

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу Візнович Олександри Василівни на тему "Математичне моделювання дифузійних процесів в рамках статистики Рені" на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – "математичне моделювання та обчислювальні методи"

Актуальність теми. Швидкий розвиток нанотехнологій є пов'язаний із застосуванням пористих, шаруватих нанокомпозитних матеріалів із складними фізико-хімічними властивостями. Дуже часто такі матеріали певним чином модифікуються для зміни електричних, магнітних та діелектричних властивостей, що приводить до їх ціленаправленої зміни структури, термодинамічних та динамічних властивостей. Для прогнозування даних змін суттєве значення має математичне моделювання таких процесів, які можуть супроводжуватися аномальністю струмопроходженням, діелектричних та магнітних властивостей. Такі модифіковані нанокомпозити дуже часто мають фрактальні структури. Відомо, що у пористих середовищах, мембранах спостерігаються процеси аномальної (супер-, суб-) дифузії носіїв зарядів, молекул, механізми яких далеко не вивчені. Тому побудова математичних моделей дифузійних процесів, що супроводжуються аномальною поведінкою, зокрема для носіїв зарядів у пористих, шаруватих середовищах є актуальною проблемою і має як теоретичне, так і прикладне значення. На сьогоднішньому етапі досліджень для побудови таких математичних моделей використовують рівняння переносу у дробових похідних та статистичні підходи, що ґрунтуються на статистиках Тсалліса та Рені.

У дисертаційній роботі О. В. Візнович запропоновано математичні моделі опису дифузійних, субдифузійних процесів у просторово-неоднорідних системах на основі єдиного статистичного підходу на основі методу нерівноважного статистичного оператора Зубарєва і принципу максимуму ентропії Рені та математичного апарату дробового числення. У такому підході послідовно отримано низку моделей рівнянь дифузії, субдифузії типу Кеттано, їх узагальнень з врахуванням просторової неоднорідності та фрактальності.

Робота складається з анотації, вступу, п'яти розділів, списку використаної літератури та двох додатків.

Структура дисертаційної роботи. В анотації подано основний зміст роботи з короткою характеристикою кожного розділу. У вступі відзначено актуальність проблем, обґрунтовано мету та основні задачі досліджень. Описано зв'язок роботи з науковими програмами. Сформульовано наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів у роботі та їх застосування. Зазначено дані про особистий внесок автора, апробацію результатів роботи та публікації. У першому розділі подано огляд робіт за актуальними проблемами, що розглядаються у дисертації. Проаналізовано математичні моделі процесів аномальної дифузії у конденсованих системах отриманих в рамках статистик Тсалліса та Рені, а також рівняння дифузії Фоккера-Планка у дробових похідних на основі теорії випадкових процесів. Дано огляд робіт щодо математичного моделювання субдифузійного імпедансу для електролітичних систем. Дано огляд основних робіт щодо проблем необхідності побудови математичної моделі узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів у системах далеких від рівноваги. Дано

стислий виклад методу нерівноважного статистичного оператора Зубарева у статистиці на основі ентропії Рені, за допомогою якого проводилися дослідження у роботі.

У другому розділі, використавши метод нерівноважного статистичного оператора Зубарева на основі ентропії Рені, вперше отримано узагальнене (немарковське) рівняння q -дифузії у дробових похідних для нерівноважної густини числа частинок класичної однокомпонентної системи. При цьому суттєвим є використання рівняння Ліувілля у дробових похідних, запропонованого В. Тарасовим. Важливо зазначити й те, що рівняння є узагальненими у тому сенсі, що при граничному випадку $q = 1$ отримуємо узагальнене рівняння дифузії статистики Гіббса у дробових похідних. Коли ж $q = 1$ і параметр просторової фрактальності $\alpha = 1$, то приходимо до узагальненого рівняння дифузії статистики Гіббса. У запропонованому підході для математичного моделювання процесів переносу носіїв зарядів у просторово неоднорідних системах з фрактальною структурою виведено узагальнені рівняння електродифузії для носіїв заряду у дробових похідних. Моделюючи частотну (часову) залежність відповідних функцій пам'яті з врахуванням апарату дробового числення отримано ряд моделей рівнянь електродифузії типу Кеттано з врахуванням просторово-часової фрактальності. У граничному випадку, коли $q = 1$ отримується узагальнене рівняння типу Кеттано в статистиці Гіббса із просторово-часовою фрактальністю, а коли ж $q = 1$, $\alpha = 1$, то отримується відоме рівняння дифузії типу Кеттано.

У третьому розділі проведено математичне моделювання субдифузійних процесів в електролітичній системі для GaSe з інкапсульованим β -циклодекстрином. Для цього було використано узагальнене рівняння типу Кеттано в статистиці Гіббса із просторово-часовою фрактальністю. Чисельне моделювання субдифузійного імпедансу на основі запропонованої математичної моделі дало можливість проаналізувати нелінійну природу явищ струмопроходження в мультишарових наноструктурах на основі частотної залежності дійсної та уявної частин її узагальненого опору в залежності від впливу світла та магнітного поля. Проведений аналіз отриманих діаграм Найквіста показав, що спостережуваний на експерименті ріст частотної дисперсії годографа імпедансу при синтезі в електричному полі з одночасним освітленням зумовлений не, як очікувалося, ростом часу релаксації τ , а зміною часової фрактальної розмірності α . Це стало підтвердженням важливості застосування рівнянь дифузії у дробових похідних.

У четвертому розділі дисертантом отримано узагальнене рівняння дифузії в статистиці на основі ентропії Рені. На відміну від статистики Гіббса операція усереднення в узагальненому коефіцієнті q -дифузії виконується із функцією розподілу Рені, степеневою функцією у часі, що очевидно забезпечує довго-часову поведінку часової кореляційної функції. Використавши, подібно як у другому розділі, модель частотної залежності відповідної функції пам'яті з врахуванням апарату дробового числення отримано узагальнене рівняння типу Кеттано з врахуванням часової фрактальності. У цьому розділі реалізовано один із шляхів розрахунків коефіцієнтів q -дифузії, які входять у відповідні узагальнені рівняння дифузії. Такі розрахунки важливі, оскільки в узагальнених коефіцієнтах дифузій містяться механізми процесів переносу. За допомогою методу моментів, отримано аналітичні вирази для коефіцієнта q -дифузії залежного від просторової координати та часу. Проведені у роботі числові розрахунки

коефіцієнта q -дифузії при $q > 1$ і $q < 1$ вказують на складну поведінку і очевидно на різні механізми дифузійних (суб- чи супер) процесів, які можуть протікати у розглянутих математичних моделях. Важливо зазначити, що у часовій залежності коефіцієнтів q -дифузії спостерігається від'ємна ділянка залежності, що співпадає з результатами експериментальних досліджень.

У п'ятому розділі розглянуто модель опису кінетичних процесів для системи взаємодіючих частинок, що перебувають у нерівноважних станах, далеких від рівноваги. Використавши метод нерівноважного статистичного оператора і принцип максимуму ентропії Рені отримано нерівноважну функцію розподілу, за допомогою якої отримано узагальнені кінетичні рівняння для нерівноважних одно- та двочастинкових функцій розподілу. Показано, що у структуру рівнянь типу Фоккера-Планка входять узагальнені коефіцієнти дифузії і тертя частинок у просторі координат та імпульсів, що характерно для систем далеких від рівноваги.

Ступінь обґрунтованості та достовірності наукових положень, висновків та рекомендацій

Основні наукові результати дисертаційної роботи є достатньо обґрунтованими. Їх достовірність забезпечується використанням методу нерівноважного статистичного оператора Зубарева, математичного апарату дробового числення, апробацією результатів на численних науково-технічних конференціях. Про достовірність результатів роботи свідчать також результати практичного використання.

Наукова новизна

У роботі вперше розв'язано важливу наукову задачу – розроблення та дослідження нових математичних моделей дифузійних, субдифузійних процесів у просторово-неоднорідних конденсованих системах (включаючи мультишарові наноструктури), для яких суттєва просторово-часова фрактальність. До основних наукових результатів можна віднести наступні:

- вперше виведено узагальнені рівняння електродифузії для носіїв заряду, які базуються на математичному апараті фрактального числення та методі НСО Зубарева, що дало можливість описувати дифузійні та субдифузійні процеси у рамках статистики на основі ентропії Рені;
- вперше отримано узагальнені рівняння електродифузії типу Кеттано для систем з просторово-часовою фрактальністю, що уможливило моделювання субдифузійного імпедансу для мультишарових наноструктур та забезпечило якісне узгодження із експериментальними даними для системи GaSe з інкапсульованим β -циклодекстрином;
- вперше отримано рівняння q -дифузії в однокомпонентній системі частинок, які базуються на рівнянні Ліувілля у дробових похідних і методі НСО в статистиці Рені, що дало можливість моделювати просторово-часові залежності коефіцієнта дифузії при відповідних значеннях параметра Рені та встановлювати режими суб-, супер- та нормальної дифузії;
- вперше розроблено математичну модель кінетичних та гідродинамічних процесів у системі взаємодіючих частинок, що перебувають у нерівноважних станах, далеких від рівноваги, яка базується на узагальнених кінетичних

рівняннях для нерівноважних одночастинкової та двочастинкової функцій розподілу, отриманих методом НСО оператора Зубарева для класичних систем далеких від рівноваги у статистиці Рені, що дало можливість досліджувати залежності дифузійних процесів від узагальнених коефіцієнтів дифузії і тертя частинок у просторі координат та імпульсів.

Повнота викладу наукових результатів в опублікованих працях

За темою дисертаційної роботи опубліковано 20 наукових праць, серед яких розділ у монографії, 4 статті у наукових фахових виданнях України, 3 статті у наукових періодичних виданнях інших держав, 2 статті у наукових виданнях України, та 10 праць у матеріалах наукових конференцій. У цих публікаціях достатньо повно викладено основні результати дисертаційних досліджень.

Практичне значення отриманих результатів та їх використання

Математичне моделювання субдифузійного імпедансу на основі рівняння Кеттано у дробових похідних знайшло практичне застосування у поясненні експериментальних даних з імпедансної спектроскопії для мультишарових наноструктур, що отримані у дослідженнях на кафедрі прикладної фізики Національного університету "Львівська політехніка". Запропоновані математичні моделі в дисертації знайшли своє застосування у технологіях в ПАТ "Львівський електроламповий завод "ІСКРА" та ТзОВ "Бескид-Біт". Отримані результати у дисертації використовуються також у навчальному процесі у Національному університеті "Львівська політехніка", про що свідчать Акти впровадження.

Автореферат адекватно відображає основні результати дисертаційної роботи.

Недоліки та зауваження по роботі

1. У другому розділі при виведенні узагальненого рівняння електродифузії (2.41) зроблені модельні апроксимації для функції пам'яті у формулах (2.43) та (2.44). Що зміниться у даних рівняннях якщо будуть інші часи релаксації окрім часу релаксації τ_a , який характеризує процеси переносу?
2. У третьому розділі виведені рівняння для еволюції функції розподілу, які стосуються тільки одновимірних систем. Виникає питання чи зміниться структура рівнянь про переході до опису систем вищої розмірності?
3. У четвертому розділі для часового розрахунку коефіцієнта аномальної дифузії $D_q(\vec{r}, t)$ (розділ 4.3) використано "q представлення" експоненти, для якого на жаль вирази не подані, а є тільки посилання на статті. Було б доцільним навести ці вирази у роботі.
4. Доцільно було б проаналізувати результати адекватності отриманих математичних моделей для дослідження субдифузійного імпедансу в електролітичній системі для різних значень часової фрактальної розмірності.
5. Робота перенасичена складними математичними виразами (особливо 5 розділ), що ускладнює читання. Так в підрозділі 5.2 наведені загальні формули для ядер переносу, однак не наведено жодного конкретного прикладу для їх розрахунку. Добре було б навести ці приклади хоча б для найпростіших моделей.

6. У роботі отримано ряд моделей рівнянь дифузії у дробових похідних. Однак не наведено дослідження існування та стійкості розв'язків.

Наведені зауваження не зменшують наукової цінності результатів, отриманих у дисертаційній роботі Візнович О. В.

Висновки

Дисертаційна робота Візнович О. В. є завершеною науково-дослідною працею, в якій розв'язано актуальну наукову задачу розроблення та дослідження нових математичних моделей дифузійних, субдифузійних процесів у просторово-неоднорідних конденсованих системах (включаючи мультишарові наноструктури) для яких суттєва просторово-часова фрактальність.

Дисертаційна робота відповідає вимогам п.11 "Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника", а її автор Візнович Олександра Василівна заслуговує присудження їй наукового ступеня кандидата технічних наук із спеціальності 01.05.02 – "математичне моделювання та обчислювальні методи".

Офіційний опонент
завідувач кафедри інформаційних
технологій Національного
лісотехнічного університету України,
д.т.н., проф.

Я. І. Соколовський



ЗАВІРЯЮ
Кандидат наук, доцент
в.о. завідувач кафедри
Інформаційних технологій
лісотехнічного університету України
3 2018 р. Підпис