ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Узденовой Аминат Магометовны "Математическое моделирование сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме"

Теоретическая часть представленной диссертации заключается в выводе гальванодинамических граничных условий для ряда одно- и двумерных задач переноса ионов в мембранных системах, разработке численных методов для их решения; практическая состоит в создании программ для реализации разработанных методов и проведения численных расчетов.

1. Гальванодинамические граничные условия

Ключевым моментом для построения модели переноса ионов в гальванодинамическом режиме (ГДР) является постановка граничного условия для уравнения Пуассона, зависящего не от скачка потенциала, как для потенциодинамического режима, а от заданного тока. В главах 2 и 3 выводятся такие граничные условия. При этом допущены ошибки, делающие полученные модели некорректными.

Рассмотрим сделанные ошибки на примере задачи из п. 2.1. Из формулы для плотности полного тока i_{tot} (нумерация формул взята из диссертации):

$$i_{tot} = i_F + i_c, \tag{2.4}$$

где $i_F = z_1 j_1 + z_2 j_2$ – плотность тока проводимости, $i_c = -\varepsilon\, \partial^2\varphi/\partial x \partial t$ – плотность тока смещения, с учетом принятого автором условия:

$$i_c(1,t) = 0 \text{ при } x = 1, \tag{1}$$

вытекает равенство (здесь $i(t)$ – заданное граничное значение плотности полного тока):

$$i_{tot}(t) = i(t) = z_1 j_1(1,t) + z_2 j_2(1,t). \tag{2}$$

Из равенства (2) следует эквивалентное ему равенство, которое в диссертации называется гальванодинамическим граничным условием (ГДГУ):

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x}(1,t) = -\frac{i(t) + z_1 D_1 \frac{\partial C_1}{\partial x} + z_2 D_2 \frac{\partial C_2}{\partial x}}{z_1^2 D_1 C_1 + z_2^2 D_2 C_2}(1,t). \tag{2.11}$$

Теперь автор считает задачу поставленной, так как вместе с уравнениями (2.6)-(2.8) имеет граничные условия для потенциала – (2.11) и

$$\varphi(0,t) = 0, \tag{2.12}$$

для концентраций – два граничных условия при $x = 0$:

$$C_n(0,t) = 1,\ n = 1,2 \tag{2.13}$$

и два граничных условия при $x = 1$:

$$C_1(1,t) = C_{1,K} \tag{2.14}$$

и

$$j_2(1,t) = \left(-D_2\frac{\partial C_2}{\partial x} - z_2 D_2 C_2 \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)(1,t) = T_{2K} i(t)/z_2. \tag{2.15}$$

Замечания

1. Из равенства (2), равносильного ГДГУ (2.11), с учетом (2.15) получим равенство:

$$j_1(1,t) = \left(-D_1\frac{\partial C_1}{\partial x} - z_1 D_1 C_1 \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)(1,t) = (1 - T_{2K}) i(t)/z_1. \tag{3}$$

Таким образом, ГДГУ (2.11) с учетом граничного условия (2.15) – не "новое" условие, а иная запись граничного условия для потока (3).

2. Из условия (1) следует, что $\partial^2\varphi/\partial x\partial t(1,t) = 0$, откуда в рамках уровня строгости, принятого в диссертации, получаем

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x}(1,t) = \frac{\partial \varphi}{\partial x}(1,0). \tag{4}$$

Обычно считают, что при $t = 0$ ток в системе отсутствует, поэтому правую часть в (4) принимают равной нулю.

Итак, с учетом условия (1) и ГДГУ (2.11) получаем для уравнений (2.6)-(2.8) следующие граничные условия:

– для потенциала – (2.12) и (4);

– для концентраций – при $x = 0$ (2.13), при $x = 1$ (2.14), (2.15) и равносильное ГДГУ (2.11) условие (3), которое с учетом (4) принимает вид:

$$-D_1\frac{\partial C_1}{\partial x}(1,t) - z_1 D_1 C_1(1,t)\frac{\partial \varphi}{\partial x}(1,0) = (1 - T_{2K}) i(t)/z_1.$$

Последнее равенство вместе с (2.14) дает при $x = 1$ два граничных условия для C_1. Это делает задачу переопределенной, т.е. некорректной.

Вывод : математические модели с построенными в главах 2 и 3 гальванодинамическими граничными условиями некорректны, что делает их неприменимыми для моделирования гальванодинамического режима.

2. Методы решения Некорректность математических моделей, построенных в главах 2-3 с использованием ГДГУ, лишает смысла разработку методов их решения. Однако, приведенные в главе 4 методы формально могут применяться и для других моделей переноса ионов. Покажем, что при построении этих методов допущены ошибки, делающие их некорректными.

2.1. Методы решения одномерных задач

В п. 4.2 приведены методы решения одномерных задач переноса ионов, состоящие в замене стационарного уравнения Пуассона для потенциала φ на нестационарное уравнение для напряженности E. Для решения задач с граничными условиями 1-го рода для уравнения Пуассона применение этого метода некорректно, потому что вычисленное значение скачка потенциала $d_\varphi = -\int_0^\delta E(x,t)\,dx$ (формула (4.26)), вообще говоря, не равно скачку потенциала исходной задачи $\varphi(\delta, t)$, следовательно, преобразованная задача не эквивалентна исходной.

Кроме того, проблемой является корректное задание начальных условий $E(x,0)$. Автор ошибается даже в простых случаях: так, задание начального условия (4.44) формулой $E(x,0) = \frac{\partial\varphi}{\partial x}(x,0)$ некорректно, так как заданная в (4.37) функция $\varphi(x,0)$ не является дифференцируемой по x.

Вывод: в случае задания традиционных граничных условий применение предложенного метода не позволяет найти решение исходной задачи.

2.2. Методы решения двумерных задач

В пп. 4.3 и 4.4 для численного решения двумерных задач предлагается использовать "метод функции тока электрического тока". При этом допущены грубые ошибки, делающие применение этих методов некорректным.

Для использования в алгоритме вводится функция тока η, для отыскания которой необходимо решить уравнение Пуассона (4.50) с граничными условиями, удовлетворяющими условиям:

$$\frac{1}{L}\int_0^L i_{tot\ x}(0,y,t)\,dy = i(t), \quad \frac{1}{L}\int_0^L i_{tot\ x}(H,y,t)\,dy = i(t), \tag{4.48}$$

$$i_{tot\ x} = \frac{\partial\eta}{\partial y}, \tag{4.49}$$

$0 \le x \le H,\ 0 \le y \le L.$

С учетом (4.49) перепишем равенства (4.48) в более удобном виде:

$$\frac{1}{L}\int_0^L \frac{\partial\eta}{\partial y}(0,y,t)\,dy = i(t), \quad \frac{1}{L}\int_0^L \frac{\partial\eta}{\partial y}(H,y,t)\,dy = i(t). \tag{5}$$

Автор не замечает, что условиями (5) функция η не определяется однозначно. Например, граничные условия

$$\frac{\partial\eta}{\partial x}(0,y,t) = 0, \quad \frac{\partial\eta}{\partial x}(H,y,t) = 0,$$
$$\eta(0,0,t) = a, \quad \eta(0,L,t) = a + i(t)L, \quad \eta(H,0,t) = b, \quad \eta(H,L,t) = b + i(t)L$$

удовлетворяют (5) при любых a и b. Таким образом, алгоритм численного решения, приведенный в п. 4.3 (стр. 161), при разном допустимом выборе граничных условий для η будет приводить к различным результатам, что делает его применение некорректным.

Предлагаемый в п. 4.4 алгоритм отличается от случая п. 4.3 заменой уравнения Пуассона для потенциала φ нестационарным уравнением для напряженности E. Применение в алгоритме функции η делает его некорректным.

Вывод. ГДГУ, предлагаемые в главах 2 и 3 диссертации, приводят к серьезным модельным противоречиям, что делает их непригодными для моделирования переноса ионов в гальванодинамическом режиме.

В главе 4 приведены алгоритмы решения как одномерных (п. 4.2), так и двумерных (пп. 4.3 и 4.4) задач с обычными граничными условиями и с ГДГУ. При построении этих алгоритмов автором допущены грубые просчеты, не позволяющие найти решение исходной задачи.

Программный комплекс (глава 5) содержит одну программу для решения одномерных задач с ГДГУ и две для решения двумерных задач. Как следует из описания этих программ, все они основаны на ошибочных алгоритмах, приведенных в пп. 4.2, 4.3 и 4.4 главы 4, что лишает применение этих программ смысла.

Считаю, что диссертационная работа Узденовой Аминат Магометовны "Математическое моделирование сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме" не удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук.

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

Подпись Дробботенко Михаила Ивановича заверяю
Зам. ГК по АСУ
(совмещ. Руководителя ОП в г. Краснодар
пр. от 07.10.2021 № 833-к) — Н.Д. 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