

## **ВІДГУК**

офіційного опонента про дисертаційну роботу Шумиляк Лілії Михайлівни «Моделювання процесів кристалізації сплавів методом неперервних клітинних автоматів», подану на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

### **1. Актуальність теми дисертаційної роботи та її зв'язок з науковими програмами, планами, темами.**

У всіх сучасних галузях суспільної діяльності спостерігається стрімке впровадження електронної техніки, розвиток якої значною мірою залежить від якості матеріалів, що використовуються для її виробництва, та їхньої вартості. Тому досить актуальною задачею у виробництві кристалів є підвищення відсотку виходу корисного для подальшого використання матеріалу. Одним із підходів до пошук оптимальних параметрів процесу отримання матеріалів є дослідження на основі реальних експериментів, але вони призводять до додаткових економічних витрат. Інший підхід, який дозволяє значно скоротити ці витрати, полягає у побудові комп'ютерних моделей процесів отримання матеріалів та проведення над ними ряду обчислювальних оптимізаційних експериментів.

Класичні моделі фізичних процесів, побудовані на диференціальних рівняннях, не завжди забезпечують отримання прийнятних результатів. Через це останнім часом набувають поширення альтернативні підходи до побудови моделей, серед яких одним із перспективних є підхід, що базується на апараті клітинних автоматів (КА). Перевагою такого підходу є можливість опису в рамках єдиної математичної моделі процесів на макро- і мікрорівнях. Це забезпечує створення нових засобів для підвищення ефективності проведення експериментів з метою підбирання оптимальних часових та температурних параметрів процесу кристалізації сплавів шляхом застосування методів імітаційного моделювання.

Тема досліджень відповідає планам наукової та науково-технічної діяльності кафедри програмного забезпечення комп'ютерних систем Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича та виконана в рамках держбюджетної науково-дослідної роботи «Математичне та програмне забезпечення обчислювальних систем» (Державний реєстраційний номер 0116U007046).

Таким чином, усе сказане обумовлює актуальність теми дисертаційної роботи Шумиляк Л.М. і наукову новизну поставлених в ній задач досліджень.

### **2. Наукова новизна результатів роботи**

У результаті виконання дисертаційної роботи розв'язано актуальну науково-прикладну задачу підвищення ефективності процесу вирощування кристалів шляхом моделювання його динаміки з використанням асинхронних клітинно-автоматних моделей дифузійних та теплових процесів з фазовими переходами першого роду і впровадження у лабораторії термоелектричного

матеріалознавства.

Виходячи з того, що нові наукові результати - це нові знання в певній галузі фундаментальних чи прикладних наук, можна вважати основними науковими результатами дисертації таке:

- вперше запропоновану асинхронну клітинно-автоматну модель процесів теплопровідності та дифузії, яка дозволяє отримати розв'язок задачі теплопровідності в будь-який момент часу, що дає змогу визначити залежність часу однієї клітинно-автоматної взаємодії від розмірності клітинно-автоматного поля, розмірів та теплових параметрів модельованої системи;

- вперше запропоновану клітинно-автоматну модель процесу кристалізації розплаву, яка дозволяє описати розподіл домішки у твердій та рідкій фазах та комірчастий ріст, і, на відміну від відомих, дає змогу зафіксувати момент переходу до концентраційного переохолодження та визначити характер комірчастого росту;

- вперше запропоновану клітинно-автоматну модель процесу росту зерен при рівномірному охолодженні бінарного розплаву, яка, на відміну від існуючих моделей, демонструє самовільне утворення зародку та динаміку росту зерен;

- удосконалений метод моделювання дифузійних та теплових процесів з урахуванням фазового переходу першого роду, що базується на моделі асинхронного клітинного автомату, який, на відміну від відомого методу, дозволяє отримати кількісні результати моделювання в будь-який момент часу.

### **3. Ступінь обґрунтованості наукових положень дисертації та їх достовірність.**

Наукові положення, викладені в дисертаційній роботі, є достатньо обґрунтованими за рахунок використання апробованих математичних методів, а саме: при розробці клітинно-автоматної моделі процесу теплопровідності, дифузії та сегрегації використовувались методи теорії клітинних автоматів; при доведенні адекватності запропонованих моделей - аналітичні та числові методи розв'язання диференціальних рівнянь з частинними похідними; для емпіричного підтвердження отриманих результатів - методи комп'ютерного експерименту.

Достовірність основних наукових результатів роботи підтверджується наведеною в розд. 2-4 системою формальних методик і перетворень, що не містить принципових помилок, а також рядом прикладів і збіжністю результатів обчислювальних і натурних експериментів з теоретичними результатами.

### **4. Цінність дисертаційної роботи для науки**

Цінність дисертації полягає в тому, що в ній запропоновано нове рішення важливої науково-практичної задачі в теорії математичного моделювання фізичних процесів, що відбуваються при вирощуванні кристалів для електронної техніки. Змістовний аспект запропонованого рішення, який спрямований на розширення класу моделей і методів математичного моделювання фізичних процесів, що забезпечують підвищення ефективності процесу вирощування, не був відомий раніше.

## **5. Практична корисність роботи**

Практична корисність роботи обумовлена тим, що використання запропонованих в ній моделей, формальних методів і розробленого програмного засобу забезпечують емпіричне підбирання параметрів експерименту шляхом моделювання теплових процесів не обмежуючись додатковими спрощеннями, що дозволяє підвищити ефективність досліджень за рахунок зменшення вартості виробництва та скорочення часових витрат.

Результати дисертаційних досліджень впроваджено:

- у ТОВ «Інтерм», де програмний засіб використовується для пошуку оптимальних режимів вирощування кристалів термоелектричного матеріалу;
- у ТОВ «ВальСофт», де використовується фреймворк для візуалізації процесів складних науково-технічних розрахунків;
- у навчальний процес кафедри напівпровідників і наноструктур Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича в рамках навчальних дисциплін: «Новітня техніка і технології», «Автоматизація фізичних досліджень», «Фізика напівпровідників і діелектриків».

## **6. Оцінка змісту дисертації, її завершеності й оформлення.**

Побудова дисертації відповідає прийнятим для наукового дослідження вимогам. Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків.

**У вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, показано зв'язок роботи з науковими темами, сформульовано мету та задачі досліджень, наведено методи дослідження, викладено наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, зазначено особистий внесок здобувача та наведено відомості про впровадження, апробації, структуру роботи.

**У першому розділі** наведено аналіз відомих підходів щодо математичного опису процесів теплопровідності та дифузії. Проаналізовані переваги і недоліки їх застосування. Відзначено, що в деяких задачах не завжди можливе застосування аналітичних методів. Зокрема, при виконанні конкретних розрахунків, особливо при великій кількості вхідних даних, процес отримання рішення значно ускладнюється, внаслідок чого неможливо отримати точний температурний розподіл. Описано процеси, що відбуваються при фазових переходах в бінарних розчинах, та розподіл домішок в кристалах при кристалізації. Сформульовано напрям досліджень, що ґрунтується на удосконаленні математичного моделювання теплових процесів за допомогою методу клітинних автоматів. Проведено порівняння методу клітинних автоматів та звичайних диференціальних рівнянь, визначені переваги та недоліки використання цих методів. Зроблено висновок, що незважаючи на доволі складний процес побудови таких локальних правил мікровзаємодій, які б під час функціонування певної кількості клітинних автоматів породжували ту чи іншу відповідну макродинаміку, існує ряд явищ, для яких застосування КА-моделювання виявляється прийнятнішим за використання чисельних методів розв'язку диференціальних рівнянь з частинними похідними.

**Другий розділ** дисертаційної роботи присвячений викладенню загальних

принципів побудови КА-моделей. Висвітлено суть моделювання процесів теплопровідності за допомогою клітинних автоматів. Описано процес моделювання, що складається з ітераційних циклів клітинно-автоматних взаємодій, які передбачають виконання трьох типових кроків. Отримана система ітераційних рівнянь шляхом декомпозиції великої досліджуваної системи на маленькі частинки (співрозмірні з клітинами КА), що описує процес теплопровідності. Таким чином, в результаті масових взаємодій маленьких частинок, вся система прямує до стану рівноваги. Отримано оцінки часу однієї клітинно-автоматної взаємодії шляхом проведення ряду обчислювальних експериментів.

**У третьому розділі** наведено результати апробації запропонованої асинхронної клітинно-автоматної моделі дифузійних і теплових процесів із фазовими переходами. Для підтвердження адекватності моделі проведено порівняння розв'язку, отриманого за допомогою КА-моделювання, з аналітичним і чисельним розв'язком для декількох варіантів задач. Розглянуто випадок теплопровідності для одновимірного однорідного зразка з постійним коефіцієнтом температуропровідності, коли теплофізичні характеристики не залежать від температури. В такому випадку задача зводиться до розгляду теплопередачі через плоску нескінченну пластину або ізольований стержень. Була отримана оцінка точності КА-рішення. Проведено апробацію КА-моделі на прикладі нестационарної задачі теплопровідності із врахуванням фазових переходів першого роду, так званій задачі Стефана. За результатами моделювання сегрегації отримано розподіл відносної концентрації домішки вздовж фрагменту зразка в процесі кристалізації. Розглянуто питання моделювання концентраційного переохолодження та моделювання динаміки утворення зародків і росту зерен при дослідженні рівномірного твердіння розплавів у малих об'ємах. Отримані результати підтверджують адекватність запропонованої КА-моделі.

**У четвертому розділі** представлена реалізація комп'ютерної системи, яка забезпечує пошук оптимальних умов вирощування і підвищення точності регулювання температури росту термоелектричного матеріалу. Поставлена задача застосування розробленої моделі на практиці була зведена до виявлення закону управління параметрами процесу. Було отримано найприйнятнішу стратегію управління температурою нагрівачів і швидкістю руху ампул, яка забезпечує мінімальний час вирощування злитку при оптимальній його якості. Проведено дослідження у двох напрямках: пошук параметрів нового виробничого процесу та оптимізація вже існуючого. Зокрема, час вирощування телуриду вісмуту вдалося зменшити, в середньому, майже на 20%.

**У висновках** наведено стислу характеристику основних результатів досліджень.

**У додатках** наведено список публікацій автора дисертаційної роботи, лістинг частини коду програми моделювання процесу кристалізації сплавів методом асинхронних клітинних автоматів, а також подано акти впровадження результатів дисертаційних досліджень.

## **7. Рекомендації щодо використання результатів дисертації.**

Запропоновані в роботі моделі фізичних процесів та розроблений програмний засіб можуть бути використані для моделювання процесу кристалізації з метою удосконалення технологічного процесу вирощування кристалів методом зонної плавки та підвищення його ефективності, що може знайти використання на підприємствах-виробниках кристалів термоелектричних матеріалів.

## **8. Повнота викладення основних результатів дисертації.**

Основні результати дисертації достатньо повно відображені в 20 наукових працях, з яких 10 статей у наукових виданнях, що входять до переліку фахових видань України з технічних наук та індексуються в міжнародних науково-метричних базах, та пройшли апробацію на 10 міжнародних науково-технічних конференціях.

## **9. Автореферат дисертації**

Автореферат дисертації за своїм змістом повністю відповідає дисертаційній роботі.

## **10. Зауваження щодо змісту і оформлення дисертації.**

1. У розділі 1 при аналізі відомих моделей автор не завжди вказує джерело інформації, відзначаючи лише «Відомо, що математичні моделі...», «Добре відомо ...».

2. Замість поняття «похибка» іноді вживається поняття «помилка». Наприклад, «помилки завдання вихідних даних» і «помилки обчислень».

3. У тексті роботи для опису одних і тих же моделей використовуються різні словосполучення: «неперервна асинхронна клітинно-автоматна модель», «асинхронна клітинно-автоматна модель», «клітинно-автоматна модель».

4. У теорії клітинних автоматів розглядаються триангулярні, тетрагональні та гексагональні структури, в межах яких виділяють різні околи. Автор використовує тетрагональну структуру з околom Неймана не наводячи обґрунтування свого вибору.

5. У роботі відзначається, що результатом моделювання є матриця станів клітинного автомата. В разі розв'язання задачі дифузії матриця станів зберігає безрозмірні значення концентрацій, а в разі розв'язання задачі теплопровідності матриця станів зберігає безрозмірне значення температури. Виходячи з цього, некоректними є такі висловлювання: «Вміст комірок клітинного автомата може набувати дійсних неперервних значень» і «Суть клітинно-автоматних взаємодій полягає у модифікації неперервних значень відповідних характеристик клітин». Температура і концентрація подаються в вигляді числових значень, що є дійсними числами. Відомо, що в комп'ютерах дійсні числа мають скінченну форму подання і як наслідок, комп'ютерна множина дійсних чисел є скінченною і дискретною.

6. При виведенні формули для визначення часу однієї клітинно-автоматної взаємодії використовується символ  $d$  як для позначення довжини

речовини, так і для позначення розміру однієї клітини автоматного поля, що вносить певну плутанину.

7. При отриманні порівняльних оцінок точності реалізації різних методів вказано, що «... похибка КА-методу обчислювалась відносно точного розв'язку». З контексту випливає, що точний розв'язок - це аналітичний розв'язок. Тому більш коректним було б відзначити, що похибка КА-методу обчислювалась відносно результату аналітичного розв'язку.

8. Виходячи з теми, мети і задач дисертаційного дослідження є недоречним розгляд прикладу розв'язання задачі промерзання вологого ґрунту.

9. У підрозділах 3.3 «Аналіз результатів застосування КА-моделі для моделювання сегрегації» і 3.4 «Перевірка моделі асинхронних клітинних автоматів на прикладі явища концентраційного переохолодження» наведено результати обчислювальних експериментів, але не вказано, яка кількість комірок клітинно-автоматного поля при цьому використовувалася.

10. У підрозділі 3.5 «Підтвердження адекватності застосування моделі асинхронних КА для моделювання росту зерен при рівномірному охолодженні» вказано такі параметри обчислювальних експериментів: розміри КА-поля 250×250; розміри однієї клітини – 1 мкм. Однак результати експериментів, наведені на рис. 3.16 – Розподіл концентрації домішки (розмір зразка 1200×900 мкм), отримано для КА-поля 1200×900, що впливає з підпису під рисунком.

11. Асинхронне клітинно-автоматне моделювання реальних процесів вимагає великих обчислювальних потужностей, оскільки необхідно оперувати великими кількостями частинок протягом тривалого часу. Тому виникає потреба в прискоренні обчислень. У підрозділі 4.2.4 «Шляхи оптимізації клітинно-автоматних обчислень програмними засобами» автор в оглядовому стилі відзначає, що «...вирішити цю проблему сьогодні стало можливим шляхом обробки інформації з масовою організацією паралельних обчислень, при якій для вирішення однієї задачі використовуються десятки, сотні і навіть тисячі процесорів». Однак, асинхронні клітинні автомати не піддаються легкому розпаралеленню. Це пов'язано з необхідністю дотримання вимог коректності та ефективності розпаралелення, а також рівноймовірності вибору клітин. Остання вимога впливає з означення асинхронного режиму роботи клітинного автомата. Тому було б доцільним розглянути особливості розпаралелення конкретного, запропонованого автором клітинного автомата, а не якогось абстрактного клітинного автомата.

12. У підрозділі 4.2.5 «Організація управління процесом вирощування матеріалу методом зонної плавки» наведено огляд відомих праць, присвячених питанням автоматичного управління процесом вирощування термоелектричних матеріалів. Такий огляд доцільно було б навести в розділі 1.

## **11. Загальна оцінка дисертації**

Оцінюючи роботу в цілому, вважаю, що в дисертації отримано нове рішення важливої актуальної науково-прикладної задачі підвищення ефективності процесу вирощування кристалів шляхом моделювання його динаміки з використанням асинхронних клітинно-автоматних моделей

дифузійних та теплових процесів з фазовими переходами першого роду і впровадження у лабораторії термоелектричного матеріалознавства.

Дисертація є завершеною науково-дослідною роботою. Вважаю, що за актуальністю вибраної теми, обсягом і рівнем виконаних теоретичних і експериментальних досліджень, достовірністю і обґрунтованістю висновків, новизною досліджень, значенням отриманих результатів для науки і практики дисертаційна робота задовольняє вимогам п. 9, 11, 12, 13 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого Постановою КМУ від 19 серпня 2015 року № 656, а її автор, Шумиляк Лілія Михайлівна, заслуговує присудження наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи.

Офіційний опонент  
завідувач кафедри захисту інформації  
Вінницького національного  
технічного університету,  
д.т.н., професор

"01" жовтня 2018 р.



В.А. Лужецький

