

ВІДГУК

офіційного опонента - доктора фізико-математичних наук, професора
Костробія Петра Петровича

на дисертаційну роботу *Жуковського Віктора Володимировича*
«Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури», подану на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

Актуальність теми дисертації

Стрімкий прогрес в області нанотехнологій призвів до відкриття нових наноматеріалів з унікальними фізико-хімічними властивостями стосовно процесів сорбції. Екологічні проблеми України пов'язані із забрудненням підземних та ґрунтових вод, ґрунтів органічними та неорганічними токсичними матеріалами вимагають розробки нових технологій щодо їх очищення, в основу яких можливо закласти використання наноматеріалів з унікальними сорбційними властивостями.

Це природньо веде до виникнення нового класу задач математичного моделювання стосовно опису явищ масопереносу «брудних» розчинів в дисперсних та сорбційно-активних середовищах мікро- та мезопористої структури. На жаль, ці моделі є нелінійними та описуються відповідними крайовими задачами, розв'язання яких потребує використання числових методів та відповідного програмного продукту.

Таким чином тема, мета та задачі, поставлені в дисертаційній роботі Жуковського В.В., є без сумніву **актуальними**.

Важливість та перспективність отриманих дисертантом результатів підтверджується також тим, що робота відповідає програмам і планам наукових досліджень Національного університету водного господарства та природокористування (м. Рівне), що виконувались в рамках держбюджетних науково-дослідних робіт МОН України зокрема за темами «Математичне та комп'ютерне моделювання фізико-хімічних процесів підземної гідромеханіки під впливом природних, техногенних і соціальних факторів» (№ ДР 0110U000816); «Математичне та комп'ютерне моделювання нелінійних фізико-хімічних процесів гідромеханіки в багатокомпонентних середовищах пористої та нанопористої структури» (№ ДР 0113U004052); «Математичне та комп'ютерне моделювання складних фізико-хімічних процесів підземної гідромеханіки природного та техногенного характеру» (№ ДР 0114U001148); «Інформаційне забезпечення розвитку конкурентоспроможного органічного сільського господарства України в умовах євроінтеграції» (№ ДР 0117U001987). У рамках виконання цих робіт здобувач був виконавцем та отримав всі результати, які становлять наукову новизну дисертаційного дослідження.

Структура та зміст дисертації

Робота складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел із 282 найменувань та додатків. Обсяг роботи становить 253 сторінки, в тому числі основного тексту 160 сторінок.

У *вступі* висвітлено обґрунтування актуальності теми роботи, мету, задачі та методи досліджень, визначено об'єкт і предмет досліджень, окреслено наукову новизну та практичне значення вирішення завдання математичного та комп'ютерного моделювання масопереносу сольових розчинів в середовищах частинок мікропористої структури, відображено зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами, наведено дані про апробацію результатів, особистий внесок здобувача, кількість опублікованих дисертантом праць.

У *першому розділі* дисертаційної роботи проведено огляд літератури з питань дослідження застосування мікро- та нанопористих частинок до процесів очищення ґрунтів, а також розглянуто теорію тепло- масопереносу при фільтрації в пористих середовищах, відповідні математичні описи задач тепло- масопереносу та методи їх розв'язку. Наведено постановки задач та відповідні математичні моделі процесів дифузії в гранулах адсорбента, дифузії в біпористих частинках, дворівневого однокомпонентного адсорбційного масопереносу в каталітичному середовищі частинок мікропористої структури, міграції забруднених речовин в каталітичному пористому середовищі з пастками та міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку та з урахуванням неізотермічних умов при фільтрації підземних вод.

Другий розділ присвячено питанням математичного та комп'ютерного моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в одновимірному випадку в ізотермічних та неізотермічних умовах в середовищах з пастками у лінійній постановці. Зокрема, сформульовано відповідні постановки задач та побудовано математичні моделі. Для числового розв'язання поставлених крайових задач використано метод скінченних різниць. Отримано значення концентрації солей та швидкості фільтрації після проведення серії числових експериментів у розробленому дисертантом програмному комплексі NanoSurface. Аналіз отриманих результатів показав, що розподіли концентрацій сольових розчинів у часі є більш повільними і передбачуваними. Проведений порівняльний аналіз результатів числових експериментів для ізотермічного та неізотермічного режимів показав важливість впливу процесів теплоперенесення на поведінку концентрації солей «брудних» розчинів.

У *третьому розділі* дисертаційної роботи удосконалено згадані вище математичні моделі з врахуванням нелінійної постановки. Проведено математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в пористих середовищах частинок нанопористої структури в ізотермічних умовах у нелінійній постановці, а згодом і для неізотермічних умов. Аналогічно до попереднього розділу було наведено математичні викладки числового розв'язку для відповідних крайових задач, проведено чисельні експерименти та аналіз отриманих результатів для ізо- та неізотермічного режимів у програмному комплексі інтелектуального інтерфейсу NanoSurface.

Четвертий розділ присвячено математичному та комп'ютерному моделюванню міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод у

насиченому каталітичному пористому середовищі у двовимірному випадку. Здійснено постановку задачі та наведено відповідну математичну модель. Побудовано числовий розв'язок відповідної крайової задачі з використанням локально-одновимірного методу та монотонних різницевих схем. Результати порівняльного аналізу чисельних експериментів показали пришвидшення процесу масопереносу за наявності мікрочастинок. Однак, у зв'язку з непроникністю підстилаючої поверхні помітне поступове накопичення радіонуклідів в зоні під фільтром-вловлювачем. І, разом з тим, подача чистої води на верхню поверхню ґрунтового масиву демонструє поступове очищення (вимивання) ґрунту від забруднення.

У *п'ятому розділі* висвітлено основні проблеми побудови програмних комплексів математичного моделювання підземних процесів. На прикладі власного кросплатформенного програмного комплексу NanoSurface дисертантом запропоновано підхід до вибору методології розробки, архітектури класів та проектування програмної системи. Наводяться також практичні аспекти застосування шаблонів проектування, організації числових обчислень та побудови користувачького інтерфейсу. Позитивним моментом, що свідчить про успішне виконання поставленої задачі, є порівняльна характеристика якості коду, яка була проведена за допомогою спеціалізованих утиліт. Також в даному розділі здійснено верифікацію програмного забезпечення на основі знаходження та порівняння аналітичного та числового розв'язку крайової задачі, що описує внутрішньочастинковий масоперенос речовин у каталітичному пористому середовищі. Доведено, що розбіжність результатів не перевищує 0,5%. З цього можна зробити висновок про коректність постановки задачі та успішну верифікацію програмного комплексу NanoSurface для комп'ютерного моделювання задач внутрішньочастинкового масопереносу.

У **додатках** подано довідки про використання результатів дисертаційного дослідження, свідоцтво про реєстрації авторського права на комп'ютерну програму «Nanosurface», список опублікованих праць за темою дисертації, відомості про апробацію результатів дисертації, а також деякі результати чисельного розв'язання поставлених крайових задач у вигляді табличних даних.

Достовірність одержаних результатів, обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій забезпечується коректним застосуванням сучасних методів математичного моделювання, теоретично обґрунтованих та апробованих методів математичної фізики та обчислювальної математики, узгодженням окремих результатів досліджень з відомими з літературних джерел тестовими прикладами.

Обґрунтованість та достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій забезпечується також їх апробацією на наукових конференціях та семінарах, опублікуванням 9 статей у фахових виданнях з технічних наук, зокрема у таких відомих журналах, як «Инженерно-физический журнал» (англомовний переклад: «Journal of Engineering Physics and Thermophysics»), що входить до науково-метричної бази даних Scopus і належить до II квартилю (Q2) та «Mathematical Modeling and Computing», який рекомендовано до включення у науково-метричну базу Scopus в серпні 2018 року.

Серед нових **наукових результатів** слід відмітити наступні:

- Вперше побудовано одно- та двовимірні математичні моделі міграції забруднених речовин в ґрунтовому середовищі при наявності каталітичних частинок мікропористої структури, що на відміну від існуючих, враховують вплив масопереносу в пористих мікро- та наносорбентах на загальну кінетику процесу. Удосконалено дані математичні моделі з врахуванням неізотермічних умов, нелінійної залежності коефіцієнтів дифузії та фільтрації від концентрації, впливу дифузії у скелеті ґрунту.
- Розроблення ефективних алгоритмів для числових розрахунків із використанням паралельних обчислень для комп'ютерних систем із спільною пам'яттю при розв'язуванні відповідних крайових задач.
- Створення кросплатформенного комплексу програмного забезпечення «NanoSurface» для комп'ютерного моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури (в одно- та двовимірному випадках, в ізотермічних та неізотермічних умовах, нелінійній постановці, тощо).
- В результаті проведеного комп'ютерного моделювання та аналізу отриманих результатів чисельних експериментів **вперше** продемонстровано ступінь вплив сорбуючих частинок, температури, нелінійних залежностей швидкості фільтрації та коефіцієнтів дифузії на процес вертикальної міграції радіонуклідів в насиченому середовищі.

Практична цінність одержаних результатів

Практична цінність одержаних у роботі результатів підтверджена довідками про їхнє використання, зокрема в практиці роботи ТзОВ «Волиньсапрофос», Рівненської філії державної установи «Інститут охорони ґрунтів України», Інституту сільського господарства Західного Полісся та управлінні економіки, інфраструктури та інвестиційної діяльності Рівненської районної державної адміністрації. Крім того, науково-методичні розробки та результати дисертаційних досліджень використано у навчальному процесі при виконанні кваліфікаційних, дипломних та магістерських робіт студентами освітніх програм «Прикладна математика» та «Комп'ютерні науки» Національного університету водного господарства та природокористування МОН України, а також при підготовці та викладанні ряду тем з наступних дисциплін: «Теорія систем та математичне моделювання», «Математичне і комп'ютерне моделювання природних та техногенних процесів», «Паралельні та розподілені обчислення».

Розроблений програмний комплекс NanoSurface дозволяє зручно керувати вихідними даними (коефіцієнтами дифузії, пористості, дисперсії, крайовими умовами, ізотермами адсорбції і т.п.), що визначають гідрогеологічні умови та можливу дію техногенних факторів; виконувати необхідні обчислення, будувати порівняльні 2D/3D графіки і таблиці значень концентрацій, швидкості фільтрації, температурні залежності, коефіцієнти дифузії. Це дає змогу використати результати дисертаційної роботи при

прогнозуванні очищення забруднених родючих ґрунтів з використанням каталітичних мікро- та наночастинок (сорбентів).

Публікації та апробація результатів дисертаційної роботи

Результати дисертації опубліковані в 32 наукових працях, серед яких 9 статей, з них 1 – одноосібна, 1 – у журналі, що входить до науково-метричної бази даних Scopus (II квартал), 6 – у фахових виданнях України з технічних наук, 2 – у наукових виданнях іноземних держав, 22 публікації у матеріалах міжнародних та всеукраїнських конференціях, 1 авторське свідоцтво. Кількість публікацій та їх рівень відповідають встановленим вимогам.

В опублікованих працях в повному обсязі викладено основні положення дисертаційної роботи, які винесено на захист. Особистий внесок здобувача в сумісних публікаціях є підтвердженим. Рівень та кількість публікацій, результати апробації відповідають вимогам, що ставляться до кандидатських дисертацій.

Оформлення дисертації та автореферату

Викладені в авторефераті актуальність теми, мета і завдання дослідження, наукова новизна одержаних результатів та їхнє практичне значення, короткий зміст розділів повністю відповідають змісту дисертації. Особистий внесок здобувача в спільних публікаціях відображено в авторефераті та дисертації. Основні наукові результати, які викладені в спільних публікаціях, отримані дисертантом самостійно. Автореферат оформлений згідно з вимогами.

Дисертація Жуковського В.В. відповідає діючим вимогам щодо оформлення дисертаційних робіт. Робота написана грамотно, послідовно та має завершену логічну структуру. Стиль викладення наукових положень та отриманих результатів забезпечує доступність їх сприйняття.

Дисертаційна робота Жуковського В.В. відповідає паспорту спеціальності 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи (технічні науки), а саме напрямкам досліджень: “Розроблення або розвиток теорії математичного моделювання реальних явищ, процесів, об’єктів та систем на основі формалізації дії фізичних законів, виведення рівнянь та логічних співвідношень, що адекватно описують динаміку процесів з урахуванням топологічної складності досліджуваних об’єктів ...”, “Розробка теорії побудови комп’ютерних, зокрема програмних, програмно-апаратних, аналогових, гібридних систем моделювання ...”.

Зауваження до дисертаційної роботи

Разом з тим, дисертаційна робота Жуковського В.В. містить **ряд недоліків**. Зокрема:

1. Для опису процесів масо переносу дисертант використовує дифузійні рівняння, що впливають з закону Фіка. Для обґрунтування використовуваних в роботі математичних моделей слід використовувати рівняння Нерста-Планка, яке оперує з градієнтами хімічних потенціалів. Це важливо при описі процесів масопереносу в мультишарових структурах, що містять мезопори, чи мезокомплекси. Моделювання хімічних (чи електрохімічних) потенціалів та їх

залежностей від параметрів явища на сьогодні набагато простіше, особливо для нанопористих мультишарових структур.

2. В роботі недостатньо визначена область застосування розроблених математичних моделей. Зокрема, не вказано тип ґрунтового масиву та сольового розчину. У зв'язку з цим важко визначити відповідність використаних значень коефіцієнтів математичних моделей фізичним об'єктам та процесам.

3. В дисертаційній роботі не сказано про обґрунтування вибору числових методів розв'язання наведених нелінійних крайових задач, зокрема не висвітлено питання встановлення оцінок збіжності описаних ітераційних методів, визначення оцінок похибок та ін.

4. На жаль в дисертаційній роботі Жуковського В.В. не подано жодних результатів дослідження стійкості розв'язків, особливо для нелінійних моделей.

При аналізі нелінійних моделей дуже важливо знати області стійкості, оскільки для таких моделей дуже часто зустрічаються точки часової (нестійкість Хопфа) чи просторової (настійкість Тюррінга) біфуркацій.

5. Дисертаційна робота, як і автореферат містять незначну кількість синтаксичних чи орфографічних помилок. Однак в дисертації (в оригінальній частині) дуже часто зустрічаються повтори одних і тих самих висновків.

Вказані зауваження не зменшують загального позитивного враження щодо новизни та якості дисертаційної роботи в цілому.

Загальна оцінка роботи і висновок

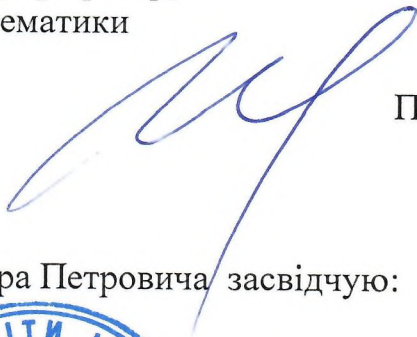
Подана до захисту дисертаційна робота Жуковського В. В. «Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури» є оригінальним і завершеним науковим дослідженням, в якому розв'язана важлива науково-технічна задача математичного та комп'ютерного моделювання процесів масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури в ґрунтах при фільтрації підземних вод. Розвинуто числові методики одержання наближених розв'язків відповідних нелінійних крайових задач в одно- та двовимірному випадках та створено відповідний програмний комплекс NanoSurface.

Результати роботи є новими та достатньо апробованими, зокрема доповідались на вітчизняних та міжнародних конференціях, наукових семінарах. Аналіз публікацій дисертанта показує, що основні результати дисертації отримано автором самостійно. Автореферат адекватно відображає зміст роботи.

За актуальністю теми, рівнем та обсягом виконаних досліджень, науковою новизною та практичним значенням отриманих результатів дисертаційна робота повністю відповідає паспорту спеціальності 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи, а також вимогам, які висуваються до кандидатських дисертацій, зокрема, п. 9, 11 «Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 р. № 567 зі змінами, а її автор *Жуковський Віктор*

Володимирович заслугоує присудження йому наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи.

Офіційний опонент,
доктор фізико-математичних наук, професор,
завідувач кафедри прикладної математики
Національного університету
«Львівська політехніка»



П.П. КОСТРОБІЙ

Підпис проф. Костробія Петра Петровича засвідчую:

Вчений секретар
Національного університету
«Львівська політехніка», доцент



Р.Б. БРИЛИНСЬКИЙ