

«УТВЕРЖДАЮ»
Директор Федерального
государственного учреждения
«Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша
Российской академии наук»
член-корреспондент РАН Аптекарев А.И.



20 2 2 г

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного учреждения
«Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша
Российской академии наук»

Диссертация «Разработка и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе» выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

В период подготовки диссертации соискатель Гусев Андрей Олегович обучался в аспирантуре ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

В 2018 г. окончил Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана по специальности 01.04.04 - прикладная математика.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2022 году Федеральным государственным учреждением "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук»

Научный руководитель — кандидат физико-математических наук Щерица Ольга Владимировна работает в должности старшего научного сотрудника отдела № 11 Федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук»

По итогам обсуждения принято следующее Заключение:

Диссертация Гусева Андрея Олеговича посвящена разработке и исследованию численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Диссертационная работа является законченной научно-квалификационной работой, которая выполнена на высоком научном уровне и содержит решение следующих научных задач:

- Построен и исследован метод численного решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Постановка математической задачи учитывает движение фронта кристаллизации, конвективный и диффузионный тепломассоперенос в растворе, процессы теплопроводности и диффузии в кристалле, зависимость температуры фазового перехода от состава фаз. Доказано, что предложенный вычислительный алгоритм гарантирует выполнение разностных аналогов законов сохранения, характерных для рассматриваемого физического процесса.
- Изучено влияние способа аппроксимации нелинейных условий на межфазной границе на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений. Получены условия сходимости итерационных методов, основанных на последовательном и совместном определении полей температуры и концентрации.
- Для двухфазной задачи Стефана на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз, построена разностная схема, алгебраически эквивалентная схеме, построенной методом выпрямления фронта. Доказано, что обе схемы наследуют основные свойства исходной дифференциальной задачи и, аналогично дифференциальному случаю, переходят друг в друга с помощью замены переменных.

Практическая значимость исследования состоит в следующем. 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. В диссертационной работе для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе построен вычислительный метод, позволяющий проводить исследования различных режимов выращивания кристаллов для широкого круга полупроводниковых материалов. Результаты расчетов, полученные в работе, согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными и отражают качественные особенности рассмотренных методов выращивания полупроводниковых материалов из жидкой фазы.

Научную новизну работы определяют следующие результаты:

- построен численный метод для исследования двумерной модели процесса кристаллизации бинарного соединения, учитывающей тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах, движение фронта кристаллизации и зависимость температуры фазового перехода от состава фаз. Доказано, что предложенная разностная схема является консервативной: в дискретной модели выполнены законы баланса для завихренности, внутренней и кинетической энергии, массы.
- для модели процесса кристаллизации бинарного соединения, учитывающей тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах в диффузионном приближении, проведен анализ устойчивости различных методов численной реализации нелинейных условий на границе раздела фаз. Показано, что алгоритмы, основанные на последовательном определении полей температуры и концентрации, имеют ограниченную область применения. Доказано, что совместный алгоритм решения задачи обладает значительным запасом устойчивости и позволяет численно исследовать фазовые переходы в многокомпонентных системах для широкого круга материалов;
- для двумерной задачи Стефана представлено семейство разностных схем, полученное методами с явным выделением границы фазового перехода.

Доказано, что разностная схема, построенная на подвижной сетке, и разностная схема, построенная методом выпрямления фронта, алгебраически эквивалентны.

Вычислительный алгоритм, предложенный Андреем Олеговичем Гусевым, является гибким инструментом численного исследования фазовых переходов. Разработанный автором метод обладает значительным запасом устойчивости и позволяет моделировать различные режимы выращивания из жидкой фазы для широкого круга многокомпонентных материалов. Параллельный программный комплекс, созданный на основе изложенных в диссертационной работе принципов, позволяет получать детальную информацию о ходе процесса кристаллизации существенно быстрее, чем в случае проведения натуральных экспериментов, и может быть использован для оптимизации реальных технологических режимов.

Диссертация соответствует требованиям, установленным в п.п. 9 - 14 Положения «О присуждении учёных степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. 8 № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям и является законченной научно-квалификационной работой.

Диссертационная работа Гусева Андрея Олеговича «Разработка и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе» соответствует паспорту научной специальности 1.1.6 «Вычислительная математика»:

- формуле паспорта специальности, так как в диссертации рассматриваются вопросы «разработки и теории методов численного решения математических задач, возникающих при моделировании естественнонаучных и прикладных проблем, а также реализация методов в практическом решении задач с применением современных ЭВМ»;
- областям исследования паспорта специальности, в частности:
 - 1) пункту «Разработка теории численных методов, анализ и обоснование алгоритмов, вопросы повышения их эффективности»;

2) пункту «Реализация численных методов в решении прикладных задач, возникающих при математическом моделировании естественнонаучных и научно-технических проблем, соответствие выбранных алгоритмов специфике рассматриваемых задач»;

Результаты, изложенные в работе, получены автором лично, являются новыми и представляют научный интерес. Основные результаты диссертации полно отражены в 12 работах. Статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК и международных баз цитирования:

1. Щерица О.В., Гусев А.О., Мажорова О.С. Численное исследование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2016. — № 125. — 31 с.
2. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Численное исследование процесса кристаллизации чистого вещества из раствора в присутствии примеси // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2017. — № 24. — 22 с.
3. Щерица О.В., Гусев А.О., Мажорова О.С. Об одном методе решения задачи кристаллизации многокомпонентного раствора в цилиндрической ампуле // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. — 2017. — № 5. — С. 118–138.
4. Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Conservative finite-difference algorithm for the thermodiffusion Stefan problem // Lecture Notes in Computer Science. — 2019. — Т. 11386. — С. 256—263.
5. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Анализ устойчивости методов решения задачи о фазовом переходе // Дифференциальные уравнения. — 2019. — Т. 55, № 7. — С. 929 - 939.

Переводная версия:

Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Stability analysis of solution methods for a phase transition problem // Differential Equations. — 2019. — Т. 55, №. 7. — С. 929–939.

6. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Параметрическое исследование процесса кристаллизации чистого вещества в присутствии примеси // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2019. — № 130. — 30 с.

7. Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques // Computers & fluids. — 2020. — Т. 202. — С. 104501.
8. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Опыт применения библиотек Intel MKL и PETSc для решения задач тепломассопереноса с фазовым переходом // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2020. — № 62. — 34 с.
9. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. К вопросу об эквивалентности разностных методов решения задачи Стефана на подвижных и фиксированных сетках // Дифференциальные уравнения. — 2021. — Т. 57, № 7. — С. 907—921.
Переводная версия:
Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Two Equivalent finite volume schemes for Stefan problem on boundary-fitted grids: front-tracking and front-fixing techniques // Differential Equations. — 2021. — Т. 57, № 7. — С. 876–890.
10. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. О свойствах одного разностного метода решения двухфазной задачи Стефана // Дифференциальные уравнения. — 2022. — Т. 58, № 7. — С. 930—946.
Переводная версия:
Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. On the properties of conservative finite volume scheme for the two-phase Stefan problem// Differential Equations. — 2022. — Т. 58, № 7. — С. 930–946.
11. Гусев А.О. Сравнение трех математических моделей процесса направленной кристаллизации многокомпонентного раствора // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2022. — № 53. — 32 с.
12. Гусев А.О. Численное моделирование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора на подвижной сетке // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2022. — № 64. — 30 с.

Результаты работы представлены на следующих научных конференциях и семинарах:

1. Всероссийская научная конференция «Теоретические основы конструирования численных алгоритмов и решение задач математической физики», посвященная памяти К.И. Бабенко, Пушкино, Россия (2022);
2. Международная научная конференция «Фундаментальные и прикладные задачи механики (FAPM-2021)», Москва, Россия (2021);
3. International symposium «Non-equilibrium processes in continuous media», Пермь, Россия (2021);
4. VIII Международная конференция «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии», Ижевск, Россия (2019);
5. FDM'18: Seventh conference of finite difference methods: theory and applications, Лозенец, Болгария (2018);
6. Международная научная конференция «Фундаментальные и прикладные задачи механики (FAPM-2017)», Москва, Россия (2017);
7. Международная научная конференция «Современные проблемы математической физики и вычислительной математики», посвященная 110-летию академика А.Н. Тихонова, Москва, Россия (2016);
8. XIV International seminar «Mathematical models and modeling in laser plasma processes and advanced science technologies», Москва, Россия (2016)

Результаты работы также обсуждались в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша на семинарах «Вычислительные методы и математическое моделирование» им. Ю.П. Попова под руководством проф. М.П. Галанина и проф. В.М. Чечёткина.

Диссертация «Разработка и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе» Гусева Андрея Олеговича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.6 «Вычислительная математика».

Заключение принято на заседании семинара «Вычислительные методы и математическое моделирование» им. Ю.П. Попова «12» декабря 2022 года.

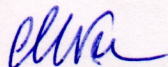
На заседании присутствовало 23 чел.

Выступили с положительной оценкой диссертации: Галанин М.П., Жуков В.Т.

Результаты голосования: «за» - 23 чел., «против» - 0 чел., «воздержались» - 0 чел.

Протокол № 279 от «12» декабря 2022 года.

Руководитель семинара,
д.ф.-м.н., профессор,
гл.н.с., и.о. зав. отд. № 11



Галанин М.П.

Секретарь семинара,
к.ф.-м.н., с.н.с. отд. № 11



Лукин В.В.