

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертационную работу

Казаковцевой Екатерины Васильевны

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

1. Актуальность темы исследования.

В настоящее время загрязнение водной среды создает значительный дефицит чистой воды, и поэтому задачи, связанные с процессом опреснения и очистки воды, являются весьма значимыми. Одним из наиболее известных методов очистки воды являются электрохимические методы, в том числе, электромембранные системы очистки, имеющие осевую симметрию. К таким системам относят, в первую очередь, системы с вращающимся мембранным диском (ВМД). Математические модели этих систем используют условие локальной электронейтральности. Тем не менее, практика и эксперименты показывают, что эффективное функционирование систем с осевой симметрией при переносе ионов связано с использованием сверхпределных токовых режимов, когда возникает электроконвекция. Это приводит к несоответствию между теорией и практикой, что требует дальнейшего изучения и уточнения существующих теорий.

Таким образом, разработка математических моделей переноса ионов соли с учетом электроконвекции, а также методов аналитического и численного решения возникающих краевых задач, создание комплекса программ для вычислительных экспериментов и анализа переноса ионов соли в ЭМС с осевой симметрией является важной проблемой, решению которой и посвящена данная диссертационная работа.

2. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформированных в диссертации, их достоверность и новизна.

Достоверность результатов обеспечивается использованием уравнений, представляющих основные законы физики, а также строгих математических методов. Кроме того, результаты диссертационной работы были сопоставлены как с теоретическими, так и с экспериментальными результатами других авторов, когда это было возможно и показано их соответствие, что также позволяет судить о достоверности результатов исследований.

Кроме того, достоверность результатов, проведенных соискателем ученой степени исследований, подтверждается их публикацией в рецензируемых журналах из списка ВАК, а комплекса программ – получением свидетельства о государственной регистрации программ на ЭВМ и их апробацией.

Научную новизну имеют предложенный метод расщепления системы уравнений Навье – Стокса и Нернста – Планка – Пуассона в цилиндрической системе координат, а также гибридный численно-аналитический метод решения краевых задач. Эти методы могут использоваться при математическом моделировании других задач, например, задач переноса ионов в ЭМС и при решении краевых задач с пограничными слоями.

3. Практическая значимость результатов.

Практическую значимость имеют предложенные упрощённые математические модели, которые можно использовать для проектирования электромембранных систем очистки воды. Кроме того, комплекс программ для ЭВМ, может быть использован на практике, так как позволяет находить концентрации и напряженность при реальных значениях скачка потенциала, угловой скорости и начальной концентрации, а также для расчета оптимальных рабочих и технологических параметров электромембранных систем очистки воды, для прогнозирования скачка потенциала, при котором

начинается электроконвекция и прогнозирования толщины диффузионного слоя в системах с ВМД.

Практическую значимость также подтверждает использование результатов диссертационной работы в работе ООО «Инновационное предприятие «Мембранная технология»», а также в учебном процессе ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» при чтении учебных курсов для аспирантов.

Получены 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ: «Программа для переноса ионов соли с учётом пространственного заряда в мембранных системах с осевой симметрией» и «Программный комплекс для решения задач переноса в мембранных системах с осевой симметрией гибридным численно-аналитическим методом».

4. Содержание и структура диссертации.

Диссертационная работа Казаковцевой Е.В. состоит из введения, четырех глав, заключения, приложений, списка сокращений, списка литературы из 122 наименований и изложена на 176 страницах.

Во введении обоснована актуальность исследования, представлен краткий обзор предыдущих работ по теме исследования, сформулированы цель и задачи исследования, научная новизна, практическая значимость и основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе проведен аналитический обзор математических моделей электромембранных систем очистки воды с осевой симметрией, включая установки с вращающимся мембранным диском. Рассмотрены математические модели переноса в системах с вращающимся мембранным диском, их аналитическое решение 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 цилиндрической системе координат, в виде краевой задачи для системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона и Навье – Стокса.

Вторая глава посвящена разработанному автором методу расщепления нестационарной системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона в цилиндрической системе координат. Используя метод расщепления, из базовой модели переноса ионов соли получена иерархическая система математических моделей: общая модель с расщеплением (ОМР), модель без начального пограничного слоя (БНПС) и модель в цилиндрических координатах (ЗОМ ЦК), полученная в некотором приближении обобщения закона Ома.

В третьей главе диссертации предлагается алгоритм численного решения краевой задачи базовой модели с ВМД, который заключается в сочетании метода конечных элементов и метода последовательных приближений, а именно, в расщеплении задачи, после дискретизации, на текущем слое по времени на электрохимическую и гидродинамическую и последовательном их решении до выполнения некоторого условия останова. В диссертации показано, что решение краевой задачи базовой модели таким методом возможно при ограниченном диапазоне начальных параметров. Были выведены основные закономерности переноса ионов, а именно:

- 1) квазиравновесная область пространственного заряда (ОПЗ) образуется практически мгновенно;
- 2) толщина квазиравновесной ОПЗ не зависит от радиуса (r) мембранного диска, за исключением окрестности $r = 0$;
- 3) квазиравновесная ОПЗ является также квазистационарной, то есть практически не зависит от времени;
- 4) аксиальная и радиальная скорости в квазиравновесной ОПЗ близки к нулю, а азимутальную можно считать практически постоянной и равной ωr , т.е. раствор электролита вблизи мембраны в квазиравновесной ОПЗ вращается как единое целое.

На основе этих закономерностей, предложен новый гибридный численно-аналитический метод, позволяющий находить решение базовой задачи путём сращивания численного решения модели без ОВК с

асимптотическим решением в области возрастания катионов. Предложенный метод позволяет проводить численный анализ переноса ионов соли при реальных концентрациях раствора электролита бинарной соли при широком диапазоне изменения скачка потенциала и угловой скорости вращения мембранного диска.

В четвертой главе приведено описание разработанного комплекса программ для вычислительных экспериментов и анализа процесса переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией, состоящий из шести программ, разработанный на языке программирования Java с использованием библиотек среды Matlab и Comsol Multiphysics. Кроме того, описаны две нейронные сети, входящие в комплекс программ, используя которые, определена поправка в формуле толщины диффузионного слоя Левича, позволяющая учесть влияние электроконвекции.

В заключении перечислены основные результаты проведенных исследований, научная новизна и значимость которых не вызывает сомнений.

5. Соответствие паспорту специальности

Полученные в диссертации результаты соответствуют пунктам 1, 2, 3 и 8 паспорта научной специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»:

- п.1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений (физико-математические науки);
- п.2. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий;
- п.3. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента;
- п.8. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

6. Замечания по диссертационной работе и автореферату.

1) Остается непонятным, почему в п.4.3 не исследована зависимость переноса ионов от начальной концентрации раствора?

2) Для нейронной сети, определяющей скачок потенциала, при котором начинается электроконвекция следовало привести, помимо расчётов с помощью нейронной сети, столбец с реальными данными по аналогии с тем, как это сделано в п 4.5.

3) В п. 4.4 прогнозирование скачка потенциала проводится в зависимости от угловой скорости в об/мин, а в п. 4.5 для прогнозирования толщины диффузионного слоя используется угловая скорость, выраженная в рад/с, возможно стоило использовать одни единицы измерения?

4) Рисунки 3.28, 3.32, 4.18, 4.23 следовало объяснить в тексте более подробно.

5) Следовало бы привести более полное сравнение полученных в работе результатов с известными результатами других авторов.

Однако считаю, что указанные замечания не снижают значимость данного диссертационного исследования.

Заключение

Диссертация Казаковцевой Екатерины Васильевны на тему «Математическое моделирование переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией» является законченной научно-квалификационной работой. Диссертация написана грамотно и соответствующим образом оформлена. По каждой главе и работе в целом сделаны четкие выводы. Материал диссертации изложен последовательно, выводы имеют логическое обоснование. Диссертация обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, что свидетельствует о личном вкладе автора диссертации в науку.

По глубине проведенных исследований, их объему и широте, диссертационная работа полностью соответствует требованиям «Положения о

присуждении ученых степеней» (пп. 9-14), утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г. (с актуальными изменениями), а ее автор, Казаковцева Екатерина Васильевна 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»

Усов Анатолий
Борисович

«14» сентября 2024 г.

Моб. Тел.: +7 904 340-46-21
e-mail: abusov@sfedu.ru
Подпись Усова А.Б. заверяю:



Усов Анатолий Борисович
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.

 Усов Анатолий Борисович
«14» сентября 2024 г.

Личную подпись Усова Анатолия Борисовича заверяю



Усов Анатолий Борисович
Мирошниченко О.С.