**Отзыв официального оппонента**

на диссертацию Соколова Андрея Александровича на тему

«МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НЕЛОКАЛЬНОЙ ТЕРМОУПРУГОСТИ И ИХ ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ»

представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математическихнаук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

**Актуальность работы.** Диссертационная работа Соколова А.А. посвящена исследованию нелокальных моделей теплопроводности и термоупругости. Данный класс моделей позволяет учесть дальнодействующие эффекты, которые могут возникать в материалах обладающих микро- и наноструктурой. В качестве основного преимущества данного класса моделей, по сравнению с другими моделями обобщённой механики сплошной среды, можно выделить малое количество материальных параметров, требующих экспериментального уточнения. К недостаткам стоит отнести более сложную формулировку уравнений, которые выражены в интегро-дифференциальной форме, что влечёт за собой большую вычислительную сложность.

Важным этапом, после разработки математических моделей, является разработка численного алгоритма решения. В представленной на отзыв работе выбор сделан в пользу метода конечных элементов, который применительно к моделям данного класса принято называть методом нелокальных конечных элементов. В качестве основной особенности предложенного алгоритма стоит выделить способ аппроксимации области нелокального влияния относительно центров конечных элементов. Это позволило упростить численный метод и представить его в форме, где алгоритм интегрирования и алгоритм формирования портрета матрицы могут быть реализованы независимо друг от друга.

Одним из основных результатов работы является программный комплекс NonLocFEM, который собрал в себе реализацию всех предложенных в работе алгоритмов. Данный программный комплекс предназначен для вычислений на многопроцессорных вычислительных машинах. В качестве инструментов для распараллеливания кода использует интерфейсы параллельного программирования OpenMP и MPI. Показанные в работе результаты численных расчетов свидетельствуют о высокой эффективности разработанной автором программной реализации, а также о достоверности результатов моделирования.

Таким образом, результаты работы создают цельный задел в области математического моделирования сложноустроенных миеронеоднородных сред, к которым относятся широкие классы современных и перспективных материалов. По этой причине полученные в работе результаты, равно как и рассмотренные в ней задачи являются актуальными.

**Научная новизна** работы состоит в исследовании нелокальных уравнений стационарной теплопроводности и термоупругости, разработке новых методов их численного решения и реализации программного комплекса.

**Структура работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и приложения. Полный объём диссертации составляет 111 страниц, включая 37 рисунков и 9 таблиц. Список литературы содержит 138 источников.

**Во введении** приведён широкий обзор литературы, посвящённой современным инженерным задачам, трудностям, с которыми сталкиваются исследователи, а также моделям обобщённой механики сплошной среды, предназначенные для исследования материалов обладающих микро- и наноструктурой. Также здесь объяснена актуальность темы исследования, научная новизна, вклад автора, сформулированы цели и задачи исследования, положения, выносимые автором на защиту, и другие пункты.

**В первой главе** представлены математические модели нелокальной теплопроводности и нелокальной термоупругости. Рассмотрен интегральный нелокальный оператор, на его основе сформулированы уравнения стационарной теплопроводности и равновесия в интегро-дифференциальной форме, а также предложены два семейства функций нелокального влияния: полиномиальное и экспоненциальное.

**Во второй главе** описаны общие сведения о методе конечных элементов и схема аппроксимации уравнений стационарной теплопроводности и равновесия в нелокальных постановках. Получены матрично-векторые уравнения, основной особенностью которых является разбиение матриц теплопроводности и жёсткости на взвешенные суммы, где весовые параметры аналогичны таковым для интегрального нелокального оператора.

Здесь же предложен способ квадратурной аппроксимации области нелокального влияния, подразумевающий аппроксимацию области относительно каждого квадратурного узла и учёт в расчёте тех элементов, квадратурные узлы которых попали в область. Представлены алгоритмы ассемблирования слагаемых систем алгебраических уравнений, соответствующих слагаемым исходных уравнений, а также вычисления производных величин, таких как вектор плотности теплового потока и тензор напряжений.

**В третьей главе** представлена общая структура программного комплекса NonLocFEM, описана взаимосвязь модулей программы, их структура и особенности. Стоит отметить возможность использовать многопроцессорные вычислительные системы при помощи технологий OpenMP и MPI.

Далее в главе описаны алгоритмы и структуры, реализованные в программном комплексе: параллельный алгоритм ассемблирования матриц теплопроводности и жёсткости, аппроксимация области нелокального влияния относительно центров элементов на основе k-d дерева, а также оптимизированный базис для квадратичных серендиповых элементов.

**В четвёртой главе** представлен сравнительный анализ решений между классической постановкой и нелокальной. Продемонстрирована применимость принципов Сен-Венана и стабильности тепловых потоков в контексте нелокальных постановок. Изучено влияние нелокальных эффектов в областях с концентраторами тепловых потоков и напряжений. Проведён анализ температурных деформаций на областях с эллиптическими вырезами.

Главной особенностью нелокальных решений, по сравнению с их классическими аналогами, стоит считать кромочные эффекты, которые характеризуются увеличением температуры и перемещений вблизи точек приложения нагружений и снижением производных величин, таких как плотность теплового потока и напряжения на свободных от нагружений границах. Также стоит отметить снижение роли концентраторов в нелокальных постановках и увеличению уровня напряжения внутри области.

**В пятой главе** проведён анализ эффективности программного комплекса NonLocFEM. Представлены результаты ускорения расчётов на 18-ядерном процессоре Intel Core i9-10980XE, а также данные о балансировке данных между шестью вычислительными узлами, свидетельствующие о высоком уровне параллельности кода программы.

Был проведён анализ сходимости метода сопряжённых градиентов при вариации свободного параметра базиса и весового параметра модели. Представленные данные свидетельствуют об ускорении сходимости метода сопряжённых градиентов при увеличении вклада нелокального влияния. В последнем разделе главы был предложен предобуславливатель на основе неполного разложения Холецкого локальной матрицы жёсткости. При применении такого способа предобуславливания системы удалось получить двукратное ускорение сходимости решения.

В качестве **замечаний по работе** следует отметить следующие:

1. Для предобуславливания системы линейных алгебраических уравнений конечно-элементных аппроксимаций использован алгоритм неполного разложения Холецкого. Детали его реализации не приводятся. Вместе с тем, в настоящее время существуют достаточно эффективные параллельные (MPI, OpenMP) реализации неполного разложения Холецкого, например, в свободной и бесплатной библиотеке SuperLU. Использование подобных библиотек сделало бы параллельной самую вычислительно «тяжелую» часть программной реализации и позволило бы рассматривать задачи существенно большей сеточной размерности. Так же автору следует рассмотреть возможность использования предобуславливателей на основе многосеточного метода, имеющих практически идеальную масштабируемость и «по-элементных» («element-by-element») предобуславливателей.
2. Основное назначение предложенных автором моделей ‑ это моделирование процессов в микро- и нано-неоднородных средах и материалах. Вместе с тем, связь между параметрами использованных феноменологических моделей и параметрами первичными, «мкиронеоднородных» моделей в работе не показана и не анализируется.
3. Предложенный в работе алгоритм численного решения оперирует блочными матрицами и в работе были введены определения блоков, из которых ассемблируются матрицы теплопроводности (2.9) и жёсткости (2.10). Однако процедура, при которой были получены именно такие определения блоков, не до конца изложена.

Сделанные замечания не влияют на общую высокую оценку, проделанной работы. Тема работы полностью соответствует выбранной специальности и удовлетворяет всем формальным требованиям, а её содержание и вклад автора в разработку новых методов математического моделирования открывает возможности для дальнейшего изучения процессов в сложноустроенных средах и материалах в содержательных прикладных постановках.

Диссертационная работа полностью соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям в соответствии с Поставлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (ред. от 01.10.2018) «О порядке присуждения учёных степеней», а её автор Соколов Андрей Александрович заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Официальный оппонент

Доктор физико-математических наук, Евгений

ведущий научный сотрудник, Борисович

Федеральный исследовательский центр Савенков

«Институт прикладной математики

имени М.В. Келдыша Российской академии наук»

125047, Россия, Москва,

Миусская пл., д. 4.

тел. +7 (495) 220-79-24

savenkov@keldysh.ru

Подпись официального оппонента Евгения Борисовича Савенкова удостоверяю.

Ученый секретарь ИПМ им. М.В. Келдыша РАН,

к.ф.-м.н. А. А. Давыдов