

ВАРИАЦИОННАЯ ФОРМУЛИРОВКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА СТАЦИОНАРНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ С УЧЕТОМ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕЛОКАЛЬНОСТИ

И.Ю. Савельева

inga.savelyeva@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Важным этапом в создании и использовании новых структурно-чувствительных материалов является построение математических моделей, позволяющих описать их поведение в широком диапазоне изменения внешних воздействий. Моделирование нелокальных сред представляет собой класс методов обобщенной механики сплошной среды. Возможности анализа математических моделей непрерывной среды могут быть расширены вследствие применения вариационных методов. Описано построение функционала для задачи стационарной теплопроводности в однородном теле с учетом эффектов нелокальности и независящего от температуры коэффициента теплопроводности. Использование вариационной формулировки в случае линейной задачи в сочетании с приемлемыми допустимыми функциями позволило количественно оценить влияние этого эффекта. Приведен пример использования предложенной вариационной формулировки, учитывающей влияние пространственной нелокальности процесса стационарной теплопроводности на параметры, которые определяют известное явление теплового взрыва при экспоненциальной зависимости от температуры объемной мощности тепловыделения в пластине. Количественный анализ выполнен для двух вариантов функции, допустимой для построенного интегрального функционала и описывающей возможное распределение температуры по толщине рассматриваемой пластины. Сравнение полученных результатов позволяет отдать предпочтение той допустимой функции, использование которой приводит к меньшему отличию максимального значения параметра, характеризующего

Ключевые слова

Математическая модель, нелокальность, вариационная формулировка, функционал, нелинейность

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (проект № 0705-2020-0047)

Введение. Создание новых перспективных структурно-чувствительных материалов требует разработки новых математических моделей термомеханики. Теоретическое и экспериментальное изучение таких материалов показало определяющее влияние наноразмерных неоднородностей среды на физические свойства объемного образца. Например, в [1] описаны экспериментальные исследования температурного поля на границах раздела зерен металлов, изменения теплопроводности в таких окрестностях и локализация градиентов температуры вблизи границ. Подобные явления наблюдались при молекулярно-динамическом моделировании теплопереноса в нанопроволоках, объемных и тонкопленочных материалах с наноразмерными включениями. Наличие термостатированных областей включает в себя фонон-фононное рассеяние, которое изменяет свойство теплопроводности материалов [2, 3].

Построение математических моделей, позволяющих описать поведение новых структурно-чувствительных материалов в широком диапазоне изменения внешних воздействий, — важный этап в их создании и использовании. В настоящее время методы теоретического моделирования материалов со сложной внутренней структурой разделяют в зависимости от масштабы длины: 1) атомарный масштаб (квантово-механические подходы, методы молекулярной динамики и модели Монте-Карло); 2) мезомасштаб (теории эффективных свойств); 3) макромасштаб (методы обобщенной механики сплошной среды).

Моделирование нелокальных сред представляет собой класс методов обобщенной механики сплошной среды [4, 5]. Ключевым моментом является установление связи между характеристиками микро-(нано-) и макроуровня, позволяющей учесть пространственную и временную нелокальности среды. Результаты исследования влияния эффекта пространственной нелокальности на поле температуры в случае нестационарных процессов для одномерных задач приведены в [6–9].

Возможности анализа математических моделей непрерывной среды могут быть расширены вследствие применения вариационных методов [10, 11]. Так, один из путей получения количественных оценок сочетания значений определяющих параметров, при котором наступает предшествующее

тепловому взрыву предельное состояние, связан с применением вариационной формулировки соответствующей нелинейной задачи стационарной теплопроводности в твердом теле [12, 13]. Эта формулировка включает в себя функционал, из анализа стационарных точек которого можно установить условия возникновения теплового взрыва. Сравнение полученных результатов позволяет отдать предпочтение той допустимой функции, использование которой приводит к меньшему экстремальному значению.

Постановка задачи. Формулировка нелинейной задачи стационарной теплопроводности в случае однородной среды с независимым от температуры коэффициентом теплопроводности λ включает в себя дифференциальное уравнение [7]:

$$\nabla \cdot (p_1 \nabla T(M) + p_2 \nabla T^*(M)) + q_V(M, T(M)) / \lambda = 0, \quad M \in V, \quad (1)$$

с граничными условиями

$$T(P) = f_T(P), \quad P \in S_T, \quad (2)$$

$$\nabla (p_1 T(P) + p_2 T^*(P)) \cdot \mathbf{n}(P) - f_q(P, T(P)) / \lambda = 0, \quad P \in S_q = S \setminus S_T, \quad (3)$$

где $p_1, p_2 \in [0, 1]$ — доли влияния пространственных локальных и нелокальных эффектов при переносе тепловой энергии ($p_1 + p_2 = 1$); $T(M)$ — температура в точке $M \in \bar{V} = V \cup S$ замкнутой области \bar{V} с поверхностью S , ограничивающей открытую область V ; q_V — объемная мощность тепловыделения в материале тела; $f_T(P)$, $f_q(P, T(P))$ — заданные функции своих аргументов на соответствующих участках поверхности S ; ∇ — векторный дифференциальный оператор Гамильтона; \mathbf{n} — единичный вектор внешней нормали к поверхности S ;

$$\nabla T^*(M) = \int_V \varphi(M, M') \nabla T(M') dV'(M'), \quad M \in \bar{V}, \quad M' \in V'. \quad (4)$$

Здесь $\varphi(M, M')$ — функция влияния, определяющая пространственную нелокальность процесса переноса тепловой энергии, причем $\int_V \varphi(M, M') dV' = 1$. Условное векторное поле $\nabla T^*(M)$ в окрестности точки $M \in \bar{V}$ возникает в силу проявления эффекта нелокальности. Это поле можно интерпретировать как векторное поле, определяемое градиентом скалярного поля, который описывает локальное возмущение температуры в некоторой окрестности $V'(M') \subseteq \bar{V}'$ точки $M' \in \bar{V}'$, обусловленное свойством нелокальности процесса переноса тепловой энергии в рассматриваемой области \bar{V} .

Обзор функций влияния. Вид используемой в основных соотношениях функции $\varphi(M, M')$ может быть следующим [5]:

$$1) \quad \varphi(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) = \frac{1}{\pi^3} \prod_{i=1}^3 \frac{1}{x'_i - x_i} \sin \frac{\pi(x'_i - x_i)}{a} \quad \text{при } (|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \leq a;$$

$$2) \quad \varphi(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) = \begin{cases} \frac{n+1}{2na^n} \left(1 - \frac{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^n}{a^n}\right) & \text{при } |\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \leq a, \\ 0 & \text{при } |\mathbf{x}' - \mathbf{x}| > a; \end{cases}$$

$$3) \quad \varphi(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) = \frac{1}{\sqrt{\pi^n}} \left(\frac{k}{l}\right)^n \exp\left(-\frac{k^2}{l^2} |\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^2\right).$$

Здесь \mathbf{x}, \mathbf{x}' — радиус-векторы точек M и M' ; $k = \text{const}$; l — характерный размер; n — размерность задачи. В работе функцию влияния выберем как в п. 2 при $n=1$.

Построение функционала. Один из путей построения вариационной формулировки поставленной задачи в виде интегрального функционала [10, 11, 13] состоит в умножении уравнения (1) на вариацию $\delta T(M)$, $M \in V$, интегрировании этого произведения по области V и вычитании полученного результата из интеграла по участкам S_q поверхности S произведения равенства (3) и множителя $\delta T(P)$, $P \in S_q$. Результатом такой операции будет равенство (аргументы функций опущены)

$$\int_{S_q} \left((p_1 \nabla T - p_2 \nabla T^*) \mathbf{n} - \frac{f_q}{\lambda} \right) \delta T dS - \int_V \left(\nabla \cdot (p_1 \nabla T - p_2 \nabla T^*) + \frac{q_V}{\lambda} \right) \delta T dV = 0. \quad (5)$$

Использование первой формулы Грина [14] в виде

$$\int_V \nabla^2 T \delta T dV = \int_S \mathbf{n} \cdot \nabla T \delta T dS - \int_V \nabla T \cdot \nabla \delta T dV$$

позволяет преобразовать второй интеграл в левой части соотношения (5) и с учетом равенства нулю вариации δT для заданных равенством (2) фиксированных значений температуры на участках S_T поверхности S записать

$$\delta \int_V \left(\frac{p_1}{2} (\nabla T)^2 - p_2 \int_{T_*}^T (\nabla^2 T^*) dT - \int_{T_*}^T \frac{q_V}{\lambda} dT \right) dV + \delta \int_{S_q} dS \int_{T_*}^T \left(p_2 \mathbf{n} \cdot \nabla T^* - \frac{f_q}{\lambda} \right) dT = 0,$$

где T_* — нижняя грань множества возможных значений температуры в области \bar{V} . Это равенство является условием $\delta J[T, \delta T] = 0$ стационарности функционала

$$J[T] = \int_V \left(\frac{p_1}{2} (\nabla T)^2 - p_2 \int_{T_*}^T (\nabla^2 T^*) dT - \int_{T_*}^T \frac{q_V}{\lambda} dT \right) dV + \int_{S_q} dS \int_{T_*}^T \left(p_2 \mathbf{n} \cdot \nabla T^* - \frac{f_q}{\lambda} \right) dT. \quad (6)$$

В рассматриваемом случае равенство (2) играет роль дополнительного условия, накладывающего некоторые ограничения на выбор допустимых для функционала (6) функций $T(M)$, $M \in \bar{V}$.

Функционал (6) допустимо рассматривать на множестве непрерывных в области V и кусочно-дифференцируемых в ней функций $T(M)$, $M \in \bar{V}$, принимающих на участках S_T поверхности S значения, определяемые граничным условием (2). Из процедуры вывода этого функционала следует, что функции $T(M)$, $M \in \bar{V} = V \cup S$, удовлетворяющие соотношениям (1) и (3), являются его стационарными точками. Допустимая функция может содержать параметры, определяемые из условия стационарности функционала (6).

Пример применения вариационной формулировки к линейной задаче. Пусть в неограниченной в своей плоскости пластине толщиной h действуют внутренние источники тепловыделения, объемная мощность которых линейно зависит от температуры с коэффициентом пропорциональности q_V° и имеет постоянную составляющую $q_V^* = q_V^\circ$. Одна из поверхностей пластины идеально теплоизолирована, а на ее другой поверхности задана температура T_h . Без учета эффекта нелокальности для такой пластины несложно получить точное аналитическое решение задачи стационарной теплопроводности в виде

$$\Theta(\xi) = \frac{\cos G\xi}{\cos G} - 1, \quad (7)$$

где $\Theta = T/T_h - 1$; $\xi = x/h$ (отсчет координаты x принят от идеально теплоизолированной поверхности пластины по нормали к этой поверхности); $G^2 = q_V^\circ h^2 / (\lambda T_h) < \pi^2/4$. Графики функции $\Theta(\xi)$ при нескольких значениях параметра G приведены на рис. 1. Для сравнения представлены графики парабол $\Theta_1(\xi) = B_1(1 - \xi^2)$ с соответствующими коэффициентами $B_1 = 1/\cos G - 1$. Следует отметить, что графики косинусоид $\Theta_2(\xi) =$

$= B_2 \cos(\pi\xi/2)$ при $B_2 = B_1$ практически совпадают с графиками функции $\Theta(\xi)$, определяемой формулой (7), и поэтому на рис. 1 не показаны.

При использованных для рассматриваемой пластины обозначениях соотношение (6) примет вид характерного для линейной задачи квадратичного функционала

$$J[\Theta] = \int_0^1 \left(\frac{p_1}{2} \left(\frac{d\Theta(\xi)}{d\xi} \right)^2 - p_2 \int_0^{\Theta(\xi)} \frac{d^2\Theta^*(\xi)}{d\xi^2} d\Theta - G^2\Theta \left(\frac{\Theta}{2} + 1 \right) \right) d\xi + p_2 \int_0^{\Theta(0)} \frac{d\Theta^*(\xi)}{d\xi} d\Theta. \quad (8)$$

По формуле (8) без учета эффекта нелокальности ($p_1 = 1$) построены зависимости этого функционала от коэффициентов B_1 и B_2 при выборе в качестве допустимых функций $\Theta_1(\xi)$ и $\Theta_2(\xi)$ (рис. 2). Единственной стационарной точке квадратичного функционала соответствует его минимум при определенном значении коэффициентов B_1 и B_2 в использованных допустимых функциях. Для четырех принятых выше значений параметра G в таблице приведены значения абсцисс B_1^* и B_2^* минимумов функционалов $J[\Theta_1]$ и $J[\Theta_2]$. Для сравнения представлены значения $B^* = 1/\cos G - 1$, равные абсциссам минимума функционала $J[\Theta]$ при подстановке в него точного решения (7) рассматриваемой линейной задачи.

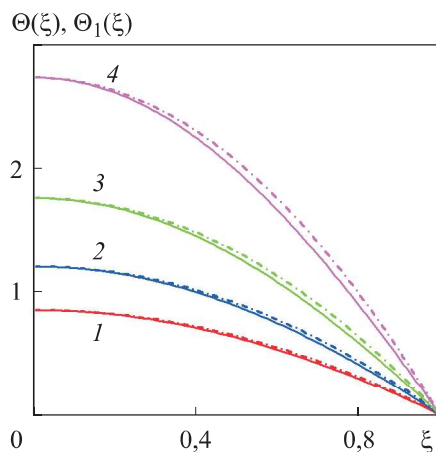


Рис. 1. Графики функции $\Theta(\xi)$ и $\Theta_1(\xi)$ при $G = 1,0$ (1), 1,1 (2), 1,2 (3) и 1,3 (4)

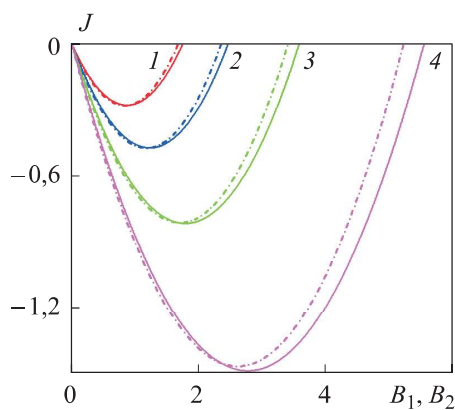


Рис. 2. Зависимости функционала (8) при $p_2 = 0$ от коэффициентов B_1 (штрихпунктирные) и B_2 (сплошные) при $G = 1,0$ (1), 1,1 (2), 1,2 (3) и 1,3 (4)

**Сравнение значений B_1^* , B_2^* , B^* при различных значениях
допустимых функций**

Коэффициент	G			
	1,0	1,1	1,2	1,3
B_1^*	0,8341	1,1745	1,6923	2,6042
B_2^*	0,8687	1,2225	1,7882	2,7604
B^*	0,8508	1,2046	1,7597	2,7383

Согласно представленным в таблице результатам, использование в качестве допустимой для функционала (8) функции Θ_1 приводит к значениям абсцисс минимумов этого функционала, несколько меньшим по сравнению со значениями B^* , полученными при подстановке в функционал точного решения задачи. Применение в качестве допустимой функции Θ_2 дает несколько завышенные значения абсцисс минимумов, но более близкие к полученным для точного решения. Из проведенного сопоставления результатов можно сделать вывод, что при отсутствии точного решения использование функции Θ_2 в качестве допустимой предпочтительнее по сравнению с функцией Θ_1 .

Даже в случае линейной задачи маловероятно получить в виде формулы ее точное решение с учетом эффекта нелокальности. Использование вариационной формулировки задачи в сочетании с приемлемыми допустимыми функциями позволяет количественно оценить влияние этого эффекта. В качестве примера применим функционал (8) для получения таких оценок в случае рассматриваемого процесса стационарной теплопроводности в пластине с внутренними источниками тепловыделения.

Для выбранных выше значений параметра G на рис. 3 построены зависимости функционала (8) от коэффициентов в функциях, использованных в качестве допустимых. Следует отметить, что для всех рассмотренных вариантов абсциссы минимумов этого функционала при фиксированном значении параметра G удовлетворяют неравенству $B < B_1 < B_2$. Это означает, что эффект нелокальности при фиксированной температуре на одной поверхности пластины приводит к некоторому возрастанию температуры на противоположной идеально теплоизолированной поверхности.

Пример применения вариационной формулировки к нелинейной постановке задачи. В качестве примера используем функционал (6) для оценки влияния нелокальности процесса теплопроводности на параметры, определяющие явление теплового взрыва при экспоненциальной зависимости от температуры объемной мощности q_V тепловыделения в неограни-

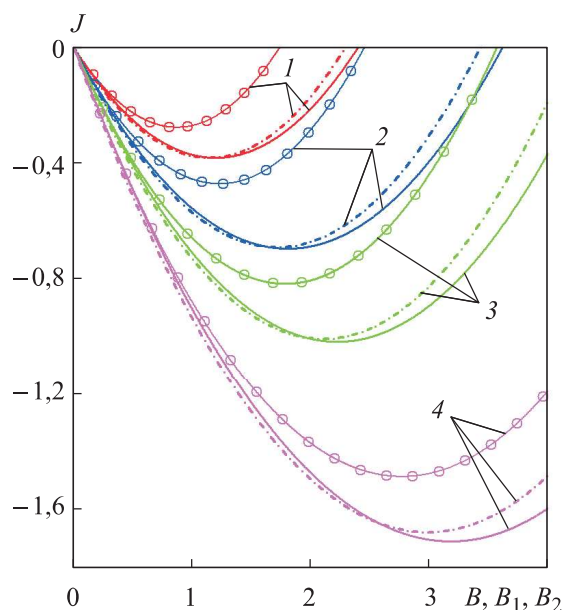


Рис. 3. Зависимости функционала (8) от коэффициентов B при $p_2 = 0$ (кривые со светлыми кружками) и B_1, B_2 (штрихпунктирные и сплошные кривые) при $G = 1,0, p_2 = 0,2$ (1), $G = 1,1, p_2 = 0,2$ (2), $G = 1,2, p_2 = 0,1$ (3) и $G = 1,3, p_2 = 0,05$ (4)

ченной в своей плоскости однородной пластине постоянной толщины h с фиксированной температурой T_h на одной из поверхностей пластины и идеально теплоизолированной другой поверхностью. Если выделение тепловой энергии вызвано протекающими в материале пластины экзотермическими процессами (в том числе химическими реакциями), скорость которых описывает закон Аррениуса [15], основанный на распределении Больцмана [16] реагирующих частиц по уровням энергии, то для объемной мощности тепловыделения допустимо применить зависимость

$$q_V(T) = q^\circ \exp\left(-\frac{E}{k_0 T}\right) = \frac{q^\circ}{T_h} \frac{h^2}{\lambda} \beta \exp\left(\frac{\Theta}{1 + \gamma \Theta}\right), \quad (9)$$

где q° — предэкспоненциальный множитель; E — энергия активации экзотермического процесса; $k_0 \approx 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К — постоянная Больцмана; $\gamma = k_0 T_h / E$; $\Theta = (T/T_h - 1) E / (k_0 T)_h$; $\beta = (q^\circ E h^2 / (\lambda k_0 T_h^2)) \times \exp(-(E/k_0)/T_h)$.

Следует отметить, что соотношение (9) входит в основную математическую модель в стационарной теории теплового взрыва [15, 17]. Для экзотермических реакций $q_V^\circ > 0$ и $E > 0$, тогда при фиксированном значении

температуры T_h на одной из поверхностей пластины внутри ее температура будет превышать это значение. Кроме того, в силу неравенства $dq_V(T)/dT > 0$ стационарное распределение температуры в пластине возможно лишь при определенном ограничении на величину $q_V(T)$, когда выделяемая в пластине тепловая энергия еще может быть отведена к поверхности пластины с температурой T_h . При нарушении такого ограничения стационарное распределение температуры в пластине невозможно, что и определяет состояние теплового взрыва.

Математическую модель теплового взрыва в среде, в которую входит соотношение (9) с двумя параметрами q_V° и γ и не обладающую свойством нелокальности, принято называть двухпараметрической [15, 18]. В общем случае построенный с использованием этой модели функционал может иметь три стационарные точки. Две из них соответствуют минимальным значениям функционала и устойчивым распределениям температуры в пластине, а одна — максимальному значению функционала и неустойчивому температурному состоянию пластины [10]. С возрастанием значения q_V° одна из стационарных точек с минимальным значением функционала объединяется со стационарной точкой, в которой функционал достигает максимума, образуя при представлении функционала в виде функции одного переменного точку перегиба, соответствующую состоянию теплового взрыва.

Для достаточно большой группы экзотермических реакций $\gamma\Theta \ll 1$. В этом случае допустимо использовать однопараметрическую модель, приняв в соотношении (9) $\gamma = 0$. Функционал, построенный с использованием однопараметрической модели применительно к пластине из необладающего свойством нелокальности материала, имеет лишь две стационарные точки, соответствующие минимуму и максимуму функционала. Состояние теплового взрыва также соответствует объединению этих точек в точку перегиба. Использование однопараметрической модели при $\lambda = \text{const}$ позволяет получить трансцендентное уравнение или интегральное соотношение [10], численное решение которого определяет условие возникновения теплового взрыва в пластине, материал которой не обладает свойством нелокальности. При этом параметр β принимает наибольшее возможное значение $\beta^* \approx 0,8785$, а идеально теплоизолированной поверхности пластины соответствует значение $\Theta_0^* \approx 1,1860$. При использовании двухпараметрической модели с возрастанием параметра γ монотонно возрастают и значения β^* и Θ_0^* . Представленные ниже результаты получены путем перехода

от постановки задачи в дифференциальной форме к ее эквивалентной интегральной форме [10], которая позволяет выполнить вычисления с контролируемой точностью. Эти результаты имеют некоторое отличие от приведенных в [19] и полученных численным решением соответствующего дифференциального уравнения.

Значения параметров при двухпараметрической модели

γ	0	0,01	0,02	0,025	0,04	0,05	0,1
β^*	0,8785	0,8878	0,8975	0,9024	0,9178	0,9284	0,9882
Θ_0^*	1,1860	1,2122	1,2390	1,2520	1,2974	1,3292	1,5244

Стационарные точки функционала (6), учитывающего нелокальность, сохраняют отмеченные выше свойства при использовании двух- и однопараметрической математических моделей теплового взрыва. В случае рассматриваемой пластины этот функционал с учетом соотношения (9) примет вид

$$J[\Theta] = \int_V \left(\frac{p_1}{2} \left(\frac{d\Theta}{d\xi} \right)^2 - p_2 \int_0^\Theta \frac{d^2\Theta^*}{d\xi^2} d\Theta - \beta \int_0^\Theta \exp\left(\frac{\Theta}{1 + \gamma\Theta} \right) d\Theta \right) d\xi + p_2 \frac{d\Theta^*(\xi)}{d\xi} \Big|_{\xi=0}, \quad (10)$$

где $\xi \in [0,1]$ — безразмерная координата, отсчитываемая от идеально теплоизолированной поверхности пластины в направлении нормали к этой поверхности и

$$\frac{d\Theta^*(\xi)}{d\xi} = \int_0^1 \varphi(\xi, \xi') \frac{d\Theta(\xi')}{d\xi'} d\xi'.$$

В качестве допустимой для функционала (10) используем функцию вида $\Theta(B, \xi) = Bf(\xi)$, включающую в себя переменный коэффициент B . Связь этого коэффициента с параметрами β и γ следует из необходимого условия $\partial J / \partial B = 0$ стационарности функционала (10). Из этого условия получим равенство

$$\beta = BF \left(p_1, p_2, f, \varphi \right) \left(\int_0^1 f(\xi) \exp\left(B f \left(\frac{\xi}{1 + \gamma B f(\xi)} \right) \right) d\xi \right)^{-1}, \quad (11)$$

где

$$F(p_1, p_2, f, \varphi) = \int_0^1 \left(p_1 \left(\frac{df(\xi)}{d\xi} \right)^2 - 2 \frac{df}{d\xi} \int_0^1 \varphi(\xi, \xi') \frac{\partial f(\xi')}{\partial \xi'} d\xi' \right) d\xi + \\ + 2p_2 \int_0^1 \varphi(0, \xi') \frac{\partial f(\xi')}{\partial \xi'} d\xi'.$$

В качестве допустимых для функционала (8) функций, удовлетворяющих граничному условию (2), рассмотрим функции $\Theta_1 = B_1(1 - \xi^2)$ и $\Theta_2 = B_2 \cos(\pi\xi/2)$ и примем $\gamma = 0,01$. При отсутствии эффекта нелокальности ($p_2 = 0$) подстановка функции Θ_1 в (8) и (9) приводит к зависимостям функционала J и параметра β от коэффициента B_1 (кривые 1, 2, рис. 4, а). При этом точка с максимальным значением $\beta \approx 0,9009$ и соответствующая стационарная точка функционала в виде точки перегиба на кривой 1 имеют абсциссу $B_1 \approx 1,2072$. Здесь и далее вертикальными линиями со стрелками показана связь значения функционала (8) в его стационарной точке с полученным значением параметра β при указанном значении коэффициента B_1 . Горизонтальными линиями соединены пары точек на графиках зависимостей β от B_1 , соответствующие двум стационарным точкам функционала, которые определяют устойчивое и неустойчивое температурные состояния пластины. Третьей стационарной точкой функционала (8), определяющей устойчивые температурные состояния пластины, соответствует столь большое значение $B_1 = \Theta_0$, при котором реализация этого состояния практически неосуществима.

Отмеченное значение β несколько больше представленного выше, а значение B_1 достаточно близко к табличному. С учетом эффекта нелокальности стационарная точка функционала (8) в виде точки перегиба на кривой 3 соответствует максимальному значению $\beta \approx 0,8509$ ординаты кривой 4 при значениях абсциссы $B_1 \approx 1,2144$ и доли $p_2 = 0,0688$ влияния пространственных нелокальных эффектов при переносе тепловой энергии в материале пластины. Влияние значения p_2 на изменение коэффициента B_1 и параметра β можно определить по кривым 5 и 2 при $p_2 = 0$ и по кривым 6 и 7 при $p_2 = 0,4$. В каждом случае реализуемо лишь сочетание параметров, соответствующее минимальному значению функционала, поскольку температурное состояние пластины, отвечающее максимальному значению функционала, является неустойчивым.

Кривая 8 на рис. 4, а, построенная по (8) при значениях $\beta = 0,9009$ и $p_2 = 0,0688$, соответствует функционалу (8), не имеющему стационарных точек, что означает отсутствие при этих значениях установившегося темпе-

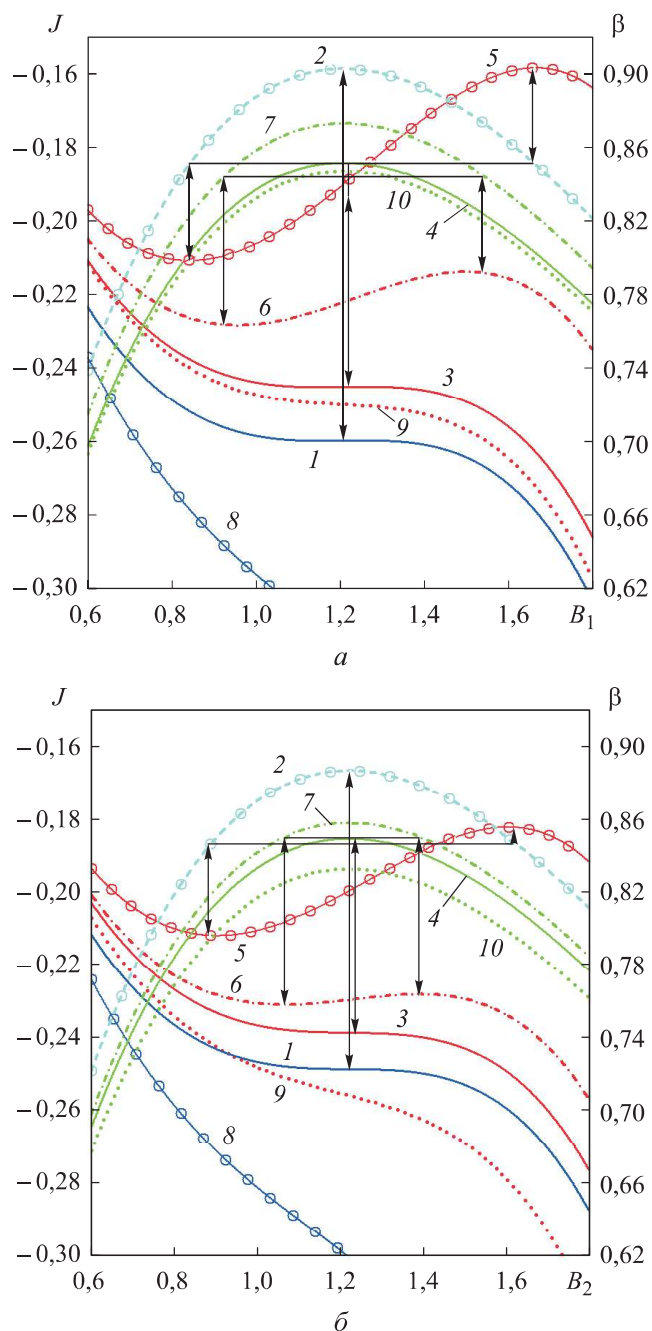


Рис. 4. Графики функций влияния $J(B_1)$ (а), $J(B_2)$ (б) при $\xi=0$ (1), $\xi=0,1$ (2), $\xi=0,5$ (3) и $\xi=1,0$ (4) и $p_2=0$ (5), $p_2=0,4$ (6, 7), $p_2=0,0688$ (8), $p_2=0,075$ (9, 10)

ратурного состояния, описываемого функцией Θ_1 . Действительно, при таком значении p_2 наибольшая ордината кривой 4 меньше указанного значения параметра β . Аналогично кривая 9, построенная по (8) при значе-

ниях $\beta = 0,8509$ и $p_2 = 0,075$, не имеет экстремальных точек и точек перегиба с горизонтальной касательной, которые соответствовали бы стационарным точкам функционала. При этом наибольшая ордината кривой 10, построенной по (9) при $p_2 = 0,075$, меньше $\beta = 0,8509$.

Представленные на рис. 4, б результаты аналогичных расчетов по (8) и (9), но с использованием функции Θ_2 в качестве допустимой для функционала (8), позволяют сделать вывод, что эта функция несколько лучше соответствует истинным распределениям температуры в пластине при рассмотренных сочетаниях принятых значений определяющих параметров. Подстановка этой функции в (8) и (9) при $\gamma = 0,01$ и $p_2 = 0$ приводит к зависимостям функционала J и параметра β от коэффициента B_2 (кривые 1 и 2, см. рис. 4, б). При этом максимальное значение $\beta \approx 0,8867$ соответствует абсциссе $B_2 \approx 1,2179$, которой отвечает стационарное значение функционала (8), равное ординате точки перегиба с горизонтальной касательной к кривой 1. Полученное значение β ближе к $\beta^* = 0,8878$ по сравнению с приведенным выше значением, найденным с использованием в качестве допустимой для функционала (8) функции Θ_1 .

Все кривые на рис. 4, имеющие совпадающие номера, построены по результатам расчетов с одинаковыми значениями параметров γ и p_2 . Замена допустимой функции функцией Θ_2 сохраняет достигнутое при использовании Θ_1 максимальное значение $\beta \approx 0,8509$, если $p_2 = 0,052$. В этом случае на рис. 4, б абсцисса стационарной точки функционала (8) на кривой 3 и максимума на кривой 4 равна $B_2 = 1,2156$. Следует отметить, что при фиксированном значении $\beta \approx 0,8509$ использование функции Θ_2 приводит к сближению абсцисс экстремальных точек этого функционала по сравнению с использованием функции Θ_1 , причем это происходит как при отсутствии эффекта нелокальности ($p_2 = 0$, кривая 5, см. рис. 4, б), так и при наличии этого эффекта ($p_2 = 0,04$, кривая 6, см. рис. 4, б).

Заключение. Представленную вариационную формулировку математической модели процессов стационарной теплопроводности в области произвольной формы можно рассматривать как достаточно удобный инструмент для проведения приближенного анализа влияния на эти процессы эффектов пространственной нелокальности. Количественный анализ влияния этих эффектов с применением математических моделей, содержащих интегродифференциальные уравнения, связан с проведением значительного объема расчетов, требующих использования огромных вычислительных ресурсов. В противоположность этому вариационная формули-

ровка модели, содержащая функционал в виде интегралов по рассматриваемой области и некоторым участкам ее поверхности, позволяет путем соответствующего выбора допустимой для этого функционала функции, описывающей предполагаемое распределение температуры, установить количественную связь между параметрами, которые определяют роль пространственной нелокальности при протекании установившегося процесса теплопроводности.

Приведен пример использования предложенной вариационной формулировки, учитывающей влияние пространственной нелокальности стационарной теплопроводности на параметры, определяющие явление теплового взрыва при экспоненциальной зависимости от температуры объемной мощности тепловыделения в пластине. Количественный анализ выполнен для двух вариантов функции, допустимой для построенного интегрального функционала и описывающей возможное распределение температуры по толщине рассматриваемой пластины. Сравнение полученных результатов позволяет отдать предпочтение той допустимой функции, использование которой приводит к меньшему отклонению максимального значения параметра, характеризующего интенсивность тепловыделения в пластине, от результата, найденного без учета влияния пространственной нелокальности.

Экстремальные свойства функционала позволяют для однородного тела произвольной конфигурации получить полное решение рассматриваемой задачи стационарной теплопроводности с учетом эффектов пространственной нелокальности. Для этого можно использовать метод локальных вариаций [20]. Эффективное применение этого метода, предложенного более полувека назад, требовало в силу сравнительно медленной сходимости решения наличия значительных вычислительных ресурсов, отсутствовавших в тот период. В настоящее время метод локальных вариаций может стать эффективным способом решения широкого класса вариационных задач с формулировкой, содержащей функционал, стационарные точки которого обладают экстремальными свойствами.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Jolley K., Gill S. Modelling transient heat conduction in solids at multiple length and time scales: a coupled non-equilibrium molecular dynamics/continuum approach. *J. Comput. Phys. Sci.*, 2009, vol. 228, iss. 19, pp. 7412–7425. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.06.035>
- [2] Cahill D., Ford W., Goodson K., et al. Nanoscale thermal transport. *J. Appl. Phys.*, 2003, vol. 93, iss. 2, art. 793. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1524305>

- [3] Jolley K., Gills S.P. Modeling transient heat conduction at multiple length and time scale: a coupled non-equilibrium molecular dynamics/continuum approach. In: Pyrz R., Rauhe J.C. (eds). *IUTAM Symposium on Modelling Nanomaterials and Nanosystems. IUTAM Bookseries*, vol. 13. Dordrecht, Springer, 2009, pp. 27–36.
DOI: https://doi.org/10.1007/978-1-4020-9557-3_4
- [4] Онами М., Ивасимидзу С., Гэнка К. и др. Введение в микромеханику. М., Металлургия, 1987.
- [5] Eringen A.C. *Nonlocal continuum field theories*. New York, NY, Springer, 2002.
DOI: <https://doi.org/10.1007/b97697>
- [6] Kuvyrkin G.N., Savelieva I.Yu. Thermomechanical model of nonlocal deformation of a solid. *Mech. Solids*, 2016, vol. 51, no. 3, pp. 256–262.
DOI: <https://doi.org/10.3103/S002565441603002X>
- [7] Kuvyrkin G., Savelyeva I., Kuvshinnikova D. Temperature distribution in a composite rod, taking into account nonlocal spatial effects. *E3S Web Conf.*, 2019, vol. 128, art. 09006. DOI: <https://doi.org/10.1051/e3sconf/201912809006>
- [8] Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu., Kuvshinnikova D.A. Nonlocal dynamic temperature stress simulation. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2021, vol. 1902, art. 012015.
DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1902/1/012015>
- [9] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Yu. Mathematical model of a nonlocal medium with internal state parameters. *J. Eng. Phys. Thermophy.*, 2013, vol. 86, no. 4, pp. 820–826. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10891-013-0900-5>
- [10] Зарубин В.С. Инженерные методы решения задач теплопроводности. М., Энергоатомиздат, 1983.
- [11] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Variational estimates of the parameters of a thermal explosion of a stationary medium in an arbitrary domain. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 2019, vol. 135, pp. 614–619.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.02.009>
- [12] Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu., Zarubin V.S. Dual variational model of a thermal breakdown of a dielectric layer at an alternating voltage. *Z. Angew. Math. Phys.*, 2019, vol. 70, no. 4, art. 115. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00033-019-1153-8>
- [13] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Yu. The variational form of the mathematical model of a thermal explosion in a solid body with temperature-dependent thermal conductivity. *High Temp.*, 2018, vol. 56, no. 2, pp. 223–228.
DOI: <https://doi.org/10.1134/S0018151X18010212>
- [14] Власова Е.А., Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Приближенные методы математической физики. М., Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004.
- [15] Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., Наука, 1987.
- [16] Глаголев К.В., Морозов А.Н. Физическая термодинамика. М., Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2007.

[17] Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б. и др. Математическая теория горения и взрыва. М., Наука, 1980.

[18] Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Вариационный подход к анализу модели теплового взрыва в твердом теле. *Математика и математическое моделирование*, 2016, № 5, с. 29–45. DOI: <https://doi.org/10.7463/mathm.0516.0847523>

[19] Parks J.R. Criticality criteria for various configurations of a self-heating chemical as functions of activation energy and temperature of assembly. *J. Chem. Phys.*, 1961, vol. 34, iss. 1, pp. 46–50. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1731612>

[20] Баничук Н.В., Петров В.М., Черноусько Ф.Л. Численное решение вариационных и краевых задач методом локальных вариаций. *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 1966, т. 6, № 6, с. 947–961.

Савельева Инга Юрьевна — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Прикладная математика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Савельева И.Ю. Вариационная формулировка математической модели процесса стационарной теплопроводности с учетом пространственной нелокальности. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2022, № 2 (101), с. 68–86. DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2022-2-68-86>

VARIATIONAL FORMULATION OF THE MATHEMATICAL MODEL OF STATIONARY HEAT CONDUCTION WITH ACCOUNT FOR SPATIAL NONLOCALITY

I.Yu. Savelyeva

inga.savelyeva@bmstu.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

Abstract

In creating and using new structurally sensitive materials, it is essential to construct mathematical models which make it possible to describe the materials' behavior in widely changing external influences. Modeling of non-local media is a class of methods of generalized continuum mechanics. The capability of analyzing mathematical models of a continuous medium can be extended through variational methods. The paper describes the construction of a functional for the problem of stationary heat conduction in a homogeneous body,

Keywords

Mathematical model, nonlocality, variational formulation, functional, nonlinearity

taking into account the effects of nonlocality and with a temperature-independent heat conduction coefficient. A variational formulation used in the case of a linear problem in combination with acceptable admissible functions allowed us to quantify this effect. The study gives an example of using the variational formulation, which takes into account the influence of the spatial nonlocality of the stationary heat conduction process on the parameters that determine the well-known phenomenon of thermal explosion with an exponential temperature dependence of the volumetric heat release rate in the plate. The quantitative analysis was carried out for two versions of the function that is admissible for the constructed integral functional and describes the possible temperature distribution over the thickness of the plate under consideration. Having compared the obtained results, we opted for the admissible function, as its use leads to a smaller difference between the maximum value of the parameter characterizing the intensity of heat release in the plate and the known result found with no account for the influence of spatial nonlocality

Received 03.02.2022

Accepted 21.02.2022

© Author(s), 2022

The work was carried out with the support of the Ministry of Education and Sciences of the Russian Federation (project no. 0705-2020-0047)

REFERENCES

- [1] Jolley K., Gill S. Modelling transient heat conduction in solids at multiple length and time scales: a coupled non-equilibrium molecular dynamics/continuum approach. *J. Comput. Phys. Sci.*, 2009, vol. 228, iss. 19, pp. 7412–7425. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.06.035>
- [2] Cahill D., Ford W., Goodson K., et al. Nanoscale thermal transport. *J. Appl. Phys.*, 2003, vol. 93, iss. 2, art. 793. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1524305>
- [3] Jolley K., Gills S.P. Modeling transient heat conduction at multiple length and time scale: a coupled non-equilibrium molecular dynamics/continuum approach. In: Pyrz R., Rauhe J.C. (eds). *IUTAM Symposium on Modelling Nanomaterials and Nanosystems. IUTAM Bookseries*, vol. 13. Dordrecht, Springer, 2009, pp. 27–36. DOI: https://doi.org/10.1007/978-1-4020-9557-3_4
- [4] Onami M., Ivasimidzu S., Genka K., et al. Vvedenie v mikromekhaniku [Introduction into micromechanics]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1987.
- [5] Eringen A.C. Nonlocal continuum field theories. New York, NY, Springer, 2002. DOI: <https://doi.org/10.1007/b97697>

- [6] Kuvyrkin G.N., Savelieva I.Yu. Thermomechanical model of nonlocal deformation of a solid. *Mech. Solids*, 2016, vol. 51, no. 3, pp. 256–262.
DOI: <https://doi.org/10.3103/S002565441603002X>
- [7] Kuvyrkin G., Savelyeva I., Kuvshinnikova D. Temperature distribution in a composite rod, taking into account nonlocal spatial effects. *E3S Web Conf.*, 2019, vol. 128, art. 09006.
DOI: <https://doi.org/10.1051/e3sconf/201912809006>
- [8] Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu., Kuvshinnikova D.A. Nonlocal dynamic temperature stress simulation. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2021, vol. 1902, art. 012015.
DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1902/1/012015>
- [9] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Yu. Mathematical model of a nonlocal medium with internal state parameters. *J. Eng. Phys. Thermophy.*, 2013, vol. 86, no. 4, pp. 820–826. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10891-013-0900-5>
- [10] Zarubin V.S. Inzhenernye metody resheniya zadach teploprovodnosti [Engineering methods for solving heat transfer problems]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1983.
- [11] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Variational estimates of the parameters of a thermal explosion of a stationary medium in an arbitrary domain. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 2019, vol. 135, pp. 614–619.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.02.009>
- [12] Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu., Zarubin V.S. Dual variational model of a thermal breakdown of a dielectric layer at an alternating voltage. *Z. Angew. Math. Phys.*, 2019, vol. 70, no. 4, art. 115. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00033-019-1153-8>
- [13] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Yu. The variational form of the mathematical model of a thermal explosion in a solid body with temperature-dependent thermal conductivity. *High Temp.*, 2018, vol. 56, no. 2, pp. 223–228.
DOI: <https://doi.org/10.1134/S0018151X18010212>
- [14] Vlasova E.A., Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Priblizhennyye metody matematicheskoy fiziki [Approximate methods of mathematical physics]. Moscow, BMSTU Publ., 2004.
- [15] Frank-Kamenetskiy D.A. Diffuziya i teploperedacha v khimicheskoy kinetike [Diffusion and heat transfer in chemical kinetics]. Moscow, Nauka Publ., 1987.
- [16] Glagolev K.V., Morozov A.N. Fizicheskaya termodinamika [Physical thermodynamics]. Moscow, BMSTU Publ., 2007.
- [17] Zeldovich Ya.B., Barenblatt G.I., Librovich V.B., et al. Matematicheskaya teoriya gorenija i vzryva [Mathematical theory of combustion and explosion]. Moscow, Nauka, Publ., 1980.
- [18] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Mathematical model of thermal explosion, the dual variational formulation of nonlinear problem, alternative functional. *Matematika i matematicheskoe modelirovanie* [Mathematics and Mathematical Modeling], 2016, no. 5, pp. 29–45 (in Russ.).
DOI: <https://doi.org/10.7463/mathm.0516.0847523>

[19] Parks J.R. Criticality criteria for various configurations of a self-heating chemical as functions of activation energy and temperature of assembly. *J. Chem. Phys.*, 1961, vol. 34, iss. 1, pp. 46–50. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1731612>

[20] Banichuk N.V., Petrov V.M., Chernous'ko F.L. The solution of variational and boundary value problems by the method of local variations. *USSR Comput. Math. Math. Phys.*, 1966, vol. 6, iss. 6, pp. 1–21.

DOI: [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(66\)90158-3](https://doi.org/10.1016/0041-5553(66)90158-3)

Savelyeva I.Yu. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Assoc. Professor, Department of Applied Mathematics, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Savelyeva I.Yu. Variational formulation of the mathematical model of stationary heat conduction with account for spatial nonlocality. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2022, no. 2 (101), pp. 68–86 (in Russ.). DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2022-2-68-86>