \frac{\partial T}{\partial x_j} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt' \right) \right), \quad (2) \end{aligned}$$

где $\lambda_{ij}^{(T)}$ — компоненты тензора теплопроводности; $c = c_\epsilon$ — удельная массовая теплоемкость при постоянной деформации, τ_t и τ_q — времена релаксации.

Интегрированием по частям выражение в скобках в левой части уравнения (2) можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} - \int_0^t \frac{\partial^2 T}{\partial t'^2} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' = \frac{\partial T}{\partial t} - \int_0^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) d\left(\frac{\partial T}{\partial t'}\right) = \\ = \frac{\partial T}{\partial t} - \left(\exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) \frac{\partial T}{\partial t'} \right) \Big|_{t'=0}^{t'=t} + \frac{1}{\tau_t} \int_0^t \frac{\partial T}{\partial t'} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' = \\ = \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{t=0} \exp\left(-\frac{t}{\tau_t}\right) + \frac{1}{\tau_t} \int_0^t \frac{\partial T}{\partial t'} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt'. \quad (3) \end{aligned}$$

Аналогично, преобразуя выражение в скобках в правой части уравнения (2), получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \int_0^t \frac{\partial}{\partial t'} \frac{\partial T}{\partial x_j} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt' &= \frac{\partial T}{\partial x_j} - \int_0^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) d\left(\frac{\partial T}{\partial x_j}\right) = \\ &= \frac{\partial T}{\partial x_j} - \left(\exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) \frac{\partial T}{\partial x_j}\right) \Big|_{t'=0}^{t'=t} + \frac{1}{\tau_q} \int_0^t \frac{\partial T}{\partial x_j} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt' = \\ &= \frac{\partial T}{\partial x_j} \Big|_{t=0} \exp\left(-\frac{t}{\tau_q}\right) + \frac{1}{\tau_q} \int_0^t \frac{\partial T}{\partial x_j} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt'. \quad (4) \end{aligned}$$

Таким образом, после преобразований (3)–(4) уравнение (2) примет вид

$$\begin{aligned} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{t=0} \exp\left(-\frac{t}{\tau_t}\right) + \frac{\rho c}{\tau_t} \int_0^t \frac{\partial T}{\partial t'} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' &= \\ = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{ij}^{(T)} \frac{\partial T}{\partial x_j} \Big|_{t=0} \exp\left(-\frac{t}{\tau_q}\right) + \frac{\lambda_{ij}^{(T)}}{\tau_q} \int_0^t \frac{\partial T}{\partial x_j} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt' \right). \quad (5) \end{aligned}$$

Это уравнение, в отличие от классического параболического уравнения теплопроводности

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{ij}^{(T)} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right),$$

является уравнением гиперболического типа [8]. Уравнение (5) содержит дополнительные слагаемые, учитывающие нелокальность по времени: слагаемые в левой части равенства отражают эффект запаздывания при аккумуляции теплоты, в правой — конечную скорость распространения теплоты в теле.

Зачастую математические модели теплопроводности с нелокальностью используются для моделирования процессов высокоинтенсивного нагрева [9, 10, 11, 12, 13, 14]. Тогда уравнение (5) может дополняться граничным условием вида (в одномерном случае)

$$-\lambda^{(T)} \left(\frac{\partial T(x_1, t)}{\partial x_1} - \int_0^t \frac{\partial}{\partial t'} \frac{\partial T(x_1, t')}{\partial x_1} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt' \right) \Big|_{x_1=x_1^{(0)}} = q_s,$$

где q_s — заданный тепловой поток на границе.

В частности, при $q_s = B M t^m \exp(-mt/t_0)$, $B, M = \text{const}$, $m \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$, существует аналитическое решение уравнения теплопроводности (5) [6].

4. Математическая модель, учитывающая эффект запаздывания при аккумуляции теплоты

Уравнение теплопроводности. Для численного моделирования сплошной среды с памятью целесообразно отдельно рассмотреть математические модели теплопроводности, учитывающие два различных эффекта. Уравнение (5) при $\tau_t \neq 0$ и $\tau_q \rightarrow 0$ учитывает эффект

запаздывания при аккумуляции теплоты, при этом скорость распространения теплоты считается бесконечной. Для однородного изотропного твердого тела $\lambda_{ij}^{(T)} = \lambda^{(T)} \delta_{ij}$, $a^2 = \frac{\lambda^{(T)}}{\rho c}$ — коэффициент температуропроводности тела. Кроме того, при моделировании поверхностного нагрева часто имеет место начальное условие $\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0$. Соответствующее уравнение теплопроводности имеет вид [7]

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{\tau_t} \int_0^t \frac{\partial T}{\partial t'} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (6)$$

Если взять по частям интеграл в левой части уравнения (6), получим

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{\tau_t} \left(T(t) - T_0(\mathbf{x}) \exp\left(-\frac{t}{\tau_t}\right) \right) - \frac{1}{\tau_t^2} \int_0^t T(t') \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j}, \quad (7)$$

где $T_0(\mathbf{x}) = T(x, t) \Big|_{t=0}$ — начальное распределение температуры.

Аппроксимация уравнения. Следующим этапом на пути к проведению вычислительного эксперимента и получению численного решения является процесс аппроксимации уравнения (7). Для этой цели в качестве основной платформы выбран программный пакет OpenFOAM. Данный пакет представляет собой инструментарий для решения дифференциальных уравнений в частных производных с помощью метода контрольных объемов. Решение задачи в OpenFOAM происходит в общем случае в трехмерной постановке, при этом для решения одно- или двумерных задач необходимо указать, в каких направлениях искомая величина не изменяется. Стоит отметить, что решение этой задачи и подобных ей (например, [15]) возможно и с использованием метода конечных элементов, однако в таком случае не будет обеспечиваться выполнение дискретного аналога закона сохранения энергии.

При аппроксимации уравнения (7) наибольший интерес представляет интегральное слагаемое в левой части, которое, собственно, учитывает влияние распределения температуры в теле в предыдущие моменты времени на текущее в согласии с принципом затухающей памяти. Введем на отрезке $[0; t]$ равномерную разностную сетку с шагом Δt :

$$\omega_{\Delta t} = \{t_i: t_i = i\Delta t, \quad i = 0, 1, \dots, n; \quad t_n = t\}.$$

Интеграл по временному промежутку $(0; t)$ представим в виде суммы интегралов по промежуткам $(t_i; t_{i+1})$. Каждый из них аппроксимируем линейной комбинацией распределений температуры на концах соответствующего промежутка интегрирования:

$$\int_0^t T(t') \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} T(t') \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' \approx \sum_{i=0}^{n-1} (C_i T_i + D_i T_{i+1}). \quad (8)$$

Здесь C_i и D_i — коэффициенты, которые вычисляются непосредственно с учетом требования точности квадратурной формулы (8) для кусочно-линейной по времени функции температуры:

$$C_i = -\tau_t \exp\left(-\frac{t-t_i}{\tau_t}\right) + \frac{\tau_t^2}{\Delta t} \left(\exp\left(-\frac{t-t_{i+1}}{\tau_t}\right) - \exp\left(-\frac{t-t_i}{\tau_t}\right) \right),$$

$$D_i = \tau_t \exp\left(-\frac{t-t_{i+1}}{\tau_t}\right) - \frac{\tau_t^2}{\Delta t} \left(\exp\left(-\frac{t-t_{i+1}}{\tau_t}\right) - \exp\left(-\frac{t-t_i}{\tau_t}\right) \right).$$

В силу принципа затухающей памяти, для ускорения процесса счета целесообразно непосредственно учитывать вклад только последних k слагаемых в сумме (8) (для шагов $t_{n-k+1}, \dots, t_n$), а вклад первых слагаемых учитывать упрощенно: например, заменяя все $T_0, \dots, T_{n-k}$ на T_{n-k} и вычисляя один интеграл для целого промежутка (t_0, t_{n-k}) :

$$\begin{aligned} \int_0^{t_{n-k}} T(t') \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' &\approx \int_0^{t_{n-k}} T_{n-k} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_t}\right) dt' = \\ &= T_{n-k} \exp\left(-\frac{t}{\tau_t}\right) \int_0^{t_{n-k}} \exp\left(\frac{t'}{\tau_t}\right) dt' = \frac{1}{\tau_t} T_{n-k} \exp\left(-\frac{t}{\tau_t}\right) \left(\exp\left(\frac{t_{n-k}}{\tau_t}\right) - 1 \right). \end{aligned}$$

В соответствии с общепринятым подходом, в OpenFOAM производится замена исходной системы дифференциальных уравнений в частных производных системой линейных алгебраических уравнений с помощью процедуры аппроксимации и последующее решение построенной системы тем или иным прямым или итерационным методом. Для построения разностной схемы выполняется интегрирование исходного уравнения по *контрольному* объему V_0 и времени.

Аппроксимация слагаемых уравнения (7) в OpenFOAM осуществляется описанным ниже способом. Описанные далее подходы не являются единственно возможными в OpenFOAM и для построения СЛАУ могут быть применены иные схемы аппроксимации уравнений [16].

1. Слагаемое $\frac{\partial T}{\partial t}$:

$$\int_{V_0} \int_{t-\Delta t}^t \frac{\partial T}{\partial t} dt dV \approx \int_{V_0} \frac{T - \check{T}}{\Delta t} \Delta t dV = (T - \check{T}) V_0,$$

где $T = T(t)$ — неизвестная температура; $\check{T} = T(t - \Delta t)$. Значения температуры (T , $\check{T}$ и т.д.) берутся в геометрических центрах контрольных объемов.

2. Слагаемое $a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j}$: в соответствии с теоремой Остроградского — Гаусса,

$$\begin{aligned} a^2 \int_{V_0} \int_{t-\Delta t}^t \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} dt dV &= a^2 \int_{V_0} \int_{t-\Delta t}^t \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial x_j} \right) dt dV \approx \\ &\approx a^2 \int_{t-\Delta t}^t \left(\sum_f \left(\frac{\partial T}{\partial x_j} \right)_f \cdot (S_f)_j \right) dt = a^2 \Delta t \sum_f \left(\frac{\partial T}{\partial x_j} \right)_f \cdot (S_f)_j. \end{aligned}$$

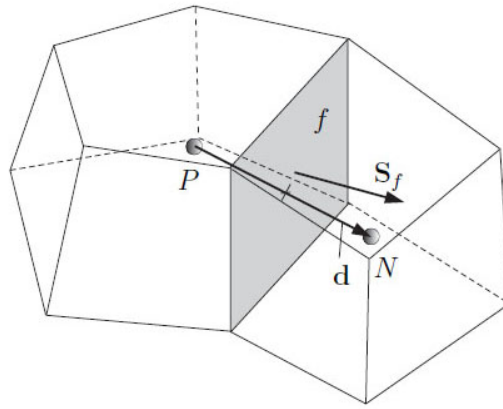


Рис. 1. Параметры сетки в OpenFOAM

Последнее выражение представляет собой сумму по граням, окружающим контрольный объем V_0 ; $(S_f)_j$ — компоненты вектора, направленного по нормали к грани, с длиной, равной площади грани S_f ; $\left(\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)_f$ — компоненты градиента температуры, вычисленного на грани (точнее, в ее центре; рис. 1). В случае ортогональной сетки (т.е. когда вектор $\mathbf{d}$, соединяющий центр ячейки с центром соседней, коллинеарен вектору $\mathbf{S}_f$) скалярное произведение под знаком суммы вычисляется следующим образом:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)_f \cdot (S_f)_j = S_f \frac{T - T_N}{|\mathbf{d}|},$$

где T_N — значение температуры в ячейке, соседней с данной. В случае неортогональной сетки при аппроксимации градиента вводятся необходимые поправки.

3. Вычисление двойного интеграла от оставшихся слагаемых в левой части уравнения (7) с учетом формулы (8) приводит к источниковым членам вида αT (или $\alpha \check{T}$) и $\alpha_i T_i$, где α , α_i , $i = 0, \dots, n - 1$, — некоторые числовые коэффициенты.

5. Математическая модель, учитывающая конечную скорость распространения теплоты

Уравнение теплопроводности. Уравнение (5) в случае $\tau_t \rightarrow 0$ и $\tau_q \neq 0$ учитывает конечную скорость распространения теплоты без рассмотрения эффекта запаздывания при аккумуляции теплоты. Как и ранее, будем исходить из предположения однородности и изотропности твердого тела. Тогда получим уравнение

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} \Big|_{t=0} \exp\left(-\frac{t}{\tau_q}\right) + \frac{a^2}{\tau_q} \int_0^t \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt'. \quad (9)$$

Обозначим $\frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} = \Delta T$, где Δ — оператор Лапласа.

Аппроксимация уравнения. Аппроксимация первой производной по времени аналогична случаю уравнения, учитывающего запаздывание при аккумуляции теплоты.

Слагаемое $a^2 \Delta T|_{t=0}$ аппроксимируется общепринятым образом. В частности, в одномерном случае, если на отрезке $[0; l]$ (l — размер расчетной области) ввести равномерную разностную сетку с шагом Δx

$$\omega_{\Delta x} = \{x_k: x_k = k\Delta x, k = 0, 1, \dots, m; x_m = l\},$$

то получим

$$a^2 \Delta T|_{t=0} = a^2 \frac{T_{j+1} - 2T_j + T_{j-1}}{(\Delta x)^2} \Big|_{t=0}.$$

Наибольшую важность представляет аппроксимация интеграла в правой части уравнения (9). Представим его в виде суммы интегралов по промежуткам $(t_i; t_{i+1})$ и аппроксимируем каждый интеграл отдельно:

$$\frac{a^2}{\tau_q} \int_0^t \Delta T \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt' = \frac{a^2}{\tau_q} \sum_{i=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \Delta T \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt'. \quad (10)$$

Аппроксимация интеграла в (10) может производиться различными способами (обозначим $(\Delta T)_i = \Delta T(t_i)$).

1. С помощью квадратурной формулы трапеций:

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \Delta T \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt' &\approx \frac{\Delta t}{2} \left((\Delta T)_i \exp\left(-\frac{t-t_i}{\tau_q}\right) + (\Delta T)_{i+1} \exp\left(-\frac{t-t_{i+1}}{\tau_q}\right) \right) = \\ &= \frac{\Delta t}{2} \exp\left(-\frac{t-t_i}{\tau_q}\right) \left((\Delta T)_i + (\Delta T)_{i+1} \exp\left(\frac{\Delta t}{\tau_q}\right) \right). \end{aligned}$$

2. По аналогии с формулой (8), на каждом отдельном промежутке интегрирования можно представить ΔT в виде

$$\Delta T(t) = (\Delta T)_i + \left((\Delta T)_{i+1} - (\Delta T)_i \right) \frac{t-t_i}{t_{i+1}-t_i}, \quad t \in [t_i; t_{i+1}],$$

и вычислить интеграл в (10) непосредственно:

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} \Delta T \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_q}\right) dt' \approx E_i(\Delta T)_i + F_i(\Delta T)_{i+1},$$

где

$$\begin{aligned} E_i &= -\frac{1}{\tau_q} \exp\left(-\frac{t-t_i}{\tau_q}\right) + \frac{1}{\Delta t} \left(\exp\left(-\frac{t-t_{i+1}}{\tau_q}\right) - \exp\left(-\frac{t-t_i}{\tau_q}\right) \right), \\ F_i &= \frac{1}{\tau_q} \exp\left(-\frac{t-t_{i+1}}{\tau_q}\right) - \frac{1}{\Delta t} \left(\exp\left(-\frac{t-t_{i+1}}{\tau_q}\right) - \exp\left(-\frac{t-t_i}{\tau_q}\right) \right). \end{aligned}$$

Как и в случае уравнения, учитывающего запаздывание при аккумуляции теплоты, целесообразно учитывать явно последние k слагаемых в сумме в (10), а вклад первых слагаемых учитывать приближенно, заменяя $(\Delta T)_0, \dots, (\Delta T)_{n-k}$ на $(\Delta T)_{n-k}$ и вычисляя один интеграл для всего промежутка $(t_0; t_{n-k})$.

6. Математическая модель теплопроводности, учитывающая нелокальность по пространству

Уравнение теплопроводности. Распределение температуры в материале с нелокальностью по пространству описывается следующим уравнением [6, 17]:

$$\begin{aligned} \frac{\rho c}{A_{44}} \left(\gamma_1 \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \gamma_2 \int_V \varphi_T(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \frac{\partial T(\mathbf{x}', t)}{\partial t} dV(\mathbf{x}') \right) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{ij}^{(T)} \left(\gamma_1 \frac{\partial T}{\partial x_j} + \gamma_2 \int_V \varphi_1(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \int_V \varphi_2(|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'|) \frac{\partial T}{\partial x_j} dV(\mathbf{x}'') dV(\mathbf{x}') \right) \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь $\gamma_1, \gamma_2 \in [0; 1]$, $\gamma_1 + \gamma_2 = 1$, — коэффициенты учета различных процессов теплопроводности в теле, причем γ_1 — доля локального теплообмена (между соседними структурами материала), γ_2 — коэффициент учета влияния на определенную структуру материала всех остальных, в том числе и не являющихся соседними с ней (учет пространственной нелокальности); A_{44} — коэффициент учета влияния поверхностей раздела ($0 < A_{44} \leq 1$); $\varphi_T(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) = \varphi_T^0 \varphi_0(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)$; φ_T^0 — константа; $\varphi_0(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)$, $\varphi_1(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)$, $\varphi_2(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)$ — единичные функции влияния, такие, что

$$\int_{V'} \varphi_0(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) dV' = 1, \quad \int_{V'} \varphi_1(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) dV' = 1, \quad \int_{V'} \varphi_2(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) dV' = 1.$$

Функции влияния характеризуют степень взаимного влияния структурных элементов, образующих материал. В данном случае выберем функции влияния следующим образом (a — характерный размер структурного элемента):

$$\varphi_i(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) = \varphi(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) = \begin{cases} \frac{1}{a} \left(1 - \frac{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|}{a} \right), & |\mathbf{x}' - \mathbf{x}| < a; \\ 0, & |\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \geq a, \end{cases} \quad i = 0, 1, 2.$$

Аппроксимация уравнения. Как и ранее, будем рассматривать однородное изотропное тело, т.е. $\lambda_{ij}^{(T)} = \lambda^{(T)} \delta_{ij}$. Аппроксимация слагаемых с коэффициентом γ_1 в уравнении (11), соответствующих локальному уравнению теплопроводности, является общепринятой и не отличается от описанной в разд. 4. Для интегральных членов с коэффициентом γ_2 , учитывающих пространственную нелокальность материала, в соответствии с методом контрольных объемов перейдем к сумме по контрольным объемам V_k ($k = 1, \dots, m$):

$$\int_V \varphi_T(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \frac{\partial T(\mathbf{x}', t)}{\partial t} dV(\mathbf{x}') = \sum_{k=1}^m \int_{V_k} \varphi(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \frac{\partial T(\mathbf{x}', t)}{\partial t} dV(\mathbf{x}'), \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} \int_V \varphi(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) dV(\mathbf{x}') \int_V \varphi(|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'|) \frac{\partial T}{\partial x_j} dV(\mathbf{x}'') = \\ = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \frac{\partial}{\partial x_j} \int_{V_k} \varphi(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) dV(\mathbf{x}') \int_{V_l} \varphi(|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'|) \frac{\partial T}{\partial x_j} dV(\mathbf{x}''). \end{aligned} \quad (13)$$

Аппроксимация интегралов (12) и (13) представляет сложность в силу присутствия в подинтегральных функциях функции влияния φ . Примем следующие допущения относительно функций влияния для упрощения вычисления интегралов:

1) размер структурного элемента a значительно больше шага сетки, т.е. в пределах одной функции влияния находится достаточно много контрольных объемов;

2) Функция влияния считается постоянной в пределах каждого контрольного объема и равной значению φ в его центре.

Тогда суммы (12) и (13) можно вычислить следующим образом:

$$\sum_{k=1}^m \int_{V_k} \varphi(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \frac{\partial T(\mathbf{x}', t)}{\partial t} dV(\mathbf{x}') \approx \sum_{k=1}^m \varphi(|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}|) \frac{\partial T(\mathbf{x}_k)}{\partial t} V_k, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \frac{\partial}{\partial x_j} \int_{V_k} \varphi(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) dV(\mathbf{x}') \int_{V_l} \varphi(|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'|) \frac{\partial T}{\partial x_j} dV(\mathbf{x}'') \approx \\ \approx \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \varphi(|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}|) \varphi(|\mathbf{x}_l - \mathbf{x}|) \Delta T(\mathbf{x}_l) V_k V_l, \end{aligned} \quad (15)$$

где $\mathbf{x}_k$ и $\mathbf{x}_l$ — центры контрольных объемов V_k и V_l , соответственно.

Аппроксимация уравнения в одномерном случае. Рассмотрим случай одномерного стержня из материала с пространственной нелокальностью. Построим однородную сетку из контрольных объемов с шагом Δx . С учетом (14) и (15), обозначая $a^2 = \lambda^{(T)}/(\rho c)$, уравнение теплопроводности (11) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \gamma_1 \frac{\partial T(x)}{\partial t} + \gamma_2 \Delta x \sum_k \varphi(|x_k - x|) \frac{\partial T(x_k)}{\partial t} = \\ = a^2 \left(\gamma_1 \frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} + \gamma_2 (\Delta x)^2 \sum_k \sum_l \varphi(|x_k - x|) \varphi(|x_l - x_k|) \frac{\partial^2 T(x_l)}{\partial x^2} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Аппроксимация слагаемых с коэффициентом γ_1 , соответствующих параболическому уравнению теплопроводности, не отличается от общепринятой и осуществляется следующим образом:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \approx \frac{T - \check{T}}{\Delta t}, \quad \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} \approx \frac{T_{k+1} - 2T_k + T_{k-1}}{(\Delta x)^2}.$$

При решении классического локального уравнения теплопроводности ($\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 0$) такая аппроксимация приводит к построению трехдиагональной матрицы системы линейных алгебраических уравнений.

Можно предложить различные способы аппроксимации слагаемых с коэффициентом γ_2 , учитывающих пространственную нелокальность материала.

1. Явный метод:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(x_k, t)}{\partial t} \approx \frac{\check{\check{T}}_k - \check{T}_k}{\Delta t}, \quad k = 1, \dots, m; \quad \frac{\partial^2 T(x_l, t)}{\partial x^2} \approx \frac{\check{\check{T}}_{l+1} - 2\check{\check{T}}_l + \check{\check{T}}_{l-1}}{(\Delta x)^2}, \quad l = 1, \dots, m; \\ \check{\check{T}}_k = T_k(t - \Delta t), \quad \check{\check{T}}_k = T_k(t - 2\Delta t), \quad k = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

2. Явно- неявный метод:

$$\frac{\partial T(x_k, t)}{\partial t} \approx \begin{cases} \frac{T_k - \check{T}_k}{\Delta t}, & x_k = x_{-1}, x, x_{+1}; \\ \frac{\check{T}_k - \check{\check{T}}_k}{\Delta t}, & x_k \neq x_{-1}, x, x_{+1}; \end{cases} \quad \frac{\partial^2 T(x_l, t)}{\partial x^2} \approx \begin{cases} \frac{T_{l+1} - 2T_l + T_{l-1}}{(\Delta x)^2}, & x_l = x; \\ \frac{\check{T}_{l+1} - 2\check{T}_l + \check{T}_{l-1}}{(\Delta x)^2}, & x_l \neq x. \end{cases}$$

3. Неявный метод:

$$\frac{\partial T(x_k, t)}{\partial t} \approx \frac{T_k - \check{T}_k}{\Delta t}, \quad k = 1, \dots, m; \quad \frac{\partial^2 T(x_l, t)}{\partial x^2} \approx \frac{T_{l+1} - 2T_l + T_{l-1}}{(\Delta x)^2}, \quad l = 1, \dots, m.$$

В то время как при двух первых способах аппроксимации слагаемых, учитывающих пространственную нелокальность, матрица системы остается трехдиагональной, при использовании неявного метода структура матрицы становится более общей и требует иных методов решения системы.

7. Распараллеливание вычислений при использовании математических моделей с нелокальностью

При решении практических задач (двумерных и трехмерных) значительно увеличивается количество контрольных объемов и размер матрицы системы. Для ускорения процесса счета целесообразно применять многопроцессорные вычислительные системы. При этом важно выбрать эффективный алгоритм распараллеливания вычислений и обмена данными между вычислительными ядрами.

Математическая модель теплопроводности, учитывающая нелокальность по времени. Математическая модель с нелокальностью по времени не учитывает взаимного влияния структурных элементов, поэтому распараллеливание выполняется естественным образом с помощью декомпозиции расчетной области, решения уравнения теплопроводности и обмена данными на границах областей, принадлежащих различным вычислительным ядрам.

Математическая модель теплопроводности, учитывающая нелокальность по пространству. Уравнение теплопроводности с пространственной нелокальностью (11) предполагает, что температура в некоторой точке среды существенным образом зависит от температуры соседних точек. Вид зависимости и область влияния определяются видом функции влияния $\varphi(|x' - x|)$. Это необходимо учитывать при декомпозиции области. Возможны различные подходы к организации процесса параллельных вычислений.

1. Начальное распределение температуры в полном объеме рассылается на каждый вычислительный узел, который находит решение для выделенного ему набора контрольных объемов. После каждого шага происходит сборка решения и рассылка его всем вычислительным ядрам. Такой подход является простым в реализации, однако неоптимален в использовании памяти, а также приводит к большим временным затратам на обмен данными между вычислительными узлами.

2. Рассылка каждому вычислительному ядру значений температуры только в ограниченном наборе контрольных объемов, соседних с подобластью, выделенной ядру при декомпозиции расчетной области. Каждый вычислительный узел находит решение в выделенной ему части расчетной области, после чего между узлами происходит обмен только данными о дополнительных ячейках (для каждого узла). В таком случае значительно сокращаются расходы на пересылки данных как перед первым шагом, так и в процессе счета.

Заключение

Приведенные математические модели могут использоваться для моделирования поведения материалов с нелокальностью по времени или пространству. Рассмотренные математические модели образуют новый класс неклассических математических моделей, принципиально отличаясь от классических моделей теплопроводности и учитывая дополнительные скоростные эффекты и эффекты запаздывания. Предложенные алгоритмы реализации в пакете OpenFOAM описанных математических моделей делают возможным проведение вычислительного эксперимента с применением современной вычислительной техники, при использовании предложенных подходов распараллеливания вычислений. Благодаря выбору пакета OpenFOAM разработанные алгоритмы позволяют решать не только одномерные, но и двух- и трехмерные задачи.

Список литературы

1. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели термомеханики. М.: Физматлит, 2002. 168 с.
2. Кувыркин Г.Н. Термомеханика деформируемого твердого тела при высокоинтенсивном нагружении. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1993. 141 с.
3. Кунин И.А. Теория упругих сред с микроструктурой. Нелокальная теория упругости. М.: Наука, 1975. 416 с.
4. Nonlocal Continuum Field Theories / ed. by A.C. Eringen. New York: Springer-Verlag, 2002. 376 p. DOI: [10.1007/b97697](https://doi.org/10.1007/b97697)
5. Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Математическая модель теплопроводности новых конструкционных материалов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2010. № 3. С. 72–85.
6. Савельева И.Ю. Разработка неклассических математических моделей теплопроводности и их анализ: дисс. . . . канд. физ.-мат. наук. М., 2011. 101 с.
7. Савельева И.Ю. Моделирование процесса теплопроводности в нелокальных средах с учетом аккумуляции теплоты // Инженерный журнал: наука и инновации. 2012. № 4. Режим доступа: <http://engjournal.ru/catalog/mathmodel/hidden/173.html> (дата обращения 01.05.2015).

8. Кувыркин Г.Н. Термодинамический вывод гиперболического уравнения теплопроводности // Теплофизика высоких температур. 1987. Т. 25, № 1. С. 78–82.
9. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математическое моделирование термомеханических процессов при интенсивном тепловом воздействии // Теплофизика высоких температур. 2003. Т. 41, № 2. С. 300–309.
10. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Термомеханическая модель релаксирующего твердого тела при нестационарном нагружении // Доклады РАН. 1995. Т. 345, № 2. С. 193.
11. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Нелокальная математическая модель теплопроводности в твердых телах // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2011. № 3. С. 20–30.
12. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Y. Mathematical model of a nonlocal medium with internal state parameters // Journal of engineering physics and thermophysics. 2013. Vol. 86, no. 4. P. 820–826. DOI: [10.1007/s10891-013-0900-5](https://doi.org/10.1007/s10891-013-0900-5)
13. Кувыркин Г.Н., Панин С.Д., Цицин А.Г. Особенности численного решения задач нестационарной теплопроводности при высокоинтенсивном нагреве // Известия АН СССР. Энергетика и транспорт. 1988. № 5. С. 162–165.
14. Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Моделирование температурных полей в твердом теле при поверхностном нагреве // Тепловые процессы в технике. 2009. Т. 1, № 9. С. 375–378.
15. Tian H., Ju L., Du Q. Nonlocal convection-diffusion problems and finite element approximations // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2015. Vol. 289. P. 60–78. DOI: [10.1016/j.cma.2015.02.008](https://doi.org/10.1016/j.cma.2015.02.008)
16. Greenshields C.J. OpenFOAM User Guide. Version 2.4.0. OpenFOAM Foundation Ltd., 2015. Режим доступа: [http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a 4/UserGuide.pdf](http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a%204/UserGuide.pdf) (дата обращения 31.05.2015).
17. Кувыркин Г.Н. Математическая модель нелокальной термовязкоупругой среды. Ч. 2. Уравнение теплопроводности // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. 2013. № 2. С. 86–95.

Algorithms of the Numerical Analysis of Non-classical Thermomechanical Models

Popov A. Yu.^{1,*}

[*andreypopov@live.ru](mailto:andreypopov@live.ru)

¹Bauman Moscow State Technical University, Russia

Keywords: parallelism, the heat equation, non-classical models, nonlocal continuum mechanics

A certain range of physical and mechanical problems does not allow for the use of classical treatment. Theoretical forecasting of the properties of new types of constructional materials is one of such problems. Due to the micro- or nanostructure of such materials one has to use molecular dynamics or non-classical approaches. The continuous approximation method is one of the latter. It implies extension of the continuum mechanics methods onto the microscale level and establishing the connection between microscale and macroscale properties of the material. When considering heat transfer in a solid, this method allows to take into account such effects as the finite speed of heat propagation and delay in the accumulation of heat, i.e. time nonlocality. Spatial nonlocality leads to a completely different type of the heat transfer equation - integro-differential equation. Due to the lack of software implementation of these kinds of models, especially for 2-D and 3-D cases, this work's objective was development of the algorithms for the numerical analysis of non-classical heat transfer models for their subsequent implementation within the OpenFOAM software package.

Approximation of the integral of the temperature distribution or its time derivative over the whole period of time is the main problem in case of heat transfer equation with time nonlocality. In case of the equation with spatial nonlocality, development of the algorithm for numerical solution of the integro-differential heat transfer equation is required. Its most important terms account for the mutual impact of all the parts of material without any limits. Different means of these terms' approximation are offered.

Several approaches for parallelization of the algorithms are described for the purpose of speeding up the computational process. Parallelization is done in a natural way for the model with time nonlocality. For the model with spatial nonlocality, the outlined means of arrangement of the computational process and communication between the nodes take into account the specifics of the integro-differential heat transfer equation.

References

1. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. *Matematicheskie modeli termomekhaniki* [Mathematical models of thermomechanics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2002. 168 p. (in Russian).
2. Kuvyrkin G.N. *Termomekhanika deformiruemogo tverdogo tela pri vysokointensivnom nagruzhении* [Thermomechanics of a solid body under highly intensive load]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 1993. 141 p. (in Russian).
3. Kunin I.A. *Teoriya uprugikh sred s mikrostrukturoy. Nelokal'naya teoriya uprugosti* [Theory of elastic media with microstructure. Nonlocal elasticity theory]. Moscow, Nauka Publ., 1975. 416 p. (in Russian).
4. Eringen A.C., ed. *Nonlocal Continuum Field Theories*. New York, Springer-Verlag, 2002. 376 p. DOI: [10.1007/b97697](https://doi.org/10.1007/b97697)
5. Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Mathematical Model of Heat Conduction of New Structural Materials. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki = Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Ser. Natural science*, 2010, no. 3, pp. 72–85. (in Russian).
6. Savel'eva I.Y. *Razrabotka neklassicheskikh matematicheskikh modeley teploprovodnosti i ikh analiz. Kand. diss.* [Development and analysis of non-classical mathematical models of heat conductivity. Cand. diss.]. Moscow, Bauman MSTU, 2011. 101 p. (in Russian).
7. Savelyeva I.Yu. Simulation of Heat Conduction in Non-Local Media with Consideration for Heat Accumulation. *Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovatsii = Engineering Journal: Science and Innovation*, 2012, no. 4. Available at: <http://engjournal.ru/catalog/mathmodel/hidden/173.html>, accessed 01.05.2015. (in Russian).
8. Kuvyrkin G.N. Thermodynamic derivation of the hyperbolic heat-conduction equation. *Teplofizika vysokikh temperature*, 1987, vol. 25, no. 1, pp. 78–82. (English version of journal: *High Temperature*, 1987, vol. 25, iss. 1, pp. 68-73.).
9. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Mathematical modeling of thermomechanical processes under intense thermal effect. *Teplofizika vysokikh temperature*, 2003, vol. 41, no. 2, pp. 300-309. (English version of journal: *High Temperature*, 2003, vol. 41, iss. 2, pp. 257–265. DOI: [10.1023/A:1023390021091](https://doi.org/10.1023/A:1023390021091)).
10. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Thermomechanical model of a relaxing solid under transient load. *Doklady RAN*, 1995, vol. 345, no. 2, p. 193. (in Russian).
11. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Nonlocal Mathematical Model of Heat Conduction in Solids. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki = Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Ser. Natural science*, 2011, no. 3, pp. 20–30. (in Russian).

12. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Y. Mathematical model of a nonlocal medium with internal state parameters. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2013, vol. 86, no. 4, pp. 820–826. DOI: [10.1007/s10891-013-0900-5](https://doi.org/10.1007/s10891-013-0900-5)
13. Kuvyrkin G.N., Panin S.D., Tsitsin A.G. Specific features of numerical solution of transient heat conduction problems with highly intensive heating. *Izvestiya AN SSSR. Energetika i transport*, 1988, no. 5, pp. 162–165. (in Russian).
14. Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Simulation of Temperature Fields in the Solid Body at Surface Heating. *Teplovye protsessy v tekhnike = Thermal Processes in Engineering*, 2009, vol. 1, no. 9, pp. 375–378. (in Russian).
15. Tian H., Ju L., Du Q. Nonlocal convection-diffusion problems and finite element approximations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, vol. 289, pp. 60–78. DOI: [10.1016/j.cma.2015.02.008](https://doi.org/10.1016/j.cma.2015.02.008)
16. Greenshields C.J. *OpenFOAM User Guide. Version 2.4.0*. OpenFOAM Foundation Ltd., 2015. Available at: <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/UserGuide.pdf>, accessed 31.05.2015.
17. Kuvyrkin G.N. Mathematical Model of Nonlocal Thermal Viscoelastic Medium. Part 2. Heat Equation. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki = Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Ser. Natural science*, 2013, no. 2, pp. 86–95. (in Russian).