

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу
Давидок Анастасії Євгенівни

«Математичне моделювання дифузійних потоків у двофазних стохастично неоднорідних шаруватих структурах», подану на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

Актуальність теми дисертації. Під час математичного моделювання процесів масоперенесення важливим завданням є оцінка впливу випадково розташованих включень на процес дифузії домішкових субстанцій у різного типу об'єктах. Наприклад, це можуть бути неоднорідні геологічні структури, композитні конструкції, багат шарові фільтри, пористі матеріали або наноструктури. При цьому, як правило, відомі певні геометричні параметри та фізичні характеристики цих включень, а також умови на внутрішніх границях контакту.

На сьогодні достатньо повно розроблено підходи і створено математичні моделі для визначення розподілу концентрації домішкової речовини у півпросторі та шарі в припущенні рівномірного чи гама-розподілу включень у вигляді прошарків, паралельно орієнтованих циліндрів або куль. Водночас в інженерній практиці важливою характеристикою процесу дифузії, крім концентрації мігруючої речовини, є дифузійний потік. Оцінка дифузійних потоків дає можливість визначити параметри різного роду мембран і фільтрів та провести аналіз ефективності, надійності, довговічності їхньої роботи. Так в існуючих системах промислового очищення забруднених стоків та питної води застосовують багат шарові фільтри з різними фізичними та геометричними параметрами підшарів. Комп'ютерне моделювання роботи таких фільтрів дозволяє підбирати оптимальні характеристики їх функціонування, заощаджуючи при цьому на проведенні натурних експериментів. У випадку, якщо координати розташування чи товщини підшарів багат шарових фільтрів є невідомими, виникає необхідність розгляду таких структур як випадкових.

Визначення потоків маси домішкових субстанцій у багатофазних тілах випадково неоднорідної структури з першого закону Фіка за знайденою концентрацією викликає деякі проблеми, оскільки при виконанні процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз виникає ненульовий і невідомий доданок – функція кореляції градієнта стохастичного поля концентрації та

випадкового коефіцієнта дифузії. Саме тому дисертаційна робота Давидок А.Є., в якій запропоновано нову модель та підхід до визначення випадкових дифузійних потоків у двофазних стохастично неоднорідних шаруватих структурах за довільного ймовірнісного розподілу фаз та стохастичних товщин підшарів, є актуальною та важливою.

Дисертаційна робота Давидок А.Є. виконувалась в рамках таких науково-дослідних робіт Центру математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С.Підстригача НАН України, які мають відповідні номери державної реєстрації: «Розробка методів математичного моделювання нелінійних нерівноважних процесів у багатофазних тілах періодичної та стохастичної структури і створення програмного забезпечення» (№ ДР 0111U009748), «Створення і дослідження математичних моделей процесів переносу у регулярних і нерегулярних дисперсних структурах, континуальних моделей наномеханіки і математичних методів обробки експериментальних даних» (№ ДР 0115U003566), що підтверджено актом, поданим у додатках до дисертації.

Тема дисертаційної роботи відповідає пункту 4 Статті 3 «Пріоритетні напрями розвитку науки і техніки на період до 2020 року» Закону України «Про пріоритетні напрями розвитку науки і техніки», а саме «Раціональне природокористування», а також загальнодержавній цільовій програмі «Питна вода України» на 2011-2020 роки, зокрема, завданню Програми «Розроблення та впровадження науково-дослідних і дослідно-конструкторських розробок із застосуванням новітніх матеріалів, технологій, обладнання та приладів».

Структура та зміст дисертації. Робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел із 224 найменувань та додатків. Загальний обсяг дисертації складає 198 сторінок, з них 148 сторінок основного тексту.

У **вступі** до дисертації зосереджено увагу на обґрунтуванні актуальності теми роботи, задачах та методах досліджень, науковій новизні результатів. Аргументовано практичне значення вирішення завдання математичного моделювання дифузійних потоків у випадково неоднорідних структурах, наведено дані про особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів, кількість опублікованих дисертантом праць.

У **першому розділі** здійснено аналіз типових багатофазних шаруватих структур та галузей їх використання. Проведено огляд сучасних підходів до вивчення цих об'єктів та процесів, які в них перебігають, обґрунтовано актуальність розроблення нових моделей і засобів до математичного опису

випадкових дифузійних потоків.

У другому розділі дисертаційної роботи розроблено підхід до математичного моделювання потоків маси у випадково неоднорідних шаруватих тілах. У рамках підходу з рівняння балансу маси, дією на нього зліва оператором Гамільтона, домноженням отриманого співвідношення на коефіцієнт дифузії і врахуванням першого закону Фіка, отримано нове рівняння дифузії безпосередньо на дифузійний потік. Запропоновано та обґрунтовано крайові умови для функції потоку маси. Виведено еквівалентну початкову умову на функцію концентрації з початкової умови на потік, використовуючи перший закон Фіка для хімічного потенціалу та лінеаризоване співвідношення між хімічним потенціалом та концентрацією домішкової субстанції. Сформульовані крайові задачі на випадкову функцію потоку розв'язуються за умов нульової та ненульової сталої початкової концентрації домішки в тілі. Розглядаючи неоднорідність середовища як внутрішні джерела, крайовій задачі дифузії на потік поставлено у відповідність еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння з випадковим ядром. Сформульована і доведена теорема існування розв'язку отриманого інтегро-диференціального рівняння. Його знайдено у вигляді абсолютно і рівномірно збіжного ряду Неймана, що дало можливість проводити процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз із заданою функцією розподілу.

Ряд Неймана для випадкової функції потоку побудований в околі розв'язку однорідної крайової задачі з характеристиками базової фази. Для знаходження потоку в однорідному шарі розв'язано відповідні крайові задачі, сформульовані на функцію концентрації, за нульової та ненульової сталої початкових умов та використано перший закон Фіка. Зокрема, отримано вирази для концентрації мігруючої речовини та потоку в однорідному тілі, а також крайові умови для функції потоку через нижню границю шару. Проведено числові дослідження та показано, що для ненульової початкової концентрації спостерігається утворення максимуму дифузійного потоку в околі нижньої границі тіла тим більшого, чим більшим є відношення початкової концентрації до потоку на верхній межі.

Проведено процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу та отримано формули для визначення потоків домішки у смузі з прошарком та багат шаровому тілі. В одержаних формулах не враховано конкретний вигляд крайових умов, що дає можливість застосовувати їх для різних типів початкових та граничних умов. Отримано розрахункові формули та розроблено відповідні програмні модулі для комп'ютерного моделювання усереднених дифузійних потоків у двофазній смузі з рівномірним розподілом фаз. Зокрема показано, що для коефіцієнтів

дифузії мігруючої субстанції у матриці менших, ніж у включенні, потік у неоднорідному середовищі завжди більший, ніж у тілі без прошарків.

Третій розділ присвячений математичному та комп'ютерному моделюванню випадкових потоків маси у шаруватому тілі за різних випадків бета-розподілу включень. Зокрема, розглядались структури із ймовірним розташуванням включень біля верхньої границі тіла, біля нижньої межі та посередині тіла. За розробленим у другому розділі підходом знайдено розрахункові формули для усереднених за ансамблем конфігурацій фаз потоків маси у двофазних шаруватих тілах для трьох випадків бета-розподілу включень. На цій основі створено відповідні програмні модулі та здійснено комп'ютерне моделювання усереднених потоків домішкових частинок для різних модельних варіантів реалізації двофазних багат шарових структур, проведено порівняльний аналіз потоків маси для структури з рівномірним розподілом фаз, а також коли включення сконцентровані біля однієї з поверхонь тіла або посередині смуги. Отримано залежності усереднених потоків від часу протікання процесу, об'ємної частки включень, їх середньої товщини, відношення коефіцієнтів дифузії матеріалу базової фази і включення тощо. Встановлено, що для коефіцієнтів дифузії домішки у включенні більших, ніж у матриці, значення потоків у розглянутих структурах можуть різнитись до 70%, а отже для такого випадку є суттєвим врахування ймовірного розподілу прошарків.

Для оцінки ефекту парного взаємовпливу шаруватих включень на дифузійний потік проведено усереднення за ансамблем конфігурацій фаз третіх доданків рядів Неймана та отримано розрахункові формули для усередненого потоку у двофазній смугі з рівномірним розподілом фаз за нульової початкової концентрації та смугі з областю найбільш ймовірного розташування включень біля верхньої границі тіла за ненульової початкової умови на концентрацію мігруючої речовини. При цьому процедура усереднення третіх доданків ряду зведена до усереднення добутку двох випадкових функцій структури з використанням функції кореляції фаз. У випадку рівномірного розподілу включень автор використала відомий вираз для функції кореляції, тоді як для бета-розподілу було знайдено функцію кореляції фаз з відповідного двовимірного спільного розподілу двох випадкових величин. Проведений кількісний та якісний аналіз залежності величини третього доданка ряду Неймана від параметрів задачі показав, що для такого класу задач ефектом парного взаємовпливу шаруватих включень можна знехтувати.

У **четвертому розділі** розвинуто математичні моделі дифузії у двофаз-

ній шаруватій смузі зі стохастично розташованими прошарками випадкової товщини. Отримано розрахункові формули для усереднених дифузійних потоків за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій для випадків, коли товщина прошарку є випадковою величиною з рівномірним або трикутним розподілами на заданому проміжку. Проведено низку числових експериментів та проаналізовано отримані результати. Показано, що у випадку багатошарової смуги з прошарками стохастичної товщини, неоднорідна частина розрахункових формул для потоків є пропорційною кількості включень. Зокрема, встановлено, що для коефіцієнтів дифузії у матриці менших, ніж у включенні, збільшення кількості прошарків призводить до зростання усереднених потоків і навпаки. Водночас із збільшенням кількості прошарків менш значимим стає характер розподілу їх товщини.

Проведено порівняльний аналіз розв'язків крайових задач дифузії залежно від етапу, на якому проводиться процедура усереднення за випадковою товщиною. Показано, що для часів близьких до стаціонарних, невеликих значень об'ємної частки включень та коефіцієнтів дифузії мігруючої речовини у матриці більших, ніж у включенні для знаходження усереднених потоків маси можна використовувати простішу математичну модель із відомою товщиною включень, усередненою за заданою функцією розподілу.

На основі розв'язку крайових задач дифузії для функції потоку в однорідному тілі та двофазній багатошаровій смузі з рівномірним розподілом фаз досліджено вплив похибок вхідних даних, методу та заокруглення на усереднений потік. Показано, що чим більший час протікання процесу дифузії, тим менш чутливим є розв'язок задачі до збурень вхідних параметрів. Крім того, при обчисленні усереднених потоків з точністю 10^{-15} накопичення похибки заокруглення не спостерігалось.

У **додатках** подано опис програмного комплексу «FlowRap», який складається з 20 програмних модулів, створених на основі отриманих автором розрахункових формул, та акти про використання результатів дисертаційного дослідження.

Достовірність одержаних результатів, обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій визначається відповідністю їх сучасним теоретичним уявленням про процеси дифузії в багатофазних і багатокомпонентних середовищах, а також результатам деяких експериментальних досліджень. Зокрема, при побудові математичної моделі процесів дифузії у двофазних випадково неоднорідних середовищах автор використала відомі та експериментально підтверджені закони Фіка та

рівняння балансу маси, положення хімічної термодинаміки, за якими виведено рівняння дифузії на функцію потоку та встановлено еквівалентну початкову умову на функцію концентрації. При розвиненні підходу до побудови розв'язків поставлених крайових задач автор спирається на обґрунтовані методи математичної фізики, зокрема, методи функції Гріна та інтегральних перетворень, теорії диференціальних та інтегральних рівнянь, теорії ймовірності та математичної статистики, а також чисельних методів. Крім того показано, що для однорідного середовища розв'язок крайової задачі для функції потоку, сформульованої у роботі, співпадає із виразом, одержаним із відомого розв'язку крайової задачі на функцію концентрації.

Про обґрунтованість та достовірність отриманих результатів також свідчить їх опублікування у фахових рецензованих виданнях та апробація їх на наукових конференціях, симпозіумах та семінарах.

Новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі розв'язано нове наукове завдання математичного моделювання дифузійних потоків у двофазних випадково неоднорідних шаруватих структурах за довільного ймовірнісного розподілу фаз та стохастичних товщин підшарів.

Для математичного опису дифузійних потоків у багатофазних тілах випадково неоднорідної структури побудовано нову математичну модель, яка містить рівняння дифузії на функцію потоку, отримане з рівняння балансу маси; на одній з поверхонь задано крайову умову на потік, а на іншій – на функцію концентрації мігруючої речовини, встановлено початкову умову на концентрацію, еквівалентну початковій умові першого роду на потік. Розвинуто підхід до отримання розв'язку крайової задачі дифузії, сформульованої на функцію потоку, у вигляді інтегрального ряду Неймана.

Визначено умови збіжності побудованого ряду Неймана і доведено теорему існування розв'язку, причому вперше для крайових задач, в яких неоднорідність матеріалу врахована у коефіцієнтах диференціальних рівнянь.

Вперше розв'язано крайові задачі дифузії, сформульовані на функцію потоку маси, у шарі зі стохастично розташованими включеннями за рівномірного розподілу фаз та часткових випадків бета-розподілу включень, а також у смузі з рівномірним розподілом включень випадкової товщини для двох типів початкових умов на функцію концентрації.

Вперше проведено оцінювання впливу третього доданка ряду Неймана на усереднений дифузійний потік у тілі з рівномірним розподілом фаз та структурі з областю найбільш ймовірного розташування включень біля верхньої границі тіла.

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

Практична цінність одержаних результатів полягає в отриманні розрахункових формул для усереднених потоків домішкової речовини, яка мігрує у двофазних шаруватих тілах, за неповної інформації про їх внутрішню структуру. На цій основі розроблено програмний комплекс “FlowRan”, який призначений для кількісного і якісного аналізу дифузійних потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах з різними конфігураціями фаз; знаходження порівняльних розподілів потоків маси, усереднених за ансамблем конфігурацій фаз, за різних значень параметрів внутрішньої структури та фізичних характеристик середовища; кількісної оцінки парного взаємовпливу включень на усереднений потік маси; дослідження дифузійних потоків у випадкових шаруватих структурах зі стохастичними розмірами включень. Цей комплекс використано для комп’ютерного моделювання потоків водню та вуглецю у шаруватих композитних матеріалах залізо-мідь та α -залізо-нікель за рівномірного розподілу мідних та нікелевих прошарків, та структур, в яких область ймовірного розташування відповідних включень зосереджена біля однієї з границь тіла або посередині матеріалу. Програмний комплекс використано також при розв’язуванні наступних практичних задач, що підтверджено актами про використання та впровадження, поданими у додатках до дисертації:

- розрахунок потоків водню та вуглецю у композитному матеріалі сталь 38ХНЗМФА-Ni (Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України);

- проведення оцінки технологічного періоду продуктивного функціонування фільтра (підприємство «Пріма-сервіс» ЛТД, м. Галич);

Частина теоретичних та прикладних результатів, отриманих у роботі, використана для проведення спецкурсів студентам спеціальності «Прикладна математика» у Прикарпатському національному університеті ім. В. Стефаника.

Повнота викладу наукових положень, висновків, рекомендацій в опублікованих працях. Результати дисертаційної роботи відображені у 34 наукових працях, серед яких 10 статей у фахових виданнях з технічних наук, зокрема, у журналі “Доповіді НАН України”, журналі «Математичні методи та фізико-механічні поля» (індексується у наукометричній базі даних SCOPUS), журналі «Фізика і хімія твердого тіла» індексується у наукометричній базі даних Index Copernicus), 22 – матеріали конференцій, 7 – одноосібних.

внесок дисертанта, короткий зміст розділів повністю відповідають змісту дисертації. Автореферат оформлений згідно з вимогами МОН України.

Відповідність дисертації встановленим вимогам. Дисертація Давидок А. Є. відповідає діючим вимогам МОН України щодо оформлення дисертаційних робіт. Робота написана грамотно, хорошою літературною мовою, викладення лаконічні, чіткі і достатні для повного розуміння. Однак є деякі помилки і неузгодженості. Кількість їх незначна, і вони не впливають на правильне розуміння тексту дисертації.

Відповідність дисертації паспорту спеціальності. Подана до захисту дисертаційна робота Давидок А.Є. відповідає паспорту спеціальності 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи (технічні науки), а саме напрямком “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.”

По суті дисертаційної роботи можна зробити такі **зауваження**.

1. Гранична умова на концентрацію домішкової речовини, яка накладається на одній з поверхонь шару, знайдена з крайової задачі дифузії для однорідного тіла. Тоді для двофазного тіла таку граничну умову можна розглядати тільки як наближену.

2. Для кожного з розглянутих розподілів включень у тілі наведено розрахунки потоків домішки (водню або вуглецю) у певному шаруватому композиті. Є відповідні акти про використання цих результатів. Проте після порівняння різних модельних варіантів шаруватих структур технічних рекомендацій не наведено.

3. У дисертації на рис. 1.2 (стор. 14) та рис. 1.7 (стор. 17) надписи, що позначають відповідні структурні елементи, зроблені англійською мовою. Варто було здійснити їх переклад.

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

ВИСНОВОК. Дисертаційна робота Давидок А. Є. «Математичне моделювання дифузійних потоків у двофазних стохастично неоднорідних шаруватих структурах» є завершеним науковим дослідженням, в якому отримано нові наукові результати, що дозволяють вирішити актуальну науково-прикладну задачу моделювання дифузійних потоків мігруючої речовини у випад-

ково неоднорідних шаруватих тілах за довільного ймовірного розподілу фаз та стохастичних товщин підшарів.

Робота відповідає паспорту спеціальності 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи, а також вимогам, які висуваються до кандидатських дисертацій, зокрема, п. 11 “Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника”, а її автор Давидок Анастасія Євгенівна заслуговує присвоєння їй наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи.

Офіційний опонент,

Завідувач кафедри транспортних технологій
Дніпропетровського національного
університету залізничного транспорту
ім. В. Лазаряна МОН України,
доктор технічних наук, професор

Гера Б.В.

Підпис Гери Б.В. засвідчую.
Директор Львівської філії
Дніпропетровського національного
університету залізничного транспорту
імені академіка В.Лазаряна



16.02.2016

Довганюк С.С.