

УДК 51-72

Исследование математической модели теплопроводности для пространственно-нелокальной сплошной среды

Корчагова В.Н., студент

*Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,
кафедра «Прикладная математика»*

Научный руководитель: Марчевский И.К., к.ф.-м.н, доцент

Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана

iliamarchevsky@bmstu.ru

Введение

Многие современные материалы являются структурно-чувствительными: физические характеристики микроскопических элементов таких материалов подвержены влиянию окружающих элементов (т.е. имеет место так называемая нелокальность среды). Примером такого материала является сплошная среда с малоразмерными включениями.

Математические модели макроуровня к таким материалам, вообще говоря, неприменимы. Тем не менее, допустимо распространение методов механики сплошной среды, занимающейся изучением механического поведения материалов на макроуровне, на микроуровень. Такой прием распространения методов механики сплошной среды называют методом непрерывной аппроксимации, а область науки, в которой поведение материалов с микро- и наноструктурой изучается при использовании методов непрерывной аппроксимации, называют обобщенной механикой сплошной среды. Ключевым моментом в этом методе является установление связи между характеристиками микроуровня и макроуровня.

Метод непрерывной аппроксимации

С одной стороны, для определения температурного поля материала, который рассматривают как сплошную среду, используют «макроскопические» функции состояния:

- абсолютную температуру $T(x, t)$;
- массовую плотность энтропии $h(x, t)$;
- массовую плотность свободной энергии $A(x, t)$;
- вектор плотности теплового потока $\mathbf{q}$, имеющий одну ненулевую компоненту $q_x = q$ в одномерном случае.

С другой стороны, процессы, протекающие на микроуровне, описывают с помощью внутренних параметров состояния [1]. Эти процессы связывают с фононным механизмом теплопроводности в материале [4].

В сплошной среде с малоразмерными включениями будут существовать свободные поверхности. Частицы (фононы) на таких поверхностях имеют возможность совершать колебания с большей частотой, вследствие чего температура повышается. Такие локальные повышения температуры учитывает скалярный параметр $\Phi(x, t)$. Также между свободными поверхностями происходят локальные процессы переноса энергии, которые описывает векторный параметр χ , в одномерном случае имеющий только одну ненулевую компоненту $\chi_x = \chi$.

В дальнейшем будем рассматривать процессы, близкие к равновесным. Это позволяет записать в линейном приближении кинетические уравнения, описывающие изменения внутренних параметров состояния во времени [4]:

$$\begin{aligned}\tau_T \dot{\Phi} + A_{44} \Phi &= \bar{\Phi}; \\ \tau_q \dot{\chi} + A_{xx} \chi &= \bar{\chi},\end{aligned}\tag{1}$$

где $\bar{\Phi}$, $\bar{\chi}$ — равновесные значения соответствующих переменных микроуровня, τ_T и τ_q — времена релаксации соответствующих параметров, A_{xx} и A_{44} — коэффициенты, характеризующие влияние поверхностей раздела по пространству и времени.

Отметим, что при $\tau_T \neq 0$ проявляется эффект аккумуляции теплоты, а ненулевая величина τ_q позволяет учесть конечную скорость распространения теплоты. В данной работе нет необходимости учитывать эти эффекты, поэтому примем $\tau_T = 0$ и $\tau_q = 0$.

Метод непрерывной аппроксимации заключается в учете интегральной связи микро- и макроскопических параметров состояния. Похожие соотношения, но для задач упругости, были использованы в работе [5].

Итак, в одномерном случае компонента q вектора плотности теплового потока имеет следующий вид:

$$q = -\gamma_1 \lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} + \gamma_2 \int_0^L \varphi_x(|x' - x|) \chi(x', t) dx'.\tag{2}$$

Здесь φ_x — функция, описывающая взаимное влияние частиц стержня в пределах некоторой области $(x - a; x + a) \cap [0; L]$ и принимающая ненулевые значения только

при $|x' - x| \leq a$; a — характерный размер области влияния; L — длина стержня; λ — теплопроводность стержня. Константы $\gamma_1 \in [0,1]$ и $\gamma_2 \in [0,1]$, такие, что $\gamma_1 + \gamma_2 = 1$, имеют смысл долей учета процессов теплопроводности между соседними частицами стержня и влияния друг на друга частиц стержня, не являющихся соседними.

Равновесные значения переменных микроуровня положим такими:

$$\begin{aligned}\bar{\Phi}(x, t) &= \gamma_1 T(x, t) + \gamma_2 \int_0^L \varphi_T(|x' - x|) T(x', t) dx', \\ \bar{\chi}(x, t) &= - \int_0^L Z_x(|x' - x|) \frac{\partial T(x', t)}{\partial x'} dx',\end{aligned}\quad (3)$$

где функции φ_T и Z_x имеют тот же смысл, что и φ_x .

Получение математической модели

Решив уравнения (1) с учетом (3), получим

$$\begin{aligned}\Phi(x, t) &= \frac{1}{A_{44}} \left(\gamma_1 T(x, t) + \gamma_2 \int_0^L \varphi_T(|x' - x|) T(x', t) dx' \right), \\ \chi(x, t) &= - \int_0^L Y_x(|x' - x|) \frac{\partial T(x', t)}{\partial x'} dx',\end{aligned}\quad (4)$$

где $Y_x(|x' - x|) = \frac{1}{A_{xx}} Z_x(|x' - x|)$.

Уравнение теплопроводности, описывающее процессы распространения теплоты в сплошной среде, может быть получено из соотношений рациональной термодинамики необратимых процессов для среды с параметрами термодинамического состояния [1]. Без учета диссипации энергии и без источников энерговыделения это уравнение в одномерном случае выглядит так:

$$\rho T \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0. \quad (5)$$

В дальнейшем будем рассматривать сравнительно небольшие отклонения температуры от естественного состояния. В таком случае можно принять

$$A(T, \Phi) = (T - T_e) \cdot A_T^0(\Phi),$$

где T_e — температура в естественном состоянии.

По определению,

$$h = - \frac{\partial A}{\partial T}.$$

Тогда с учетом (2), (4), (5) получим уравнение

$$\begin{aligned} & \rho c \left(\gamma_1 \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \frac{\gamma_2}{A_{44}} \int_0^L \varphi_T(|x' - x|) \frac{\partial T(x', t)}{\partial t} dx' \right) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma_1 \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} + \gamma_2 \int_0^L \varphi_x(|x' - x|) \int_0^L Y_{xx}(|x' - x''|) \frac{\partial T(x'', t)}{\partial x''} dx'' dx' \right), \end{aligned}$$

позволяющее рассматривать процесс теплопроводности на макроуровне с учетом процессов, проходящих на микроуровне. Здесь ρ — плотность материала, c — удельная массовая теплоемкость.

Будем считать, что

$$\begin{aligned} \varphi_T(|x' - x|) &= \varphi_T^0 \cdot \varphi(|x' - x|), & \varphi_x(|x' - x|) &= \varphi_x^0 \cdot \varphi(|x' - x|), \\ Y_{xx}(|x' - x|) &= Y_{xx}^0 \cdot \varphi(|x' - x|), \end{aligned}$$

где $\varphi_T^0, \varphi_x^0, Y_{xx}^0$ — константы, а функция $\varphi(|x' - x|)$ — единичная функция влияния, такая, что

$$\int_{x-a}^{x+a} \varphi(|x' - x|) dx' = 1.$$

К примеру, функция φ может иметь следующий вид (рис. 1), который будет использован в дальнейших расчетах:

$$\varphi(|x' - x|) = \begin{cases} \frac{1}{a} \left(1 - \frac{|x' - x|}{a} \right), & |x' - x| < a, \\ 0, & |x' - x| \geq a. \end{cases} \quad (6)$$

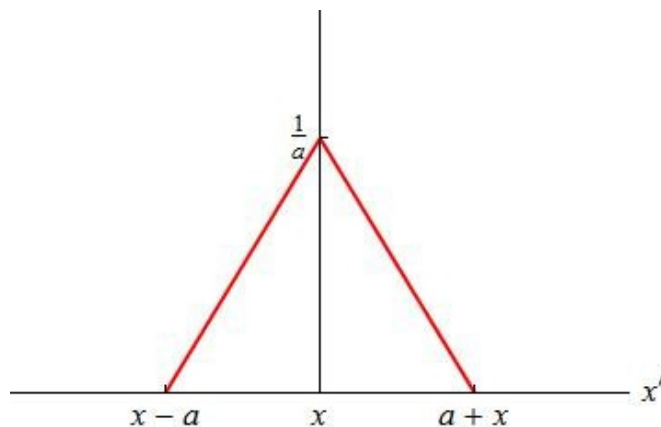


Рис. 1. Пример функции влияния.

Тогда окончательно получим следующее интегро-дифференциальное уравнение теплопроводности [4]:

$$\begin{aligned} \frac{\rho c}{A_{44}} \left(\gamma_1 \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \gamma_2 \int_0^L \varphi(|x' - x|) \frac{\partial T(x', t)}{\partial t} dx' \right) = \\ = \lambda \frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma_1 \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right. \\ \left. + \gamma_2 \int_0^L \varphi(|x' - x|) \int_0^L \varphi(|x' - x''|) \frac{\partial T(x'', t)}{\partial x''} dx'' dx' \right), \end{aligned} \quad (7)$$

где было принято соотношение $\lambda = \varphi_x^0 Y_{xx}^0 / \varphi_T^0$.

Начальные и граничные условия (заданного теплового потока) для уравнения (7) выглядят так:

$$\begin{aligned} T(x, 0) &= T_0(x); \\ x = 0: & -\lambda \left(\gamma_1 \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right. \\ & \left. + \gamma_2 \int_0^L \varphi(|x' - x|) \int_0^L \varphi(|x' - x''|) \frac{\partial T(x'', t)}{\partial x''} dx'' dx' \right) \\ &= q_l; \\ x = L: & \lambda \left(\gamma_1 \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right. \\ & \left. + \gamma_2 \int_0^L \varphi(|x' - x|) \int_0^L \varphi(|x' - x''|) \frac{\partial T(x'', t)}{\partial x''} dx'' dx' \right) = q_r. \end{aligned} \quad (8)$$

Отметим, что при $\varphi(|x' - x|) = \delta(|x' - x|)$ будет получена классическая математическая модель теплопроводности с параболическим уравнением и граничными условиями II рода.

Конечно-элементное представление модели

Для расчета температурного поля, подчиняющегося модели (7)-(8), используем метод конечных элементов [2]. Компоненты системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$[C]\{\dot{T}\} + [K]\{T\} = \{F\}, \quad (9)$$

аппроксимирующей поставленную краевую задачу, рассчитываются методом Бубнова – Галеркина:

$$\int_0^L [N]^T R dx = 0,$$

где R — невязка уравнения (7).

Компоненты вектора правой части имеют вид

$$F_0 = q_l; \quad F_n = q_r; \quad F_p = 0, \quad p \in [1, n-1].$$

Матрицы $[C]$ и $[K]$ можно представить в следующем виде:

$$[C] = \gamma_1 [C^{par}] + \gamma_2 [C^{unl}], \quad [K] = \gamma_1 [K^{par}] + \gamma_2 [K^{unl}],$$

где вклад в матрицы $[C^{par}]$ и $[K^{par}]$ дают слагаемые уравнения (7), учитывающие процесс «обычной» теплопроводности, а матрицы $[C^{unl}]$ и $[K^{unl}]$, в свою очередь, будут получены с учетом интегральных слагаемых.

Расчет матриц $[C^{par}]$ и $[K^{par}]$ является традиционной задачей, с помощью которой обычно иллюстрируют применение метода конечных элементов [2], и не представляет проблем. Основную трудность представляет расчет матриц $[C^{unl}]$ и $[K^{unl}]$. Их компоненты имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} C_{pq}^{unl} &= \frac{\rho c}{A_{44}} \int_0^L N_p(x) dx \int_0^L \varphi(|x-x'|) N_q(x') dx'; \\ K_{pq}^{unl} &= \lambda \int_0^L \frac{dN_p(x)}{dx} dx \int_0^L \varphi(|x-x'|) dx' \int_0^L \varphi(|x''-x'|) \frac{dN_q(x'')}{dx''} dx'' \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $N_p(x)$, $p = 0 \dots n$ — кусочно-линейная функция формы, относящаяся к p -му узлу сетки, наложенной на стержень, n — число конечных элементов.

Из-за наличия пространственной нелокальности затруднительно выделить элементные матрицы, из которых в дальнейшем идет «сборка» матриц $[C^{unl}]$ и $[K^{unl}]$. В одномерном случае предпочтительно рассчитывать матрицы целиком, без выделения элементных матриц.

Кроме того, прямой программный расчет элементов $[C^{unl}]$ и $[K^{unl}]$ по неупрощенным формулам (10) ресурсоёмок и сложен. Для успешного разрешения этой проблемы будем использовать такую конечно-элементную сетку, что в пределах одной функции влияния (6) лежит достаточно много конечных элементов (см. рис. 2).

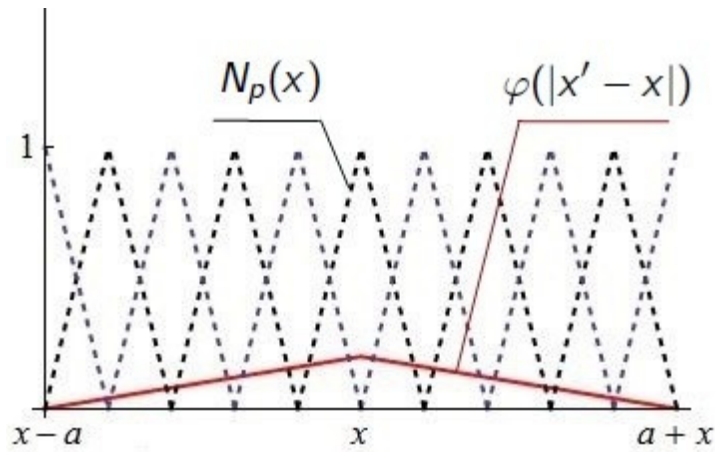


Рис. 2. Пример взаимного расположения функции влияния и функций формы.

При таком допущении функция влияния может быть аппроксимирована кусочно-постоянной функцией, принимающей постоянное значение на каждом конечном элементе, равное значению функции φ в центре конечного элемента (рис.3).

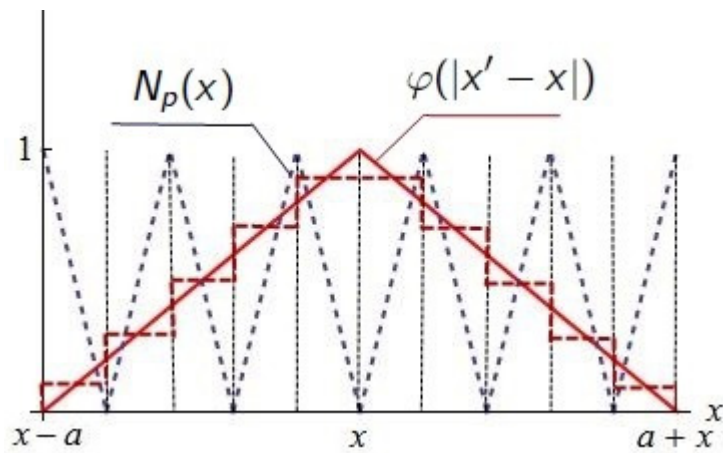


Рис. 3. Пример аппроксимации функции влияния кусочно-постоянной функцией.

Это позволяет вынести функцию влияния из-под интегралов в выражениях (10), а оставшиеся интегралы от функций формы легко вычислить аналитически. Используя кусочно-линейные функции формы, получим такие соотношения:

$$C_{pq} = \frac{\rho c}{A_{44}} \frac{h^2}{4} [\varphi(|x_{p-1} - x_{q-1}|) + \varphi(|x_p - x_{q-1}|) + \varphi(|x_{p-1} - x_q|) + \varphi(|x_p - x_q|)]; \quad (11)$$

$$K_{pq} = \lambda \left[\int_0^L \varphi(|x_{p-1} - x'|) \varphi(|x' - x_{q-1}|) dx' - \int_0^L \varphi(|x_p - x'|) \varphi(|x' - x_{q-1}|) dx' - \right. \quad (12)$$

$$\begin{aligned}
& - \int_0^L \varphi(|x_{p-1} - x'|) \varphi(|x' - x_q|) dx' \\
& + \int_0^L \varphi(|x_p - x'|) \varphi(|x' - x_q|) dx' \Big].
\end{aligned}$$

Полученные соотношения, несмотря на их достаточно громоздкий вид, легко использовать при написании программы, реализующей вычислительную процедуру. Интегралы в выражении (12) могут быть легко рассчитаны с использованием квадратурных формул.

При использовании соотношений (11), (12) матрицы $[C^{unl}]$ и $[K^{unl}]$ имеют ленточный вид, причем размер ленты матрицы $[C^{unl}]$ пропорционален количеству конечных элементов, уместяющихся на отрезке длиной a , а матрицы $[K^{unl}]$ — количеству элементов, уместяющихся на отрезке длиной $2a$.

Вычислительный эксперимент и анализ полученных результатов

Рассмотрим тестовую задачу об остывании стержня длиной $L = 10$ из структурно-чувствительного материала, на обоих концах которого задано граничное условие I рода, а начальное распределение температуры известно (рис.4). Примем $\lambda = \rho = c = A_{44} = 1$.

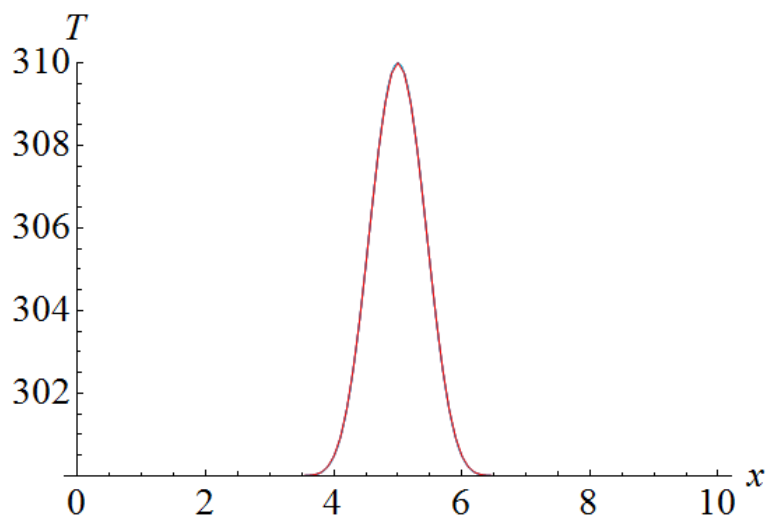


Рис. 4. Пример начального распределения температуры в стержне.

Распределение температуры в стержне описывается уравнением теплопроводности (7) со следующими граничными и начальными условиями:

$$T(x, 0) = \begin{cases} T_0, & x \in (0, 0.25L); \\ T_0 + L * \exp\left(\frac{L^2}{(x - 0.25L)(x - 0.75L)} + (4L)^2\right); & x \in (0.25L, 0.75L); \\ T_0, & x \in (0.75L, L); \end{cases}$$

$$T(0, t) = T(0, L) = T_0 = 300.$$

Результаты численного решения тестовой задачи методом конечных элементов с использованием приближенных соотношений (11), (12) приведены на рис.5, ба-6е. Расчеты были проведены при $h = 0.01$, $\tau = 0.1$, где h и τ — шаги по пространству и времени соответственно. Были выявлены следующие особенности.

При уменьшении размаха функции влияния решение тестовой задачи стремится к температурному профилю, получаемому при рассмотрении классической математической модели для той же задачи, что подтверждает теорию.

Взаимное влияние элементов стержня друг на друга приводит к замедлению распространения тепла в стержне.

Необходимо решить вопрос об уменьшении времени работы программы и затрат памяти. Главным образом время счета меняется за счет выбора итерационного метода СЛАУ, получаемой из (9) с помощью двухслойной разностной схемы по времени. Так, в настоящей работе был использован метод BiCGStab с iLU-предобуславливателем [6], который дает сходимость решения СЛАУ за 1-2 итерации (против 20-30 при использовании обычного BiCGStab). Для уменьшения количества используемой при счете памяти можно использовать специальный CSR-формат хранения разреженных матриц.

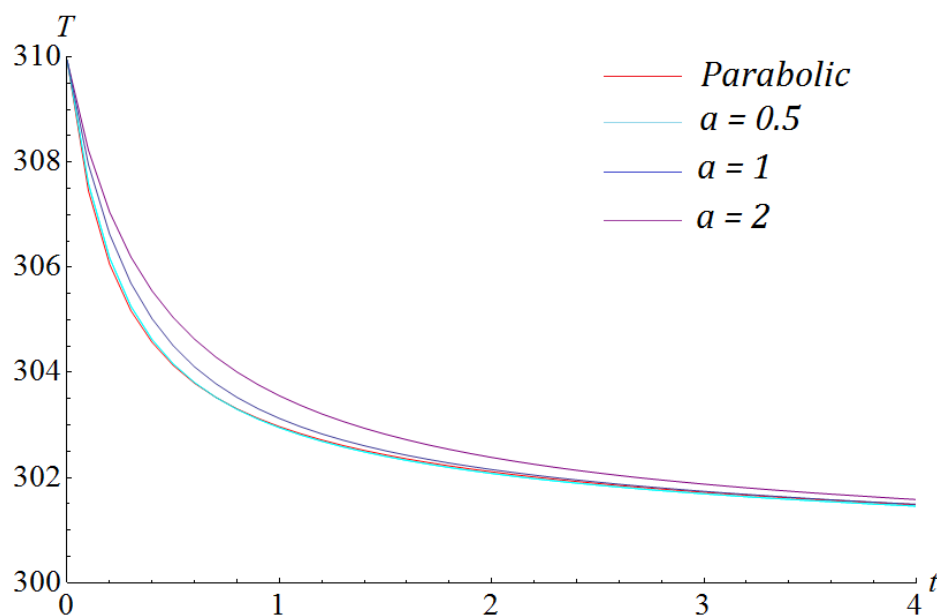


Рис. 5. Изменение температуры в середине стержня во времени

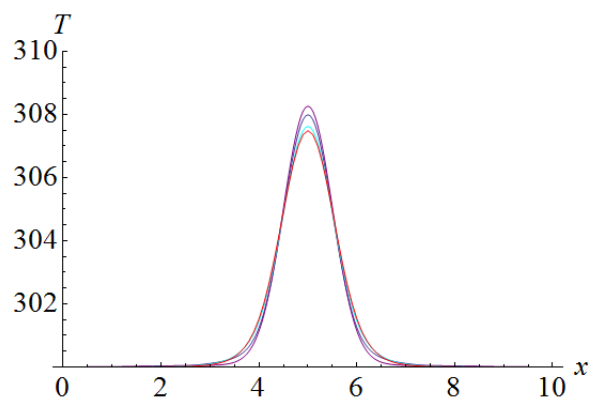


Рис. 6а. $t = 0.1$

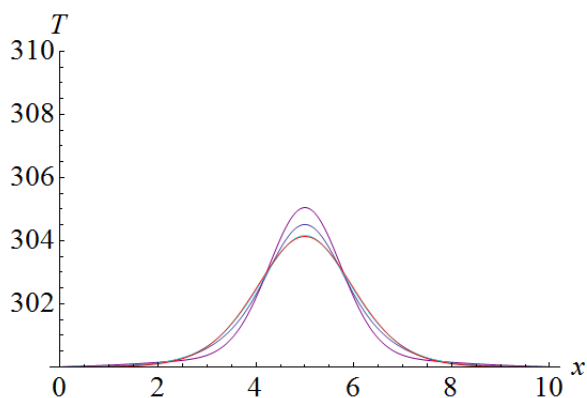


Рис. 6б. $t = 0.5$

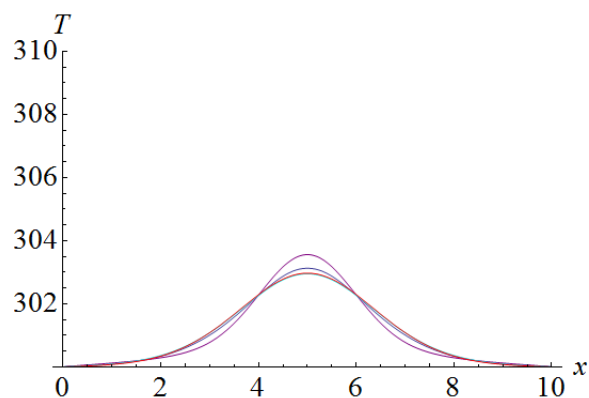


Рис. 6в. $t = 1$

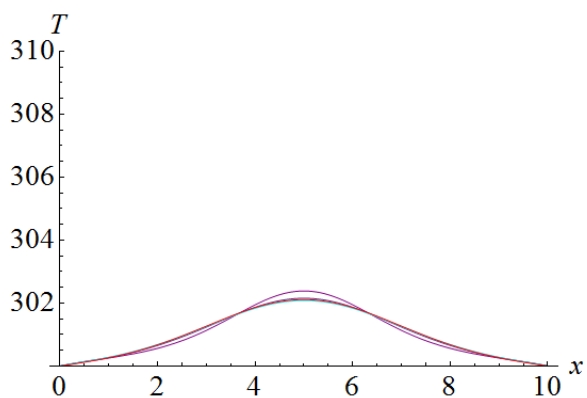


Рис. 6г. $t = 2$

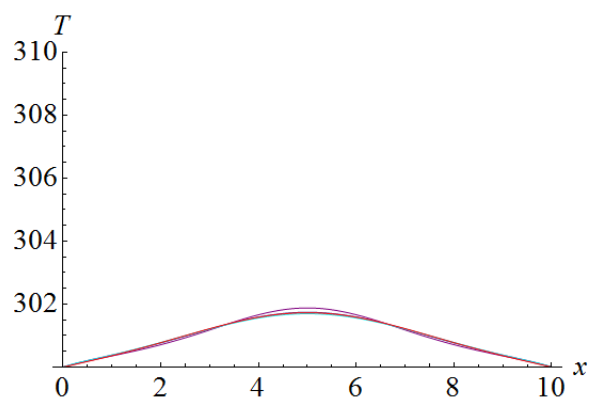


Рис. 6д. $t = 3$

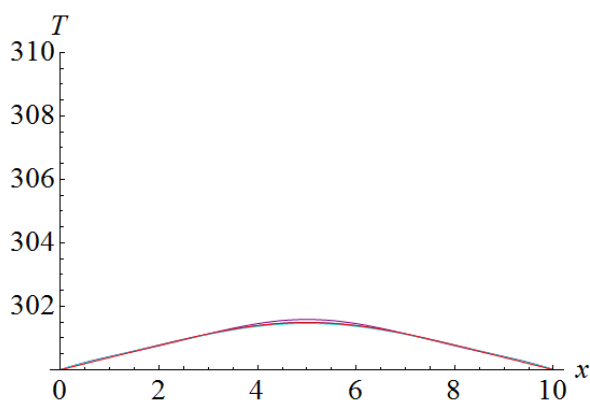


Рис. 6е. $t = 4$

Рис. 6а-6д. Распределение температуры в стержне в момент времени t

Список литературы

- 1) Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 511 с.
- 2) Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. М.: Мир, 1975. 541 с.
- 3) Кувыркин Г.Н. Термомеханика деформируемого твердого тела при высокоинтенсивном нагружении. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1993. 141 с.

- 4) Савельева И.Ю. Разработка неклассических математических моделей теплопроводности и их анализ: дисс. ... канд. физ.-мат. наук. М., 2011. 101 с.
- 5) Pisano A.A., Sofi A., Fuschi A. Nonlocal integral elasticity: 2D finite element based solutions // International Journal of Solids and Structures. 2009. № 46. P. 3836-3849.
- 6) Марчевский И.К., Пузикова В.В. Анализ эффективности итерационных методов решения систем линейных алгебраических уравнений, реализованных в пакете OpenFOAM // Труды Института системного программирования РАН. 2013. Т 24. С. 71-86.