

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 структурно-фазовых превращений при кристаллизации вещества и – конкретно – моделированию динамики микрокристаллических структур.

Несмотря на то, что процессы кристаллизации вещества во время фазового перехода из жидкого в твердое состояние изучались очень долго и продолжают изучаться в настоящее время, многие детали этого переходного процесса остаются плохо формализованными. В то же время, понимание процессов кристаллизации на уровне физико-математических моделей позволяет, как минимум, определить влияние технологических параметров на микроструктуру и свойства образующегося материала. В перспективе изучение процессов затвердевания позволяет синтезировать новые материалы с улучшенными свойствами, оптимизировать процесс производства и повысить его эффективность. Таким образом, тематика диссертационной работы представляет большой научный и практический интерес, в том числе – соответствует приоритетному направлению развития науки “Индустрия наносистем”.

В диссертационной работе Стародумова И.О. исследуется важное малоизученное направление – моделирование процесса высокоскоростной кристаллизации модифицированным методом кристаллического фазового поля. Моделирование такого процесса осложняется тем, что при его описании необходимо учитывать некоторую величину релаксации системы, связанную с локальными внутренними термодинамическими процессами. Именно учет релаксации позволяет модифицированной модели описывать высокоскоростную динамику процессов вдали от состояния равновесия и корректно предсказывать метастабильные структуры. В результате, однако, математическое описание высокоскоростной кристаллизации существенно усложняется по сравнению с традиционным методом кристаллического фазового поля, что делает необходимым разработку специальных эффективных вычислительных методов и программных комплексов для проведения численных экспериментов.

Первая глава диссертации Стародумова И.О. посвящена литературному обзору и исторической справке о методах и подходах для моделирования кристаллизации веществ. Отдельно приводится описание фазово-полевого подхода и особенностей традиционного метода кристаллического фазового поля. Также в этой главе приводится обоснование модифицированной модели кристаллического фазового поля с точки зрения высокоскоростной кристаллизации как немарковского процесса.

Во второй главе автором приведен разработанный вычислительный алгоритм для решения сформулированного уравнения модифицированного кристаллического фазового поля. В алгоритме используется современное обобщение конечно-элементного метода Галеркина, называемое изогеометрическим анализом.

В третьей главе рассматриваются результаты решения нескольких задач по расчету трехмерных стационарных и нестационарных кристаллических структур. Приводится сравнение результатов расчетов с ранее опубликованными материалами теоретических исследований. Все это позволяет сделать вывод об эффективности рассматриваемой модели и разработанного вычислительного метода. Кроме того, важным результатом работы является подтверждение в ходе вычислительных экспериментов потенциальных ограничений модели: действительно, отсутствие каких бы то ни было флуктуаций фазового поля является сильным допущением модели кристаллического фазового поля, что в ряде случаев может приводить к некорректным с физической точки зрения результатам.

В четвертой главе автором приводится описание разработанного программного комплекса, в котором объединены как вычислительный алгоритм, так и дополнительные программные средства для постановки задачи, запуска расчетов на суперкомпьютере в параллельном режиме, а также прикладные модули для численной обработки результатов. Учитывая высокую вычислительную сложность поставленной задачи, такой программный комплекс не является и не мог являться тривиальной разработкой. Отмечено, что комплекс прошел процедуру государственной регистрации в Роспатенте с получением соответствующего свидетельства.

Проведенные автором исследования опираются на наиболее современные разработки мирового уровня как в отношении обоснования физико-математической модели кристаллизации, так и в отношении совершенствования вычислительного метода. Следует подчеркнуть также и то, что разработанный программный комплекс изначально был ориентирован на поддержку параллельных вычислений на суперкомпьютере. Благодаря этому комплекс может быть использован не только для решения узкого круга относительно простых задач, но и стать основой для проведения актуальных крупномасштабных и крупносерийных научных расчетов.

Представленные в диссертации результаты обладают безусловной научной новизной. Еще несколько лет назад в литературе не было представлено методов для трехмерных расчетов модифицированным методом кристаллического фазового поля, а имеющиеся расчеты традиционным методом проводились в наиболее простой постановке. Представленные в диссертации результаты являются важным шагом по верификации не только отдельных разработок автора, но также отражают успешно реализованные исследования по расширенной теории кристаллического фазового поля в целом.

Научная и практическая значимость результатов диссертации заключается в возможности путем компьютерного моделирования оценить метод кристаллического фазового поля в модифицированной постановке при решении динамических задач

образования кристаллических структур из метастабильного или неустойчивого состояния, что является отдельной приоритетной задачей современного теоретического материаловедения. Результаты рассматриваемых диссертационных разработок имеют перспективное значение и в вопросах моделирования процессов формирования новых материалов, а также их последующего синтеза из метастабильного и неравновесного состояний, например, в области производства наноструктурированных функциональных покрытий. Кроме этого, программный комплекс, представленный в диссертации, может являться основным инструментарием для решения прикладных задач материаловедения в многопрофильном металлургическом производстве. Среди них важно указать направление по определению и прогнозированию условий оптимизации современных технологических процессов для получения металлических заготовок, в том числе – отливок, с заданными структурой и свойствами, по диагностике и локализации дефектов кристаллической структуры при литье, оценке качества специальных покрытий и многие другие.

По содержанию диссертации имеются некоторые замечания.

- 1) В тексте диссертации присутствуют пунктуационные опечатки.
- 2) Текст диссертации, в целом демонстрирующий отличное владение материалом и умелое его изложение, изобилует специфической терминологией, которая усложняет восприятие материала.
- 3) В главе 3 диссертации приводятся расчеты некоторых тестовых задач, однако, не рассматриваются задачи моделирования существенно неравновесных процессов. Хотя постановка таких модельных задач является отдельной серьезной проблемой, тем не менее их формулировка и рассмотрение в рамках диссертации кажется целесообразной.

Отмеченные замечания не носят принципиального характера и не снижают высокой оценки диссертационной работы.

В целом, диссертация Стародумова И.О. представляет собой завершённую научно-исследовательскую работу на актуальную тему, содержит новые оригинальные результаты, имеющие высокую теоретическую и практическую значимость. Результаты диссертации с достаточной полнотой опубликованы в 11 печатных работах, из которых 9 – статьи в высокорейтинговых рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК и проиндексированных международными базами Scopus и Web of Science. Результаты диссертационных исследований в полной мере представлены в монографии автора. Материалы диссертации успешно прошли апробацию на российских и международных конференциях.

Тема и содержание работы соответствуют паспорту специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Автореферат и опубликованные работы правильно и полно отражают содержание

диссертации. Достоверность и новизна полученных результатов хорошо обоснованы, личный вклад автора ясно определен.

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

Официальный оппонент,
доцент кафедры «Металлургические и литейные технологии» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»,
кандидат технических наук, доцент


Голод Валерий Михайлович

«08» август 2019г.

Почтовый адрес:
Адрес: г. Санкт-Петербург, 195251,
ул. Политехническая, д. 29, СПбПУ Петра Великого
Тел. моб.: +7 (921-311-59-86)
Email: lpi2015@mail.ru

Подпись В.М. Голода заверяю

