УДК 51-72

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕЛОКАЛЬНОСТИ НА ТЕМПЕРАТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ ПЛАСТИНЫ

И.Ю. Савельева

inga.savelyeva@bmstu.ru

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

Аннотация

Ключевые слова

Используемые для многомасштабного моделирования модели варьируются от моделей квантовой механики до моделей механики сплошной среды. В микромасштабе модели молекулярной динамики требуют больших вычислительных ресурсов. Таким образом, модели макромасштаба, подразумевающие применение модифицированных моделей сплошной среды и позволяющие учесть связь характеристик материалов на макро- и микроуровнях, сохраняют свою актуальность. Один из известных походов к построению таких моделей связан с учетом влияния пространственной и временной нелокальности сплошной среды. Все модели нелокальных сред включают в себя некоторые параметры нелокальности, варьирование и подбор которых и позволяет учитывать связь характеристик среды на макро- и микроуровнях. В настоящее время установление связей этих параметров макромасштабных моделей с параметрами моделей атомистической и молекулярной динамики — актуальная задача. Здесь на примере задачи о стационарном температурном состоянии однородной пластины с учетом пространственной нелокальности показана возможность установления указанных связей параметров разномасштабных моделей. Для одномерной задачи при рассмотрении простой функции влияния получено аналитическое решение. Исследовано влияние коэффициента нелокальности на степень отклонения распределения температуры по толщине пластины от классического решения. Выполнено сопоставление температурного состояния пластины, полученное в рамках макромасштабного

Математическая модель, нелокальность, теплоперенос, многомасштабный подход, неравновесная молекулярная динамика

Оценка влияния эффекта пространственной нелокальности...

подхода, с результатами математического модели-	Поступила 27.02.2023
рования на наноуровне распределения температуры	Принята 17.03.2023
методом неравновесной молекулярной динамики	© Автор(ы), 2024

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (проект № 0705-2023-0012)

Введение. К многомасштабным относят материалы, для которых необходимо использовать многомасштабный подход при моделировании одного или нескольких физических явлений, которые происходят в различных временных масштабах и для разных характерных длин [1–3]. Например, классическая механика материалов не позволяет при моделировании учесть микроструктурные особенности материалов, так как масштаб длины, соответствующий этим особенностям, существенно меньше характерного размера классической механики.

Основные подходы многомасштабного моделирования — иерархическое [1, 4] и гибридное [5, 6] многомасштабное моделирование. При первом подходе материал условно разбивают на несколько масштабов длин. Модели для разных масштабов запускают независимо. Для соединения независимо работающих моделей в рассмотрение вводят параметры соединения. В случае второго подхода многомасштабная модель работает как единый пакет, в котором модели разных масштабов запускаются одновременно.

Модели, используемые для многомасштабного моделирования, варьируются от моделей квантовой механики до моделей механики сплошной среды. Для захвата наномасштабных явлений используют модели атомистической и молекулярной динамики [7–9]. Точность таких моделей зависит от эмпирических межатомных потенциалов. В микромасштабе (< 0,1 мкм) модели молекулярной динамики требуют больших вычислительных ресурсов. Следовательно, модели макромасштаба, подразумевающие применение модифицированных моделей сплошной среды и позволяющие учесть связь характеристик материалов на макро- и микроуровнях, актуальны и в настоящее время. Один из походов к построению таких моделей связан с учетом влияния пространственной и временной нелокальности сплошной среды [10-13]. Для одномерных задач в [14-16] исследовано влияние эффекта пространственной нелокальности на поле температуры в случае нестационарных процессов. Возможности анализа математических моделей непрерывной среды могут быть расширены вследствие применения вариационных методов [17, 18].

Все модели нелокальных сред содержат такие параметры нелокальности, варьирование и подбор которых позволяют учесть связь характери-

стик среды на макро- и микроуровнях. Установление связей этих параметров макромасштабных моделей с параметрами моделей атомистической и молекулярной динамики является актуальной задачей. Возможность установления связей можно рассмотреть применительно к достаточно простой задаче о стационарном температурном состоянии однородной пластины с заданными значениями температуры на ее поверхностях.

Постановка задачи. Если материал неограниченной в своей плоскости пластины обладает свойством пространственной нелокальности по отношению к процессу теплопереноса и имеет постоянное значение коэффициента теплопроводности, то одномерное установившееся распределение температуры T(z) по толщине h = const в такой пластине при заданных значениях температуры на ее поверхностях и наличии эффекта нелокальности будет удовлетворять интегродифференциальному уравнению [14, 15]

$$(1-p_2)\frac{d^2T(z)}{dz^2} + hp_2\frac{d}{dz}\int_0^h \varphi_1(z',z)\frac{dT(z')}{dz'}dz' = 0, \ z, \ z' \in (0, \ h)$$
(1)

с граничными условиями

$$T(0) = T_0, \ T(h) = T_h.$$
 (2)

Здесь z — координата, отсчитываемая от поверхности пластины с температурой T_0 по направлению внутренней нормали к этой поверхности; $p_2 \in [0, 1)$, $\varphi_1(z', z)$ — параметр пространственной нелокальности процесса теплопереноса и функция, определяющая интенсивность проявления эффекта пространственной нелокальности в окрестности точки с координатой z в материале пластины.

Для последующего анализа влияния эффекта пространственной нелокальности на установившееся распределение температуры в пластине при заданных граничных условиях целесообразно перейти к безразмерной координате $\zeta = z / h$ и безразмерной температуре

$$\Theta(\zeta) = \frac{2T(z) - T_0 - T_h}{T_0 - T_h}$$

Тогда уравнение (1) примет вид

$$(1-p_2)\frac{d^2\Theta(\zeta)}{d\zeta^2} + \frac{p_2}{\alpha}\frac{d}{d\zeta}\int_0^1 \varphi(\zeta',\zeta)\frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'}d\zeta' = 0$$
(3)

с граничными условиями

$$\Theta(0) = 1, \ \Theta(1) = -1.$$
 (4)

В качестве функции влияния предложено несколько вариантов соотношений [7, 10]. Выберем одно из наиболее простых, которое в безразмерной форме имеет вид

$$\varphi(\zeta',\zeta) = \varphi_1(z',z) = \frac{1}{\alpha} \left(1 - \frac{|\zeta' - \zeta|}{\alpha} \right) = \frac{1}{\alpha} \left(1 - \frac{\zeta' - \zeta}{\alpha} \operatorname{sign}(\zeta' - \zeta) \right).$$
(5)

При использовании соотношения (5) необходимо выполнить условия $|\zeta' - \zeta| \le \alpha \le 1/2$ и $|\zeta' - \zeta| / \alpha = 0$ при $|\zeta' - \zeta| > \alpha$. Величину $a = \alpha h$ принято называть радиусом нелокальности [10].

Для пластины из однородного материала при λ = const следует ожидать, что распределение безразмерной температуры $\Theta(\zeta)$ при граничных условиях (4) будет антисимметричным относительно средней плоскости пластины с безразмерной координатой $\zeta = 1/2$. Тогда из условий (4) следует, что $\Theta(1/2) = 0$.

Преобразование интеграла в уравнении (3). Поскольку интегрирование по координате ζ' и дифференцирование по координате ζ во втором слагаемом уравнения (3) являются независимыми операциями, допустимо продифференцировать по ζ функцию влияния $\varphi(\zeta',\zeta)$, входящую сомножителем в подынтегральное выражение интеграла в этом уравнении. В результате с учетом равенства $|\zeta' - \zeta| = (\zeta' - \zeta) \operatorname{sign}(\zeta' - \zeta)$ вместо уравнения (3) получим

$$(1-p_2)\frac{d^2\Theta(\zeta)}{d\zeta^2} + p_2 \int_0^1 \operatorname{sign}(\zeta'-\zeta) \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta' = 0, \ \zeta, \ \zeta' \in (0, \ 1).$$
(6)

Пусть отношение $1/\alpha$ равно целому числу N, причем четному. Тогда интеграл в левой части равенства (6) с учетом граничных условий (4) можно представить в виде

$$\int_{0}^{1} \operatorname{sign}(\zeta'-\zeta) \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta = \int_{0}^{\alpha} \operatorname{sign}(\zeta'-\zeta) \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta + \int_{1-\alpha}^{1} \operatorname{sign}(\zeta'-\zeta) \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta + \sum_{j=2}^{N-1} \int_{(j-1)\alpha}^{j\alpha} \operatorname{sign}(\zeta'-\zeta) \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta.$$
(7)

Для первых двух интегралов в правой части равенства (7) имеем

$$\int_{0}^{\alpha} \operatorname{sign}(\zeta'-\zeta) \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta = \int_{\zeta}^{\alpha} \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta - \int_{0}^{\zeta} \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta = \Theta(\alpha) - 2\Theta(\zeta) + 1, \quad 0 < \zeta < \alpha,$$

$$\int_{1-\alpha}^{1} \operatorname{sign}(\zeta'-\zeta) \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta = \int_{\zeta}^{1} \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta - \int_{1-\alpha}^{\zeta} \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta =$$
$$= -1 - 2\Theta(\zeta) + \Theta(1-\alpha), \quad 1-\alpha < \zeta < 1.$$

Аналогично для каждого слагаемого суммы в правой части равенства (7) запишем

$$\int_{(j-1)\alpha}^{j\alpha} \operatorname{sign}(\zeta'-\zeta) \frac{d\Theta(\zeta')}{d\zeta'} d\zeta = \Theta(j\alpha) - 2\Theta(\zeta) + \Theta((j-1)\alpha),$$

(j-1)\alpha < \zeta < j\alpha, 1 < j < N-1.

В силу антисимметрии распределения безразмерной температуры $\Theta(\zeta)$ относительно безразмерной координаты $\zeta = 1/2$ имеем тождество $\Theta(j\alpha) + \Theta((N-j)\alpha) \equiv 0$. Поэтому сумма интегралов в правой части соотношения (7) будет равна $-2T(\zeta)$. В результате интегродифференциальное уравнение (6) перейдет в однородное обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка

$$\frac{d^2\Theta(\zeta)}{d\zeta^2} - \beta^2\Theta(\zeta) = 0, \tag{8}$$

где $\beta = \sqrt{2 p_2 / \alpha^2 / (1 - p_2)}.$

Анализ решения уравнения (8). Решением уравнения (8) с учетом граничных условий (4) будет равенство

$$\Theta(\zeta) = \frac{\operatorname{sh}\left(\beta(1/2-\zeta)\right)}{\operatorname{sh}\left(\beta/2\right)}.$$
(9)

При отсутствии в процессе теплопереноса в материале пластины эффекта пространственной нелокальности (*p*₂ ≡ 0) распределение безразмерной температуры будет линейным:

$$\Theta_0(\zeta) = 1 - 2\zeta. \tag{10}$$

Действительно, предельным переходом при $p_2 \rightarrow 0$ из соотношения (9) следует равенство (10).

Согласно зависимости на рис. 1, с увеличением коэффициента β возрастает отличие распределения по толщине пластины безразмерной температуры $\Theta(\zeta)$ от линейного, соответствующего отсутствию эффекта пространственной нелокальности и сохранению лишь теплопереноса в соответствии с гипотезой Био — Фурье.

С возрастанием коэффициента β происходит приближение к нулю значения производной

$$D(\beta) = \frac{\partial \Theta(\zeta)}{\partial \zeta} \bigg|_{\zeta = 1/2}$$

в средней плоскости пластины, что означает ослабление теплового взаимодействия двух слоев пластины, разделенных этой плоскостью. В гипотетическом случае существования равенства $D(\beta) = 0$ такое взаимодействие будет возможно лишь за счет эффекта пространственной нелокальности. Результаты анализа соотношения (9) позволяют установить зависи-



33

мость производной от коэффициента β, представленную в полулогарифмических координатах на рис. 2, *a*.



Рис. 2. Зависимость абсолютного значения производной $D(\beta)$ от коэффициента β (*a*) и связь параметра p_2 и коэффициента β (*b*) при $\alpha = 1/2$ (*1*), 1/4 (*2*), 1/6 (*3*), 1/8 (*4*), 1/10 (*5*) и 1/20 (*6*)

Фиксированное значение коэффициента β наряду с влиянием на степень отклонения распределения температуры по толщине пластины от линейного определяет для рассматриваемого материала пластины однозначную связь относительного размера α области влияния эффекта пространственной нелокальности и параметра p_2 , характеризующего интен-

сивность проявления этого эффекта. Согласно зависимости на рис. 2, δ , по мере возрастания коэффициента β эта связь приводит к увеличению параметра p_2 , причем тем интенсивнее, чем больше значение α .

Сравнение с результатами моделирования на наноуровне. Результаты математического моделирования методом неравновесной молекулярной динамики распределения температуры в прямолинейном стержне с идеально теплоизолированной боковой поверхностью из [19] можно сопоставить с полученным выше решением задачи для пластины. Участки стержня, прилегающие к его торцам, имеют заданные значения температуры, поддерживаемые двумя термостатами. В объеме стержня находятся 6 464 атома, энергообмен между которыми происходит за счет переноса фононов. По длине стержня между термостатами расположены 70 атомов. Для количественного описания взаимодействия атомов использован потенциал Леннарда — Джонса [20].

При различных сочетаниях значений температуры на торцевых участках стержня из твердого аргона на рис. 3 [19] сплошными цветными линиями показаны стационарные распределения температуры по длине упомянутого стержня. Штриховой наклонной прямой 1 отмечено распределение температуры, которое отвечает установившемуся температурному состоянию, соответстветствующему континуальной модели процесса теплопроводности. Эта прямая расположена между поперечными сечениями стержня, отстоящими от торца на расстояниях, равных 15 % его длины. Прилегающие к торцами участки такой длины соответствуют термостатам.

Прямой 2 на рис. 3 показано установившееся распределение температуры в сплошном стержне, соответствующее континуальной модели процесса переноса тепловой энергии. Эта прямая расположена между поперечными сечениями стержня, отделяющими прилегающие к торцам изотермические участки от его средней части, в которой происходит изменение температуры. Кривая 3 построена между этими поперечными сечениями по формуле (9), описывающей стационарное температурное состояние однородной пластины с заданными на ее поверхностях температурами, материал которой обладает эффектом пространственной нелокальности по отношению к процессу теплопроводности. Значение коэффициента $\beta = \sqrt{2 p_2/(\alpha^2/(1-p_2))} = 6$ в (9) подобрано из условия наиболее близкого соответствия между кривыми 3 и 4 [19] математическим моделированием с использованием метода неравновесной молекулярной динамики и с учетом наибольшего отклонения от прямой 1.



Рис. 3. Стационарное распределение температуры вдоль стержня из атомов твердого аргона [19] при 3...5 (—), 6...10 (—), 15...25 (—) и 30...50 К (—)

Потенциал Леннарда — Джонса использован в [19] в предположении, что его действие ограничено одним межатомным расстоянием. Поскольку протяженность участка стержня с изменяющейся между термостатами температурой составляет примерно 80 межатомных расстояний, соответствующий радиус нелокальности в таком случае следует принять равным 1/80, что с учетом подобранного выше значения $\beta = 6$ позволяет получить оценку для параметра пространственной нелокальности процесса теплопереноса $p_2 \approx 0,002$. Вне зависимости от свойств материала пластины (и рассматриваемого тела) изложенный подход дает возможность по результатам моделирования или экспериментального исследования на наноуровне в каждом конкретном случае установить связь между значениями α и p_2 .

Заключение. Сопоставление температурного состояния пластины, полученное в рамках макромасштабного подхода, который характерен для термомеханики сплошной среды, но с учетом влияния эффекта пространственной нелокальности, с результатами математического моделирования на наноуровне распределения температуры методом неравновесной молекулярной динамики позволило установить связь между существенно разномасштабными моделями.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Nieminen R.M. From atomistic simulation towards multiscale modelling of materials. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 2002, vol. 14, no. 11, pp. 2859–2876. DOI: https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/306

35

ISSN 1812-3368. Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2024. № 1

[2] Elliott J.A. Novel approaches to multiscale modelling in materials science. *Int. Mater. Rev.*, 2011, vol. 56, iss. 4, pp. 207–225.

DOI: https://doi.org/10.1179/1743280410Y.000000002

[3] Shaat M. A reduced micromorphic model for multiscale materials and its applications in wave propagation. *Compos. Struct.*, 2018, vol. 201, pp. 446–454. DOI: https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.06.057

[4] Bouvard J.L., Ward D.K., Hossain D., et al. Review of hierarchical multiscale modeling to describe the mechanical behavior of amorphous polymers. *J. Eng. Mater. Technol.*, 2009, vol. 131, iss. 4, art. 41206. DOI: https://doi.org/10.1115/1.3183779

[5] Ogata S., Lidorikis E., Shimojo F., et al. Hybrid finite-element/moleculardynamics/electronic-density-functional approach to materials simulations on parallel computers. *Comput. Phys. Commun.*, 2001, vol. 138, iss. 2, pp. 143–154. DOI: https://doi.org/10.1016/S0010-4655(01)00203-X

[6] Miller R.E., Tadmor E.B. Hybrid continuum mechanics and atomistic methods for simulating materials deformation and failure. *Mater. Res. Soc. Bull.*, 2007, vol. 32, no. 11, pp. 920–926. DOI: https://doi.org/10.1557/mrs2007.189

[7] Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятшин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Часть 2. Потенциалы для многокомпонентных систем. *Вестник ПНИПУ. Механика*, 2018, № 2, с. 114–132.

DOI: https://doi.org/10.15593/perm.mech/2018.2.11

[8] Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation. Academic Press, 2001.

[9] Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем. СПб., Лань, 2010.

[10] Eringen A.C. Nonlocal continuum field teories. Springer, 2002. 393 p.

[11] 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

[12] Shaat M., Ghavanloob E., Fazelzadeh S.A. Review on nonlocal continuum mechanics: physics, material applicability, and mathematics. *Mech. Mater.*, 2020, vol. 150, art. 103587. DOI: https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2020.103587

[13] Polizzotto C. Nonlocal elasticity and related variational principles. *Int. J. Solids Struct.*, 2001, vol. 38, iss. 42-43, pp. 7359–7380.

DOI: https://doi.org/10.1016/S0020-7683(01)00039-7

[14] 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

[15] 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

Оценка влияния эффекта пространственной нелокальности...

[16] Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Численное решение интегродифференциального уравнения теплопроводности для нелокальной среды. *Математическое моделирование*, 2013, т. 25, № 5, с. 99–108.

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

[18] Савельева И.Ю. Двойственная вариационная модель стационарного процесса теплопроводности, учитывающая пространственную нелокальность. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2022, № 5 (104), с. 45–61. DOI: http://dx.doi.org/10.18698/1812-3368-2022-5-45-61

[19] Jolley K., Gill S.P.A. 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

[20] Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Физические и математические модели микромеханики. М., Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2021.

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. Оценка влияния эффекта пространственной нелокальности на температурное состояние пластины. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2024, № 1 (112), с. 28–40. EDN: EZWDQS

SPATIAL NONLOCALITY EFFECT INFLUENCE ON THE PLATE TEMPERATURE STATE

I.Yu. Savelyeva

inga.savelyeva@bmstu.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

Abstract

Keywords

Models used in the multiscale simulation are ranging from the quantum mechanics to the continuum mechanics models. At the microscale, the molecular dynamics models are computationally intensive. Thus, the macroscale models imply the modified continuum models, make it possible to take into account relationship between the material characteristics at the macro and micro levels, and are remaining relevant.

Mathematical model, nonlocality, heat transfer, multiscale approach, nonequilibrium molecular dynamics One of the well-known approaches to constructing such models involves considering the influence of the continuum spatial and temporal nonlocality. All the nonlocality medium models include certain nonlocality parameters, which variation and selection make it possible to account for connection between medium characteristics at the macro and micro levels. Currently, establishing connections between these macroscale models parameters and parameters of the atomistic and molecular dynamics models becomes an urgent task. The paper uses the example of a problem in the stationary temperature state of a homogeneous plate taking into account the spatial nonlocality, and demonstrates a possibility to establish the indicated relationships between parameters of the different-scale models. An analytical solution was obtained for the onedimensional problem when considering a simple influence function. Influence of the nonlocality coefficient on the degree of deviation of the temperature distribution over the plate thickness from the classical solution was analyzed. The plate temperature state obtained within the framework of the macroscale approach was compared with the mathematical simulation results at the temperature distribution Received 27.02.2023 nanolevel using the nonequilibrium molecular dynamics Accepted 17.03.2023 method © Author(s), 2024

> The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project no. 0705-2023-0012)

REFERENCES

[1] Nieminen R.M. From atomistic simulation towards multiscale modelling of materials. J. Phys.: Condens. Matter., 2002, vol. 14, no. 11, pp. 2859-2876. DOI: https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/306

[2] Elliott J.A. Novel approaches to multiscale modelling in materials science. Int. Mater. Rev., 2011, vol. 56, iss. 4, pp. 207–225.

DOI: https://doi.org/10.1179/1743280410Y.000000002

[3] Shaat M. A reduced micromorphic model for multiscale materials and its applications in wave propagation. Compos. Struct., 2018, vol. 201, pp. 446-454. DOI: https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.06.057

[4] Bouvard J.L., Ward D.K., Hossain D., et al. Review of hierarchical multiscale modeling to describe the mechanical behavior of amorphous polymers. J. Eng. Mater. Technol., 2009, vol. 131, iss. 4, art. 41206. DOI: https://doi.org/10.1115/1.3183779

ISSN 1812-3368. Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2024. № 1

Оценка влияния эффекта пространственной нелокальности...

[5] Ogata S., Lidorikis E., Shimojo F., et al. Hybrid finite-element/molecular-dynamics/electronic-density-functional approach to materials simulations on parallel computers. *Comput. Phys. Commun.*, 2001, vol. 138, iss. 2, pp. 143–154. DOI: https://doi.org/10.1016/S0010-4655(01)00203-X

[6] Miller R.E., Tadmor E.B. Hybrid continuum mechanics and atomistic methods for simulating materials deformation and failure. *Mater. Res. Soc. Bull.*, 2007, vol. 32, no. 11, pp. 920–926. DOI: https://doi.org/10.1557/mrs2007.189

[7] Volegov P.S., Gerasimov R.M., Davlyatshin R.P. Models of molecular dynamics: a review of EAM-potentials. Part 2: Potentials for multi-component systems. *Vestnik PNIPU. Mekhanika* [PNRPU Mechanics Bulletin], 2018, no. 2, pp. 114–132 (in Russ.). DOI: https://doi.org/10.15593/perm.mech/2018.2.11

[8] Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation. Academic Press, 2001.

[9] Ibragimov I.M., Kovshov A.N., Nazarov Yu.F. Osnovy kompyuternogo modelirovaniya nanosistem [Fundamentals of computer modeling of nanosystems]. St. Petersburg, Lan Publ., 2010.

[10] Eringen A.C. Nonlocal continuum field teories. Springer, 2002. 393 p.

[11] 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

[12] Shaat M., Ghavanloob E., Fazelzadeh S.A. Review on nonlocal continuum mechanics: physics, material applicability, and mathematics. *Mech. Mater.*, 2020, vol. 150, art. 103587. DOI: https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2020.103587

[13] Polizzotto C. Nonlocal elasticity and related variational principles. *Int. J. Solids Struct.*, 2001, vol. 38, iss. 42-43, pp. 7359–7380.

DOI: https://doi.org/10.1016/S0020-7683(01)00039-7

[14] 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

[15] 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

[16] Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Numerical solution of integrodifferential heat conduction equation for a nonlocal medium. *Math. Models Comput. Simul.*, 2014, vol. 6, no. 1, pp. 1–8. DOI: https://doi.org/10.1134/S2070048214010104

[17] 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: http://dx.doi.org/10.18698/1812-3368-2022-2-68-86

[18] Savelyeva I.Yu. Dual variational model of a steady-state thermal conductivity process taking into account spatial non-locality. *Herald of the Bauman Moscow State*

ISSN 1812-3368. Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2024. № 1 39

Technical University, Series Natural Sciences, 2022, no. 5 (104), pp. 45–61 (in Russ.). DOI: http://dx.doi.org/10.18698/1812-3368-2022-5-45-61

[19] Jolley K., Gill S.P.A. 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

[20] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Fizicheskie i matematicheskie modeli mikromekhaniki [Physical and mathematical models of micromechanics]. Moscow, BMSTU Publ., 2021.

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. Spatial nonlocality effect influence on the plate temperature state. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences,* 2024, no. 1 (112), pp. 28–40 (in Russ.). EDN: EZWDQS