

## ОТЗЫВ

официального оппонента д.ф.-м.н., профессора Т.П.Любимовой  
о диссертационной работе **Гусева Андрея Олеговича «Разработка и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе»** представляемой на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.6 – Вычислительная математика

Диссертационная работа А.О. Гусева посвящена разработке и исследованию численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе.

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Она содержит 42 рисунка, список цитируемой литературы включает 120 источников. Полный объем работы 160 страниц.

Во введении содержится обзор литературы, посвященной численным методам решения задач о фазовом переходе, формулируются цели и задачи работы, обсуждаются актуальность, новизна, теоретическая и практическая значимость и методы исследований.

Первая глава диссертации посвящена построению консервативной разностной схемы для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Задача рассматривается в осесимметричном приближении, на основе уравнений Навье — Стокса в терминах “функция тока – завихренность”, уравнений теплопереноса в твердой и жидкой фазах и условий термодинамического равновесия на границе раздела фаз. Для решения задачи применяется метод выпрямления фронта. В расчетной системе координат на прямоугольной сетке с помощью метода конечных объемов построена разностная схема, наследующая основные свойства исходной дифференциальной задачи. Доказано, что в дискретной среде конвективные слагаемые в уравнении переноса завихренности не вносят вклад в производство кинетической энергии; слагаемые, описывающие перенос в уравнениях тепло- и массообмена не влияют на балансы тепла и массы и на средние по области значения квадратов температуры и концентрации; оператор, аппроксимирующий диссипативные члены в уравнениях движения жидкости и теплопереноса в расчетной системе координат, самосопряжен и отрицательно определен; выполнены законы сохранения массы, внутренней и кинетической энергии, завихренности и балансные соотношения для квадратов температуры и концентрации..

Во второй главе диссертации рассмотрены методы решения сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения движения жидкости, тепло- и массопереноса в многокомпонентной среде с фазовым переходом. Для решения системы нелинейных алгебраических уравнений используется метод, в основе которого лежит расщепление по



физическим процессам. На примере упрощенной одномерной разностной модели процесса кристаллизации многокомпонентного раствора, отражающей характерные особенности задачи, изучено влияние на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений способа аппроксимации нелинейных условий на межфазной границе. Получены условия сходимости для методов, основанных на последовательном определении полей температуры и концентрации, и для алгоритма, в котором соответствующая система нелинейных уравнений решается совместно с помощью метода Ньютона относительно вектора неизвестных. Показано, что несмотря на большую, по сравнению с последовательными методами, вычислительную сложность, совместный алгоритм является существенно более надежным и гибким для исследования процессов кристаллизации. В той же главе разработанный вычислительный алгоритм применен для решения модельной задачи о кристаллизации двухкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле. Расчеты показали, что разностные аналоги законов сохранения выполняются с высокой точностью, вклад конвективного переноса в балансы тепла, массы и кинетической энергии на протяжении всего процесса остается на уровне машинной погрешности. Достоверность полученных результатов подтверждена расчетами, проведенными на серии сгущающихся пространственных сеток.

В следующей третьей главе с помощью методов, основанных на явном выделении границы фазового перехода, построены две разностные схемы для задачи о кристаллизации чистого вещества в прямоугольной области: на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз, и на фиксированной сетке, полученной с помощью метода выпрямления фронта. Указан закон движения узлов сетки, обеспечивающий алгебраическую эквивалентность этих двух разностных схем. Доказано, что преобразование одной схемы в другую осуществляется с помощью замены переменных, аналогично тому, как это делается в дифференциальной задаче. В силу алгебраической эквивалентности методов, разностная схема, построенная на подвижной сетке, также является консервативной. Таким образом, для двухфазной задачи Стефана выделен класс схем, наследующих основные свойства исходной дифференциальной модели.

В последней четвертой главе численно исследованы основные этапы выращивания двухкомпонентного соединения методом Бриджмена: растворение загрузки, смена растворения ростом, кристаллизация полупроводникового материала. Математическая модель, рассмотренная в главе 1, дополнена соотношениями, описывающими кинетические процессы на межфазной границе и теплообмен излучением между нагревателем и ростовой камерой. В расчетах использованы реальные параметры



установки и материалов, а также внешние температурные режимы. Численно изучена стадия растворения загрузки: определены внешние температурные режимы, позволяющие растворить необходимый объем материала. Указан технологический режим, применение которого приводит к росту кристалла с выпуклым в жидкую фазу фронтом и искомым распределением состава. Изучено влияние на ход кристаллизации процессов, протекающих на межфазной границе. Показано, что поверхностные эффекты играют существенную роль на ранней стадии процесса кристаллизации, когда скорость фронта велика.

Полученные в диссертационной работе результаты имеют большое теоретическое и практическое значение, так как предложенный вычислительный алгоритм очевидным образом обобщается на случай кристаллизации жидкой фазы с произвольным числом растворенных компонентов и применим для моделирования выращивания тонких пленок методом жидкофазной эпитаксии, получения монокристаллов методом подвижного нагревателя и диффузии в жидкой фазе, процесса легирования элементарных полупроводников и т.д.

По работе имеются следующие замечания:

1. В обзоре литературы отмечается, что недостатком метода фазового поля является то, что при численном исследовании с применением этого метода, как правило, используют явные схемы, при этом из-за структуры уравнений ограничение на шаг интегрирования по времени  $\tau$  очень жесткое:  $\tau \sim h^4$ . Однако, в последнее время появилось много работ по применению метода фазового поля, в которых предлагаются различные варианты неявных схем. Следовало бы упомянуть эти работы.
2. На с. 67 высказано предположение о незначительности изменения размеров жидкой и твердой фаз в процессе кристаллизации, на основании чего производится фиксация положения фронта кристаллизации в течение всего роста, что противоречит самой природе процесса кристаллизации. Фиксация положения фронта кристаллизации может свидетельствовать о применении квазистационарного подхода, однако из текста диссертации следует, что расчеты проводятся в полной нестационарной постановке.
3. Не поддержано ссылками утверждение о плохой обусловленности дискретных аналогов уравнений Навье-Стокса на подробных сетках на с. 77.
4. На с. 79 упоминается, что используемая расчетная сетка равномерна в радиальном направлении. В то же время используется сильное сгущение сетки вблизи фронта кристаллизации в осевом направлении. Таким образом, получаемые контрольные объемы могут оказываться сильно вытянутыми в условиях имеющего место сильного искривления

фронта кристаллизации вблизи тройной точки кристалл-раствор-ампула, а также при моделировании поздних стадий процесса выращивания, при приближении фронта к верхнему концу ампулы.

5. В работе используется метод выпрямления границы. Каковы границы его применимости? Не станет ли преобразование координат разрывным, если топология области изменится (фазы разобьются на подобласти)?

6. Известно, что метод Ньютона очень чувствителен к начальному приближению. Как это влияет на вывод о том, что совместный алгоритм является существенно более надежным и гибким для исследования процессов кристаллизации, чем последовательные методы?

Сделанные замечания не влияют на общую положительную оценку работы. Диссертация А.О. Гусева представляет собой цельное и достаточно полное исследование рассматриваемой проблемы и демонстрирует владение диссертантом численными методами решения задач о фазовом переходе в многокомпонентных растворах. Достоверность полученных результатов обоснована. По теме диссертации опубликовано 12 работ, из них 10 в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК, 6 в журналах, индексируемых в базе данных Scopus, 4 в журналах, индексируемых в базе данных Web of Science. Автореферат соответствует содержанию диссертации, а сама диссертационная работа соответствует требованиям п. 9 «Положения ВАК о присуждении ученых степеней». Считаю, что А.О. Гусев заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.6 – Вычислительная математика.

Официальный оппонент, заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией вычислительной гидродинамики, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук – филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук



Татьяна Петровна Любимова

Рабочий адрес: 614068, Россия, г. Пермь, ул. Академика Королёва, 1.

Телефон: +7 (342) 237 78 86



Электронная почта: [lubimova@icmm.ru](mailto:lubimova@icmm.ru)

Я, Татьяна Петровна Любимова, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

*Любимова*

Татьяна Петровна Любимова

Подпись Любимовой Т.П. заверяю



*Иванов А.А. Ученого*  
*специалиста по кадрам*