

Відгук

офіційного опонента на дисертаційну роботу Шаповала Дмитра Юрійовича «Кооперативні явища, скейлінг та утворення структур у моделях реакційно-дифузійних процесів», подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії зі спеціальності 104 — фізика та астрономія 10 — природничі науки

Дисертація Дмитра Шаповала "Кооперативні явища, скейлінг та утворення структур у моделях реакційно-дифузійних процесів" присвячена актуальному напряму дослідження колективних ефектів в системах із багатьма агентами. Отримані в роботі результати є цінними не лише для широкого спектра фізичних задач, а можуть бути застосовані в хімії, економіці та суспільних науках, що є чудовим прикладом інкорпорації фізичних методів досліджень в інші галузі.

Структурно дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списком використаних джерел (на 269 позицій); її обсяг становить 221 сторінок, із яких основний текст — 160 сторінок. Для полегшення прочитання, в кінці роботи наведено додатки з деталями обчислень, що не увійшли до основного тексту дисертації.

У *вступі* автор обґрунтовує актуальність теми дослідження, формулює його мету і задачі; коротко обговорює використані методи, які включають не лише аналітичні (точні розв'язки одновимірних ґраткових моделей, пертурбативні теоретико-польові) підходи, але й комп'ютерні симуляції; наголошує на новизні і практичному значенні отриманих результатів.

У *першому* розділі Дмитро Шаповал детально оглядає історію і сучасний стан дослідження реакційно-дифузійних процесів, особливості їх кінетики. Зокрема, проведено, на основі порівняння характерних часів зіткнення двох частинок та їх хімічної взаємодії, чітке розділення між двома режимами кооперативних явищ — реакційно-обмеженим та дифузійно-обмеженим. Якщо в першому режимі систему наближено можна вважати однорідною, то в другому — вплив локальних флуктуацій є визначальним на поведінку її кінетики. У вступі обговорюються поняття аномальної дифузії та польотів Леві, а також процес стохастичного скидання. Взагалі, вступна частина дисертації могла б бути чудовою оглядовою статтею, де є поклики на велику кількість робіт і достатньо доступно описано фізичні принципи, які лежать в основі описаних явищ — все те, що потрібно для швидкого введення в курс тематики.

Другий розділ є першим оригінальним, в якому розв'язано задачу про кросоверну поведінку коагуляційно-дифузійного процесу між двома граничними режимами дифузійно-обмеженим та реакційно-обмеженим на прикладі неперервної моделі, що інтерполірує між одновимірним ланцюжком та ґраткою Бете. Незважаючи на середньопольовий характер моделі, було виявлено, що поведінка густини частинок на великих часах має логарифмічні поправки. Знайдена відповідність між стаціонарною границею моделі з випадковим скиданням, та нестаціонарним розв'язком задачі.

У *третьому* розділі дисертаційної роботи методи квантової теорії поля застосовано до задачі про виживання частинок у двосортній реакційно-дифузійній системі. Розглянуто систему з двома реакціями (коагуляція та анігіляція) між частинками одного типу — пастками, які можуть захоплювати частинки іншого сорту. В неперервній границі ефективна теорія поля, що описує модель є еквівалентна двокомпонентній системі бозонів (в евклідовому формулюванні і з неермітовим гамільтоніаном), ускладненній відсутністю

галілей-інваріантності. Останнє забезпечується аномальною дифузією, що описується польотами Леві. Результати аналітичних розрахунків показників загасання густини частинок в однопетловому наближенні добре узгоджуються з даними чисельного моделювання представленими в розділі.

Четвертий розділ роботи присвячено точному розв'язку одновимірних моделей з каталітично-активованими реакціями. Фактично мова йде про двокомпонентні системи частинок, які можуть перебувати в газоподібній фазі і абсорбуватись підкладкою з каталітичними зв'язками (модель I), або каталітичними вузлами (модель II). Розподіл каталітичних зв'язків (вузлів) в обох випадках моделювався відпаленим, або замороженим безладом. Використовуючи методи рекурентних співвідношень та твірних функцій, вдалось явно отримати вирази для великих статистичних сум систем і розрахувати їх термодинамічні характеристики (рівноважні густини та ізотермічні стисливості) при різних концентраціях каталітичних зв'язків (вузлів). У другій частині цього розділу розглянуто узагальнення моделі I (з відпаленим безладом) на випадок врахування взаємодії між частинками одного сорту, що знаходяться на сусідніх вузлах деревовидних ґраток Бете і Фушімі. Побудовано точні фазові діаграми моделей, виявлено низку переходів між фазами з однаковими (симетрична фаза) та різними (фаза зі спонтанно порушеною симетрією) концентраціями частинок обох сортів.

Основні результати роботи викладені у загальних **висновках**.

Результати досліджень особливостей реакційно-дифузійних процесів у дисертації Шаповала Дмитра Юрійовича викладено послідовно та логічно. Обґрунтованість висновків роботи забезпечується використанням апробованих аналітичних та чисельних методик. В дисертаційній роботі ми знаходимо, як точні розв'язки ізингоподібних моделей з різними типами безладу, аналітичні розв'язки рівнянь в частинних похідних при аналізі кросоверної поведінки коагуляційно-дифузійних процесів, так і використання методів квантової теорії поля для розрахунку показників загасання густини у двокомпонентній реакційно-дифузійній системі, що в поєднанні з числовими методами та результатами Монте Карло симуляцій дають повну картину поведінки досліджуваних систем.

Результати роботи опубліковано в 4 журнальних статтях та в 11 тезах доповідей міжнародних конференцій і семінарів. Особливу увагу привертає високий рівень видань, де опубліковано результати: «Physical Review E», «Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical» — це журнали, котрі входять до наукометричних баз Web of Science та Scopus.

Незважаючи на високий рівень дисертаційної роботи Дмитра Шаповала та вагомість отриманих у ній результатів, деякі питання та зауваження потребують уточнення.

1. Не зовсім зрозуміла процедура вибору залежності констант взаємодії, заданих формулами (3.32)-(3.33), від часового параметра t , що відповідає наближенню Смолюховського у задачі про виживання частинок в двокомпонентній реакційно-дифузійній системі.
2. На сторінці 103 є коментар стосовно кластеризації двокомпонентної системи, коли частка каталітичних зв'язків прямує до одиниці. Чому ваш точний розв'язок

не «вхоплює» цієї фази, і про необхідність використання якого складнішого підходу йде мова?

3. Які переваги використаного в 4 розділі методу розрахунку статистичних сум моделей з відпаленим безладом над трансфер-матричним підходом?
4. Мабуть у формулі (4.124) і нижче мова йде про великий термодинамічний потенціал системи, а не про її вільну енергію?
5. У тексті дисертації подекуди трапляються дрібні огріхи; часом верстка формул некоректна (наприклад, формула (4.97) та ін.); на сторінці 105 після формули (4.36) не означено контур інтегрування в комплексній площині.

Проте, висловлені зауваження, принципово не впливають на загальну високу оцінку роботи, яка є оригінальним дослідженням і повністю відповідає вимогам "Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії", затвердженого постановою Кабінету Міністрів України №44 від 12 січня 2022 року та з внесеними змінами згідно постанови Кабінету Міністрів України №341 від 21 березня 2022 року, а сам дисертант, Шаповал Дмитро Юрійович, безумовно заслуговує на присудження йому наукового ступеня наукового ступеня доктора філософії зі спеціальності 104 — фізика та астрономія 10 — природничі науки.

Доцент кафедри теоретичної фізики
імені професора Івана Вакарчука
Львівського національного університету
імені Івана Франка,
кандидат фізико-математичних наук

В. С. Пастухов