

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.237.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР ИНСТИТУТ
ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША РАН»
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 27 апреля 2023 № 8

О присуждении **Гусеву Андрею Олеговичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Разработка и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе» по специальности 1.1.6 – «Вычислительная математика» принята к защите 26.01.23 (протокол заседания №2/пз) диссертационным советом 24.1.237.01, созданным на базе Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук» (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН), 125047, Москва, Миусская пл., д. 4. Диссертационный совет утвержден приказом Минобрнауки России №105/нк от 11 апреля 2012 года.

Соискатель **Гусев Андрей Олегович**, 1994 года рождения, в 2018 году окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» с присвоением квалификации магистр по направлению подготовки 01.01.04 – Прикладная математика.

С 2018 г. по 2022 г. соискатель освоил программу подготовки научно-педагогических кадров в очной аспирантуре ИПМ им. М.В. Келдыша РАН по направлению подготовки «01.06.01 Математика и механика».

В настоящее время соискатель работает в должности младшего научного сотрудника в 11 отделе ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Диссертация выполнена в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН в период обучения в аспирантуре.

Научный руководитель – Щерица Ольга Владимировна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник 11 отдела ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Официальные оппоненты:

Любимова Татьяна Петровна, заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией вычислительной гидродинамики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук – филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук,

Еленина Татьяна Георгиевна, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник кафедры математического моделирования и информатики Физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова дали **положительный** отзыв на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» в своем **положительном** отзыве, подписанном **Колдобой Александром Васильевичем**, доктором физико-математических наук, заведующим кафедрой моделирования и технологий разработки нефтяных месторождений МФТИ и утвержденным **Баганом Виталием Анатольевичем**, кандидатом физико-математических наук, проректором по научной работе МФТИ указала, что работа выполнена на высоком научном уровне и содержит решение сложной и актуальной задачи, связанной с разработкой методов численного изучения процессов тепломассопереноса в среде с фазовым

переходом. Диссертация вносит существенный вклад в исследование и разработку методов численного решения задач кристаллизации. Надежность и эффективность предложенного вычислительного алгоритма позволяют рекомендовать его в качестве инструмента для проведения многопараметрического моделирования. Результаты численных экспериментов могут быть использованы профильными организациями (АО Гиредмет, ИК РАН, ИНХ СО РАН и др.) при разработке новых и оптимизации существующих технологических режимов. Диссертация Гусева Андрея Олеговича является законченным научным исследованием, содержание и результаты работы соответствует паспорту научной специальности 1.1.6 – «Вычислительная математика» и требованиям п. 9 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 №842 «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, А.О. Гусев, заслуживает присуждения ученой степени кандидата наук физико-математических наук по специальности 1.1.6 – «Вычислительная математика».

Соискатель имеет 12 опубликованных работ по теме диссертации, в том числе 10 публикаций в изданиях, входящих в перечень ВАК, 6 – в журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus.

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. **(ВАК)**
2. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Численное исследование процесса кристаллизации чистого вещества из раствора в присутствии примеси // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2017. — № 24. — 22 с. **(ВАК)**
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. **(ВАК, Scopus)**

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. **(Scopus)**
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. **(ВАК)**
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. **(Scopus, WOS)**
6. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Параметрическое исследование процесса кристаллизации чистого вещества в присутствии примеси // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН*. — 2019. — № 130. — 30 с. **(ВАК)**
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. **(Scopus, WOS)**
8. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Опыт применения библиотек Intel MKL и PETSc для решения задач тепломассопереноса с фазовым переходом // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН*. — 2020. — № 62. — 34 с. **(ВАК)**
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. **(ВАК)**
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. **(Scopus, WOS)**
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.

(ВАК)

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.

(Scopus, WOS)

11. Гусев А.О. Сравнение трех математических моделей процесса направленной кристаллизации многокомпонентного раствора //Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2022. — № 53. — 32 с. **(ВАК)**
12. Гусев А.О. Численное моделирование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора на подвижной сетке // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2022. — № 64. — 30 с. **(ВАК)**

В работах [3, 4, 7-9] для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе автором самостоятельно построены и изучены разностные схемы на подвижных и фиксированных сетках, получены численные результаты, демонстрирующие надежность и эффективность рассмотренного подхода. Утверждения о свойствах предложенных численных методов доказаны автором в работах [5, 9, 10]. В работах [1, 2, 6, 7, 11, 12] автором численно изучены реальные технологические режимы получения полупроводников монокристаллов и монокристаллических слоев; в расчетах использовался параллельный программный комплекс, самостоятельно разработанный Гусевым А.О., на основе предложенных вычислительных алгоритмов.

Научные статьи отражают основные результаты диссертационной работы. Сведения об опубликованных соискателем работах достоверны.

На диссертацию поступили отзывы ведущей организации и оппонентов, также поступил 1 отзыв на автореферат. Все отзывы положительные. В отзывах содержится ряд замечаний:

В отзыве ведущей организации МФТИ:

1. Преимущества построенного алгоритма демонстрируются автором на примере численного моделирования процесса направленной кристаллизации двухкомпонентного раствора. Анализ результатов расчетов для режимов выращивания соединений с большим числом компонентов позволил бы более полно представить результаты работы.
2. В третьей главе для двухфазной задачи Стефана построена и исследована консервативная разностная схема на подвижной сетке. Результаты расчетов, полученные с помощью данной схемы, в диссертационной работе не представлены.
3. При выращивании кристаллов из высокотемпературных расплавов из-за неоднородности распределения температуры в материале возникают термические напряжения, являющиеся основной причиной образования дислокаций. Плотность дислокаций является одной из главных характеристик качества кристалла. В четвертой главе с помощью численного моделирования определен технологический режим, обеспечивающий рост кристалла с выпуклой межфазной границей и заданным распределением состава. Для того чтобы подтвердить практическую применимость предложенного внешнего температурного режима целесообразно оценить плотность распределения дислокаций в полученном монокристалле.
4. Формулировка «закон сохранения теплоты», которая несколько раз встречается в диссертации, не является удачной.

В отзыве официального оппонента, д.ф.-м.н. Любимовой Т.П.:

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 τ 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?

В отзыве официального оппонента, к.ф.-м.н. Елениной Т.Г.:

1. Во второй главе получены условия сходимости итерационных методов решения сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения тепломассопереноса в среде с фазовым переходом. В расчетах показано влияние величины коэффициента диффузии в жидкой фазе на сходимость соответствующих алгоритмов, при этом влияние других параметров соединения, таких как коэффициент сегрегации и угол наклона фазовой диаграммы не рассмотрено.
2. В тексте работы отсутствует сравнение результатов расчетов с аналитическими решениями. При этом соответствующее сопоставление приведено в статье автора «Сравнение трех математических моделей процесса направленной кристаллизации многокомпонентного раствора». Представляется, что включение соответствующего материала в текст диссертационной работы обогатило бы ее содержание.
3. Диссертантом разработан параллельный программный комплекс, реализующий предложенные им математические модели и вычислительные алгоритмы. Описание комплекса в работе, прежде всего с точки зрения особенностей его параллельной реализации, сделало бы изложение более полным. Также существенный интерес, с учетом высокой сложности и практической значимости решаемой задачи, представляет информация о практической параллельной масштабируемости использованных автором алгоритмов и разработанной им программной реализации.
4. Работа не лишена опечаток, однако они не мешают пониманию изложенного материала. Иногда специальные термины даны в тексте без определения, например, «жидкофазная эпитаксия», «метод подвижного нагревателя» и др.

Отзыв на автореферат от **Мухина Сергея Ивановича**, д.ф.-м.н., профессора, заместителя заведующего кафедрой вычислительных методов ВМК МГУ им. М.В. Ломоносова замечаний не содержит.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью и высоким уровнем компетентности по всем основным вопросам, рассмотренным в диссертации, включая численное изучение процессов тепло- и массопереноса, разработку и анализ новых вычислительных алгоритмов, реализации их в виде программного комплекса, применение методов и средств математического моделирования для решения сложных научно-практических задач, что подтверждается списком публикаций официальных оппонентов и сотрудников ведущей организации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. **Построены и исследованы** разностные схемы на неподвижных сетках, предназначенные для решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. **Доказаны** теоремы о выполнении в дискретной модели аналогов законов сохранения, характерных для рассматриваемого физического процесса.
2. **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.
3. **Построена** консервативная разностная схема для двухфазной задачи Стефана в декартовой системе координат на движущейся сетке, согласованной с формой границы раздела фаз. **Доказано**, что разностные схемы, полученные в работе с помощью метода выпрямления фронта и на подвижных сетках, алгебраически эквивалентны.
4. **Разработан** параллельный программный комплекс для численного моделирования промышленных способов получения полупроводниковых материалов из жидкой фазы.

Теоретическая значимость исследования состоит в том, что разработаны и исследованы методы численного решения двумерной задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Соответствующая математическая модель учитывает тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах, движение фронта кристаллизации и зависимость температуры фазового перехода от состава фаз. С помощью методов, основанных на явном выделении границы раздела фаз, построены разностные схемы, обеспечивающие выполнение дискретных аналогов законов сохранения массы, внутренней и кинетической энергии. Выделен класс схем, для которых метод выпрямления фронта и метод, основанный на использовании подвижных сеток, согласованных с формой фронта кристаллизации, алгебраически эквивалентны. Проведен анализ устойчивости различных методов численной реализации нелинейных условий на границе раздела фаз. Получены и доказаны условия сходимости итерационных методов, основанных на последовательном и совместном определении полей температуры и концентрации.

Практическое значение результатов исследования заключается в том, что на основе изложенных в работе алгоритмов автором разработан параллельный программный комплекс, позволяющий проводить исследования промышленных режимов выращивания монокристаллов. Результаты расчетов, полученные в работе, согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными. Надежность и эффективность предложенного вычислительного алгоритма позволяют рекомендовать его в качестве инструмента для проведения многопараметрических исследований процессов выращивания полупроводниковых материалов из жидкой фазы.

Достоверность научных положений и выводов диссертации подтверждается тем, что все утверждения о свойствах вычислительных алгоритмов, предложенных автором в диссертационной работе, строго

доказаны, иллюстрируются результатами расчетов, в том числе, проведенными на последовательности сгущающихся сеток.

Личный вклад соискателя. Автором самостоятельно построены представленные в работе разностные схемы, доказаны утверждения о свойствах рассмотренных численных методов, разработан параллельный программный комплекс для численного исследования процессов тепло- и массопереноса в среде с фазовым переходом, получены все численные результаты. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю.

В ходе защиты диссертации вопросы соискателю задали члены диссертационного совета: Козлов А.Н., Колесниченко А.В., Четверушкин Б.Н., Елизарова Т.Г., Меньшов И.С., Гаранжа В.А., Василевский Ю.В.

Существенных замечаний по диссертации высказано не было. Соискатель ответил на заданные ему в ходе заседания вопросы, согласился с рядом замечаний, указанных в письменных отзывах, и дал комментарии в необходимых случаях.

В дискуссии приняли участие: зав. отделом №11 доктор физ.-мат. наук профессор Галанин М. П., члены совета - Мажукин В.И., Четверушкин Б.Н.

На заседании 27 апреля 2023 года диссертационный совет принял решение за разработку и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе, вносящих существенный вклад в развитие вычислительной математики, присудить Гусеву Андрею Олеговичу ученую степень кандидата-физико-математических наук по специальности 1.1.6 – «Вычислительная математика».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 24 человек,

входящих в состав совета, проголосовали: за 18, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета 24.1.237.01



Четверушкин Борис Николаевич

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.237.01

A handwritten signature in blue ink, likely belonging to Marina Andreevna Kornilina.

Корнилина Марина Андреевна

27.04.2023 г.