ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Казаковцевой Екатерины Васильевны

"Математическое моделирование переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией"

Диссертация посвящена математическому моделированию переноса ионов соли в системе с вращающимся диском. Дана формулировка базовой математической модели переноса, включающая уравнения переноса ионов соли в электромембранных системах, записанных в цилиндрической системе координат, начальные и граничных условия (п. 1.6 диссертации). Рассмотрен численный метод решения базовой математической модели (п. 3.1). Для повышения эффективности решения базовой модели предложено расщепление ее на ряд более простых задач (п. 2.2) и рассмотрены некоторые упрощения расщепленной задачи (п. 2.3). Работа вызывает ряд замечаний.

Замечание 1: формулировка базовой математической модели переноса.

Ключевым элементом базовой модели являются начальные и граничные условия (стр. 39-40 диссертации), однако их изложение неудовлетворительно. В частности:

– на границе 2 граничные условия отсутствуют,

– на границе 1 сформулированы граничные условия для радиальной скорости u, а записаны для азимутальной v,

– на границе 4 записаны условия для потока: $\vec{j}_i = -u \cdot C_i$, $i = 1, 2$ (слева трехмерный вектор, справа – скаляр) и для потенциала: $-\vec{n} \cdot \left(r\frac{\partial \Phi}{\partial r}, \frac{\partial \Phi}{\partial z}\right)^T = 0$ (слева – скалярное произведение трехмерного на двумерный вектор),

– раствор подается через границу 2 (через ось симметрии?),

– начальное условие для скорости жидкости отсутствует.

При этом условия для потока: $\vec{j}_i = -u \cdot C_i$, $i = 1, 2$ нельзя удовлетворительно исправить, заменив слева потоки на их нормальные (радиальные) составляющие (подробно – в замечании 2).

Таким образом, формулировка базовой математической модели переноса (положение 1, выносимое на защиту) неудовлетворительна.

Замечание 2: численный метод решения базовой математической модели.

Алгоритм численного решения базовой математической модели основан на том, что на каждом временном слое решаемая задача расщепляется по физическим процессам.

Сначала формируется гидродинамическая задача с учетом электрохимических значений, взятых с нижнего временного слоя. После ее решения решается электрохимическая задача, при этом используются неисправленные граничные условия из п. 1.6. Метод решения в диссертации не приводится, просто написано: "В результате решения этой краевой задачи находим..." (стр. 80).

Покажем, что даже после исправления условий на границе 4: $\vec{j}_i = -u \cdot C_i$, $i = 1, 2$ (замены потоков слева на их нормальные (радиальные) составляющие) останутся серьезные проблемы при решении электрохимической задачи, не замеченные автором.

Действительно, для каждого i граничные условия содержат две неизвестные – j_i и C_i, таким образом, есть произвол при выборе значений, берущихся с предыдущего временного слоя. Если поднимать значения концентраций C_i, то при переходе от слоя к слою их значения останутся постоянными; таким образом, на границе 4 значения концентраций будут такими же, как в начальный момент, что неверно. Если поднимать с нижнего слоя значения потоков j_i, то постоянными останутся потоки (при этом само решение будет другим).

Итак, численный метод решения базовой математической модели в диссертации описан неполно. С граничными условиями $\vec{j}_i = -u \cdot C_i$, $i = 1, 2$ из п. 1.6 эта задача не может быть корректно решена.

Таким образом, положение 4, выносимое на защиту, реализовано неудовлетворительно.

Замечание 3: расщепление базовой математической модели.

В главе 2 производится расщепление сложной базовой математической модели на небольшие более простые задачи (стр. 43). Результат расщепления электрохимической части базовой модели приведен на стр. 64 (стр. 12 автореферата). На этой же странице автор пишет, что приведенная система "совместно с системой уравнений НС и соответствующими краевыми условиями определяет общую математическую модель с расщеплением"; самих краевых условий автор не приводит. Трудность состоит в том, что граничные условия для расщепленной задачи необходимо задавать так, чтобы она была эквивалентна базовой математической модели.

3.1. Заметим, что расщепленная система содержит 3 уравнения относительно $\tilde{S}, \vec{E}$ и $\vec{\Phi}$. При этом $\tilde{S} = C_1 + C_2 + \mathrm{Const}\,(E_r^2 + E_z^2)$. Таким образом, для задания граничных условий для $\tilde{S}$ необходимо, чтобы граничные условия для C_1 и C_2 были однотипными на всех участках границы. Однако на границе 3 для C_1 задано граничное условие 1-го рода (задана концентрация), а для C_2 заданы условия 2-го рода (задан поток), поэтому граничное значение для $C_1 + C_2$ задать не получится. Добавление недостающих граничных условий делает расщепленную задачу неэквивалентной базовой модели. Аналогично обстоит дело с заданием граничных значений $\vec{E}$ на тех участках границы, на которых в исходной постановке задан потенциал φ.

3.2. При расщеплении используется функция $\vec{\Phi} = \varepsilon \mathrm{Pe} \frac{\partial (r\vec{E})}{\partial t} + r\vec{I}$. Чтобы ее найти, необходимо знать значения функции $\operatorname{div} \vec{\Phi}$ и вектор-функции $\operatorname{rot} \vec{\Phi}$ (п. 2.2.2). Автор, замечает, что "с учетом осевой симметрии вектор $\vec{\Phi}$ не зависит от угла φ" и в силу этого для определения $\vec{\Phi}$ считает достаточным ограничиться равенством $\operatorname{div} \vec{\Phi} = 0$ и значением азимутальной компоненты вектора $\operatorname{rot} \vec{\Phi}$: $\xi(\vec{\Phi}) = \left(\operatorname{rot} \vec{\Phi}\right)_{\varphi}$.

Однако из осевой симметрии функции $\vec{\Phi}$ не следует, что $\left(\vec{\Phi}\right)_{\varphi} = 0$, поэтому необходимо учитывать все 3 компоненты вектора $\operatorname{rot}\vec{\Phi}$, без этого восстановить $\vec{\Phi}$ нельзя.

3.3. Значения $\operatorname{div}\vec{\Phi}$ и $\operatorname{rot}\vec{\Phi}$ позволяют определить $\vec{\Phi}$, но не единственным образом (Г.М. Фихтенгольц. Курс дифференциального и интегрального исчисления, т.3, п.671, стр. 378). Для единственности необходимо дополнительно задавать граничные условия для функции $\vec{\Phi}$, чего невозможно сделать без нарушения эквивалентности с базовой моделью.

3.4. Кроме того, автор не замечает, что решение расщепленной задачи может дать лишь значение $C_1 + C_2$. Чтобы найти значения концентраций C_1 и C_2 по отдельности, все равно придется решать уравнения базовой модели, чего автор пытается избежать с помощью её "расщепления".

Таким образом, расщепление базовой математической модели (положение 2, выносимое на защиту) не может быть реализовано. Из этого следует, что и построение иерархической системы математических моделей (положение 3, выносимое на защиту), базирующихся на расщепленной задаче, не имеет смысла.

Вывод. Работа содержит большое количество неточностей и явных просчетов, что не позволило удовлетворительно реализовать основные положения диссертации, выносимые на защиту.

Считаю, что диссертационная работа Казаковцевой Екатерины Васильевны "Математическое моделирование переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией" не удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук.

Научный консультант
отдела математического моделирования
обособленного подразделения АО "СКБ МО РФ"
в г. Краснодар,
канд. физ.-мат. наук — Дроботенко Михаил Иванович
"4" октября 2024 г.

Подпись Дроботенко Михаила Ивановича заверяю

Зам ГК по АСУ
(совмещ. Руководитель ОП в г. Краснодар
пр. от 07.10.2021 г. № 839-к) — Л. А. Дмитренко

Обособленное подразделение
АО "Специальное конструкторское бюро МО РФ" в г. Краснодар
350020, г. Краснодар, ул. Одесская, 48/3, тел 8 (861) 997-25-38

e-mail: mdrobotenko@mail.ru