

ВІДГУК

на дисертаційну роботу Білушчака 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

Математичне моделювання процесів масоперенесення в неоднорідних середовищах належить до найбільш актуальних напрямів сучасних науково-інженерних досліджень у природоохоронній, машинобудівній, енергетичній, атомній галузях, мікроелектроніці та приладобудуванні.

В основі прогнозування функціонування очисних споруд, деталей машин та елементів конструкцій і приладів, які в процесі виготовлення та експлуатації перебувають у складних умовах взаємодії із зовнішнім середовищем, лежать математичні моделі для кількісного опису полів різної фізичної природи. Такі моделі повинні бути адекватними реальним об'єктам, поведінку яких вони описують, тобто вони мають достатньо повно враховувати структуру та властивості матеріалу, а також характер зовнішньої дії, яка часто буває високоінтенсивною.

До сучасних проблем математичного моделювання також, належить розробка і дослідження математичних моделей процесів перенесення з урахуванням впливу локальної структури матеріалу середовища.

Так, наприклад, відомо, що ряд домішок, зокрема, важкі метали, включаючи радіонукліди, нітратні та інші сполуки мігрують в дисперсній мікроструктурі об'єктів природного середовища декількома шляхами, переходячи з одного шляху дифузії на інший, зв'язуються з матеріалом тіла тощо. Такі особливості процесу перенесення домішкової речовини є характерними для ґрунтів, їх необхідно враховувати, оскільки попадання згаданих домішок у ґрунтові води і водоносні горизонти являє собою значну екологічну небезпеку і унеможливорює їхню промислову експлуатацію. У зв'язку з цим кількісні оцінки забруднення ґрунту токсичними речовинами і прогнозування захищеності ґрунтових вод з врахуванням впливу локальної структури середовища є однією з актуальних науково-прикладних проблем.

Як правило, розрізняється математичний опис дрібнодисперсних середовищ та складених тіл, кожен з контактуючих макроелементів яких має свою відмінну від інших мікроструктуру. У першому випадку використовують континуально-термодинамічні моделі, які побудовані з використанням положень механіки суцільного середовища та нерівноважної термодинаміки.

При цьому локальна структура середовища враховується шляхом уведення фізично різних станів частинок домішкової речовини, їх міграцією різними шляхами, переходами частинок з одного стану в інший, тощо.

У другому випадку часто ефективним є моделювання процесів перенесення на основі конкретних крайових та контактних-крайових задач математичної фізики. Труднощі, які при цьому виникають, коли умови контакту макроелементів є неідеальними, або необхідно врахування як дифузійного так і конвективного механізму перенесення, розв'язуються за допомогою використання відповідних числових методів. Проте у випадку швидкостей конвективного перенесення, близьких або більших за числа Пекле, відповідні методи тільки розробляються.

Процеси масоперенесення в складних тілах з мікроструктурою можуть супроводжуватись каскадним розпадом речовин, або незворотною хімічною реакцією. Саме тому потрібно створювати нові засоби та методи для їх математичного опису, у тому числі у взаємозв'язку з процесами іншої фізичної природи.

При постановках крайових задач перенесення у складених тілах з мікроструктурою виникають труднощі з адекватним формулюванням граничних умов. Існують ситуації, коли виходячи з фізичних міркувань, неможливо коректно сформулювати граничні умови, навіть в достатньо загальному вигляді. В той же час є можливість отримати експериментальні дані в певні моменти часу на частині зовнішньої границі тіла. Проте залишається проблемою встановлення оптимального часу припинення експерименту.

Тому тема дисертаційної роботи, яка присвячена розробці нових математичних моделей дифузійних процесів у складних тілах з мікроструктурою та розвиненню нових підходів і методів розв'язування крайових і контактних-крайових задач масоперенесення, є **актуальною**.

Тема роботи тісно зв'язана з науковими програмами, які виконувались в організаціях НАН України і МОН України. Загалом у рамках семи науково-дослідних робіт відображено результати дисертації, при цьому здобувач виконував їх як відповідальний виконавець або виконавець проектів.

Високий ступінь **обґрунтованості** основних наукових положень дисертації і висновків та їх **достовірність** забезпечується достовірністю прийнятих у роботі законів термодинаміки нерівноважних процесів, аналітичної хімії та законів Фіка; математичною строгістю і коректністю постановок розглянутих у роботі задач; обґрунтованістю застосування існуючих та розвинення нових підходів і методів побудови розв'язків сформульованих задач, а також

узгодженням окремих результатів з відомими у літературі теоретичними та експериментальними даними.

Дисертаційна робота Білушца Ю.І. присвячена математичному моделюванню процесів перенесення в тілах зі складною внутрішньою структурою. Автор отримує вихідні співвідношення математичної моделі зв'язаних механічних, теплових і гетеродифузійних процесів з урахуванням каскадного розпаду мігруючих речовини у середовищі з двома шляхами міграції та пастками. При цьому конкретно відзначено, які положення постулюються, а які отримані апробованими методами термодинаміки нерівноважних процесів із строгим математичним доведенням. Розроблена математична модель включає рівняння стану, кінетичні співвідношення та балансові рівняння на кожному етапі каскаду. На основі цієї моделі одержано ключову систему рівнянь термомеханогетеродифузії за каскадного розпаду речовин у багатокомпонентному середовищі, запропоновано та обґрунтовано її лінеаризований варіант.

Для розв'язування зв'язаних крайових каскадного типу задач дифузії, невзаємодіючих потоків та дифузії у середовищі з пастками, гетеродифузії двома шляхами і гетеродифузії у середовищі з пастками, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці, розроблена ітераційна процедура, що виправдано використовує інтегральні перетворення, теорії узагальнених функцій, теорію рядів та метод функцій Гріна. Аналітичний вигляд отриманих формул для концентрацій мігруючих речовин на всіх етапах каскаду дозволив, обґрунтовано застосовуючи перший закон Фіка, отримати розрахункові формули для потоків маси та кількості речовини, що пройшла через шар за певний часовий інтервал.

У багатофазних багатокомпонентних тілах, що складаються з макроелементів з власною пористою мікроструктурою, розвинено та обґрунтовано два підходи, що виправдано використовують методи термодинаміки нерівноважних процесів для побудови лінеаризованих математичних моделей гетеродифузії та конвективної дифузії мігруючих частинок, які супроводжуються їхньою сорбцією на скелет, у багатофазних середовищах, методи математичної фізики, диференціальної геометрії поверхонь, математичного аналізу, інтегральних рівнянь, математичної статистики, класичні методи інтерполяції, апроксимації та екстраполяції для знаходження розв'язків контактної-крайових задач конвективної дифузії у тришаровому пористому тілі за неідеального масового контакту, а також добре обґрунтованої теорії інтегральних перетворень до однозв'язних областей з їхнім подальшим "зшиванням" через додатко-

во введено функцію, яка означається та визначається з умов контакту областей. Для комп'ютерного моделювання отриманих розв'язків обґрунтовано застосовується теорія алгоритмів, метод Ньютона-Котеса замкненого типу, підходи об'єктно-орієнтованого проектування.

Для аналізу функцій концентрацій домішкової речовини, сорбованої на скелеті тіла, автор запропонував оригінальний метод чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами, який включає накладання змінної сітки на змінну область інтегрування, виправдане застосування методу кубатур та здійснення тріангуляційного розбиття вздовж змінної межі, встановлення похибки обчислень розкладом подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами в ряд Тейлора з обґрунтованим використанням теореми Барроу. Метод верифіковано на основі інтегрування достатньо простих функцій, для яких відомо аналітичні вирази.

Для визначення довговічності роботи промислових тришарових засипних фільтрів води, що базується на розв'язанні нелінійних функціональних рівнянь розвинуто метод на відрізку невідомої довжини, розвинено чисельний метод, що є композицією методу простої ітерації та модифікації методу дихотомії.

Побудова математичної моделі конвективної дифузії забрудненого розчину у фільтрі води з пом'якшенням жорсткої води за експериментальних даних на границі обґрунтовано базується на балансових співвідношеннях маси компонент системи. На цій основі сформульована крайова задача для пористого шару, через який відбувається фільтрування водного розчину і на його поверхню рівномірно подається реагент, а граничні та початкові умови на шукані функції сформульовані у відповідності із фізичними та хімічними процесами, які відбуваються на поверхнях фільтра. Для побудови розв'язків крайової задачі виправдано використано методи аналітичної хімії, математичної фізики, апроксимації, інтегральних перетворень і теорії лишків.

В роботі наведені докладні викладки при побудові математичних моделей та знаходженні розв'язків сформульованих крайових та контактних-крайових задач. Автор отримав коректні результати, які мають зрозуміле фізичне обґрунтування. Це дає можливість стверджувати про достовірність наукових положень дисертації, отриманих результатів та сформульованих висновків. Більша частина результатів безпосередньо застосована в практиці, що підтверджено п'ятьма актами про використання результатів дисертаційної роботи.

Одержані в дисертаційній роботі результати є **новими**.

Так, для багатокомпонентних систем вперше отримано вихідні модельні співвідношення механотермогетеродифузії з урахуванням каскадного розпаду мігруючих речовин у середовищі з двома шляхами міграції та пастками. При цьому аксіоматизовано базові положення континуально-термодинамічного підходу, який був використаний при їх формулюванні. Отримано часткові варіанти моделі за умови локальної термодинамічної рівноваги між станами на кожному етапі каскадного розпаду мігруючих частинок.

На цій основі зроблені постановки крайових задач каскадного типу для моделей дифузії, невзаємодіючих потоків, дифузії в середовищі з пастками, гетеродифузії, гетеродифузії в тілі з пастками. Розвинено метод розв'язування крайових задач масоперенесення каскадного типу, що здійснюється ітераційною процедурою із застосуванням інтегральних перетворень і функцій Гріна на всіх етапах каскаду. Отримання аналітичних розв'язків на перших етапах розпаду і розв'язків в інтегральному вигляді на наступних етапах каскаду дозволило одержати розрахункові вирази і проаналізувати дифузійні потоки та кількість речовини, що за заданий час пройшла через багатокомпонентне тіло.

Розроблено два нових підходи для математичного опису процесів конвективної дифузії в тілах складної та складеної структури в умовах масообміну між макроелементами системи. Перший з них базується на побудованій автором математичній моделі конвективної гетеродифузії у лінеаризованому варіанті, постановці контактної-крайових задач за умов неідеального масового контакту, побудові точного аналітичного розв'язку сформульованої задачі за допомогою методу інтегральних перетворень у контактуючих областях із доозначенням шуканої функції (або при потребі її похідної) на границі контакту з допомогою однієї з контактних умов і знаходженням цього значення з іншої контактної умови, а також комп'ютерному моделюванні отриманих розв'язків.

Другий системний підхід до опису процесів конвективної дифузії в складних та складених тілах, які знаходяться в умовах невизначеності, базується на синтезі відомого підходу до математичного моделювання процесів масоперенесення в багатофазних багатокомпонентних середовищах для добре структурованої частини системи та неklasичного статистичного підходу, за яким моделювання невідомої граничної умови здійснюється на основі експериментальних даних. В рамках статистичного підходу досліджуються експериментальні дані для вибору методу побудови апроксимуючої функції на нижній границі тіла, розв'язується локалізована задача конвективної дифузії в тришаровому тілі і за її розв'язком оцінюється зверху час насичення даного

тіла, далі з певною точністю визначається час досягнення концентрацією стаціонарного режиму, який розглядається як оціночний час насичення та припинення експериментальних вимірів, і на цій основі встановлюється гранична умова як апроксимаційний поліном.

Для дослідження концентрації домішкових частинок, сорбованих на скелеті, у макроелементах тришарового тіла розроблений новий чисельний метод знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами та змінною областю інтегрування, який ґрунтується на накладанні змінної сітки та застосуванні методу кубатур, що змінюються в залежності від кількості елементів розбиття змінної області інтегрування та ширини ґратки, та знаходження похибки обчислень.

Створене на основі отриманих формул програмне забезпечення дозволило встановити нові ефекти розподілів концентрацій мігруючих речовин та потоків маси в складних та складених тілах, зокрема показано, що для моделі гетеродифузії за каскадного розпаду речовини на першому і подальших етапах розпаду спостерігається характерне приповерхнєве накопичення частинок, максимум концентрації яких з часом зростає та зсувається вглиб тіла.

Перший розділ дисертації присвячено огляду літератури з математичного моделювання процесів перенесення в тілах складної геометричної будови та фізико-механічних процесів, що супроводжуються каскадними реакціями, окреслено проблеми та визначено місце досліджень дисертації. У другому розділі розглянуто вихідні положення континуального опису багатокомпонентних систем, побудовано в аксіоматизованому варіанті математичну модель термомеханогетеродифузії за каскадного розпаду мігруючих домішкових речовин та отримано її часткові варіанти. У третьому розділі сформульовані крайові задачі каскадного типу для моделей дифузії, невзаємодіючих потоків, дифузії в середовищі з пастками, розвинений метод та отримані аналітичні розв'язки поставлених задач. Для кожної моделі розроблені відповідні модулі програмного забезпечення та проведено числовий аналіз концентрацій розпадних домішкових речовин, потоків маси і кількостей речовин, що пройшли через шар. В четвертому розділі розвинений метод адаптований для крайових задач, сформульованих в рамках моделі гетеродифузії розпадних речовин двома шляхами. У п'ятому розділі досліджено математичну модель гетеродифузії розпадних речовин у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин. Досліджено вплив пасток для домішкових частинок на концентрацію та потоки мігруючих речовин. У шостому розділі розвинено два підходи до моделювання процесів конвективної дифузії в тілах з макро- і мікроструктурою з урахуванням

неідеальних умов масового контакту. Запропоновано та обґрунтовано чисельний метод обчислення подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами, що тягне за собою змінність області інтегрування. У цьому розділі побудована континуальна модель фільтрації (конвективної дифузії), що супроводжується сорбційними процесами та хімічною реакцією вилучення основних катіонів для пом'якшення води. Проаналізовано випадки роботи фільтрувальних установок.

Важливо підкреслити, що всі розглянуті у роботі задачі доведено до відповідної числової реалізації та багато проілюстровані графічним матеріалом.

Зміст дисертації логічно відповідає основній меті роботи та окреслює ключові завдання, необхідні для її досягнення.

В дисертаційній роботі розв'язана важлива науково-практична проблема 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.

Важливість для науки і практики результатів роботи полягає в розробленні та обґрунтуванні нових підходів та методів, які дозволяють розв'язувати нові класи крайових задач. За розвиненими у роботі підходами математичного моделювання масоперенесення у складних та складених тілах кількісно досліджено функції концентрації домішкових речовин, що каскадно розпадаються, відповідних потоків та кількостей речовин, що пройшли через шар в залежності від коефіцієнтів дифузії на різних шляхах міграції, коефіцієнтів інтенсивності розпаду, сорбції та десорбції на трьох перших етапах каскаду, поверхневого розподілу між повільним та швидким шляхами дифузії.

У роботі визначено нові закономірності процесу масоперенесення в тришарових пористих тілах за неідеального контакту концентрацій мігруючої домішкової речовини, в тому числі за експериментальних даних на нижній границі шару. Наприклад, встановлено, що величина концентрації домішкової речовини на границях контакту пористих шарів можуть набувати в залежності від величини швидкості конвективного перенесення значень від нехтовно малих, тобто на границі контакту домішкові частинки не накопичуються, до значень, які в декілька разів перевищують значення концентрації на поверхні, де діє джерело маси.

Забезпечення населення та промисловість України водою високої якості з відповідними параметрами та її пом'якшення за допомогою хімічних реакцій

потребує побудови нових математичних моделей та здійснення на цій основі обчислень концентрації забруднюючих речовин, сорбованих на скелеті фільтру, та вилучення необхідної кількості катіонів з водного розчину. Такі розрахунки проведені в дисертаційній роботі та використані на очисних спорудах у Львівській, Харківській та Хмельницькій областях.

Розроблені в роботі підходи та методи можуть використовуватися для дослідження процесів масоперенесення, теплопровідності, електропровідності та інших, які описуються параболічними рівняннями або системами рівнянь та деякими іншими рівняннями, в середовищах з мікроструктурою, складних та складених тілах в тому числі за наявності експериментальних даних щодо шуканої функції на частині зовнішньої границі тіла.

Повнота викладу результатів в опублікованих працях. Результати, отримані в дисертаційній роботі, достатньо повно викладені у двох монографіях, двох розділах колективних монографій, 22 статтях, надрукованих у фахових виданнях, у т.ч. 8 провідних світових журналах за даною спеціальністю, з них 3 у виданнях, що мають кватиль Q1, 14 статтях, 4 матеріалах конференцій, проіндексованих базою Scopus, та 46 публікації в матеріалах міжнародних і вітчизняних конференцій. Програмне забезпечення, розроблене в рамках дисертації, підтверджено 2 авторськими свідоцтвами.

Реферат відповідає змісту дисертації.

Результати наукових досліджень, за якими захищена кандидатська дисертація, не включено до докторської дисертації.

Оформлення дисертації та дотримання принципів академічної доброчесності. Дисертація є самостійно написаною кваліфікаційною науковою працею із науково обґрунтованими висновками та рекомендаціями. Структура і зміст дисертації свідчить про комплексний характер проведеного здобувачем дослідження, яке в повній мірі висвітлює тему роботи. Дисертація характеризується цілісністю, логічною послідовністю, наявністю взаємозв'язку між розділами та підрозділами та оформлена згідно з нормативними вимогами і стандартами, написана належною українською мовою. Використання ідей та результатів інших дослідників мають посилання на відповідні джерела.

Дисертація та наукові публікації, у яких висвітлені основні наукові результати, не містять ознак академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації, текстових запозичень чи інших порушень академічної доброчесності.

Оформлення дисертації відповідає вимогам Наказу МОН України «Про затвердження вимог до оформлення дисертацій» від 12.01.2017 № 40 зі

змінами від 31.05.2019 р.

Відповідність дисертаційної роботи спеціальності. Дисертаційна робота Білушчака Юрія Ігоровича «Математичне моделювання процесів масоперенесення в складних тілах з мікроструктурою» за змістом відповідає спеціальності 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи (технічні науки).

Рекомендації щодо використання результатів дисертації. Отримані в дисертаційній роботі результати доцільно використовувати для розробки програмного забезпечення комп'ютерної підтримки рішень для покращення екологічної ситуації в наслідок забруднення ґрунтів важкими металами, зокрема радіонуклідами, нітратними та іншими органічними сполуками та забезпечення якісним очищенням питних та стічних вод в промислових масштабах, а також в навчальних цілях при викладанні дисциплін, що пов'язані з чисельними методами та методами математичного моделювання.

Щодо змісту роботи можна зробити такі **зауваження**.

1. При побудові моделі механотермогетеродифузії за каскадного розпаду домішкової речовини при локальній зміні стану частинок на сторінках 80, 81 і 85 використана умова ізотропності середовища. В роботі не з'ясовується наскільки важливою є вказана умова і чи може побудована математична модель застосовуватись до анізотропних тіл?

2 У методі чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами отримано формули для трьох можливих варіантів накладання змінної сітки та визначена похибка методу щодо загального випадку. Доцільно було б, також, окремо отримати похибки для кожного з розглянутих у роботі варіантів накладання сітки.

3. При побудові математичної моделі конвективної дифузії забрудненого розчину у фільтрі води з пом'якшенням жорсткої води, автор обмежується протіканням однієї хімічної реакції для вилучення з розчину катіону одного виду. Однак у розчині нерідко виявляється два і більше види катіонів, які впливають на твердість води. В дисертації не проведено модельного дослідження щодо врахування того факту, що при пом'якшенні водного розчину відбувається нейтралізація двох і більше основних катіонів.

4. З метою підвищення ступеня достовірності кінцевих результатів щодо проблеми моделювання конвективної дифузії забруднень у фільтрах з пом'якшенням жорсткої води за умов урахування експериментальних даних на границі (розділ 7), доцільно було б використати методологію математичної теорії оптимального експерименту.

Висновок про відповідність дисертації встановленим вимогам.

Вказані вище зауваження суттєво не знижують загальної позитивної оцінки дисертації та її високої якості загалом. У цілому дисертаційна робота Білушчака Ю.І. є актуальною, завершеною та самостійною науковою працею, в якій отримані нові, достовірні результати, що ефективно вирішують наукову і прикладну проблему розвинення підходів і методів математичного моделювання процесів масоперенесення в складних і складених тілах, які супроводжуються сорбцією-десорбцією, каскадним розпадом або хімічними реакціями, за експериментальних даних на границі тіла. Більшість розв'язаних задач завершено числовою реалізацією. Дисертація відповідає спеціальності 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи (технічні науки).

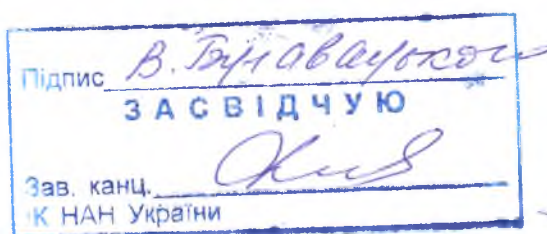
Результати дисертації є новими, їх цінність незаперечна, вони доповідались та обговорювались на національних і міжнародних конференціях. Результати досліджень достатньо повно опубліковані в наукових працях здобувача, реферат правильно відображає зміст роботи. Текст дисертації та реферату викладено на відповідному науковому та літературному рівні та подано відповідно до вимог для дисертацій на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук. Загальні висновки роботи повністю відображають досягнення її цілей.

Підсумовуючи вищесказане, можна стверджувати, що дисертація за обсягом виконаних досліджень, новизною і науковою значимістю отриманих результатів та їх рівнем повністю відповідає вимогам п.7, 8, 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 Білушчак Юрій Ігорович заслуговує присудження йому наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи.

Офіційний опонент,
провідний науковий співробітник
Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова
Національної академії наук України,
доктор технічних наук, професор



Володимир БУЛАВАЦЬКИЙ



Отримано 27.12.24 згідно з актом /Засвідчує п. В./