



УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор РТУ МИРЭА

д. х. н., профессор

Н. И. Прокопов

«25» сентября 2024 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Казаковцевой Екатерины Васильевны на тему «Математическое моделирование переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

1. Оценка актуальности темы диссертации

Опреснение и очистка воды в настоящий момент представляют собой важную задачу, что подтверждается большим объемом исследований, посвященных теоретическому и экспериментальному изучению переноса ионов в электрохимических ячейках и электродиализных аппаратах.

В экспериментальных исследованиях одним из наиболее применяемых является метод вращающегося мембранного диска (ВМД) благодаря его свойству равномерного доступа к поверхности мембраны, согласно теории Левича. Однако при высоких плотностях тока (сверхпредельный режим) возникают результаты, противоречащие теории Левича, что ограничивает использование этого метода. На практике системы с осевой симметрией, в том числе с ВМД работают в сверхпредельных токовых режимах, обусловленных электроконвекцией, тогда как теории переноса ионов разработаны для допредельных режимов, опираясь на математические модели, предполагающие локальную электронейтральность, и, соответственно, не учитывающая электроконвекцию.

Таким образом, возникает противоречие между теорией и практикой. Решение этого противоречия требует развития теории переноса ионов при сверхпредельных плотностях тока с использованием методов математического моделирования. Поэтому проблема математического моделирования переноса ионов с учетом электроконвекции в электромембранных системах с осевой симметрией является важной и актуальной. В диссертации предлагается математическая модель переноса ионов с учетом электроконвекции в виде краевой задачи для системы трехмерных уравнений Навье – Стокса (НС) и Нернста – Планка – Пуассона (НПП). Наличие осевой симметрии позволила в диссертации перейти от я трехмерных математических моделей к двумерным в виде краевых задач для системы НС и НПП в цилиндрической системе координат. Соответственно, актуальной проблемой является разработка методов для аналитического и численного решения этих краевых задач и создание программного комплекса для вычислительных экспериментов и анализа переноса ионов в электромембранных системах с осевой симметрией.

Использование нейронных сетей в различных областях позволяет сократить время выполнения многих операций. Поскольку решение одной краевой задачи может занимать от нескольких часов до недели, то становится актуальным применение нейронных сетей, которые обучаются на малых выборках данных и обладают той же точностью, но требуют гораздо меньше вычислительных ресурсов и времени. В диссертации были разработаны нейронные сети для вычисления скачка потенциала, при котором начинается электроконвекция, а также для определения толщины диффузионного слоя в системах с ВМД.

2. Оценка содержания диссертационной работы

Во введении обосновывается актуальность темы диссертации, определены цель, объект, предмет, задачи диссертационного исследования, сформулированы основные положения, выносимые на защиту; раскрыта научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, приведены сведения об апробации и внедрении результатов исследования.

В первой главе проанализированы математические модели переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией, в том числе математические модели в системах с вращающейся дисковой мембраной (ВДМ) и магнитной мешалкой. В первой главе сформулировано базовая математическая модель переноса ионов соли в системах с ВДМ, осуществлен

вывод формул для электрической силы и вольтамперной характеристики в цилиндрической системе координат.

Во второй главе рассмотрен вывод иерархической системы математических моделей переноса ионов соли в ЭМС с осевой симметрией с учетом пространственного заряда и электроконвекции, включающий переход к безразмерной форме системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона и Навье – Стокса в цилиндрической системе координат и расщепление нестационарной системы уравнений НПП в цилиндрической системе координат. Полученная иерархическая система содержит следующие модели: общая модель с расщеплением (ОМР), модель без начального пограничного слоя (БНПС), модель в некотором приближении обобщения закона Ома в цилиндрических координатах (ЗОМ ЦК).

Третья глава посвящена численным методам решения краевых задач математических моделей. Предложен алгоритм численного решения краевой задачи базовой модели с ВМД и перечислены достоинства и ограничения в применении данного алгоритма. Для преодоления ограничений предложен новый гибридный численно-аналитический метод решения краевой задачи базовой модели.

В четвертой главе описан комплекс программ для вычислительных экспериментов и анализа процесса переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией, состоящий из следующих программ: для решения задач переноса в мембранных системах с осевой симметрией гибридным численно-аналитическим методом; для переноса ионов соли с учётом пространственного заряда в мембранных системах с осевой симметрией; для численного анализа переноса ионов соли в электромембранных системах в модели без ОВК; нейронной сети для определения скачка потенциала, при котором начинается электроконвекция в системе с ВМД; нейронной сети для определения толщины диффузионного слоя; программы для численного анализа модели переноса симметричного бинарного электролита в модели ЗОМ ЦК.

В заключении приведены основные результаты диссертационной работы.

3. Научная новизна

Следующие результаты, представленные в диссертации, теоретически обоснованы и являются новыми.

1. Базовая математическая модель переноса ионов соли в ячейке с вращающейся дисковой катионообменной мембраной при сверхпредельных

токовых режимах, с учетом электроконвекции в виде краевой задачи для связанной системы уравнений НС и НПП в цилиндрической системе координат.

2. Метод расщепления связанной системы уравнений НС и НПП в цилиндрической системе координат, который является новым методом математического моделирования.

3. Новая иерархическая система математических моделей электроконвекции в цилиндрической системе координат: общая модель с расщеплением, модель без начального пограничного слоя, модель электроконвекции в некотором приближении обобщения закона Ома в цилиндрических координатах.

4. Новое уравнение для общей плотности тока, моделирующее, совместно с системой уравнений с расщеплением, электроконвекцию в ЭМС с осевой симметрией.

5. Алгоритм численного решения краевой задачи базовой модели, заключающийся 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 остановки.

6. Новый гибридный численно-аналитический метод, заключающийся в сращивании решения в области возрастания катионов (ОВК) и оставшейся основной части области (ОЧО), в ОЧО решение находится численно, а в ОВК – аналитически. Сращивание численного и аналитического решений в допредельном и сверхпредельном случае осуществляется по разным формулам, так как в допредельном режиме есть только ОЧО и квазиравновесная ОПЗ. При этом в сверхпредельном случае кроме квазиравновесной ОПЗ образуется также расширенная ОПЗ, поэтому сращивание решения в этой области с решением в квазиравновесной области осуществляется с помощью формул для напряженности, а решение в расширенной области с ОЧО сращивается по концентрации.

7. Программный комплекс «Моделирование переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией», позволяющий проводить вычислительные эксперименты и анализ переноса ионов соли в электромембранных системах с осевой симметрией, включая системы с вращающимся мембранным диском и прогнозировать скачок потенциала, при

котором начинается электроконвекция, а также прогнозировать толщину диффузионного слоя в системах с ВМД.

8. Разработаны нейронные сети, использующиеся как инструмент для прогнозирования скачка потенциала, при котором начинается электроконвекция, и толщины диффузионного слоя.

4. Теоретическая значимость и практическая ценность

Теоретическая значимость результатов диссертационной работы заключается в предложенном методе расщепления системы уравнений НПП и НС в цилиндрической системе координат, а также гибридном численно-аналитическом методе решения краевых задач, которые могут использоваться при математическом моделировании в других задачах переноса ионов в ЭМС и решении краевых задач с пограничными слоями.

Практическую значимость имеют предложенные упрощённые математические модели: ОМР, БНПС, ЗОМ ЦК, 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 может использоваться 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. Практическая ценность подтверждена внедрением в работе ООО «Инновационное предприятие «Мембранная технология»», а также в учебном процессе ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» и использованием при выполнении научных исследований по грантам РФФИ № 13-08-00464а, № 13-08-96519 *p_yog_a*, № 16-08-00128а, № 18-58-16003 *ИЦНИЛ_a* и проекта РНФ №. 24-19-00648.

5. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, их достоверность и новизна

Научные положения и результаты диссертационной работы обоснованы, так как они основаны на законах сохранения, применения строгих математических методов, опубликованы в авторитетных научных изданиях,

подтверждены сравнением с экспериментальными данными, с результатами других авторов, когда это возможно.

Выводы, и рекомендации, выполненные по главам, изложены логично и обоснованно. Они следуют из сравнительного анализа полученных в диссертации результатов и современных результатов отечественных и зарубежных ученых по исследуемой проблеме. Автор обосновал при этом собственную позицию на исследуемую проблему.

Достоверность выводов и результатов подтверждается корректным использованием математических методов и моделей, проведением адекватных теоретических исследований, согласованием теоретических результатов с результатами экспериментов в тех случаях, когда это было возможно, положительной апробацией результатов на конференциях и семинарах, их непротиворечивостью с результатами, полученными другими авторами.

В целом обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, достоверность и научная новизна полученных результатов не вызывают сомнений.

6. Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации.

Целесообразно продолжить работу по развитию теории переноса ионов в ЭМС с осевой симметрией с учётом диссоциации/рекомбинации молекул воды, для тернарного электролита, а также выполнить построение вольтамперной характеристики по формуле, выведенной в диссертации.

Рекомендуется использовать результаты диссертации 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, а также для нахождения концентраций и напряженности при реальных значениях скачка потенциала, угловой скорости и начальной концентрации

Результаты могут быть внедрены в химических лабораториях, научно-исследовательских институтах и коммерческих компаниях, занимающихся проектированием электромембранных систем очистки воды с осевой симметрией.

7. Замечания по диссертационной работе

1) В п. 3.3.3 встречаются z_m и \bar{z}_m , это разные величины или одна и та же?

2) Не описано поведение программы «Hybrid_method_for_VMD» при выборе сначала модели без ОВК или гибридной модели, без предварительного расчёта базовой модели.

3) В заключении было бы целесообразно помимо результатов диссертационной работы привести также некоторые выводы по результатам проделанной работы.

Указанные замечания не влияют на общую положительную оценку результатов диссертационной работы.

8. Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней

Диссертация Казаковцевой Е.В., является завершённой научно-исследовательской работой. Она обладает необходимым внутренним единством, логично и обоснованно приводящем к достижению сформулированной цели. Структура и содержание работы, состоящей из введения, описания глав, заключения, библиографического списка, списка сокращений и приложений дают полное представление о выполненных исследованиях и полученных результатах. Оформление диссертации отвечает требованиям к работам, рекомендуемым к открытой печати.

В автореферате представлены основные результаты, полученные в диссертации, дано краткое изложение содержания всех ее разделов, отражена актуальность работы, ее цель, научная новизна, практическая ценность, достоверность результатов и их апробация.

Диссертация соответствует паспорту научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, в части п.1, 2, 3 и 8 Паспорта специальности: «1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений», «2. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий», «3. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента», «8. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента».

Диссертация отвечает требованиям п. 9 Положения ВАК РФ о порядке присуждения ученых степеней, поскольку является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение следующих научных задач, имеющих значение для развития соответствующей отрасли знаний: 1) математическое моделирование переноса ионов соли с учетом электроконвекции в ЭМС с осевой симметрией; 2) разработка методов для аналитического и численного решения соответствующих краевых задач; 3) разработка комплекса программ для вычислительных экспериментов и анализа переноса ионов соли в ЭМС с осевой симметрией.

Диссертация отвечает всем требованиям, а ее автор, Е.В. Казаковцева, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертационная работа рассмотрена и обсуждена на заседании кафедры информационных технологий (протокол № 2 от 10 сентября 2024 года).

**Зав. кафедрой
информационных технологий
филиала РТУ МИРЭА в г. Ставрополе**

д.ф.-м.н., доцент



Чеканов Владимир Сергеевич

Филиал федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет» в г. Ставрополе
355035, Ставропольский край, Ставрополь г., Кулакова проспект, дом № 8, квартал 601
тел. +7 (8652) 56-45-46, e-mail: stavropol@mirea.ru,
адрес официального сайта: <https://stavropol.mirea.ru/>

Подпись Чеканова В.С. заверяю:

