

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по НРиПСР Федерального
государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего
образования «Удмуртский
государственный университет»,
доктор экономических наук, профессор

— А.М. Макаров

« 12 » апреля 2019 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Удмуртский государственный университет»
на диссертацию Стародумова Ильи Олеговича
«Математическое моделирование структурно-фазовых превращений модифицированным методом кристаллического фазового поля», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертационная работа Стародумова Ильи Олеговича посвящена исследованию динамики микроструктуры вещества во время процесса кристаллизации.

Моделирование трехмерных кристаллических структур вещества во время структурно-фазовых переходов является актуальной задачей современного материаловедения. Развитие физико-математических теорий и высокопроизводительных вычислительных алгоритмов позволили добиться существенных результатов по данной тематике. Перспективными оказались модели в рамках фазово-полевой методологии, основанные на теории фазовых переходов Ландау и функционале Гинзбурга-Ландау для свободной энергии. В рамках теории фазового поля удалось успешно описать различные явления на мезоскопических масштабах, в том числе процессы структурообразования при затвердевании из жидкого состояния, зародышеобразования, зарождения и роста зерен, конвекции несмешивающихся жидкостей, а также при различных многофазных и мультимасштабных превращениях. Одним из новых направлений фазово-полевых моделей является метод кристаллического фазового поля (PFC), основанный на функционале свободной энергии в форме Бразовского. Данный метод открывает возможности эффективно описывать структурно-фазовые трансформации на микроскопическом уровне. Модифицированный метод кристаллического фазового поля (MPFC) за счет учета быстрых степеней свободы расширяет область применимости модели на процессы кристаллизации, происходящие вдали от состояния термодинамического равновесия. С теоретической точки зрения это означает возможность моделировать динамику микроструктуры при значительных переохлаждениях и вблизи метастабильных структурных состояний вещества.

В диссертационной работе Стародумова И. О. исследуется модифицированная модель кристаллического фазового поля, описываемая дифференциальным уравнением в частных производных шестого порядка по пространству и второго порядка по времени. Для этого уравнения в диссертации представлен вычислительный алгоритм, основанный на методе изогеометрического анализа. На основе разработанного алгоритма представлен программный комплекс и результаты решения ряда задач с использованием этого программного комплекса.

Диссертация Стародумова И.О. состоит из введения, четырех глав основного содержания, заключения и списка цитируемой литературы из 169 наименований. Общий объем диссертации составляет 106 машинописных страниц, включая 21 рисунок и 1 таблицу.

Во введении обоснована актуальность выбранной темы, сформулирована цель работы, описаны научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов. Введение содержит основные положения, выносимые на защиту, сведения о достоверности и апробации результатов. В последующих главах диссертационной работы изложен оригинальный материал.

Первая глава посвящена описанию модифицированной модели кристаллического фазового поля. В главе рассмотрена проблема моделирования структурно-фазовых превращений при кристаллизации вещества на атомистическом пространственном уровне. Автором подчеркивается, что, традиционные атомистические подходы зачастую сталкиваются с проблемой чрезвычайно высокой вычислительной сложности постановок, в которых задача решалась бы на диффузионных масштабах времени. Для решения такой проблемы в начале 2000-х годов была предложена модель кристаллического фазового поля. Далее модель динамики структурно-фазовых переходов рассматривается как немарковский процесс, приводится обоснование модификации традиционного метода кристаллического фазового поля путем подстановки функции памяти, соответствующей локальной экспоненциальной релаксации.

Во второй главе исследуется вычислительный метод, основанный на теории изогеометрического анализа. Используя указанную теорию в главе формулируются уравнения для NURBS-функций, формирующих глобальный базис для метода Галеркина. Такой подход позволяет поставить задачу решения уравнения модифицированного кристаллического фазового поля с периодическими граничными условиями в терминах метода Галеркина, используя в качестве базисных функций C^2 -непрерывные NURBS-функции, что обеспечивает глобальную аппроксимацию решения без интерполяции.

В третьей главе для верификации диссертационных разработок исследуются некоторые задачи по моделированию стационарных и нестационарных микроструктур вещества в ходе его кристаллизации. В первой задаче рассматриваются структуры, предсказанные ранее теоретически. Для различных наборов параметров средняя атомная плотность-переохлаждение получены стационарные кристаллические структуры. Эти структуры были сопоставлены с соответствующей диаграммой состояний, что подтвердило соответствие результатов компьютерного моделирования на основе диссертационных разработок и сделанных ранее теоретических выводов. Вторая и третья задачи позволили продемонстрировать чувствительность результатов моделирования к начальному возмущению моделируемой системы, а также к параметрам дискретизации пространства

конечных элементов. На основе исследования этих задач сделаны важные обобщения и сформулированы практические рекомендации по проведению симуляций.

В четвертой главе описываются программный комплекс PFC_Simulator, разработанной автором для исследования моделирования структурно-фазовых превращений модифицированным методом кристаллического фазового поля с использованием суперкомпьютеров. Приводятся используемые технологии, состав программного комплекса, функциональные возможности.

В заключении подведены итоги диссертационной работы, сформулированы основные результаты и возможные направления для продолжения исследований по тематике диссертации.

Достоверность результатов диссертационной работы обуславливается строгостью используемого математического аппарата. Разработанный программный комплекс прошел процедуру государственной регистрации.

Проведенные в диссертационной работе научные исследования могут представлять интерес для весьма широкого круга специалистов, занимающихся моделированием структурно-фазовых переходов, материаловедением, вычислительными алгоритмами и программированием. Содержание работы соответствует паспорту специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертационная работа написана ясным и живым языком, который отражает высокий уровень понимания автором представляемых результатов. К сожалению, автор обходит стороной вопрос о сопоставлении результатов моделирования с реальными материалами. Этот вопрос, в некоторой степени, решен для чистых материалов, но остается пока закрытой областью для бинарных и более сложных систем, хотя это критическая проблема для дальнейшего развития метода. Некоторые сложности на семинаре вызвал вопрос о необходимом числе используемых глобальных базисных функций. Этот вопрос решался автором чисто практически, хотя теоретическая оценка необходимого числа базисных функций была бы очень полезна для общего понимания используемого численного алгоритма.

Указанные замечания носят, скорее, характер пожеланий и не снижают ценности проведенных исследований и общего хорошего впечатления от диссертационной работы.

В целом, работа имеет высокую научную и практическую значимость. Диссертация Стародумова И.О. выполнена на высоком уровне и является законченным научным исследованием в области математического моделирования, численных методов и комплексов программ. Полученные в диссертации результаты являются новыми и интересными. Научные положения и выводы являются обоснованными. Основные результаты диссертации представлены докладами на научных конференциях и хорошо отражены в публикациях автора, среди которых можно отметить 9 статей в ведущих рецензируемых отечественных и зарубежных научных журналах, входящих в системы цитирования Web of Science, Scopus и рекомендованных ВАК РФ для опубликования основных научных результатов диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

Автореферат и опубликованные работы очень ясно и в достаточной мере отражают содержание работы.

Таким образом, по степени новизны, обоснованности и достоверности полученных научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертационной работе, актуальности темы диссертационного исследования, практической значимости полученных результатов диссертация Стародумова Ильи Олеговича полностью удовлетворяет всем требованиям п. 9 действующего «Положения о присуждении учёных степеней». Диссертационная работа содержит новые результаты по всем трем разделам выбранной специальности: математическому моделированию, численным методам и комплексам программ, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Отзыв одобрен и принят на расширенном заседании кафедры теоретической физики 12.04.2019, протокол № 3.

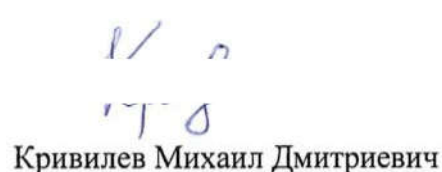
Отзыв на диссертационную работу подготовили:

Заведующий кафедрой
теоретической физики,
к.ф.-м.н., доцент
01.04.02 – теоретическая физика



Лебедев Владимир Геннадьевич

Заведующий лабораторией,
Учебно-научная лаборатория "Физика конденсированных сред"
д.ф.-м.н., доцент
05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ



Кривилев Михаил Дмитриевич

Почтовый адрес:
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1
Тел.: 8(3412) 68–16–10
E-mail: rector@udsu.ru
<http://udsu.ru>