

Аннотация диссертации Узденовой Аминат Магомедовны «Математическое моделирование сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме» на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по научной специальности 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Работа посвящена разработке математических методов моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме, включая моделирование электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды; развитию эффективных численных методов решения краевых задач, соответствующих этим моделям; а также созданию комплекса программ для проведения вычислительных экспериментов по расчёту теоретических характеристик переноса ионов.

Разработана система математических моделей переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме на основе уравнений Нернста – Планка – Пуассона и Навье – Стокса и нового гальванодинамического граничного условия. Предложены эффективные методы и алгоритмы численного решения краевых задач моделей сверхпредельного переноса ионов: гибридные численно-аналитические методы, особенностью которых является сочетание численного решения в электронейтральной области и расширенной области пространственного заряда (ОПЗ) и аналитического решения в квазиравновесной ОПЗ; методы на основе замены стационарного уравнения Пуассона для потенциала электрического поля нестационарным уравнением для напряжённости; алгоритм численного решения на основе сочетания метода последовательных приближений с расщеплением задачи на каждом временном шагу на отдельные подзадачи.

На основе предложенных моделей и методов разработан комплекс проблемно ориентированных программ для проведения вычислительных экспериментов по расчёту характеристик сверхпредельного переноса ионов в одно- и двумерных сечениях мембранных систем в гальванодинамическом режиме. Комплекс программ позволил впервые выполнить вычислительные эксперименты по расчёту хронопотенциограмм слоя раствора электролита у ионообменной мембраны и канала обессоливания с учётом формирования расширенной ОПЗ, развития электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды при сверхпредельных токах.