

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА
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

Актуальність теми дисертаційної роботи

Процеси масоперенесення в довкіллі, зокрема, при здійсненні моніторингу техногенних субстанцій, прогнозі захищеності підземних вод від поверхневих забруднень, оцінці надійності інженерних споруд щодо зберігання агресивних сполук та в техніці при описі корозії чи деградації матеріалів, прогнозуванні надійності і довговічності поверхневих покриттів є одними з найскладніших щодо вивчення та побудови математичних моделей.

Складність математичного опису таких процесів зумовлена впливами локальної структури середовища та каскадного розпаду речовин, які приводять до дослідження взаємного зв'язку цих процесів з процесами іншої фізичної та хімічної природи (сорбційних, дифузійних, хімічних реакцій), адже тоді необхідно враховувати, що внаслідок розпаду утворюються нові речовини, які своєю чергою також мігрують в тілі та можуть розпадатись.

Побудова математичних моделей та отримання розв'язків нелінійних крайових задач масоперенесення для складних та складених тіл є необхідними та важливими, беручи до уваги той факт, що перевірка основних теоретичних принципів за допомогою фізичних експериментів, зазвичай, є утрудненою через їхню високу вартість та вплив сторонніх ефектів. Тому **актуальність теми дисертації**, спрямованої на встановлення закономірностей масоперенесення домішок в елементах різного типу інженерних та природних об'єктів (конструкції, сховища техногенних забруднень, промислові засипні фільтри води тощо) шляхом математичного моделювання процесів масоперенесення та урахування кількісної оцінки впливу процесів різної фізичної природи на основні дифузійні характеристики цих елементів, не викликає сумніву.

Підтвердженням актуальності теми дисертаційної роботи є і той факт, що вона виконана відповідно до планів держбюджетних науково-дослідних робіт Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача Національної академії наук України.

Короткий аналіз змісту дисертаційної роботи

Дисертація складається з анотації, вступу, семи розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету та задачі досліджень, викладено наукову новизну і практичне

значення одержаних результатів, надано відомості про зміст роботи і її структуру, апробацію, публікації й особистий внесок автора.

У першому розділі на основі літературних джерел проведено аналіз у складних і складених системах процесів дифузії, які супроводжуються каскадним розпадом домішкових компонент, процесами сорбції-десорбції, хімічними реакціями або наявністю пасток для мігруючих частинок, підкреслено необхідність побудови нових математичних моделей, які б враховували зазначені аспекти фізико-хімічних процесів та актуальність розвинення підходів та методів математичного моделювання процесів масоперенесення в складних та складених тілах.

Другий розділ присвячено побудові в аксіоматизованому вигляді вихідних співвідношень математичної моделі взаємозв'язаних теплових, механічних і гетеродифузійних процесів з урахуванням каскадного розпаду мігруючої речовини у середовищі з двома шляхами міграції та пастками на основі континуально-термодинамічного підходу. Розглянуто багатоконпонентні системи, в яких кожній компоненті поставлено у відповідність континуум, з допомогою якого описано кінематичні та деформаційні властивості компонент. Для каскадного розпаду домішкової речовини сформульовано балансові співвідношення, які відображають закони збереження маси, імпульсу та енергії. Використовуючи концепцію локальної термодинамічної рівноваги, побудовано рівняння стану та рівняння балансу ентропії, на основі якого записано кінетичні рівняння. Для розв'язувальних функцій (концентрації домішкових компонент, вектора переміщення точок континуумів центрів мас, густини та температури тіла) записано ключову систему рівнянь, яку надалі лінеаризовано. Отримано часткові випадки моделі механотермогетеродифузії за умови локальної термодинамічної рівноваги між станами на кожному етапі каскадного розпаду мігруючих частинок.

У третьому розділі на основі отриманих у попередньому розділі часткових випадків досліджено процеси масоперенесення домішкових речовин у середовищах з мікроструктурою за їхнього каскадного розпаду. Для моделей *дифузії* у середовищах з ефективними характеристиками чи з пастками та для невзаємодіючих потоків сформульовано нові взаємозв'язані крайові задачі каскадного типу (концентрація частинок на певному кроці розпаду – одна з шуканих функцій – є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці – інша з шуканих функцій, яка теж дифундує, сорбується, десорбується і розпадається) та побудовано їхні розв'язки за ітераційною процедурою з використанням інтегральних перетворень та функцій Гріна. Здійснено комп'ютерне моделювання для кількісного аналізу концентрацій мігруючих домішкових компонент, потоків маси та кількості відповідної речовини, що пройшла через шар, на всіх етапах каскаду.

Четвертий розділ присвячено розгляду спрощеної (з точки зору термодинаміки нерівноважних процесів) математичної моделі *гетеродифузії* домішки, отриманої за умови локальної термодинамічної рівноваги між різними фізичними станами перебування домішкових частинок в адсорбованих шарах води та в об'ємі скелету. Досліджено процеси масоперенесення мігруючих речовин двома

шляхами з урахуванням взаємних переходів частинок між двома станами та каскадного розпаду домішкових компонент. Узагальнено розроблений у третьому розділі аналітико-ітераційний метод щодо розв'язання взаємозв'язаних систем диференціальних рівнянь гетеродифузії. Знайдено та кількісно досліджено концентрації й потоки маси мігруючих компонент та визначено кількість відповідних речовин, які за певний проміжок часу дифундували через нижню межу шару.

У *п'ятому розділі* на основі загальної математичної моделі термомехано-гетеродифузії розпадних мігруючих речовин у середовищі з пастками сформульовано відповідні крайові задачі каскадного типу. При цьому потоки маси у перших двох станах визначають аналогічно до математичної моделі гетеродифузії двома шляхами, описаної у четвертому розділі, а *третьій стан* домішкових частинок означено як «пастки», тобто потік маси у ньому відсутній, хоча домішкові речовини можуть сорбуватися і десорбуватися, ланцюгово розпадатися на дві нові речовини або не розпадатися. Такі системи диференціальних рівнянь зв'язані між собою розпадом мігруючих речовин типу хімічних реакцій або радіоактивного розпаду. За аналітико-ітераційним методом з використанням уведених інших матричних функцій Гріна побудовано розв'язки для концентрацій розпадних домішок на кожному з етапів розпаду на швидкому й повільному шляхах міграції, в пастках та для сумарних концентрацій. Розроблено пакет програм для комп'ютерного моделювання процесів масоперенесення у середовищі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин.

У *шостому розділі* розглянуто шарувате тіло, кожен макроелемент (фаза) якого має свою складну мезо- або мікроструктуру (пористу або композитну). Запропоновано два підходи до математичного моделювання процесів перенесення в багатофазних багатокомпонентних, у тому числі пористих, тілах. У першому з них розглянуто лінеаризований варіант з урахуванням умов неідеального контакту щодо концентрації домішкової речовини та знайдено точний аналітичний розв'язок сформульованої задачі за допомогою методу інтегральних перетворень окремо в різних фазах. Запропоновано і обґрунтовано новий метод чисельного інтегрування подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами та змінною областю інтегрування, а також алгоритм розв'язання нелінійного функціонального рівняння на відрізку невідомої довжини. Другий підхід розроблено для математичного опису таких складених об'єктів і систем, для яких, виходячи з фізичних міркувань, неможливо коректно записати крайові або початкові умови, проте наявні експериментальні дані щодо шуканої функції або її похідної на межі тіла чи в початковий момент часу. Він ґрунтується на синтезі класичного підходу до математичного моделювання зв'язаних процесів різної фізичної природи в неоднорідних середовищах для добре структурованої частини системи та некласичного статистичного підходу до моделювання невідомої крайової умови на основі експериментальних даних.

У *сьомому розділі* побудовано математичну модель конвективної дифузії забрудненого розчину у фільтрі води з пом'якшенням її жорсткості за експериментальних даних на межі на основі балансових співвідношення маси

компонент системи. Отримано систему шести диференціальних рівнянь в частинних похідних, складену з двох рівнянь масоперенесення домішкових частинок, які сорбуються на скелет, у двох станах, рівняння масоперенесення сполуки одного з основних катіонів і реагента, що вступають у хімічну реакцію, рівняння масоперенесення частинок нерозчинної речовини, що утворилися в наслідок хімічної реакції та рівняння перенесення частинок води. Сформульовано крайову задачу для шару, через який відбувається фільтрування водного розчину, де на поверхню тіла рівномірно подається реагент. У початковий момент часу механічний фільтр є чистим і заповненим водою, яка характеризується сталою підвищеною твердістю. Запропоновано модельний опис хімічної реакції пом'якшення води. Здійснено комп'ютерне моделювання процесу регенерації засипного фільтра води та кількісний і якісний аналіз ефективності його роботи (час насичення та довговічність роботи).

Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків та рекомендацій, їх достовірність

Адекватність розроблених у роботі математичних моделей відповідним процесам масоперенесення підтверджена збігом результатів проведених числових експериментів з результатами окремих натурних спостережень реальних об'єктів фільтрування.

Достовірність одержаних в дисертації результатів і висновків забезпечується математичною строгістю формулювань задач з використанням основних положень теорії термомеханогетеродифузії за каскадного розпаду дифундуючих речовин у багатокомпонентному середовищі та застосуванням апробованих аналітичних та чисельних методів, а також порівнянням результатів обчислень з експериментальними даними. Достовірність висновків і рекомендацій практичного характеру підтверджується значним обсягом проведених комп'ютерних експериментів.

У процесі детального аналізу дисертаційної роботи та автореферату не виявлено висновків та тверджень, що викликають сумніви.

Наукова новизна дисертаційного дослідження

У роботі отримано нові науково обґрунтовані результати, серед яких вперше:

- в аксіоматизованому вигляді побудовано математичну модель взаємозв'язаних теплових, механічних і гетеродифузійних процесів з урахуванням особливостей мікроструктури тіла. Запропоновано системний підхід до опису складних та складених систем, який ґрунтується на синтезі класичного підходу до математичного моделювання процесів різної фізичної природи для добре структурованої частини системи та неklasичного статистичного підходу до моделювання невідомої крайової умови на основі експериментальних даних;
- побудовано математичну модель конвективної дифузії домішкових частинок у пористих складених тілах та модель механічного очищення засипним фільтром води із хімічним пом'якшенням води в умовах невизначеності;

- отримано функціональні залежності концентрацій розпадних речовин, потоків маси та кількості речовини, що пройшла через шар, в складних та складених тілах від фізико-хімічних та геометричних характеристик середовища.

Розвинено метод розв'язування задач каскадного типу за допомогою функцій Гріна та вперше розроблено чисельний метод знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами та змінною областю інтегрування.

Оцінка отриманих здобувачем результатів щодо їхньої значущості для науки та практики

Отримані теоретичні результати та розроблений чисельний метод є основою для розв'язування низки прикладних задач, а саме:

- розрахунку експлуатаційних параметрів каркасно-насіпних фільтрів води й часових параметрів їхньої роботи;
- ефективнішого видалення органічних сполук, вилучення кольорово-забарвлених частинок та речовин, які впливають на запах та каламутність водних розчинів;
- дослідження процесів регенерації водного фільтра та пом'якшення води (вилучення надлишків іонів кальцію);
- оцінки процесів гетеродифузії техногенних речовин за їх натурального розпаду, тобто розпаду органічних азотовмісних сполук, пестицидів та радіоактивних речовин,

що підтверджено чотирма актами використання результатів дисертаційної роботи.

Отримані у роботі математичні моделі, метод, підходи, алгоритми та програмні засоби використовують при читанні курсу "Аналітичні та чисельні методи досліджень" для студентів Національного університету «Львівська політехніка» за спеціальністю 113 "Прикладна математика".

Повнота опублікування основних положень дисертації, аналіз реферату

За основними матеріалами роботи опубліковано 78 наукових праць, у тому числі: 2 монографії, 2 розділи колективних монографій, 14 статей у фахових наукових періодичних виданнях України з технічних наук, 8 статей у журналах, внесених у міжнародні науково-метричні бази Scopus та Web of Science, отримано 2 свідоцтва про реєстрацію авторського права на твір, 5 праць опубліковано без співавторів. Опубліковані матеріали дисертації достатньо і повно висвітлюють результати досліджень, що виносяться на захист.

Матеріали дисертації пройшли достатню апробацію, вони доповідались автором на міжнародних та Всеукраїнських наукових конференціях і конгресах (опубліковано 46 матеріалів доповідей, з них 4 проіндексованих у науково-метричній базі Scopus) та низці семінарів, зокрема, відділу числових методів математичної фізики Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України, кафедри обчислювальної математики та програмування Національного університету «Львівська політехніка».

Реферат правильно і з достатньою повнотою відображає основний зміст дисертації. Виклад матеріалу дисертації супроводжується всіма необхідними посиланнями в тексті роботи на першоджерела та запозичення з праць інших дослідників. Дисертація та реферат написані державною мовою, грамотно, чітко, послідовно, на високому професійному рівні, оформлені відповідно до вимог МОН України. Основні наукові, практичні положення і результати коректно та логічно сформульовано і представлено у зрозумілій формі.

Відсутність порушення академічної доброчесності

Дисертація є самостійним науковим дослідженням, в якій відображено власні ідеї і напрацювання автора, що дозволило вирішити поставлену у роботі проблему. Робота містить теоретичні положення і висновки, сформульовані дисертантом особисто. Використані в дисертаційному дослідженні ідеї і положення науковців мають на меті підкріплення ідей автора та відповідні посилання.

Наукові положення та результати, які виносилися на захист кандидатської дисертації "Математичне моделювання процесів дифузії у випадково неоднорідних шаруватих тілах" (2012 рік) за спеціальністю 01.05.02 – "математичне моделювання та обчислювальні методи" (технічні науки), не використовуються в поданій докторській дисертації.

Недоліки та зауваження до дисертації та реферату

По дисертаційній роботі слід зробити такі *зауваження*:

1. У другому розділі з високою математичною культурою викладення матеріалу описано значну кількість математичних моделей, однак розроблені в дисертації випадки є лише частиною з них. Тому виникає запитання щодо доцільності такого ґрунтовного, розлогого й деталізованого огляду і доведення значної кількості теорем.
2. Не обґрунтовано потребу введення безрозмірних змінних (3.1), які стискають часову вісь і розтягують просторові. На мою думку, твердження про природність безрозмірної форми подання результатів є дискусійним. Наскільки доцільною виявилась незалежність від геометричних розмірів тіла або характерних розмірів структурних неоднорідностей?
3. Властивості функції Гріна, отриманої в роботі, проілюстровано рисунком 3.3 та описано за результатами числових розрахунків. Усунення сингулярності цієї функції цікаво було б простежити у більш формалізованому викладі, як це зроблено у четвертому та п'ятому розділах для уведених матричних функцій Гріна.
4. Не обґрунтовано вибір нульової концентрації частинок на всіх етапах розпаду на нижній межі шару, тобто допущення, що джерелом маси на кожному кроці розпаду є лише частинки, утворені внаслідок розпаду на попередньому кроці. Наскільки ускладнить отримання розв'язку задачі урахування розпаду на кількох попередніх кроках?

