

## ОТЗЫВ

**научного руководителя на диссертационную работу**  
**Гусева Андрея Олеговича "Разработка и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе"**, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.6 – "Вычислительная математика"

Диссертационная работа Гусева Андрея Олеговича выполнена за время обучения в аспирантуре ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Предметом диссертационной работы Гусева А.О. является построение и изучение вычислительных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Современный уровень развития полупроводниковых технологий предъявляет высокие требования к качеству используемых материалов. Высокая стоимость и длительность натуральных экспериментов делают математическое моделирование необходимым этапом разработки технологического режима выращивания. Кроме того, развитие технологий приводит к возникновению новых задач, и как следствие, стимулируют работу по созданию и изучению новых вычислительных методов. Каждый полупроводниковый материал обладает уникальными свойствами, поэтому решение задач математического моделирования роста монокристаллов из жидкой фазы практически не поддается стандартизации, что усложняет использование коммерческих программных комплексов для изучения процессов тепло- и массопереноса в среде с фазовым переходом.

Целью работы являлось построение надежного метода численного исследования фазовых превращений в многокомпонентных растворах и создание соответствующего комплекса программ. Особенности рассматриваемого класса задач являются наличие подвижных внутренних границ, положение которых следует определять в ходе решения, а также зависимость температуры фазового перехода от состава кристаллизующегося вещества. В диссертации были решены следующие задачи

- построена консервативная разностная схемы для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе в цилиндрической системе координат в осесимметричном приближении. Исследованы методы решения сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения движения жидкости и тепло- и массопереноса в многокомпонентной среде с фазовым переходом;
- построена консервативная разностная схема для двухфазной задачи Стефана на движущейся сетке, согласованной с формой границы раздела фаз, в исходной системе координат. Определен закон движения узлов сетки, обеспечивающий алгебраическую эквивалентность разностных схем, построенных на подвижной сетке и методом выпрямления фронта;
- проведено численное моделирование процесса получения многокомпонентного соединения методом вертикальной направленной кристаллизации. Продемонстрированы возможности построенного вычислительного алгоритма.

В основу методов, разработанных в диссертационной работе А.О. Гусева, положены следующие принципы:

- применение алгоритмов, основанных на явном выделении границы раздела фаз;
- использование консервативных разностных схем, наследующих основные свойства исходной дифференциальной задачи;
- совместное решение нелинейной системы сеточных уравнений, описывающих тепломассоперенос в системе.

Представленная в работе вычислительная стратегия, является гибким инструментом исследования процессов тепломассопереноса в многокомпонентных средах с фазовыми переходами. Методы, построенные на основе изложенных в работе принципов, могут быть использованы для численного моделирования промышленных способов получения полупроводниковых материалов из жидкой фазы.

В диссертационной работе автором самостоятельно построены разностные схемы для решения задач о фазовом переходе в многокомпонентном растворе с использованием подвижных и неподвижных сеток, определен закон движения узлов сетки, при котором эти два подхода эквивалентны; доказано, что на разностном уровне выполняются законы сохранения массы, внутренней и кинетической энергии, и разностный оператор, аппроксимирующий диссипативные члены в уравнениях движения жидкости и тепломассопереноса в расчетной системе координат, является самосопряжённым и отрицательно определённым; изучено влияние способа аппроксимации нелинейных условий на межфазной границе на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений; для персональной ЭВМ и для кластера К60, установленного в ИПМ им. М.В. Келдыша, создан комплекс программ, для решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе в цилиндрической системе координат в осесимметричном приближении; проведено численное моделирование процесса выращивания двухкомпонентного соединения методом вертикальной направленной кристаллизации. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю, заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

В ходе работы над диссертацией автор продемонстрировал высокую квалификацию в области вычислительной математики, математического моделирования и программирования. По теме диссертации опубликовано 12 научных работ. Из них десять опубликованы в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией, шесть — в журналах, индексируемых в базе данных Scopus, четыре в журналах, индексируемых в базе данных Web of Science.

Считаю, что диссертация Андрея Олеговича Гусева «Разработка и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе» представляет собой законченное исследование, выполненное на высоком научном уровне, и отвечает требованиям Положения ВАК о присуждении ученых степеней.

Автор диссертационной работы, Гусев А.О., заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.6 – "Вычислительная математика".

Научный руководитель  
к.ф.-м.н.  
старший научный сотрудник  
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Щерица Ольга Владимировна

Подпись Щерицы О.В. удостоверяю

Ученый секретарь  
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН  
к.ф.-м.н.

Давыдов Александр Александрович

Дата 19.12.2022

