

Математическое моделирование влияния реакции диссоциации / рекомбинации на перенос ионов соли (грант РФФИ 19-38-90314 Аспиранты)

Большая часть водных ресурсов на Земле загрязнена. Из-за большого разнообразия сточных вод существуют различные способы их очистки. Одним из самых эффективных и экологичных методов очистки является электродиализ (ЭД) – процесс изменения концентрации электролита в растворе под действием электрического тока. Одним из способов повышения эффективности ЭД является использование интенсивных токовых режимов (выше предельного диффузионного тока). В этих условиях на межфазных границах мембран и раствора в каналах обессоливания электродиализной ячейки происходит реакция диссоциации/рекомбинации молекул воды, которая сопровождается выделением и поглощением тепла, что влияет на все физические свойства воды, а также ряд других явлений. Однако, процесс влияния реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды на перенос ионов соли изучен теоретически недостаточно полно. В связи с этим, разработка и модификация математических моделей, а также развитие теории переноса ионов в электромембранных системах (ЭМС) с учетом диссоциации/рекомбинации молекул воды, численных и асимптотических методов решения соответствующих краевых задач, является актуальной научной проблемой.

В ходе работы над вторым этапом реализации проекта разработаны новые и модифицированы существующие математические модели переноса ионов бинарной соли с учетом реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды в одномерном (1D) сечении канала обессоливания и двумерном (2D) канале обессоливания с учетом электроконвекции. В связи с многообразием 1D моделей построена иерархия соподчинения по свойствам уравнений, стационарности, области исследования, явлениям и свойствам раствора. Проведены краткий обзор, сравнение и анализ полученных результатов численного и асимптотического решений краевых задач соответствующих математических моделей из предложенной иерархии. В ходе исследования обнаружено новое явление в ЭМС – пробой пространственного заряда, установлены причины образования и свойства солитоноподобных волн заряда при сверхпредельных токовых режимах. Определены зависимости волн заряда от коэффициентов диффузии, начальной и граничной концентрации. Изучены особенности переноса ионов на каждом этапе пробоя. Определено влияние некаталитической реакции

диссоциации/рекомбинации молекул воды на перенос ионов соли в исследуемых моделях и электроконвекцию в 2D моделях.

Показано, что локальный максимум пространственного заряда, в диффузионном слое двигается как одиночная солитоноподобная волна вглубь раствора, медленно меняя свои размеры и форму. В сечении канала обессоливания волны пространственного заряда разных знаков начинают взаимодействовать, что приводит к новому эффекту, а именно эффекту разряда (пробоя) пространственного заряда. Изучены фундаментальные закономерности этого явления (рис. 1):

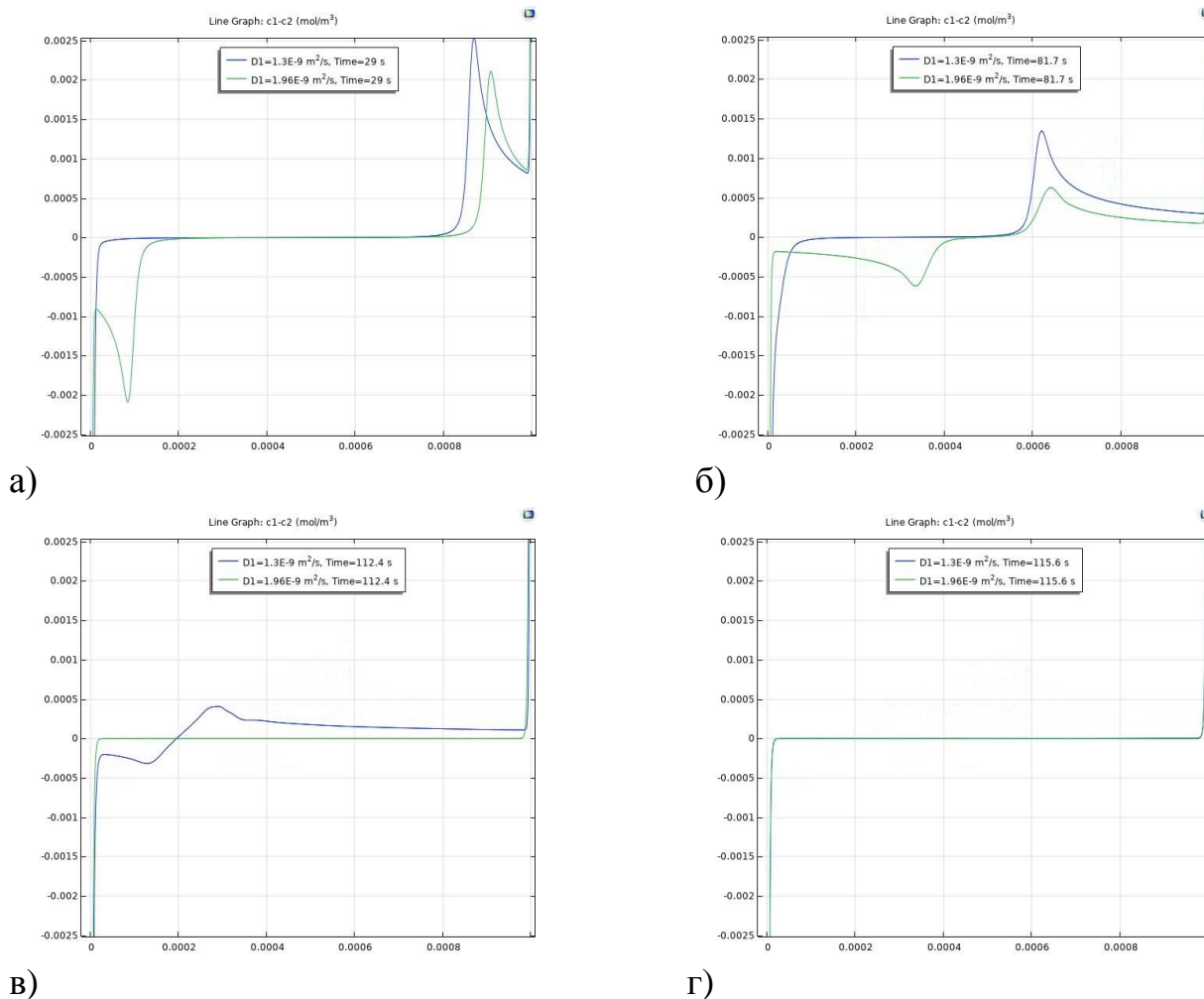


Рисунок 1 – динамика пространственного заряда: Синие линии – соответствуют моделированию процесса с использованием раствора NaCl, а зеленые – KCl: а) образование локальных максимумов, б) состояние перед пробоем, в) г) после пробоя: KCl и NaCl. Рисунки взяты из видео <http://amd-kubsu.ru/download/Projects/c1-c2.wmv>

Разработаны программы для ЭВМ 1D моделирования переноса ионов бинарной соли как в диффузионном слое, так и в сечении канала обессоливания. Эти приложения могут быть использованы для расчетов и оптимизации режимов работы электромембранных аппаратов в инженерной практике, в научных исследованиях и при обучении студентов.