

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

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 математического моделирования процесса структурно-фазовых превращений методом кристаллического фазового поля в модифицированной постановке.

Модель кристаллического фазового поля сформулирована для описания непрерывных переходов на микроструктурном уровне из однородного состояния в периодическое и между различными периодическими состояниями на диффузионных временных масштабах. В основе модели кристаллизация реальной жидкости заменена конденсацией решеточного газа, когда имеется критическая точка (при равенстве плотностей фаз). Это существенное упрощение, потому что критическая точка между жидкостью и кристаллом отсутствует. Оппонент не является сторонником такого модельного подхода, но вынужден отметить, что модель кристаллического фазового поля имеет популярность среди металлургов и химиков. Они имеют дело с кристаллизацией сложных систем и нуждаются в какой-либо прогностической пользе теоретической схемы. Игнорирование реальной структуры жидкости и отсутствия критической точки делает указанную модель применимой только к кинетическому (неравновесному) фазовому переходу и позволяет прогнозировать некоторые макрокинетические параметры кристаллизации, которые могут полезны для прикладных проблем.

Динамика кристаллизации сложных систем в модели кристаллического фазового поля требует учета дополнительных степеней свободы параметра порядка. Исследуемая в диссертации модификация модели кристаллического фазового поля в отличии от классической модели учитывает такую степень свободы в форме дополнительного инерционного члена и, тем самым, расширяет область применимости метода. Модифицированная модель описывается нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных шестого порядка по пространству и второго порядка по времени, поэтому требует разработки вычислительного метода и программного комплекса.

Диссертация представлена на 106 страницах, содержит введение, 4 главы и заключение.

Во введении представлены принципы моделирования структурно-фазовых превращений в веществе методом кристаллического фазового поля; обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы; приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагается научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

Первая глава посвящена подробному обзору метода кристаллического фазового поля для моделирования исследуемого направления – структурно-фазовых превращений из жидкого в твердое состояние. Отмечено, что модель кристаллического фазового поля является новым подходом (развиваемым с начала 2000-х годов) по сравнению с теорией движения фазовой границы, предложенной в середине прошлого века. Отдельно представлена модификация модели кристаллического фазового поля, для учета быстрых степеней свободы параметра порядка введением в модель функции памяти, описывающей релаксацию.

Вторая глава описывает постановку вычислительной задачи по решению дифференциального уравнения модифицированной модели и приведен численный алгоритм. Алгоритм основан на конечно-элементном методе Галеркина.

Третья глава посвящена анализу решения трех вычислительных задач по моделированию трехмерных стационарных и нестационарных структур. Представленные результаты позволяют в полной мере оценить эффективность диссертационных разработок, верифицировать модифицированную модель кристаллического фазового поля.

Четвертая глава диссертации содержит описание программного комплекса для моделирования динамики структурно-фазовых переходов модифицированным методом кристаллического фазового поля. Программный комплекс состоит из нескольких модулей и реализован с использованием открытых алгоритмических библиотек, компиляторов и интерфейсов. Показано, что программный комплекс позволяет проводить эффективные расчеты на суперкомпьютерах и имеет регистрацию в Роспатенте.

По содержанию диссертации имеются некоторые замечания.

1. Рассматриваемая модификация модели кристаллического фазового поля основана на функции памяти типа Максвелла. Однако, существуют и другие, более сложные функции памяти для описания динамики структурно-фазовых трансформаций. Почему выбрана эта функция?

2. В главе 3 приводится гипотеза о необходимости учета в модели «подходящего стохастического аддитивного члена, описывающего колебания поля атомной плотности...». Приводятся ссылки на работы автора, где данная гипотеза уже исследована. Однако, в самой диссертации этот вопрос не раскрывается. Возможно, следовало бы уделить этой теме больше внимания.

3. Поскольку в равновесном фазовом переходе жидкость—кристалл отсутствует критическая точка, а в рассматриваемой модели она важна, то не следует серьезно относиться к микроструктурным параметрам кристаллизации (например модель даст завышенную толщину межфазного слоя).

Результаты диссертации в полной мере опубликованы в 11 печатных работах, из которых 9 – статьи в профильных рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК и проиндексированных в базах Scopus и Web of Science. В ходе работы над диссертацией была издана монография. Материалы диссертации успешно прошли апробацию на многих международных физико-математических конференциях.

Тема и содержание работы соответствуют паспорту специальности 05.13.18 — математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Автореферат и опубликованные работы отражают содержание диссертации.

Считаю, что диссертационная работа соответствует требованиям п.п. 9-14 действующего «Положения о присуждении учёных степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Стародумов Илья Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент,
заведующий лабораторией фазовых переходов и неравновесных процессов,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики
Уральского отделения Российской академии наук

Д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН



Коверда Владимир Петрович



«25» апреля 2019г.

Почтовый адрес:
620016, г. Екатеринбург, ул.Амундсена, 107а,

Тел.: (343) 267-88-04,

Email: koverda@itp.uran.ru

Подпись Коверда В.П. заверяю

Делопроизводитель Т.Л. Волкова