

## ОТЗЫВ

официального оппонента

о диссертации Казаковцевой Екатерины Васильевны

«Математическое моделирование переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией», представленной на соискание ученой степени физико-математических наук по специальности 1.2.2 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертационная работа Казаковцевой Е.В. посвящена исследованию математических моделей переноса в электромембранных системах (ЭМС) с осевой симметрией в виде краевых задач для системы Нернста-Планка-Пуассона и Навье-Стокса, разработке численных методов решения этих краевых задач, а также созданию комплекса программ для проведения вычислительных экспериментов с целью повышения эффективности ЭМС водоочистки и водоподготовки. Математическое моделирование процессов опреснения и очистки воды в ЭМС с осевой симметрией в настоящее время является **актуальной** задачей.

В результате проведенного исследования, Казаковцевой Е.В. был сформулирован ряд новых математических моделей: переноса ионов соли в ячейке с вращающимся мембранным диском (ВМД) при сверхпределных токовых режимах с учетом электроконвекции, иерархическая система моделей электроконвекции в цилиндрической системе координат: общая модель с расщеплением (ОМР), модель без начального пограничного слоя (БНПС), модель с некоторым обобщением закона Ома в цилиндрических координатах (ЗОМ ЦК). В диссертации разработаны новые численные методы: гибридный численно-аналитический метод, заключающийся в сращивании решения в области возрастания катионов (ОВК) и оставшейся основной части области (ОЧО), причём в ОЧО решение находится численно, а в ОВК – аналитически, а также алгоритм численного решения краевой задачи базовой модели с ВМД, заключающийся в сочетании метода конечных элементов и метода последовательных приближений. Разработан комплекс, позволяющий

проводить вычислительные эксперименты и анализ переноса ионов соли в ЭМС с осевой симметрией, включающий нейросетевые модели для прогнозирования скачка потенциала, при котором начинается электроконвекция, и толщины диффузионного слоя в системах с ВМД. Все математические модели, численные методы и комплекс программ, представленные в диссертации, разработанные автором впервые, обуславливают **научную новизну** диссертационной работы.

**Практическая значимость** выполненных в работе исследований заключается в предложенных математических моделях: ОМР, БНПС, ЗОМ ЦК, которые можно использовать для проектирования электромембранных систем очистки воды. Кроме того, комплекс программ для ЭВМ, разработанный в рамках диссертационной работы, может быть использован на практике, так как позволяет находить концентрации и напряженность при реальных значениях скачка потенциала, угловой скорости и начальной концентрации, а также может использоваться для расчета оптимальных параметров устройств, для прогнозирования скачка потенциала, при котором начинается электроконвекция и прогнозирования толщины диффузионного слоя в системах с ВМД. Результаты диссертационной работы используются в работе ООО «Инновационное предприятие «Мембранная технология»», а также в учебном процессе ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» при чтении учебных курсов для аспирантов. Диссертация выполнялась в рамках РФФИ грантов: № 13-08-00464а, № 13-08-96519 р\_юг\_а, № 16-08-00128а, № 18-58-16003 НЦНИЛ\_а и проекта РНФ №. 24-19-00648, что подтверждает практическую значимость.

**Достоверность, обоснованность и оригинальность полученных результатов** обеспечивается использованием уравнений, представляющих основные законы физики, строгими математическими методами и сопоставлением с теоретическими и экспериментальными результатами других авторов, когда это было возможно, а также корректным использованием методов математического и имитационного моделирования связанной системы уравнений НПП и НС без подгоночных параметров. Основные факты, предположения, ограничения и допущения, принятые в



работе, согласуются с опубликованными данными по тематике диссертации. Также достоверность результатов, проведенных соискателем ученой степени исследований, подтверждается их публикацией в высокорейтинговых рецензируемых журналах из списка ВАК, а комплекса программ – получением свидетельства о государственной регистрации программ на ЭВМ и их апробацией.

### **Оценка содержания диссертационной работы.**

Диссертационная работа содержит введение, четыре главы, заключение, приложения, список сокращений и список литературы из 122 наименований. По результатам диссертации опубликовано 23 печатные работы, включая 7 статей в журналах из перечня научных журналов, рекомендованных ВАК России для публикации результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук и 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ. Результаты исследования доложены на всероссийских и международных конференциях.

Во **Введении** раскрыта актуальность темы исследования, степень разработанности темы, выделены цель и задачи исследования, перечислены основные положения, выносимые на защиту, а также сформулированы научная новизна и практическая значимость.

**В главе 1** приведены основные сведения о математических моделях электромембранных систем с осевой симметрией, в частности установок с вращающимся мембранным диском и магнитной мешалкой. Приведены аналитические решения некоторых краевых задач в допредельном случае, а также формула Левича для нахождения толщины диффузионного погранслоя. Сформулирована базовая модель переноса ионов соли в системах с ВМД при сверхпредельных токовых режимах с учетом электроконвекции в виде краевых задач для системы Нернста-Планка-Пуассона и Навье-Стокса, выведена формула для расчёта ВАХ в цилиндрической системе координат.

**В главе 2** диссертации выполнен переход к безразмерной форме системы уравнений НПП и НС в цилиндрической системе координат и выполнено расщепление полученной системы уравнений. Приведён алгоритм вывода иерархической системы математических моделей переноса в

цилиндрической системе координат, выполнено упрощение системы уравнений с расщеплением для проточного канала электродиализного аппарата в цилиндрической системе координат с использованием оценки членов уравнения в областях электронейтральности и пространственного заряда. В результате получены общая модель с расщеплением, модель без начального пограничного слоя, модель в некотором приближении обобщения закона Ома и модель ЗОМ ЦК для симметричного 1:1 электролита.

**Глава 3** посвящена численным методам решения краевых задач математических моделей и описанию разработанного гибридного численно-аналитического метода для эффективного решения задач переноса в системах с ВМД. Приведен алгоритм численного решения краевой задачи базовой модели с ВМД, а также проведён анализ численного решения соответствующей краевой задачи, в результате которого показано, что квазиравновесная ОПЗ является по времени также квазистационарной и не зависит от радиальной координаты. Далее в главе приводится описание нового гибридного численно-аналитического метода, основанного на разработанной впервые математической модели без ОВК, которая решается численно, а также вывода формул для нахождения аналитического решения в ОВК с последующим их сращиванием. Проведён сравнительный анализ численных результатов исследования базовой модели и модели без ОВК и показано их соответствие всюду, за исключением ОВК, где, согласно предложенному алгоритму, решение находится аналитически.

**Глава 4** посвящена описанию разработанного комплекса программ для вычислительных экспериментов и анализа процесса переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией, состоящего из шести программ:

- 1) Для решения задач переноса в мембранных системах с осевой симметрией гибридным численно-аналитическим методом;
- 2) Для решения задач переноса ионов соли с учётом пространственного заряда в мембранных системах с осевой симметрией;
- 3) Для численного анализа переноса ионов соли в электромембранных системах в модели без ОВК;



4) Нейронная сеть для определения скачка потенциала, при котором возникает электроконвекция при заданной скорости вращения мембранного диска;

5) Нейронная сеть для определения толщины диффузионного слоя у ВМД с катионообменной мембраной;

6) Программа для численного анализа модели переноса симметричного бинарного электролита в модели ЗОМ ЦК.

В **Заключении** сформулированы основные результаты проведенной диссертационной работы в области математического моделирования, численных методов и комплексов программ.

Содержание диссертационной работы Казаковцевой Е.В. позволяет говорить о том, что все поставленные задачи выполнены и основная цель исследования полностью достигнута, однако, есть несколько замечаний:

1) Не описаны ограничения базовой модели и численного метода ее решения, относительно начальных данных: угловой скорости, начальной концентрации и скачке потенциала.

2) На стр. 18 написано «бесконечно вращающийся диск», скорее должно быть «вращающийся бесконечный диск».

3) В разделе 1.3 на стр. 27 нужно было подробнее обсудить предположение о независимости концентрации от радиальной и азимутальной компонент, так как такое предположение не является очевидным.

4) В разделе 1.4 переменной  $\eta$  одновременно обозначается и динамическая и кинематическая вязкость.

5) В разделе 1.5 переменной  $\rho$  обозначается плотность заряда, хотя в предыдущем разделе так обозначалась плотность электролита.

6) В разделе 1.6 величины  $\Phi = 0.3\text{В}$  и  $C_0 = 0.01\text{ моль/м}^3$  зафиксированы. Интересно как будет зависеть поведение системы при варьировании данных параметров. Более того, в выводах указано, что представленные режимы исследованы в сверхпредельных токовых режимах, но величина  $\Phi = 0.3\text{ В}$  может быть слишком малой для формирования сверхпредельных режимов.

7) В разделе 2.1 в начале стр. 45 в число Рейнольдса входит величина  $\nu$ , хотя вязкость обозначена величиной  $\eta$ .

8) В формулах на стр. 55 допущены некоторые опечатки в скобках.

Перечисленные замечания не влияют на общую положительную оценку работы, носят рекомендательный характер и не ставят под сомнение обоснованность научных положений и выводов. Диссертация написана единолично, содержит совокупность новых научных результатов и положений, выдвигаемых автором для публичной защиты, имеет внутреннее единство и свидетельствует о личном вкладе автора в науку. Предложенные автором новые решения строго аргументированы и критически оценены по сравнению с другими известными решениями.

### **Заключение**

Диссертационная работа Казаковцевой Екатерины Васильевны «Математическое моделирование переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией» представляет собой законченную научно-квалификационную работу. Достоверность результатов работы не вызывает сомнений, сами результаты опубликованы и апробированы. Все основные выносимые на защиту научные положения и выводы обоснованы.

Диссертация соответствует п.1, 2, 3 и 8 паспорта научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ:

1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений (физико-математические науки).

2. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий.

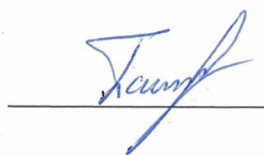
3. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

8. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.



Диссертационная работа «Математическое моделирование переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией» Казаковцевой Екатерины Васильевны соответствует всем критериям «Положения о присуждении ученых степеней» (пп. 9-14), в том числе содержит решение научных задач, имеющих значение для развития соответствующей отрасли знаний, утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г. (с актуальными изменениями), предъявляемым к диссертациям на соискание степени кандидата физико-математических наук, а ее автор, Казаковцева Екатерина Васильевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент –  
кандидат физико-математических  
наук, старший научный сотрудник  
лаборатории электро- и  
гидродинамики микро- и  
наномасштабов Краснодарского  
филиала Финансового университета  
при Правительстве Российской  
Федерации



Ганченко  
Георгий Сергеевич

10.09.2024

Моб. тел.: +7 967 651-22-42, e-mail: [GSGanchenko@fa.ru](mailto:GSGanchenko@fa.ru)

Подпись Ганченко Г.С. заверяю

*Снегидина*



*Г. С. Ганченко*

Краснодарский филиал федерального государственного образовательного бюджетного учреждения высшего образования «Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации», 350051, Краснодарский край, город Краснодар, ул. Шоссе Нефтяников, д. 32, тел. +7(861)2156360, e-mail: [Krasnodar@fa.ru](mailto:Krasnodar@fa.ru)