

## ВІДГУК

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

### 1. Актуальність теми дисертації.

Сучасний етап розвитку технологій характеризується широким використанням гетероструктурованих нанокompatитних матеріалів, у яких можлива реалізація унікальних фізико-хімічних властивостей, зокрема у електродифузійних процесах в електролітичних системах. У таких ієрархічних структурах, пористих середовищах, мембранах спостерігаються процеси аномальної (супер-, суб-) дифузії носіїв зарядів, механізми яких далеко не вивчені. Тому побудова математичної моделі дифузійних процесів, що супроводжуються аномальною поведінкою, зокрема для носіїв у пористих середовищах є актуальною проблемою і має як теоретичне, так і прикладне значення. Розрахунок просторово-часової залежності неоднорідних коефіцієнтів дифузії у таких процесах є першочерговою проблемою, оскільки вони відповідають за основні механізми. Для математичного моделювання процесів переносу у різних системах, зокрема з фрактальною структурою, актуальними залишаються проблеми послідовного виведення рівнянь переносу (дифузії, кінетичних рівнянь) у дробових похідних. Якщо математичне моделювання дифузійних процесів у конденсованих системах в рамках статистики на основі ентропії Гіббса на даний час добре розроблені, то опис суб-, супердифузійних процесів у різних середовищах виходить за рамки статистики Гіббса і розглядається в узагальнених статистиках на основі ентропій Тсалліса, Рені та ін. З цієї точки зору важливою є розробка математичних методів моделювання дифузійних процесів у статистиці Рені, для якої характерні степеневі закони для розподілів у часі. Власне таким проблемам присвячена дисертаційна робота Візнович О.В.

## 2. Структура та зміст дисертації.

Робота складається з анотації, вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків, що викладено на 99 сторінках основного тексту.

В *анотації* наведено основний зміст роботи з короткою характеристикою кожного розділу.

У *вступі* подано актуальність проблем, обґрунтовано мету та основні задачі досліджень. Описано зв'язок роботи з науковими програмами, темами. Сформульовано наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів у роботі. Зазначено дані про особистий внесок автора, апробацію результатів роботи та публікації.

У *першому розділі* дано огляд робіт за актуальними проблемами, що розглядаються у дисертації. Проаналізовано математичні моделі процесів аномальної дифузії у конденсованих системах зі степеневими розподілами відповідних статистик Тсалліса та Рені, а також рівняння дифузії Фоккера-Планка у дробових похідних. Дано огляд робіт щодо математичного моделювання субдифузійного імпедансу для електролітичних систем. Подано аналіз робіт щодо побудови рівнянь дифузії, кінетичних рівнянь у дробових похідних. Дано огляд основних робіт щодо проблем необхідності побудови математичної моделі узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів у системах далеких від рівноваги. Наприкінці розділу наведено стислий виклад методу нерівноважного статистичного оператора (НСО) Зубарева у статистиці на основі ентропії Рені, за допомогою якого проводилися дослідження у роботі.

*Другий розділ* на мій погляд є центральним у роботі, у якому запропоновані моделі рівнянь типу дифузії у дробових похідних. Використавши рівняння Ліувілля у дробових похідних та 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. Коли параметр Рені  $q=1$  узагальнене рівняння  $q$ -дифузії в статистиці Рені переходить в 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. Застосувавши даний підхід для математичного моделювання процесів переносу носіїв зарядів (іонів, електронів) у мультишарових структурах, що характеризуються фрактальною структурою, виведено узагальнені рівняння електродифузії для носіїв заряду у дробових похідних. Для розкриття часової мультифрактальності в узагальненому рівнянні електродифузії у роботі використано наближення для узагальненого коефіцієнта взаємної дифузії носіїв заряду, яке з врахуванням апарату дробового числення дало можливість отримати узагальнене рівняння електродифузії типу Кеттано з врахуванням просторово-часової фрактальності. Автором розглянуто окремі випадки. Зокрема, при  $q = 1$  отримується узагальнене рівняння типу Кеттано в статистиці Гіббса із просторово-часовою фрактальністю. Коли ж  $q = 1$ ,  $\alpha = 1$  отримується відоме рівняння дифузії типу Кеттано, на основі якого у *третьому розділі* проведено математичне моделювання субдифузійних процесів в електролітичній системі для GaSe з інкапсульованим  $\beta$ -циклодекстрином. Чисельне моделювання субдифузійного імпедансу на основі запропонованої математичної моделі дало можливість проаналізувати нелінійну природу явищ в мультишарових наноструктурах на основі частотної залежності дійсної та уявної частин її узагальненого опору. 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  $\tau$ , а зміною часової фрактальної розмірності  $\alpha$ .

У *четвертому розділі* дисертантом реалізовано один із шляхів розрахунків коефіцієнтів  $q$ -дифузії, які входять у відповідні узагальнені рівняння дифузії. Розгляд таких моделей важливий, оскільки в узагальнених коефіцієнтах дифузії містяться механізми процесів переносу. Використавши метод 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 отриманими іншими методами. Крім того, за числовими розрахунками коефіцієнта  $q$ -дифузії були проведені розрахунки функції розсіювання, яка у частотному зображенні зв'язана з динамічним структурним фактором, який може вимірюватися експериментально у процесах розсіювання нейтронів.

У *п'ятому розділі* розглянуто модель опису кінетичних процесів для системи взаємодіючих частинок, що перебувають у нерівноважних станах, далеких від рівноваги. Виходячи із принципу максимуму ентропії Рені отримано релевантну функцію розподілу і на основі неї нерівноважну функцію розподілу частинок, як розв'язок рівняння Ліувілля. За допомогою нерівноважної функції розподілу отримано узагальнені кінетичні рівняння для нерівноважних одно- та двочастинкових функцій розподілу. Розкрито внутрішню структуру узагальнених функцій пам'яті.

### **3. Ступінь обґрунтованості та достовірності наукових положень, висновків та рекомендацій.**

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

### **4. Наукова новизна отриманих результатів.**

У роботі вперше розв'язано важливу наукову задачу – розроблення та дослідження нових математичних моделей "аномальних" дифузійних 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  $\beta$ -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 нерівноважного статистичного 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.

## 5. Зауваження по дисертації.

По дисертації можна висловити такі зауваження.

1. Із дисертаційної роботи неясно, чи є критерій вибору частотної залежності для функцій пам'яті, які ведуть до рівнянь типу Кеттано у дробових похідних? На жаль у роботі цього не наведено.

2. Неясно, який критерій вибору параметрів при розрахунку субдифузійного імпедансу? Було б добре подати в роботі певну процедуру оптимізації, з якої можна було б вибрати параметри.

3. Дисертаційна робота переобтяжена математичними викладками, особливо у п'ятому розділі.

Однак, дані зауваження не зменшують наукової цінності результатів, отриманих у дисертаційній роботі Візнович О.В., і не мають істотного впливу на загальне позитивне оцінювання роботи.

**6. Оформлення дисертації** відповідає вимогам ДСТУ 3008-95 «Документація. Звіти у сфері науки і техніки. Структура і правила оформлення» та вимогам МОН України, що подані в Бюлетені ВАК.

**7. Шляхи використання наукових і практичних результатів роботи і ступінь їх реалізації.**

Розгляд матеріалів про впровадження результатів дисертаційної роботи Візнович О.В. показує, що проведене дисертантом 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". Отримані результати у дисертації впроваджено також у навчальному процесі Національного університету "Львівська політехніка" для студентів спеціальності "Прикладна математика", про що свідчать Акти впровадження. Запропоновані математичні моделі в дисертації знайшли своє застосування у технологіях в ПАТ "Львівський електроламповий завод "ІСКРА" та ТзОВ "Бескид-Біт" (м. Львів).

**8. Повнота викладу результатів досліджень в наукових виданнях.**

Основні результати досліджень, що розв'язують проблематику дисертації, в достатній мірі опубліковані у наукових фахових виданнях. За темою дисертації опубліковано 20 наукових праць, серед яких розділ у монографії, 3 статті у наукових періодичних виданнях інших держав, які індексуються у міжнародних наукометричних базах Scopus, 4 статті у наукових фахових виданнях України, 2



статті у наукових виданнях України та 10 праць у матеріалах наукових конференцій. У цих публікаціях достатньо повно викладено основні результати дисертаційних досліджень.

#### **9. Ідентичність змісту автореферату основним положенням дисертації.**

Автореферат повною мірою відображає основні положення, результати та висновки дисертаційної роботи, ступінь новизни та практичне значення результатів досліджень, їх сутність та особистий внесок здобувача. Зміст автореферату повністю відповідає розділам дисертації та її основним положенням, вступна частина і висновки дисертаційної роботи та автореферату є ідентичними.

#### **10. Висновок про відповідність дисертації вимогам МОН України.**

Не зважаючи на зауваження, можна відзначити, що дисертаційна робота Візнович Олександри Василівни є завершеною науково-дослідною працею, в якій розв'язано актуальну наукову задачу розроблення та дослідження нових математичних моделей "аномальних" дифузійних процесів у просторово-неоднорідних конденсованих системах (включаючи мультишарові наноструктури), для яких суттєва просторово-часова фрактальність.

Результати роботи є новими, вони доповідались на міжнародних і вітчизняних конференціях. Результати досліджень достатньо повно опубліковані у працях дисертанта. Автореферат адекватно відображає зміст роботи.

Судячи зі змісту дисертації, Візнович О.В. виявила себе, як ерудований висококваліфікований спеціаліст в галузі математичного моделювання та обчислювальних методів, що впевнено володіє методами математичного моделювання дифузійних та субдифузійних процесів частинок у просторово-неоднорідних системах та сучасними методами розробки програмного забезпечення з подальшою їх комп'ютерною реалізацією.

За актуальністю, рівнем та обсягом досліджень, науковою новизною та практичним значенням отриманих результатів дисертаційна робота "Математичне моделювання дифузійних процесів в рамках статистики Рені" відповідає вимогам з п.п. 10, 13 «Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого

звання старшого наукового співробітника», затвердженого постановою КМ України №567 від 24 липня 2013 р., які висуваються до кандидатських дисертацій, а її автор Візнович Олександра Василівна заслуговує присвоєння їй наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи (технічні науки).

**Офіційний опонент,**

доктор технічних наук, професор,  
завідувач кафедри  
економіко-математичного моделювання  
та інформаційних технологій  
Національного університету  
«Острозька академія», м. Острог

А. П. Власюк

Підпис проф. Власюка А.П. засвідчую  
Перший проректор з навчально-наукової  
роботи, професор



П.М. Кральнок