

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу Шумиляк Лілії Михайлівни

«Моделювання процесів кристалізації сплавів методом неперервних клітинних автоматів», яка подана на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 - Математичне моделювання та обчислювальні методи

Актуальність теми дисертації. Сучасне виробництво термоелектричних матеріалів характеризується підвищенням вимог до якості та точності вирощування кристалів. Для забезпечення конкурентоспроможності вітчизняної продукції необхідно досягти одночасного забезпечення високої якості та зниження собівартості матеріалу. Це можливе лише за умови дотримання високої точності проведення експерименту. Особливий інтерес та, одночасно, складність становить визначення параметрів експерименту, які забезпечать виробництво якісного матеріалу з мінімальними матеріальними витратами. При цьому у багатьох випадках пошук таких оптимальних параметрів вимагає проведення низки тестових експериментів, що безумовно призводить до значних витрат матеріальних та трудових ресурсів. Вочевидь, що застосування методів імітаційного моделювання до технологічних процесів, що розглядаються, дозволить отримувати інформацію про властивості, які характеризують матеріал, що отримано при певних умовах.

Враховуючі сказане, в такій постановці тема дисертаційної роботи Шумиляк Л.М. є **актуальною** і відповідає потребам сьогодення. Актуальність теми дисертації підтверджується також і тим, що вона виконувалась у рамках науково-дослідних робіт Чернівецького національного університету імені Ю. Федьковича.

Наукова новизна одержаних результатів полягає в тому, що:

- Вперше:

- 1)отримані кількісні результати моделювання за допомогою методу асинхронних клітинних автоматів. Було встановлено час однієї клітинно-автоматної взаємодії, який є функцією розмірності клітинно-автоматного поля, розмірів та теплових

параметрів зразка. Кількісна модель процесів теплопровідності та дифузії на основі клітинних автоматів, що запропонована авторкою, дозволяє отримати розв'язок задачі теплопровідності в реальний момент часу.

2) представлено і досліджено асинхронну клітинно-автоматну модель для опису процесів кристалізації сплавів. Вона кількісно описує процес сегрегації домішки при кристалізації, визначає розподіл домішки в розплаві і, на відміну від попередніх, дозволяє не тільки зафіксувати момент переходу до концентраційного переохолодження, але й визначити характер комірчастого росту.

3) побудована клітинно-автоматна модель для опису процесу росту зерен при рівномірному охолодженні розплаву, яка на відміну від існуючих, демонструє самовільне утворення зародку та динаміку росту зерен.

- Набув подальший розвиток клітинно-автоматний метод моделювання дифузійних та теплових процесів з урахуванням фазового переходу першого роду, який, на відміну від відомого, дозволяє отримати кількісні результати моделювання в будь-який момент часу.

Ступінь обґрунтованості та достовірність наукових положень, висновків, рекомендацій, сформульованих у дисертації. Обґрунтованість та достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій підтверджена аргументованою постановкою мети й задач дослідження, коректним використанням сучасних методів дослідження, результатами верифікації отриманих результатів та їх впровадженнями у наукову та практичну діяльність підприємств і навчальних закладів.

Теоретичні дослідження виконано з використанням методів теорії клітинних автоматів, класичних обчислювальних методів розв'язання диференціальних рівнянь з частинними похідними, методів комп'ютерного моделювання та експерименту. Моделі, алгоритми і програмні засоби, що запропоновані авторкою, базуються на відомих теоретичних положеннях та перевірені експериментально, що підтверджено актами впровадження отриманих результатів.

Достовірність отриманих результатів підтверджується їх узгодженням з результатами, отриманими іншими авторами, із теоретичними висновками та даними, що одержані при експериментальних дослідженнях.

Значимість отриманих результатів для науки і практичного використання. Цінність наукових результатів роботи полягає в тому, що в ній запропоновано рішення важливої науково-технічної задачі підвищення ефективності процесу вирощування кристалів шляхом моделювання його динаміки на основі розробки асинхронних клітинно-автоматних моделей дифузійних та теплових процесів із фазовими переходами першого роду.

Практична корисність роботи обумовлена тим, що результати теоретичних досліджень і розроблених моделей реалізовані у вигляді програмного продукту, який використовується у технологічному процесі вирощування кристалів у лабораторіях ТОВ «Інтерм», ТОВ «ВальСофт» та на кафедрі фізики напівпровідників і наноструктур Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича.

Мова, стиль та оформлення дисертації й автореферату.

Дисертаційну роботу написано грамотною українською мовою на достатньо високому стилістичному рівні. Застосована в роботі наукова термінологія є загальноновизнаною.

Мова та стиль дисертаційної роботи повністю відповідають існуючим вимогам щодо викладення науково-технічної інформації, оформлення відповідає вимогам щодо кандидатських дисертацій.

Повнота викладення в публікаціях та апробація роботи. Основні наукові положення, висновки і рекомендації, які сформульовані в дисертаційній роботі, достатньо повно відображені в публікаціях здобувача і пройшли апробацію на міжнародних науково-технічних конференціях. За темою дисертаційної роботи опубліковано 20 робіт, у тому числі: 10 статей у наукових виданнях з переліку фахових видань (з них 4 статті, що входять до переліку фахових видань України, 6 статей входять до міжнародних наукометричних баз даних), 10 матеріалів та тез доповідей на міжнародних конференціях.

Рівень і кількість публікацій та апробація матеріалів дисертації на конференціях повністю відповідають діючим вимогам.

Структура дисертації цілком відповідає логіці й послідовності рішення поставлених задач. Дисертація складається зі вступу, 4-х розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків.

У вступі обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, зазначено зв'язок з науковими програмами, планами, темами, сформульовано мету та задачі, об'єкт та предмет дослідження, визначено наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, наведено відомості про апробацію роботи, впровадження результатів та публікації.

Перший розділ присвячений огляду методів числового розв'язку рівняння теплопровідності та дифузії. Було виявлено основні недоліки застосування сіткових методів. Проведено порівняльний аналіз клітинно-автоматного методу з сітковими, який показав, що незважаючи на доволі складний процес побудови таких локальних правил мікрвзаємодій, які б під час функціонування певної кількості клітинних автоматів породжували ту чи іншу відповідну макродинаміку, існує ряд явищ, для яких застосування КА-моделювання виявляється більш ефективним за використання числових методів розв'язку диференціальних рівнянь з частинними похідними.

Другий розділ присвячено розробці методу клітинних автоматів у застосуванні до дифузійних і теплових процесів із фазовими переходами першого роду. Запропоновано алгоритм реалізації асинхронного КА-підходу. Побудовано та докладно описано алгоритм отримання системи ітераційних рівнянь взаємодії клітин шляхом декомпозиції великої досліджуваної системи. Представлена КА-модель для моделювання процесу кристалізації сплавів з урахуванням впливу домішки на процеси, що при цьому виникають. Розроблено КА-модель, яка дозволяє змоделювати процес комірчастого росту кристалів та росту зерен при рівномірному охолодженні розплаву. Виконаний розрахунок часу однієї КА-взаємодії, який надає можливість побудови не тільки якісної, але і кількісної картини модельованого процесу.

У третьому розділі проведено всебічне тестування адекватності розробленої КА-моделі. Проведене зіставлення вже відомих теоретичних і експериментальних даних та результатів числових розв'язків для декількох задач теплопровідності з відповідними результатами обчислювальних експериментів, що проводилися із застосуванням методу асинхронних клітинних автоматів. Перевірка проводилась порівнянням з результатами експериментів на таких задачах як: класична задача теплопровідності через нескінченну пластину; задача теплопереносу в зразку, що являє собою

сукупність двох або більше матеріалів з різними теплофізичними характеристиками; нестационарна задача теплопровідності із врахуванням фазових переходів першого роду; сегрегація домішки в процесі кристалізації та концентраційне переохолодження; утворення зародків та росту зерен. В усіх випадках результати КА-моделювання добре узгоджуються з експериментом або з відомими літературними даними, а ступінь узгодження залежить від щільності клітинно-автоматної решітки.

У четвертому розділі розроблено програмне забезпечення на основі побудованої КА-моделі, яке реалізує модель процесу зонного вирощування напівпровідникового матеріалу Bi_2Te_3 . Представлений опис процесу вертикальної зонної плавки та особливостей його моделювання, розроблено алгоритм пошуку оптимальних параметрів проведення експерименту, що сприяє зменшенню часу вирощування матеріалу без втрат його якості, чим значно зменшує економічні витрати на його вирощування. Проведена перевірка визначених технологічних параметрів на їх оптимальність шляхом порівняння з результатами експерименту. Запропонований програмний продукт, який дозволяє проводити ряд обчислювальних експериментів для нових складів матеріалу і, тим самим, відмовитись від низки дорогих експериментів з підбирання необхідних технологічних параметрів. Реалізовано автоматизоване управління експериментальною установкою зонного вирощування, що дає можливість проводити вирощування кристалів з високою точністю дотримання потрібних умов експерименту. Це, в свою чергу, дозволяє отримати на виході матеріал, який відповідає високим вимогам якості.

Автореферат дисертації повністю відповідає її змісту, повно відображає її основні наукові результати, оформлений з дотриманням вимог, встановлених Міністерством освіти і науки України.

Недоліки та зауваження щодо змісту дисертації та автореферату:

1. В першому розділі проведено порівняння клітинно-автоматного методу лиш з сітковими методами для задачі моделювання процесу кристалізації. Варто було більше уваги приділити огляду інших альтернативних методів.
2. З роботи не зрозуміло, яким чином необхідно змінювати модель та її параметри для моделювання вирощування різних матеріалів. Те ж

стосується й розробленого програмного забезпечення: наскільки важко змінити його параметри для різних матеріалів?

3. При описі алгоритмічної реалізації асинхронного підходу виділяються наступні стани клітин «0 – область динамічної зміни температури, 1 – область ізотермічної граничної умови, 2 – область адіабатичної граничної умови» [стр. 65 дисертації], що дещо спотворює ідею використання клітинних автоматів. Було б доречно використовувати розбиття на фіксовані стани для всіх комірок клітинно-автоматної моделі, а не тільки для граничних. Додати стани: «рідка фаза», «фазовий перехід», «тверда фаза», «зародок», «зерно».
4. Не зрозумілий фізичний зміст величини M_{max} у формулі (2.1).
5. Не наведені данні щодо визначення числового значення порогу сегрегації.
6. Не наведені підстави для нехтування впливом теплових процесів (макромасштаб) при моделюванні утворення зародків та росту зерен (мікромасштаб). Можливо існує зворотній вплив процесів, що відбуваються на мікрорівні, на макропроцеси.
7. Бажано було б навести аналітичний спосіб встановлення часу однієї клітинно-автоматної взаємодії, використання емпіричних висновків не виглядає досить переконливим.
8. З таблиці 3.1 випливає, що при збільшенні N похибка зменшується. Які граничні значення N доцільно використовувати?
9. Рисунки 3.6, 3.7, 3.8 наведені для демонстрації ефективності запропонованого обчислювального методу, бажано було б навести числові значення у контрольних точках і похибку обчислення. Графік дозволяє зробити висновок лише про якісну збіжність.
10. З таблиці 3.4 можливо зробити висновок про нестійкість кінцево-різницевої явної схеми, цей недолік можливо усунути при виконанні відповідності між кроком по часу і просторовій координаті.
11. Не наведені шляхи збільшення адекватності застосування моделі асинхронних КА для моделювання росту зерен при рівномірному охолодженні. Даний результат можливо характеризувати як якісний.
12. Фрагмент програмного коду, наведений у додатку, мало інформативний (4,5 сторінки), не дає змоги оцінити весь об'єм роботи, виконаної при розробці додатку.

У той же час, наведені зауваження не впливають на загальну якість дисертаційної роботи Шумиляк Л.М.

Висновки по дисертаційній роботі. Вважаю, що дисертація Шумиляк Л.М. є завершеною науково-дослідницькою роботою, що вирішує поставлену актуальну наукову-технічну задачу підвищення ефективності процесу вирощування кристалів шляхом моделювання його динаміки на основі розробки асинхронних клітинно-автоматних моделей дифузійних та теплових явищ з фазовими переходами першого роду. Дисертаційна робота написана зрозуміло і грамотно, науково-технічна термінологія використовується коректно. Дисертація відповідає паспорту спеціальності 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи (пункти 2,4). Науковий рівень дисертаційної роботи, стиль та мова викладення відповідають п.п. 9, 11, 12 «Порядку присудження наукових ступенів», а Шумиляк Лілія Михайлівна заслуговує присудження наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи.

Офіційний опонент,
доктор технічних наук, професор,
завідувач кафедри інформаційних
технологій та систем
Національної металургійної академії України,
Лауреат Державної премії в галузі науки та техніки

О.І. Михальов

Підпис проф. Михальова О.І. засвідчую
Учений секретар Національної металургійної
академії України, професор



О.Ю. Потап