

Отзыв официального оппонента

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

Актуальность темы исследования

Диссертационная работа Узденовой Аминат Магоматовны связана с исследованием проблемы разработки методов математического моделирования сверхпредельного переноса ионов в электромембранных системах. В настоящее время актуальной задачей является повышение эффективности мембранных процессов путем управления режимом электрического поля. В интенсивных токовых режимах в мембранных системах проявляются явления сверхпредельного переноса ионов (электроконвекция, гравитационная конвекция, диссоциация молекул воды), которые оказывают значительное влияние на процесс переноса ионов. Для оптимизации работы мембранных систем необходимо использовать методы математического моделирования, которые позволят понять фундаментальные закономерности сверхпредельного переноса, и предсказывать поведение систем в различных условиях. В экспериментальных исследованиях и практике эксплуатации мембранных систем активно используется гальванодинамический режим. При этом теоретические работы, посвященные этому вопросу, преимущественно ориентированы на изучение переноса ионов в потенциодинамическом режиме. Таким образом, диссертационная работа Узденовой А.М., посвященная разработке методов математического моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме, развитию численных методов решения краевых задач соответствующих моделей, а также созданию комплекса

программ для проведения вычислительных экспериментов по расчёту характеристик переноса ионов, является актуальным научным исследованием, имеющим фундаментальный характер и практическое значение в области электромембранных технологий.

Актуальность и степень научной новизны темы исследования также подтверждается грантовой поддержкой Российского научного фонда (проекты №23-29-00534, №14-19-00401) и Российского фонда фундаментальных исследований (№ 18-38-00572, №12-08-31535, №13-08-96525 и др.).

Содержание и структура диссертации

Диссертационная работа Узденовой А.М., выполненная в ФГБОУ ВО «Карачаево-Черкесский государственный университет имени У.Д. Алиева», по содержанию и структуре полностью отвечает требованиям к научно-квалификационной работе на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Диссертация включает введение, пять глав, заключение, список сокращений и условных обозначений, список литературы и приложения. Работа изложена на 244 страницах машинописного текста и содержит 69 рисунков, 11 таблиц и 5 приложений. Список литературы состоит из 201 наименования работ отечественных и зарубежных авторов. Диссертационная работа представляет собой логически выстроенное и завершённое научное исследование.

Во *введении* диссертационной работы охарактеризована актуальность и степень разработанности темы исследования, четко обозначены цель и задачи работы, научная новизна полученных результатов, теоретическая и практическая значимость, методология, а также сформулирован ряд научных положений.

В *первой главе* в рамках обзора научной литературы отмечена роль математического моделирования в развитии теории сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах. Показано, что математическое моделирование сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах для разбавленных растворов электролитов должно учитывать формирования

расширенной области пространственного заряда (ОПЗ), развитие электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды. Представлены основные подходы математического моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах. Особое внимание уделено проблеме моделирования гальванодинамического режима переноса ионов в мембранных системах. Обзор отражает современные достижения в исследуемой области и характеризуется анализом как российских, так и зарубежных публикаций.

Во *второй главе* диссертации автором выведено гальванодинамическое граничное условие, которое является ключевым элементом метода математического моделирования гальванодинамического режима с использованием уравнения Пуассона для потенциала. Разработаны и верифицированы одномерные математические модели нестационарного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме на основе краевых задач для системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона. С использованием данных моделей проведены вычислительные эксперименты и впервые рассчитаны хронопотенциограммы диффузионного слоя у ионообменной мембраны с учётом формирования расширенной ОПЗ и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды, а также выполнен анализ динамики ОПЗ в одномерном сечении электродиализного канала обессоливания в гальванодинамическом режиме.

В *третьей главе* работы изложен метод двумерного математического моделирования переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме на основе системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона и Навье – Стокса и гальванодинамического граничного условия. Построены математические модели нестационарного переноса ионов в слое раствора электролита у ионообменной мембраны и в канале обессоливания с учётом явлений сверхпредельного переноса (а именно: формирования расширенной ОПЗ, развития электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды) при постоянных и линейно-

возрастающих токах. Выполнена верификация предлагаемых математических моделей путем сопоставления результатов моделирования с экспериментальными измерениями хронопотенциограмм, аналитическими оценками предельной плотности тока, переходного времени и других характеристик переноса ионов в мембранных системах.

В *четвертой главе* работы автором изложены оригинальные методы и алгоритмы численного решения краевых задач моделей сверхпредельного переноса в гальванодинамическом режиме. Предложен численно-аналитический метод решения краевых задач рассматриваемых в работе математических моделей, основанный на сращивании численного решения в электронейтральной области и расширенной ОПЗ и аналитического решения в квазиравновесной ОПЗ. С использованием указанного метода автором найдены решения краевой задачи при значениях начальной концентрации раствора электролита, соответствующих реальным значениям, полученным на практике при использовании мембранных систем. Автором также приведен новый метод и алгоритм численного решения краевых задач моделей нестационарного переноса ионов в гальванодинамическом режиме на основе уравнений Нернста – Планка – Пуассона и Навье – Стокса, который предполагает сочетание методов конечных элементов и последовательных приближений с разделением задачи на каждом временном шаге на отдельные подзадачи расчёта гидродинамической и электрохимической составляющих. Еще одним достижением работы в области численных методов является предложенный алгоритм численного решения краевых задач моделей переноса на основе системы уравнений Нернста – Планка и уравнения для напряженности электрического поля. С использованием указанного метода получены численные решения краевых задач переноса ионов в диффузионном слое, в сечении канала обессоливания и трехслойной мембранной системе (включающей мембрану и два смежных с ней диффузионных слоя).

В *пятой главе* описывается разработанный комплекс проблемно ориентированных программ для расчета характеристик сверхпредельного

переноса ионов мембранных систем в гальванодинамическом режиме. Программы позволяют выполнять вычислительные эксперименты по расчёту концентраций ионов, электрического потенциала, скорости течения раствора электролита, хронопотенциограмм и других характеристик системы с учётом механизмов сверхпредельного переноса ионов. В данной главе также описаны результаты проведенных вычислительных экспериментов по оценке влияния электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды на характеристики переноса ионов в гальваностатическом режиме.

В *заключении* работы формулируются основные выводы, сделанные на основе проведенного математического моделирования, полученных результатов численного счета в случае сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме, а также приводятся перспективы дальнейшего развития исследований.

Научная новизна

В диссертационной работе получен ряд новых важных результатов:

– Разработаны новые методы математического моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме на основе краевых задач для системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона и Навье – Стокса, позволяющие учитывать формирование расширенной ОПЗ, развитие электроконвекции и диссоциации воды.

– Для математических моделей переноса ионов в гальванодинамическом режиме предложены оригинальные методы и алгоритмы численного решения краевых задач: гибридный численно-аналитический метод; метод на основе замены уравнения Пуассона для потенциала электрического поля нестационарным уравнением для напряжённости; метод и алгоритм численного решения на основе сочетания методов конечных элементов и последовательных приближений с разделением задачи на каждом временном шаге на отдельные подзадачи расчёта гидродинамических и электрохимических характеристик.

– Разработан комплекс проблемно ориентированных программ для математического моделирования и анализа характеристик сверхпределного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме с возможностью выбора размерности рассматриваемой области (одно- или двумерной), области мембранной системы (обедненный диффузионный слой у ионообменной мембраны или канал обессоливания) и учитываемых механизмов сверхпределного переноса ионов (развитие электроконвекции и/или реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды).

– На основе предложенных моделей, методов и программ впервые проведены вычислительные эксперименты по расчету характеристик переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме при сверхпределных токах и дана теоретическая интерпретация хронопотенциограмм и вольтамперных характеристик мембранных систем с учетом влияния электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды.

Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы. Предложенные в диссертационной работе Узденовой А.М. методы математического моделирования сверхпределного переноса ионов, численные и численно-аналитический методы решения краевых задач рассматриваемых математических моделей, их программная реализация могут быть использованы при моделировании и теоретических исследованиях переноса ионов в мембранных, нано- и микрофлюидных устройствах. Практическая значимость работы обусловлена возможностью использования полученных результатов в исследованиях электромембранных систем, при проектировании новых систем и выборе оптимальных режимов их функционирования, что подтверждается актами об использовании результатов диссертации.

Достоверность и обоснованность научных результатов, выводов и рекомендаций диссертации Узденовой А.М., определяется тем, что работа базируется на известных методологических и теоретических подходах,

полученные теоретические результаты подтверждаются экспериментом и обобщают известные в научной литературе сведения; математические модели построены с использованием уравнений, представляющих основные законы физики, и строгих математических методов. Таким образом, выдвинутые положения, сделанные выводы и рекомендации являются полностью обоснованными.

Результаты исследований, изложенные в диссертационной работе Узденовой А.М., прошли **апробацию** на международных и всероссийских конференциях, по материалам диссертации опубликовано 29 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ, получено 3 свидетельства о регистрации программы для ЭВМ.

Замечания по диссертации:

1. В диссертации разработано большое число математических моделей переноса ионов в мембранных системах. Стоило бы больше внимания уделить сравнительному анализу результатов, полученных с использованием разных моделей. Сделать более четкие выводы, когда какие модели лучше использовать.

2. При формулировании математических моделей в большинстве случаев рассматривается перенос ионов в растворе электролита у поверхности катионообменной мембраны. При этом обсуждение модификации модели переноса ионов в слое раствора электролита у анионообменной мембраны отсутствует.

3. Вычислительные эксперименты по расчету характеристик переноса ионов в гальванодинамическом режиме выполнены для водных растворов бинарного электролита. Возможно ли распространить предложенные подходы на произвольные растворы электролитов остается непонятным.

4. Стоило бы больше внимания в работе уделить сравнению полученных результатов с результатами других авторов и известным практическими результатами.

5. В тексте встречаются опечатки, например, подписи осей рисунков 3.19 (д), (е); знаки неравенства в формуле (4.31).

Высказанные замечания не влияют на общую положительную оценку обсуждаемой диссертационной.

Заключение

Диссертационная работа Узденовой Аминат Магоматовны на тему «Математическое моделирование сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме» является законченной научно-квалификационной работой, в которой развито новое научное направление математического моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме, что можно квалифицировать как научное достижение в области математического моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных. Она написано грамотно и соответствующим образом оформлена. По каждой главе и работе в целом сделаны четкие выводы. Материал диссертации изложен последовательно, выводы имеют логическое обоснование, базирующееся на применении численных методов, методов математического моделирования. Диссертация обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, что свидетельствует о личном вкладе автора диссертации в науку. Тема и содержание диссертации соответствуют паспорту научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Автореферат и опубликованные автором работы полно и правильно отражают основное содержание диссертации.

Диссертационная работа Узденовой Аминат Магоматовны «Математическое моделирование сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме» соответствует критериям пп. 9–14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. N 842 (со всеми действующими изменениями),

предъявляемым к диссертации на соискание ученой степени доктора наук, а её автор, Узденова Аминат Магометовна, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент:

доктор технических наук по специальности
05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ,
доцент, профессор кафедры прикладной
математики и программирования ФГАОУ ВО
«Южный федеральный университет»

24

Усов Анатолий
Борисович

«14» сентября 2024 г.

Моб. Тел.: +7 904 340-46-21

e-mail: abusov@sfedu.ru

Подпись Усова А.Б. заверяю:



Мирошниченко О.С.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Южный федеральный университет»

Почтовый адрес: 344002, г. Ростов-на-Дону, ул. Б. Садовая, д. 105, стр. 42

Рабочий тел.: 8(863)297-51-14, e-mail: info@sfedu.ru.

Я, Усов Анатолий Борисович, даю согласие на включение моих
персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного
совета, и их дальнейшую обработку.

24

Усов Анатолий Борисович

«14» сентября 2024 г.

Личную подпись Усова Анатолия Борисовича заверяю



Мирошниченко О.С.