

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Кривилева Михаила Дмитриевича «**Двухуровневое математическое моделирование процессов переноса и структурообразования в металлургии мезоскопических объемов**», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Актуальность темы диссертационного исследования

В последнее время в связи с бурным развитием информационных технологий, с активным внедрением в производство стандартов цифрового проектирования в исследовании процессов разработки новых изделий и технологий их производства широко используются методы математического моделирования.

Метод многоуровневого моделирования, известный в отечественной литературе также как метод расщепления, является одним из наиболее эффективных способов изучения процессов, протекающих на различных пространственно-временных масштабах. К таким процессам, в частности, относятся процессы переноса и структурообразования при кристаллизации расплавов, встречающиеся в металлургии, металлофизике и теплофизике. В диссертационной работе М.Д. Кривилева развит двухуровневый подход для математического моделирования комплексных металлургических процессов в мезоскопических объемах расплава, что актуально для оптимизации режимов получения новых функциональных материалов и покрытий.

Структура диссертации и основные научные результаты

Текст диссертационной работы изложен на 316 страницах. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения, списка литературы из 260 наименований и 6 приложений, включает 68 рисунков и 21 таблицу, к каждой главе приведен список обозначений.

Во введении приведено обоснование актуальности выбора темы исследования, сформулированы цель, задачи и основные положения, выносимые на защиту, и описана структура диссертации.

В первой главе проведен обзор литературных данных о существующих проблемах и подходах в математическом моделировании сопряженных физико-химических процессов в системах с фазовыми переходами, показана целесообразность использования многоуровневого моделирования при исследовании таких систем.

Во второй главе изложен разработанный в диссертационном исследовании двухуровневый макроскопический-мезоскопический подход к моделированию процессов переноса и структурообразования при кристаллизации из жидкого состояния, рассмотрены концептуальная, математическая и алгоритмическая постановки задачи, определена общая структура двухуровневой модели, предложены эффективные алгоритмы решения таких моделей и их программная реализация.

В следующих главах диссертационной работы описаны результаты применения разработанного двухуровневого подхода к моделированию процессов переноса и

структурообразования для решения трех научных задач, имеющих важное практическое значение.

В третьей главе изучена построенная двухуровневая модель процесса лазерного плавления металлических порошков, на макроскопическом масштабе описывающая тепловые поля, поля локальной газовой пористости и движение поверхности зоны оплавления при лазерном плавлении, а на мезоскопическом масштабе позволяющая находить эффективную теплопроводность порошковых сред, изучать механизмы консолидации порошка и сегрегации химических компонентов, проводить термохимический анализ окислительно-восстановительных реакций. На основе построенной модели разработан программный комплекс «Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков».

В четвертой главе на основе построенной двухуровневой модели селективного и высокоскоростного лазерного плавления металлических порошков и разработанного программного комплекса «Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков» проведено математическое моделирование процессов локального теплопереноса в порошках железа, нержавеющей стали, сплава Al-Si и тантала, синтеза композитных покрытий Fe-Ni, формирования покрытий на основе Fe-Cr₂O₃. Результаты математического моделирования были использованы для разработки и внедрения в производство нового метода высокоскоростного лазерного плавления функциональных покрытий с улучшенными эксплуатационными свойствами.

В пятой главе исследована построенная двухуровневая модель бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов, с помощью разработанной программы для ЭВМ «Моделирование теплофизических процессов при бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов» проведено математическое моделирование кристаллизации переохлажденных расплавов и процесса получения порошков для производства редкоземельных постоянных магнитов (для систем Nd₂Fe₁₄B₁ и Fe₅₀Co₅₀). Результаты математического моделирования позволили объяснить ряд наблюдаемых в эксперименте явлений и предсказать эффекты, трудно регистрируемые при испытаниях.

Шестая глава посвящена изучению построенной двухуровневой модели кинетики смачивания, вязкого течения и структурообразования в процессах пайки твердым припоем Al-Si алюминиевых сплавов. Приведены результаты вычислительного эксперимента с использованием разработанной программы для ЭВМ «Компьютерное моделирование технологии пайки твердым припоем». Впервые развита модель вязкого мультифазного течения припоя на основе метода фазового поля с граничным условием диффузионного типа, предложен критерий отбора интерполяционных функций, численно устойчивых для такого граничного условия, предложен согласованный метод оценки подвижности контактной точки для систем с химическим взаимодействием.

В заключении приведены основные результаты диссертационной работы.

Научная новизна основных результатов работы

– обоснован алгоритм реализации двухуровневой модели, который производит представительную выборку макроточек для решения задач на мезоуровне и

существляет динамическое согласование решений на различных уровнях в зависимости от скорости изменения термодинамических параметров;

- реализована модель многофазного течения в формализме фазового поля, в которой на линии контакта фаз вводится граничное условие диффузионного типа и обосновывается выбор интерполяционной функции для фазового поля, обеспечивающей численную устойчивость;

- проведен выбор численных схем, эффективных для решения задач в области металлургии мезоскопических объемов, исследована область их устойчивости, определены границы применимости;

- разработаны 3 программы для ЭВМ, использующие двухуровневый подход для моделирования процессов переноса при кристаллизации;

- изучены сопряженные теплофизические процессы, протекающие при короткоимпульсном лазерном плавлении в композитных металлических порошках, при бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов и пайке твердым припоем алюминиевых сплавов.

Практическая значимость работы

Разработанные двухуровневые модели, алгоритмы, комплексы программ «Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков», «Моделирование теплофизических процессов при бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов», «Компьютерное моделирование технологии пайки твердым припоем» позволяют глубже понять процессы переноса и структурообразования при кристаллизации металлических расплавов, объяснить ряд наблюдаемых в эксперименте явлений, предсказать эффекты, трудно регистрируемые при испытаниях, и могут быть использованы при оптимизации процесса производства функциональных покрытий и материалов с улучшенными магнитными, механическими и электрохимическими свойствами.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации

Исследование проводилось, в частности, с использованием методов линейной алгебры, математической физики и вычислительной математики, языков программирования C++, Pascal, метаязыка для аналитического программирования вариационных задач на вычислительной платформе Comsol MultiPhysics, среды MatLab R2013a, прямого решателя MUMPS (глава 3, стр. 162).

Построенные двухуровневые модели основаны на решении дифференциальных уравнений в частных производных для процессов переноса в многофазных системах. Постановка краевых задач производилась в соответствии со специальной процедурой согласования, тип решаемых уравнений существенно различался в задачах макро- и мезоуровня. Автором использованы численные методы, такие, как метод конечных разностей, метод конечных элементов, метод Ньютона-Рафсона, неявный метод Эйлера, формулы дифференцирования назад различных порядков. Для анализа систем с переменной плотностью применены деформируемые и адаптивные сетки. Для

каждой задачи приведены этапы проведения вычислительного эксперимента, начиная с сущностной постановки задачи до анализа результатов.

Все защищаемые положения диссертации аргументированы.

Достоверность результатов и обоснованность выводов обеспечивается удовлетворительным количественным соответствием результатов лабораторного и вычислительного экспериментов (глава 3, стр. 163-170), подтверждением результатов численного анализа в лабораторном эксперименте (глава 4, стр. 184), качественным соответствием результатов численного анализа с имеющими экспериментальными данными (глава 4, стр. 186, 188, 208; глава 5, стр. 225, 234, 236; глава 6, стр. 256-259), согласием результатов численного анализа с результатами модели LBM (глава 5, стр. 238, 241-242), хорошим согласием результатов численного анализа с аналитическими решениями (глава 6, стр. 253).

Замечания по диссертации

1) Как следует из текста диссертации (глава 2, стр. 93), «Метод ДМПС применим к решению уравнений в частных производных параболического типа. Нелинейные слагаемые на этапе формулировки модели подвергаются линеаризации». В таких сложных системах всегда присутствуют нелинейные зависимости, например, зависимость коэффициента диффузии от температуры и состава, особенно в процессе фазовых превращений. Каким образом применяется ДМПС для таких систем?

2) Как следует из текста диссертации, «Построение численных моделей потребовало разработки новых численных методов» (глава 2, стр. 111), но в то же время «Первый результат состоит в оригинальной компоновке двухмасштабного моделирования процессов переноса и структурообразования при металлургии мезоскопических объемов. Второй результат состоит в расширении метода конечных элементов...» (глава 2, стр. 112). Скорее всего, речь идет не о разработке новых численных методов, а о модификации существующих методов.

3) Как следует из текста диссертации, в названии главы 3 и выводах к данной главе присутствует слово «селективного» (стр. 118; стр. 171), хотя в данной главе рассматривается не только селективное лазерное плавление (СЛП), но и высокоскоростное лазерное плавление (ВЛП) (стр. 124, стр. 132, п.3.2.1; стр. 158, последний абзац). То же касается и главы 4 (стр. 172). В тексте автореферата упомянуты оба метода (стр. 17 автореферата, 2-й абзац).

4) В главе 3 (стр. 143, 1-й абзац) при описании МФП для каждой фазы вводится скалярный параметр порядка, хотя известно, что параметр порядка может быть многокомпонентным. Почему в работе используется только скалярный параметр порядка?

5) Как следует из текста диссертации (глава 6, стр. 253), «Проведено сравнение с аналитическими решениями для скорости поднятия мениска в тонком капилляре и равновесной формы мениска, которое показало хорошее согласие с теорией». Но в тексте диссертации не приводятся данные сравнения.

Указанные замечания не снижают общей высокой оценки диссертационной работы.

*Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным
«Положением о порядке присуждения ученых степеней»*

Диссертационная работа Кривилева М.Д. «Двухуровневое математическое моделирование процессов переноса и структурообразования в металлургии мезоскопических объемов» представляет собой законченное научное исследование, в котором автором разработан двухуровневый подход к математическому моделированию процессов кристаллизации.

Диссертационная работа имеет внутреннее единство, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для защиты. Результаты и выводы работы имеют теоретическое и практическое значение. Автореферат в полной мере отражает содержание диссертации. По теме диссертационного исследования опубликовано в открытой печати 70 научных работ, из них 22 статьи - в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК, 18 статей - в научных изданиях, индексируемых в международных базах цитирования Web of Science, Scopus и Springer, зарегистрированы 3 свидетельства на программы для ЭВМ, получены 7 патентов. Основные результаты, выводы работы прошли широкую апробацию на международных, всероссийских конференциях и научных семинарах.

Исходя из содержания диссертационной работы, опубликованных работ по теме диссертации, научной новизне и практической значимости полученных результатов, диссертационная работа М.Д. Кривилева «Двухуровневое математическое моделирование процессов переноса и структурообразования в металлургии мезоскопических объемов» является законченной научной квалификационной работой, соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (№ 842 от 24 сентября 2013г.), предъявляемым ВАК к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, ее автор Кривилев Михаил Дмитриевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Зав. кафедрой «Высшая математика» ФГБОУ ВО
«Омский государственный технический университет»,
доктор физико-математических наук (по специальности
05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ), доцент

Марта Доржукаевна Мышлявцева

« 13 » февраля 2018г.

644050, г. Омск, пр. Мира, д.11, Тел.: +7(3812)65-34-23; E-mail: myshlmd@mail.ru

Подпись д.ф.м.н., зав. кафедрой «Высшая математика» Мышлявцевой М.Д. заверяю:
Ученый секретарь Ученого Секретариата Омского государственного
технического университета»

Владимирович Бубнов