

ВІДГУК

на дисертаційну роботу Білуцака Юрія Ігоровича “*Математичне моделювання процесів масоперенесення у складних тілах з мікроструктурою*”, подану на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи

Актуальність теми дисертації.

Одним із важливих напрямків математичного моделювання є математичний опис процесів перенесення в тілах зі складною та складеною структурою. Це спричинено тим, що для вирішення сучасних технічних завдань існуючі математичні моделі та розроблені методи розв'язання відповідних задач не завжди адекватно описують особливості процесів масоперенесення в багатофазних багатокомпонентних тілах. Наприклад, при розв'язанні проблеми покращення якості промислової очистки питної та стічної води, її пом'якшення необхідно розробляти нові методи знаходження розв'язків систем диференціальних рівнянь, які включають дифузійний і конвективний механізми руху частинок забруднення, їхню сорбцію на скелеті насипного фільтру та хімічні перетворення, а також врахувати відповідні умови контакту для багатошарових фільтрів і наявність експериментальних даних на границі тіла. У свою чергу одержання розв'язку такої задачі сприяє встановленню оптимальних режимів роботи фільтрів, що приводить до економії ресурсів, зокрема, зменшення навантаження на енергетичну систему України. Подібні проблеми виникають при дослідженні гетеродифузного перенесення забруднення за його каскадного розпаду типу радіонуклідів, нітратів, пестицидів, інсектицидів та інших розпадних токсичних забруднень у приповерхневих шарах землі, коли від адекватного прогнозу поширення токсичних речовин та їхнього проникнення в ґрунтові води залежить прийняття правильних управлінських рішень.

Тому тема дисертаційної роботи Юрія Білуцака, в якій викладено результати побудови і дослідження математичних моделей процесів масоперенесення речовини в складних і складених тілах, що супроводжуються каскадним розпадом дифундуючи речовин, сорбційними процесами та хімічними реакціями і створення програмного забезпечення для кількісного дослідження міграції домішкової речовини у багатофазних багатокомпонентних структурах, є актуальною і представляє значний науковий інтерес.

Дослідження, які склали основу роботи, виконувались відповідно до державних замовлень і відомчої тематики Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України. Результати цих досліджень відображені у шести звітах, які пройшли державну реєстрацію.

Обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій.

Обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій, сформульованих у дисертації, визначається відповідністю їх сучасним теоретичним уявленням про процеси дифузії, конвективної дифузії та гетеродифузії в складних і складених тілах, а також результатам експериментальних досліджень. Зокрема, при побудові математичної моделі зв'язаних процесів теплопровідності, гетеродифузії та механічних процесів з урахуванням каскадного розпаду мігруючої речовини у середовищі з двома шляхами міграції та пастками автор використав апробовані підходи нерівноважної термодинаміки і механіки суцільного середовища. При розгляді вихідних положень континуального опису багатокомпонентних систем кожній компоненті поставлено у відповідність континуум, з допомогою якого описано кінематичні та деформаційні властивості компонент. Сформульовано балансові співвідношення, які відображають закони збереження маси, імпульсу та енергії для каскадного розпаду домішкової речовини. Використовуючи концепцію локальної термодинамічної рівноваги автор побудував рівняння стану та рівняння балансу ентропії, на основі якого записав кінетичні рівняння. Також прийнято, що термодинамічні потоки є функціями термодинамічних сил і виконуються умови взаємності Онзагера. На основі цих положень отримано повну систему рівнянь моделі, яку складають рівняння балансу мас компонент на кожному етапі розпаду, потенціальної, кінетичної та внутрішньої енергії, ентропії, а також рівняння стану та кінетичні співвідношення, зокрема, і їхній лінійний варіант. Отримано ключову систему рівнянь моделі.

Математична модель конвективної гетеродифузії домішок у багатофазних шаруватих тілах, кожен макроелемент якого має свою складну мезо- або мікроструктуру, наприклад пористу або композитну, побудована на основі відповідних балансових співвідношень. Лінеаризований варіант моделі отриманий виходячи з лінійних рівнянь стану. При цьому враховані неідеальні умови масового контакту і наявність експериментальних даних на границі тіла. Також запропоновано модельний опис хімічної реакції пом'якшення води у вигляді локальних внутрішніх перетворень у кожній точці термодинамічної системи, які розглянуті як перерозподіл внутрішніх степенів свободи моле-

кул у будь-якій точці континууму. В результаті отримано три варіанти математичної моделі конвективної дифузії забрудненого розчину у фільтрі води з пом'якшенням жорсткої води в залежності від кількості реагенту, поданого на поверхню тіла, який бере участь в хімічній реакції пом'якшення води.

При розробці власних методів і конкретних обчислювальних процедур, необхідних для вирішення визначеної у роботі важливої науково-прикладної проблеми, автор спирається на обґрунтовані методи математичної фізики, зокрема, метод функцій Гріна або інтегральних перетворень, математичного аналізу, інтегральних рівнянь, узагальнених функцій, системного аналізу, теорії алгоритмів.

Програмне забезпечення, створене на основі отриманих розрахункових формул для концентрацій розпадних речовин, потоків маси та кількості речовини, що пройшла через шар, речовин, що приймають участь в хімічній реакції та речовин, які мігрують в складених пористих тілах, розроблено на основі об'єктно-орієнтованого проєктування з використанням відомих числових методів, зокрема, методу Ньютона-Котеса, методів інтерполяції, апроксимації та покрокових методів екстраполяції.

Автором розроблено чисельний метод знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами та змінною областю інтегрування із застосуванням відомого методу кубатур; встановлено похибки обчислень розкладом інтеграла в ряд Тейлора з використанням теореми Барроу.

Обґрунтованість наукових положень, результатів та висновків дисертації забезпечується також апробацією результатів дослідження на наукових конференціях, конгресі і семінарах, опубліковані у 2 монографіях, у розділах 2 колективних монографій і 22 статтях у наукових фахових виданнях з технічних наук, зокрема, у 8 статтях, що індексуються науково-метричною базою Scopus, а також у таких світових рейтингових журналах як "Carpathian Mathematical Publications" та "Mathematics".

Достовірність і новизна наукових положень, висновків і рекомендацій.

Достовірність отриманих автором результатів, висновків і рекомендацій забезпечується застосуванням сучасних методів математичного моделювання, положень математичної фізики, математичного аналізу, теорій інтегральних рівнянь та узагальнених функцій, системного аналізу та математичної статистики, числових методів і теорії алгоритмів, несуперечністю одержаних результатів відомим теоретичним результатам, а також їх відпо-

відністю даним фізичних експериментів, що підтверджує адекватність запропонованих математичних моделей досліджуваним фізичним і хімічним процесам.

Новизна отриманих результатів.

Отримані у роботі результати є новими. Розв'язано нову науково-прикладну проблему розвинення підходів і методів математичного моделювання процесів масоперенесення в складних і складених тілах, що супроводжуються процесами сорбції-десорбції, каскадним розпадом або хімічними реакціями, за експериментальних даних на границі тіла.

Запропоновано варіант аксіоматизації побудови математичної моделі зв'язаних теплових, механічних і гетеродифузійних процесів за каскадного розпаду домішкових речовин. Отримана повна система рівнянь моделі та ключова система рівнянь у випадку вибору в якості розв'язуючих функцій концентрації домішкових компонент, вектори переміщення точок континуумів центрів мас, густини та температури тіла. За умови локальної термодинамічної рівноваги між станами на кожному етапі каскадного розпаду мігруючих частинок одержано часткові варіанти моделі.

Для математичних моделей гетеродифузного перенесення домішок у середовищі з пастками, що супроводжується каскадним розпадом частинок внаслідок радіоактивного розпаду або хімічних реакцій, а також гетеродифузії двома шляхами, ефективної дифузії розпадних речовин у середовищі з пастками, невзаємодіючих потоків та дифузії в середовищі з ефективними характеристиками сформульовано новий каскадний тип крайових задач математичної фізики – взаємозв'язані рівняння або системи рівнянь, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці. При цьому враховано, що в результаті розпаду мігруючих частинок можуть утворюватися нерозпадні або нешкідливі домішкові речовини.

Для побудови розв'язків крайових задач каскадного типу на кожному етапі розпаду запропоновано ітераційну процедуру на основі згорток функцій Гріна та концентрації речовини на попередньому етапі каскаду.

Розвинуто новий підхід до математичного опису процесів масо перенесення в об'єктах складної та складеної структури в умовах масообміну між макроелементами системи. Підхід складається з етапів: побудова лінеаризованої математичної моделі; постановка контактено-крайових задач з урахуванням умов неідеального масового контакту; отримання аналітичного розв'язку задачі з використанням методу інтегральних перетворень окремо в різних

макроелементах; розроблення алгоритмів для кожної структурної частини розв'язку контактної-крайової задачі; створення модулів програмного забезпечення та симуляція роботи багаточарового фільтра води.

Також розроблено системний підхід до моделювання складних та складених систем в умовах невизначеності. Він обґрунтовано поєднує класичний підхід до математичного моделювання процесів масоперенесення в неоднорідних середовищах для добре структурованої частини системи та розроблений автором статистичний підхід до встановлення невідомої граничної умови на основі експериментальних даних. Статистичний підхід полягає у виборі виду функції – інтерполяційної, апроксимаційної або екстраполяційної, що будується на нижній границі тіла за значеннями шуканої функції в певні моменти часу. Встановлюється оцінка зверху шуканої функції на нижній границі тіла та визначається час насичення за розв'язком спрощеної задачі конвективної дифузії в багаточаровому пористому тілі за тих самих контактних і початкових умов, першої граничної умови та другої ненульової граничної умови на дифузійний потік. Визначається час насичення за умовою виходу шуканої функції на стаціонарний режим. Встановлюється гранична умова на нижній границі тіла.

Розвинено новий чисельний метод знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами, що містить встановлення змінної області інтегрування, накладання змінної прямокутної сітки; виділення областей з квадратними і трикутними елементами, знаходження об'ємів елементарних елементів, обчислення вихідного інтеграла та похибки обчислень розкладом подвійного інтеграла зі змінними межами в ряд Тейлора.

Розроблено оригінальний алгоритм чисельного розв'язання нелінійного функціонального рівняння на відрізку невідомої довжини, який базується на основі композиції методу простої ітерації та модифікації методу дихотомії і реалізований для конвективної дифузії частинок у трьох пористих макроелементах.

Зміст дисертації належним чином відображає мету роботи та основні поставлені завдання для досягнення даної мети.

Цінність для науки одержаних автором дисертації результатів.

Цінність отриманих наукових результатів полягає у створенні нових математичних моделей та нових підходів дослідження фізичних процесів, які супроводжуються каскадним розпадом домішкових речовин, хімічними реакціями або які перебувають в умовах невизначеності. Розроблені методи

математичного моделювання дозволяють розв'язувати нові класи задач. Наприклад,

- формулювати та досліджувати новий клас неklasичних каскадного типу крайових задач математичної фізики,
- вивчати процеси перенесення в складних та складених тілах, зокрема шаруватих тілах, кожен макроелемент якого має свою складну пористу або композитну мікроструктуру,
- досліджувати новий клас неklasичних контактнo-крайових задач математичної фізики, де в якості граничної умови накладається апроксимаційна, інтерполяційна або екстраполяційна функція, побудована за експериментальними даними,
- знаходити розрахункові формули для функцій концентрацій мігруючої речовини, що розпадається, концентрації забруднення у багатшаровому пористому тілі, з врахуванням супутньої хімічної реакції та без неї, а також дифузійних потоків та кількостей речовини, що пройшла через пористий шар, на цій основі створювати програмне забезпечення.

Це в цілому надає новий інструментарій для дослідження фізичних процесів в умовах невизначеності, за каскадного розпаду, з врахуванням супутніх хімічних реакцій, дозволяє встановити взаємовплив і взаємозв'язок характеристик багатофазних і багатокомпонентних тіл.

Отримані результати становлять вагомий внесок у розвиненні засобів наукового дослідження, освітнього процесу, піднятті авторитету держави.

Дисертаційна робота спрямована на розроблення та обґрунтування синтезу інструментарію (методів, методик, алгоритмів тощо) термодинаміки нерівноважних процесів, аналітичної хімії, математичної фізики, математичного і функціонального аналізу, системного аналізу, числових методів і теорії алгоритмів.

Отримані модельні співвідношення дають можливість не тільки якісно, але й кількісно описувати характерні особливості процесів перенесення за явного врахування впливу структури середовища для гетерогенних тіл.

Практична цінність.

Потреба покращення якості питної та використаної води в промислових масштабах вимагає проведення розрахунків кількості сорбованої домішкової речовини, оптимального часу роботи насипних фільтрів та контролю якості очищеної води. Такі розрахунки проведені в дисертаційній роботі та вико-

ристані КП «Харківводоканал», ДП «Угерський спиртзавод» та «Хмельницькзалізобетон». Також отримані у роботі результати підтверджені актами про їхнє використання Департаментом екології та природних ресурсів «Львівська обласна державна адміністрація» та Національним університетом «Львівська політехніка».

Як один із перспективних напрямів подальшого використання науково-прикладних результатів дисертаційної роботи можна вказати дослідження теплових полів у дисперсних та пористих середовищах, зокрема, бетонних елементах конструкцій.

Повнота викладу результатів дослідження в наукових публікаціях.

Основні наукові результати роботи в повному обсязі викладені у 78 публікаціях, що відповідає вимогам Наказу МОН України від 23.09.2019 № 1220 «Про опублікування результатів дисертацій на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук» та «Порядку присудження та позбавлення наукового ступеня доктора наук» (Постанова Кабінету Міністрів України від 17 листопада 2021р. № 1197, м. Київ, зі змінами, внесеними згідно з постановою КМ № 507 від 03.05.2024р.). Особистий внесок здобувача у ці публікації є суттєвим, що наведено у дисертації. Серед цих робіт дві монографії, два розділи колективних монографій; 12 публікацій, що індексуються науково-метричними базами Scopus, з них 3 статті у виданнях, віднесених до першого квартилю, 5 статей у виданні, віднесеному до третього квартилю. Крім того, здобувач має два авторські свідоцтва на програмні продукти. Наукові результати, що отримані у дисертаційній роботі, також були апробовані та отримали позитивну оцінку на сорока шести міжнародних і національних конференціях, семінарі та конгресі.

Відповідність дисертації паспорту спеціальності.

Дисертація Білушчака Ю.І. на тему “Математичне моделювання процесів масоперенесення у складних тілах з мікроструктурою” є завершеною науковою працею та відповідає паспорту спеціальності 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи, а саме такому розділу: “Розроблення або розвиток теорії математичного моделювання реальних явищ, об'єктів, систем чи процесів як сукупності формалізованих дій (операцій) для складання ефективних математичних описів досліджувальних об'єктів”.

Дисертація написана якісною українською мовою. Стиль викладу матеріалу відповідає прийнятому в науковій літературі.

Реферат адекватно відповідає змісту дисертації та оформлений згідно з вимогами Постанов Кабінету Міністрів України.

До докторської дисертації не включено наукові положення і дослідження, за якими захищена кандидатська дисертація.

Академічна доброчесність.

Очевидних ознак порушення автором академічної доброчесності, зокрема випадків оприлюднення, частково або повністю, наукових результатів, отриманих іншими особами, як результатів власного дослідження та/або відтворення опублікованих текстів інших авторів без зазначення їх авторства, не виявлено.

Відповідність дисертації вимогам, передбаченим Наказом МОН від 12.01.2017 № 40 "Про затвердження вимог до оформлення дисертацій" (зі змінами, внесеними згідно з Наказом від 31.05.2019 № 759).

Дисертацію подано у вигляді спеціально підготовленої кваліфікаційної наукової праці на правах рукопису, що виконувалася здобувачем особисто. Дисертація містить наукові положення, нові науково обґрунтовані теоретичні результати проведених здобувачем досліджень, що мають істотне значення для галузі математичного моделювання та прикладної математики в цілому. Це ґрунтовно підтверджено публікаціями, що розкривають основний зміст роботи. Дисертація свідчить про суттєвий особистий внесок здобувача в науку та характеризується єдністю змісту. Вагомість особистого внеску здобувача у забезпечення розвитку прикладної математики підтверджена наявністю трьох публікацій за темою докторської дисертації у виданнях, віднесених до першого квартилю відповідно до класифікації SCImago Journal and Country Rank і Journal Citation Reports. Все вищезазначене дає змогу зробити висновок про відповідність роботи вимогам Наказу МОН від 12.01.2017 № 40 "Про затвердження вимог до оформлення дисертацій" (зі змінами, внесеними згідно з Наказом від 31.05.2019 № 759).

Дискусійні положення та зауваження до змісту дисертації.

Загалом, позитивно оцінюючи наукове і практичне значення отриманих дисертантом результатів, варто відзначити наступні дискусійні положення і зауваження до змісту дисертаційної роботи.

1. Отримання ключової системи рівнянь моделі термомеханогетеродифузії за каскадного розпаду мігруючої речовини (розд.2) не сформульовано у вигляді теореми. В результаті не ясно, які припущення прийняті при її

одержанні.

2. В дисертації не наведено результатів застосування методу чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами, при збільшенні області інтегрування, коли додаткова область розбивається іншим розміром ґратки, хоча про можливість такого накладання сітки ідеться в п. 6.2.7.2.

3. При визначенні довговічності роботи промислових тришарових засипних фільтрів води автором запропоновано чисельний метод розв'язування нелінійних функціональних рівнянь, наведено його алгоритм, який досліджено та апробовано на двох прикладах спадних функцій. Проте не зрозуміло, чи можна цей метод застосовувати до осцилюючих функцій та неперервних функцій, які не перетинають вісь абсцис. Також виникає, якщо функція є розривною, чи застосовний цей метод.

Дані зауваження не мають істотного впливу на загальне позитивне оцінювання роботи.

Загальні висновки.

Подана до захисту дисертація є завершеним науковим дослідженням, в якому розроблено нові математичні моделі, два підходи для математичного опису процесів масоперенесення у складних та складених тілах і новий метод чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами. В цілому вирішено актуальну науково-практичну проблему розвинення підходів і методів математичного моделювання процесів масоперенесення в складних і складених тілах, що супроводжуються процесами сорбції-десорбції, каскадним розпадом або хімічними реакціями, за експериментальних даних на границі тіла.

Результати роботи є новими, вони доповідались на міжнародних і національних конференціях. Результати досліджень достатньо повно опубліковані в наукових працях дисертанта. Реферат адекватно відображає зміст роботи.

Дослідження, які склали основу роботи, виконувались відповідно до відомчої тематики Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України і Національного університету «Львівська політехніка» МОН України.

За актуальністю, рівнем та обсягом досліджень, науковою новизною та практичним значенням отриманих результатів дисертаційна робота «Математичне моделювання процесів масоперенесення у складних тілах з мікро-

структурою відповідає вимогам п.7, 8 та 9 «Порядку присудження та позбавлення наукового ступеня доктора наук» (Постанова Кабінету Міністрів України від 17 листопада 2021р. № 1197, м. Київ, зі змінами, внесеними згідно з постановою КМ № 507 від 03.05.2024р.), які ставляться до докторських дисертацій, а її автор Білушак Юрій Ігорович заслуговує присвоєння йому наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи.

Офіційний опонент,

Професор кафедри прикладної математики
Національного університету водного господарства
та природокористування МОН України
доктор технічних наук, професор



А.Я.Бомба



Отримано 23.12.2024 [Signature]