



**Уральский
федеральный
университет**

имени первого Президента
России Б.Н.Ельцина

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (УрФУ)

ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002, тел.: +7 (343) 375-45-07
контакт-центр: +7 (343) 375-44-44, 8-800-100-50-44 (звонок бесплатный)
e-mail: rector@urfu.ru, www.urfu.ru
ОКПО 02069208, ОГРН 1026604939855, ИНН/КПП 6660003190/667001001

13.09.2024 № 01.09-07/755

На № _____ от _____

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по науке федерального
государственного автономного
образовательного учреждения высшего
образования «Уральский федеральный
университет имени первого Президента
России Б.Н. Ельцина» доктор физико-
математических наук, доцент

Германенко А.В.

2024 г.



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертацию Узденовой Аминат Магоматовны

**«Математическое моделирование сверхпределного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме»,
представленную на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности**

1.2.2. – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Актуальность темы диссертационной работы

Успешное развитие электромембранных технологий невозможно без теоретического анализа и глубокого понимания процессов переноса ионов. Интенсивно ведутся работы по математическому моделированию сверхпределного переноса ионов, так как с ним связывают возможности повышения эффективности работы различных электромембранных систем. Современные теоретические работы по изучению сверхпределного переноса ионов преимущественно рассматривают потенциодинамический режим, удобный для моделирования на основе системы уравнений

Нернста – Планка – Пуассона и Навье – Стокса. При этом в экспериментальных исследованиях и практике эксплуатации мембранных систем широко используется гальванодинамический режим, когда задается плотность протекающего тока. Поэтому методы математического моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме, методы и алгоритмы численного решения краевых задач, соответствующих этим моделям, а также создание комплекса программ для проведения вычислительных экспериментов по расчёту характеристик переноса ионов, являются **актуальными** направлениями исследований.

Актуальность темы диссертации А.М. Узденовой подтверждается поддержкой грантами Российского научного фонда (проекты №23-29-00534 «Новый подход к моделированию гальванодинамического режима массопереноса в электромембранных системах», №14-19-00401 «Сопряжённый перенос ионов и воды в растворе у поверхности ионообменной мембраны. Влияние свойств поверхности мембраны и токового режима») и Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 18-38-00572 «Теоретическое и экспериментальное сопоставительное исследование потенциодинамического и гальванодинамического режимов массопереноса в мембранных системах», № 18-58-16004 «Влияние параметров пульсирующего электрического поля на скорость массопереноса в мембранных системах», №14-08-31472 «Теоретическое и экспериментальное исследования процесса электродиализного обессоливания в условиях совместного действия гравитационной, вынужденной и электроконвекции», №13-08-96525 «Создание новых математических методов для моделирования сверхпредельного переноса в 2D проточной электродиализной ячейке с учётом электроконвекции и тонкого строения области пространственного заряда на микро- и нанометрическом уровне» и другие).

Научная новизна исследования и полученных результатов

В диссертационной работе предложен новый метод математического моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме на основе краевых задач для системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона и Навье – Стокса, позволяющий учитывать формирование расширенной области пространственного заряда (ОПЗ), развитие электроконвекции и реакцию диссоциации/рекомбинации молекул воды.

Предложены оригинальные методы и алгоритмы численного решения краевых задач математических моделей переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме: 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 переноса ионов и воды в мембранных системах в гальванодинамическом режиме с возможностью выбора размерности рассматриваемой области (одномерного или двумерного сечения мембранной системы), ее структуры (диффузионный слой у поверхности ионообменной мембраны или канал обессоливания) и учитываемых механизмов сверхпредельного переноса ионов (развитие электроконвекции и/или реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды). С использованием комплекса программ впервые дана теоретическая интерпретация хронопотенциограмм и вольтамперных характеристик мембранных систем с учетом влияния электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды в гальванодинамическом режиме.

Значимость полученных результатов

Научная ценность результатов работы Узденовой А.М. заключается в разработке методов математического моделирования сверхпредельного переноса ионов, методов численного и численно-аналитического решения краевых задач моделей, их программной реализации, которые могут использоваться при математическом моделировании и теоретических исследованиях переноса ионов в мембранных, нано- и микрофлюидных устройствах. Предложенный численно-аналитический метод решения краевых задач моделей переноса ионов, может быть применен для решения краевых задач в гетерогенных системах, характеризующихся пограничными областями с большими градиентами рассчитываемых величин. Практическая значимость результатов работы состоит в том, что они могут использоваться научно-исследовательскими группами, проектными организациями для повышения эффективности электродиализных систем, при разработке новых конструкций этих систем, нано- и микрофлюидных устройств и выборе параметров их функционирования. Подтверждением высокой значимости диссертации является то, что ее результаты уже использовались в научных исследованиях (о чем свидетельствует акт научно-образовательной лаборатории «Ионообменные мембраны и процессы» КубГУ), в учебной (акты об использовании при обучении студентов физико-математического факультета КЧГУ, студентов факультета компьютерных технологий и прикладной математики КубГУ) и производственной (акт ЗАО «Карачаевский пивзавод») деятельности.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертационной работы. Результаты и научные выводы исследования, полученные в диссертационной работе, могут быть использованы в организациях, занимающихся математическим моделированием и экспериментальными исследованиями мембранных систем: Институтом вычислительного моделирования СО РАН, Кубанском государственном университете, Воронежском государственном университете, ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, ИПХФ РАН, РХТУ им. Д.И. Менделеева, ИНХС им. А.В.

Топчиева РАН, ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, Уральском федеральном университете и других. Полученные Узденовой А.М. результаты могут быть использованы для повышения эффективности электромембранных систем путем оптимизации электрического режима научными организациями, а также предприятиями, работающими в области разработки новых мембранных систем.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций обеспечивается корректностью разработанных математических моделей, их соответствием исследуемым процессам, теоретическим представлениям в предметной области, а также верификацией на экспериментальных результатах различных исследовательских групп, сравнением с результатами других авторов, когда это возможно. Результаты многократно обсуждались на ведущих российских и международных конференциях.

Структура и основная характеристика диссертационной работы

Диссертационная работа Узденовой А.М., выполненная в Карачаево-Черкесском государственном университете имени У.Д. Алиева на кафедре информатики и вычислительной математики, по содержанию и структуре отвечает научно-квалификационной работе на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Работа состоит из введения, пяти глав основного текста, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка литературы и приложений. Полный объем диссертации составляет 244 страницы, включая 69 рисунков и 11 таблиц. Библиографический список содержит 201 наименование. В приложениях приведены сведения об использовании результатов исследования и свидетельства о регистрации программ для ЭВМ.

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи работы, представлены выносимые на защиту положения, научная новизна, теоретическая и практическая значимость и апробация работы.

Первая глава диссертации представляет собой обзор научной литературы, включающий исследования и результаты ученых, работающих в области создания математических моделей сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах. Показано, что математическое моделирование переноса ионов в мембранных системах для разбавленных растворов электролитов в узких каналах должно учитывать развитие таких механизмов сверхпредельного переноса, как электроконвекция и реакция диссоциации/рекомбинации молекул воды. Показано, что математическое моделирование таких процессов представляет собой задачу повышенной сложности, так как предполагает поиск численного решения одновременно в макроскопической (толщина диффузионного слоя составляет несколько сотен микрометров для типичных мембранных систем) и микроскопической (толщина квазиравновесной части ОПЗ может быть порядка десятков нанометров) областях. Описаны существующие подходы теоретического анализа переноса ионов мембранных системах и показана необходимость разработки нового метода математического моделирования сверхпредельного переноса ионов в гальванодинамическом режиме.

Во второй главе работы представлены разработанные автором одномерные математические модели нестационарного переноса ионов в гальванодинамическом режиме. Математические модели сформулированы для диффузионного слоя у поверхности ионообменной мембраны и в сечении электродиализного канала обессоливания (образованном между анионо- и катионообменной мембранами) на основе краевых задач для системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона. Для моделирования гальванодинамического режима выведено граничное условие, связывающее производную потенциала и плотность протекающего тока. Верификация моделей выполнена сопоставлением результатов моделирования с экспериментальными хронопотенциограммами и аналитической оценкой переходного времени. Демонстрируются преимущества нового метода моделирования по сравнению с известными ранее. Детально

проанализированы результаты численного моделирования характеристик переноса ионов с учётом формирования расширенной ОПЗ и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды в гальванодинамическом режиме в одномерном случае.

В третьей главе представлены результаты исследований автора, целью которых являлось математическое моделирование сверхпредельного переноса ионов с учетом развития электроконвекции. Описан новый метод двумерного математического моделирования переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме на основе системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона и Навье – Стокса. Построены математические модели переноса ионов для двумерных сечений слоя раствора электролита у ионообменной мембраны и канала обессоливания с учётом формирования расширенной ОПЗ, развития электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды при сверхпредельных токах. Выполнена верификация моделей сопоставлением с экспериментальными измерениями хронопотенциограмм, аналитическими оценками предельной плотности тока и переходного времени. На основе результатов математического моделирования дана теоретическая интерпретация хронопотенциограмм и вольтамперных характеристик мембранных систем в гальванодинамическом режиме.

В четвертой главе автором изложены оригинальные методы и алгоритмы численного решения краевых задач моделей сверхпредельного переноса в гальванодинамическом режиме. Предложен гибридный численно-аналитический метод решения краевых задач, соответствующих математическим моделям переноса ионов на базе уравнений Нернста – Планка – Пуассона, основанный на сращивании численного решения модели переноса ионов в электронейтральной области и расширенной ОПЗ и аналитического решения в квазиравновесной ОПЗ. Показано, что данный метод позволяет находить численное решение краевой задачи при значениях начальной концентрации электролита,

соответствующих реальным значениям практики использования мембранных систем. Предложен новый метод численного решения краевых задач моделей переноса ионов в гальванодинамическом режиме на основе сочетания методов конечных элементов и последовательных приближений с разделением задачи на каждом временном шаге на отдельные подзадачи расчёта гидродинамической и электрохимической составляющих и последовательном их решении до выполнения некоторого условия остановки вычислений. Соискателем предложен оригинальный подход численного решения краевых задач математических моделей переноса в гальванодинамическом режиме на основе системы уравнений Нернста – Планка и напряженности электрического поля, который позволяет достичь требуемой точности при меньшем количестве элементов вычислительной сетки по сравнению с решением уравнения Пуассона для потенциала.

Пятая глава работы содержит сведения о составе и принципах построения комплекса проблемно ориентированных программ, созданных автором для моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме. Описано проектирование и реализация программ для одномерного и двумерного моделирования и анализа сверхпредельного переноса ионов. Программы позволяют выполнять вычислительные эксперименты по расчёту концентраций ионов, электрического потенциала, течения раствора электролита, хронопотенциограмм и других характеристик переноса ионов с учётом формирования расширенной ОПЗ, развития электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды в гальванодинамическом режиме.

В заключении диссертационной работы подведен итог выполненных исследований, сформулированы основные выводы, полностью соответствующие поставленным целям и задачам, а также изложены перспективы дальнейшего развития исследований.

Вместе с тем, в диссертационной работе Узденовой А.М. имеются **дискуссионные положения и вопросы:**

1. В диссертации разработана иерархическая система математических моделей сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах для одномерного и двумерного сечений. Масштабирование предлагаемых математических моделей и методов их численного решения проблемы в трехмерном случае не освещено в работе.

2. В параграфе 2.2 построена математическая модель нестационарного переноса ионов в одномерном сечении электродиализного канала обессоливания в гальванодинамическом режиме. При этом предполагается, что слой раствора электролита покоится, хотя в практике эксплуатации электродиализных аппаратов, как правило, он прокачивается с некоторой скоростью. Следует детальнее уточнить цель данного предположения.

3. При реализации численного решения краевых задач предлагаемых математических моделей используется метод конечных элементов. В работе недостаточно внимания уделяется обоснованию выбора этого метода.

4. Проектирование и реализация комплекса проблемно ориентированных программ для моделирования сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме достаточно подробно описано в работе, но требования комплекса к аппаратной платформе не отражены.

Отмеченные замечания не являются критическими, не снижают научной ценности результатов диссертации и не подвергают сомнению выводы представленной диссертационной работы.

Заключение

Диссертация Узденовой А.М. выполнена в рамках паспорта научной специальности 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (физико-математические науки) в части 1. «Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений (физико-математические науки)», в части 3. «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента», а также части 8.

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

Диссертация написана в научном стиле и аккуратно оформлена. Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные автором, теоретически обоснованы и не вызывают сомнений. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Положения, выносимые на защиту, и основные результаты рецензируемой работы достаточно полно отражены в 29 статьях в авторитетных профильных журналах, рекомендованных ВАК, получено 3 свидетельства о регистрации программы для ЭВМ. Материалы диссертации доложены на целом ряде профильных международных и всероссийских конференций.

Диссертационная работа Узденовой Аминат Магоматовны «Математическое моделирование сверхпредельного переноса ионов в мембранных системах в гальванодинамическом режиме» является завершенной 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, численных методов и комплексов программ. В целом работа выполнена на высоком научном уровне и удовлетворяет критериям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. N 842 (со всеми последующими изменениями), а ее автор – Узденова Аминат Магоматовна – заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.2.2. – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертационная работа Узденовой А.М. и отзыв о ней заслушаны и обсуждены на заседании кафедры информационных технологий и систем управления федерального государственного автономного образовательного

учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» 12.09.2024 года, протокол №9.

Отзыв составил

Профессор кафедры информационных технологий и систем управления института радиоэлектроники и информационных технологий – РтФ Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
доктор физико-математических наук, доцент



Просвирыков Евгений Юрьевич
12 сентября 2024 г.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина». Почтовый адрес: 620002, Свердловская область, г. Екатеринбург, ул. Мира, д.19. Телефон: +7 (343) 375-44-44. Эл. почта: contact@urfu.ru

Я, Просвирыков Евгений Юрьевич, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета 24.2.320.11, и их дальнейшую обработку.



Просвирыков Евгений Юрьевич
12 сентября 2024 г.

ПОДПИСЬ
ЗАВЕРЯЮ.

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ УРФУ
МОРОЗОВА В.А.

Просвирыков Е.Ю.

