

«Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті» коммерциялық емес
акционерлік қоғамы

ӘОЖ 620.9

Қолжазба құқығында

ҚАЛАСОВ НҰРДӘУЛЕТ БОЛАТҰЛЫ

«ЖЫЛУ ЭНЕРГЕТИКАЛЫҚ ҚОНДЫРҒЫЛАРДА ҚОЛДАНЫЛАТЫН
ОТЫНДЫ АЛУ ҮШІН ИНТЕГРАЛДЫҚ МЕМБРАНАЛЫҚ
БИОРЕАКТОРЛАРДАҒЫ ГАЗДАРДЫ БӨЛУ»

6D071700 – Жылу энергетикасы

Философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін дайындалған диссертация

Ғылыми кеңесшілер:

Манатбаев Р.К.

т.ғ.к., қауымдастырылған
профессор, әл-Фараби
атындағы ҚҰУ

Daniela Dzhonova

PhD, Assoc. Professor, Institute
of Chemical Engineering, BAS,
Sofia, Bulgaria

Қазақстан Республикасы
Алматы қаласы, 2023 ж.

ҚЫСҚАРТУЛАР МЕН БЕЛГІЛЕНУЛЕР

- CFD – есептеу гидродинамикасы;
МБР – мембраналық биореактор;
ADM – анаэробты ашыту моделі;
SAPO 34 – силикоалюмофосфатты цеолит;
AM2b – микробтық өнімдердің ерігіштік динамикасы бар AM2 моделі;
RANS – Рейнольдс бойынша орташаланған Навье-Стокс әдісі;
LES – үлкен құйынды модельдеу әдісі;
 ρ – тығыздық (кг/м³);
 P – қысым (Па);
 μ_f – сүзгіш тұтқырлығы (Па с);
 L_r – радиалды бағыттағы кеукті қабырғаның өткізгіштігі (м Па⁻¹ с⁻¹);
 L_z – осьтік бағыттағы кеукті қабырғаның өткізгіштігі (м Па⁻¹ с⁻¹);
 e – кеукті қабырғаның қалыңдығы (м);
 ΔP – трансмембраналық қысым (Па);
 u_0 – канал кірісіндегі газ ағынының жылдамдығы (м/с);
 ω_A – канал кірісіндегі көмір қышқыл газының массалық үлесі;
 L_V – мембрананың гидродинамикалық өткізгіштігі (м Па⁻¹ с⁻¹);
 $\omega_{i,p}$ – i ерітіндісінің пермеат ағынындағы массалық үлесі;
 $\omega_{i,w}$ – i ерітіндісінің мембрананың бетіндегі массалық үлесі;
 R_i – i ерітіндісінің ауытқуы;
 ΔP – осмостық қысымның айырымы (Па);
 η – еріткіштің динамикалық тұтқырлығы (Па с);
 R_M – таза мембрананың кедергісі;
 l – каналдың ұзындығы (мм);
 h – каналдың биіктігі (мм);
 D^* – ығысудан туындаған диффузия коэффициенті (м²/с);
 \widehat{D}_Φ – өлшемсіз диффузия коэффициенті;
 r_0 – мембраналық саңылаулардың орташа радиусы (мм);
 A_h – мембрананың гидравликалық өткізгіштігі (м Па⁻¹ с⁻¹);
 v_p – пермеат жылдамдығы (м/с);
 C_b және C_p – көлемдік концентрация мен ерітінді концентрациясы;
 C_w – қабылданбаған СО₂ үшін мембрана бетіндегі концентрация;
 D – ерітіндінің диффузия коэффициенті (м²/с);
 \bar{u} – көлденең ағынның орташа көлемдік жылдамдығы (м/с);
 u_{\max} – канал ортасындағы көлденең ағынның максималды жылдамдығы (м/с);
 $\dot{\gamma}_w$ – қабырғаның ығысу жылдамдығы;
 δ – концентрациялық поляризациялық шекаралық қабат қалыңдығы (мм);
Sh – Шервуд саны;

Re – Рейнольдс саны;
 Sc – Шмидт саны;
 Γ_{φ} – алмасу коэффициенті;
 k – турбулентті кинетикалық энергия;
 ε – турбулентті энергияның диссипация жылдамдығы;
 ω – меншікті диссипация жылдамдығы;
 τ – тангенциалды кернеу (Па);
 Ω – құйындылықтың абсолютті мәні;
 C – бинарлы қоспаның концентрациясы (моль/м³);
 C_a – "a" компонентінің концентрациясы (моль/м³);
 C_b – "b" компонентінің концентрациясы (моль/м³);
 J – бірлік аудандағы молярлық ағын;
 N – мольдік үлес;
 α – селективтілік.

МАЗМҰНЫ

КІРІСПЕ	5
1 МОДЕЛЬДЕУ ЖӘНЕ БАҚЫЛАУ АСПЕКТІЛЕРІНЕ АРНАЛҒАН ИНТЕГРАЛДЫҚ МЕМБРАНАЛЫҚ БИОРЕАКТОРЛАРҒА ШОЛУ ЖӘНЕ ОЛАРДЫҢ ЖАҒДАЙЫ	9
1.1 Циклдік экономикадағы анаэробты мембраналық биореакторлардың рөлі	9
1.2 Биологиялық процестер мен сүзу процестерін модельдеу	14
1.3 Су текті өндіру үшін интегралдық мембраналық биореакторларды қолдану	20
1.4 I тарау бойынша қорытынды	30
2 КЕУЕКТІ МЕМБРАНА АРҚЫЛЫ КӨЛДЕНЕҢ АҒЫННЫҢ НЕГІЗГІ ГИДРОДИНАМИКАЛЫҚ МОДЕЛІ	31
2.1 2D көлденең ағынның гидродинамикалық модель геометриясы, шекаралық және бастапқы шарттары	35
2.2 Мембрана бетінде концентрациялық поляризация әсерінің қосылуы	37
2.3 Мембраналық масса тасымалын болжау және масса тасымалдау коэффициентін анықтаудың аналитикалық әдісі	46
2.4 Бастапқы гидродинамикалық модельдің нәтижелері және оларды талқылау	51
2.5 II тарау бойынша қорытынды	56
3 АРАЛЫҚ БӨЛГІШТЕРМЕН ТОЛТЫРЫЛҒАН КЕУЕКТІ МЕМБРАНА АРҚЫЛЫ КӨЛДЕНЕҢ АҒЫННЫҢ ГИДРОДИНАМИКАЛЫҚ ЖӘНЕ МАССА ТАСЫМАЛДАУ МОДЕЛІ	58
3.1 Аралық бөлгіштермен толтырылған мембраналық каналдың геометриясы және есептеу торы	63
3.2 Аралық бөлгіштермен толтырылған көлденең ағынның гидродинамикалық және масса тасымалдау моделінің шекаралық және бастапқы шарттары	67
3.3 Аралық бөлгіштермен толтырылған көлденең ағынның гидродинамикалық және масса тасымалдау моделінің нәтижелері мен талқылаулары	70
3.4 III тарау бойынша қорытынды	77
ҚОРЫТЫНДЫ	78
ҚОЛДАНЫЛҒАН ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ	80

КІРІСПЕ

Зерттеу жұмысының жалпы сипаттамасы

Диссертациялық жұмыста сутекті өндіруге және бөлуге арналған интегралдық мембраналық биореактор зерттеледі. Сутек және көмірқышқыл газ қоспаларының мембраналық бөліну процесінің сандық зерттеу барысында, гидродинамикалық модельдердің негізгі жиынтығы сипатталады. Концентрациялық поляризация қабатының қалыңдығын басқару мақсатында мембраналық бөлу процесінде ламинарлы және турбулентті ағын режимдерінде ANSYS FLUENT бағдарламалық қамтамасыз ету пакетін пайдалану арқылы гидродинамикалық (CFD) модельдеудің нәтижелері көрсетіледі.

Зерттеу тақырыбының өзектілігі

XXI ғасырда жылу электр станциялар көмегімен энергия өндіру болашақта келесі себептер бойынша үлкен алаңдаушылық туғызады. Біріншіден, алдағы 50-70 жылда органикалық отын қорының, яғни, мұнай мен газдың таусылуы. Екіншіден, жылу электр станцияларының атмосфераға көмірқышқыл газын шығарудың және парниктік әсерді құрудың негізгі көзі болып табылуы. Үшіншіден, табиғи баланстың бұзылуы, бұған себеп қазба байлықтармен табиғи отынның өндірілуі болып табылады. XX ғасырда планетаның жер қойнауынан шамамен 500 млрд. тонна отын алынды, бұл жердің 10^3 массасын құрайды. Бұл болашақта парниктік әсермен қатар күтпеген салдарға әкелуі мүмкін. Энергияны тұтыну – төмендеу тенденциясын анықтамайды, керісінше, оны тұтыну жылдамдығы үнемі өсіп келеді.

Қазіргі уақытта өнеркәсіптің жаңа саласы - сутек энергетикасы мен оны өндіру технологиясы күш алып келеді. Өйткені, бұл қарапайым және жеңіл зат (отын) ретінде ғана емес, сонымен қатар көптеген технологиялық процестерде қажетті шикізат элементі ретінде де қолданыла алады.

Сутекті өндірудегі негізгі мәселе - технологиялық үнемдеу және өнімді шығару мәселесі. Қызықтыратын және перспективалы тәсілдердің бірі мембраналық технологияны және мембраналық биореактор процестерін қолдану болып табылады, бұл биоотын өндірісінің экономикасын айтарлықтай жақсартады.

Мембраналар арқылы бөлінуге деген қызығушылық тез өсуде, өйткені мембраналық процестер көптеген өнеркәсіптік қосымшаларда басқа бәсекелес технологиялардан техникалық және экономикалық жағынан жоғары екендігі белгілі болды. Бұл артықшылық мембраналық бөлу технологиясының көптеген артықшылықтарымен түсіндіріледі, оған төмен капиталды салымдар, орнатудың және пайдаланудың қарапайымдылығы мен жеңілдігі, техникалық қызмет көрсетудің төмен талаптары, жеңіл салмақ пен бос орын және жоғары технологиялық икемділік кіреді. Сонымен қатар, мембраналық бөлу қоспаларды қажет етпейді және оларды жоғарғы температурада жұмыс істейтін басқа термиялық бөлу процестерімен салыстырғанда төмен температурада жүргізуге болады.

Биологиялық жолмен сутек өндірісінің бір түрі – қараңғы ашыту. Қараңғы ашытуда бактериялар субстратқа әсер етіп, сутек түзеді. Қараңғы ашытуға арналған субстрат лигноцеллюлозды биомасса, өнеркәсіптік ағынды сулар, қант бар өсімдік қалдықтары және тұрмыстық қатты қалдықтар сияқты көмірсутекті материалдар болып табылады. Бірінші кезеңде биомассаны алдын ала өңдеу қараңғы ашытудың тиімділігіне үлкен әсер етеді.

Қараңғы ашыту нәтижесінде пайда болған сутек, негізінен H_2 (сутек) және CO_2 (көмірқышқыл газы) газ қоспасын және айтарлықтай мөлшерде ұшпа май қышқылдары бар сұйық ағынды суларды шығарады. Сондықтан өндіріс сатысынан кейінгі әдістер кем дегенде екі мақсатқа ие болуы керек:

- сутек газын отын элементтерінде тиімді бастапқы материал болу үшін тазарту керек;

- ағынды сулар қалдық және органикалық заттарға байланысты одан әрі өңдеуді немесе пайдалануды қажет етеді. Шын мәнінде, сутек сапасын жақсарту үшін CO_2 алынып, басқа биоөнімдерге айналдырылуы керек.

Зерттеу жұмысының мақсаты

Жылу энергетикалық қондырғысын экологиялық таза және жоғары калориялы отынмен қамтамасыз ету үшін, интегралдық мембраналық биореакторлардағы газдарды бөлу процесінің гидродинамикалық және масса тасымалдау моделін құрастыру.

Айтылған мақсаттарға жету үшін келесі **міндеттерді** шешу қажет:

1. Сутек және көмірқышқыл газдарының мембраналық бөліну процесінің гидродинамикалық модельдерін сипаттау;

2. Концентрациялық поляризацияның әсерін зерттеу үшін ламинарлық ағындағы мембраналық бөлудің негізгі гидродинамикалық моделін құру;

3. Гидродинамикалық модельді қолдана отырып, масса тасымалдау коэффициентін есептеу әдістемесін жасау;

4. Аралық бөлгіштердің әр түрлі орналасуына байланысты кеуекті мембрана арқылы көлденең ағынның гидродинамикалық және масса тасымалдау моделін құру.

Зерттеу нысаны

Газдарды бөлуге арналған спиральды оралған мембрана.

Зерттеу пәні

Интегралдық мембраналық биореакторлардағы газдарды бөлу кезінде пайда болатын концентрациялық поляризацияны зерттеуге арналған есептеу гидродинамикалық (CFD) моделі.

Зерттеу әдісі

Мембрана бетіндегі концентрациялық поляризация әсерін зерттеудің негізгі әдісі Ansys Fluent ортасында компьютерлік модельдеу болып табылады. Үзіліссіздік теңдеуі мен Навье-Стокс теңдеуін, импульстің сақталу заңын және тасымалдау теңдеулерін, ламинарлық және турбулентті ағын режимдеріне арналған есептеу әдістерін қолдана отырып, тұтқыр ағынның негізгі теңдеулерін теориялық тұрғыдан шешу үшін соңғы көлем әдісі қолданылады.

Қорғауға шығарылатын негізгі тұжырымдар:

1. Мембраналық канал кірісіндегі сутек және көмірқышқыл газ қоспаларының жылдамдығы артқан сайын тангенциалдық кернеу артады және концентрациялық поляризациялық шекаралық қабатының канал ұзындығы бойынша максималды қалыңдығы Рейнольдс санының $Re=200\div 800$ диапазонында $\delta(x)=0,293*10^{-3}$ м-ден $\delta(x)=0,152*10^{-3}$ м-ге дейін өзгереді.

2. Аралық бөлгіштерді ағын орағыта аққан кезде Шервуд санының орташа мәні аралық бөлгіш жоқ жағдайға қарағанда 1.5 есе жоғары, бұл аралық бөлгіштерді орағыта аққан кезде пайда болатын құйындардың әсерінен масса тасымалдаудың артатындығын көрсетеді.

3. Аралық бөлгіштердің мембраналық канал ортасында сызықтық орналасуы, қарастырылған Рейнольдс санының барлық мәндері ($Re=200\div 800$) үшін, аралық бөлгіштердің шахматты орналасуымен салыстырғанда жоғары масса тасымалын қамтамасыз етеді.

Диссертациялық жұмыстың ғылыми жаңалығы, алғаш рет:

1. Сутек және көмірқышқыл газ қоспаларының кеуекті мембрана арқылы көлденең ағынның ламинарлы режимде негізгі гидродинамикалық моделі жасалып, масса тасымалдау коэффициентінің аналитикалық есептеу әдістемесі әзірленді;

2. Аралық бөлгіштердің үш түрлі орналасу конфигурациясында сутек және көмірқышқыл газ қоспаларының кеуекті мембрана арқылы көлденең ағынның турбулентті режимде 2D гидродинамикалық және масса тасымалдау моделі жасалды;

3. Биосутек өндірісін жақсарту және оңтайландыру мақсатында мембраналық каналдағы аралық бөлгіштердің масса тасымалдауға әсері зерттелді.

Жұмыстың ғылыми-практикалық маңыздылығы

Диссертациялық жұмыста жасалған гидродинамикалық модельдеудің нәтижелері, экологиялық таза және өзіндік құны төмен биосутекті өндіруде зор маңыздылыққа ие.

Дәлелділік пен нақтылық дәрежесі

Сандық зерттеу жұмыстары лицензияланған Ansys FLUENT бағдарламалық жасақтама пакеті (Ansys, Inc., АҚШ) арқылы жүзеге асырылды.

Гидродинамикалық модельдің дұрыстығы, аналитикалық және эксперименттік мәліметтермен тексеріліп, сәйкестігі дәлелденді. Сонымен қатар, диссертациялық жұмыста алынған нәтижелердің дұрыстығы ҚР ҒжЖБМ Білім және ғылым саласында сапаны қамтамасыз ету комитеті (БҒССҚЕК) ұсынған басылымдарда, импакт-факторы нөлден жоғары алыс шетелдердің журналдарында және халықаралық конференциялардың еңбектерінде жарияланымдардың болуымен расталады.

Автордың өзінің қосқан үлесі

Диссертацияның толық көлемін жазуды, сандық зерттеу әдісін таңдауды, Ansys FLUENT жасақтама бағдарламасында мембраналық бөлу процестерінің гидродинамикалық және масса тасымалдау моделін жасауды, модельдеу

барысында алынған нәтижелерді өңдеуді және талдауды автордың өзі дербес жүзеге асырған. Міндеттер мен тапсырмаларды белгілеу және нәтижелерді сараптау ғылыми жетекшілермен бірлесіп жүргізілді.

Диссертациялық жұмыстың апробациядан өтуі

Жұмыстың негізгі нәтижелері баяндалған және талқыланған жерлер:

– «Sustainable Processes, Sustainable Systems, Sustainable Environment», халықаралық ғылыми конференциясы, София, Болгария, 8 қараша 2019 ж.;

– «Фараби әлемі» атты студенттер мен жас ғалымдардың халықаралық ғылыми конференциясы, Алматы, Қазақстан, 6-9 сәуір 2020 ж.;

– «Білім беруді, ғылыми өндірістерді және энергияның баламалы көздерін инновациялық дамыту» халықаралық ғылыми конференциясы, Алматы, Қазақстан, 23 желтоқсан 2020 ж.

Диссертация тақырыбы бойынша жарияланымдар

Диссертациялық жұмыстың тақырыбы бойынша 8 ғылыми баспа жұмысы жарияланды, оның ішінде 4 жұмыс халықаралық конференцияларда (3 тезис түрінде және 1 мақала түрінде), 3 мақала философия докторы (PhD) ғылыми дәрежесін алу үшін БҒССҚЕК-і ұсынған ғылыми басылымдарда, 1 мақала Web of Science (Clarivate Analytics, АҚШ) және Scopus (Elsevier, Нидерланды) халықаралық ақпараттық ресурстарына кіретін ғылыми басылымдарда.

Диссертация құрылымы мен көлемі

Диссертациялық жұмыс кіріспеден, 3 тараудан, қорытынды және пайдаланылған әдебиеттер тізімінен тұрады. Жұмыс 44 сурет, 4 кесте, 61 формула, 117 әдебиеттер тізімі мен 88 бетті қамтиды.

1 МОДЕЛЬДЕУ ЖӘНЕ БАҚЫЛАУ АСПЕКТІЛЕРІНЕ АРНАЛҒАН ИНТЕГРАЛДЫҚ МЕМБРАНАЛЫҚ БИОРЕАКТОРЛАРҒА ШОЛУ ЖӘНЕ ОЛАРДЫҢ ЖАҒДАЙЫ

1.1 Циклдік экономикадағы анаэробты мембраналық биореакторлардың рөлі

Жанартылатын энергия көздері энергия өндірудің үлкен әлеуетін қамтамасыз ете алады. Олар сонымен қатар қазбалы энергия ресурстарын өндіруге, тасымалдауға, жеткізуге және пайдалануға байланысты экологиялық мәселелерді шешуге мүмкіндік береді. Қазбалы отынды жағу көмірқышқыл газының (CO_2) негізгі антропогендік көзі болып табылады және электр энергиясы секторы осы CO_2 шығарындыларының үштен бір бөлігін құрайтындығы белгілі. Технологиялық инновациялар бұл шығарындыларды едәуір азайтты, бірақ қазбалы отынды пайдалану көптеген индустриалды дамыған елдерде жалпы энергия тұтынудың 80 пайызынан астамын құрайды. Неғұрлым тұрақты энергетикалық жүйеге көшу, қазбалы отынды таза пайдалануды, энергия тиімділігі мен үнемдеуді, сондай-ақ жанартылатын энергия көздерін дамытуды қамтиды.

Қайта қалпына келмейтін шикізатты өндіруге және түрлендіруге негізделген экономикалық модельдердің болашағы, ұзақ мерзімді тұрақсыздықпен сипатталады және бұл тұрақсыздық әлем халқының өсуімен артады. Су, тамақ және энергия – бұл әлемнің көптеген елдерінде адамзат кездесетін ресурстардың негізгі үш мәселесі. Өндірістік цикл ресурстарының тұрақтылығын арттыру қажеттілігі биомассаға негізделген өзін-өзі қамтамасыз ететін экономикаға бағытталған қозғаушы күш болып табылады [1].

Судың жетіспеушілігі, атмосферадағы көміртегін төмендету қажеттілігі және қазба отын немесе сирек кездесетін материалдар сияқты ресурстардың сарқылуы дөңгелек экономикаға бағытталған дамудың жаңа моделін қолдану қажеттілігін арттырды. Судың жетіспеуі, бүкіл әлем бойынша үлкен мәселе. Мысалы, Еуропалық Одақта су тапшылығына тап болған аумақтың кеңеюіне байланысты тазартылған суды тиімді пайдалану Еуропалық Одақ саясатындағы маңызды мәселе және маңызды экологиялық, экономикалық және әлеуметтік пайда әкелуі мүмкін [2].

Көміртекке келетін болсақ, қалдықтарды аэробты өңдеу энергияны көп қажет ететін іс-әрекеттің бірі. Мысалы, [3] әдебиетте ағынды суларды тазарту кезінде парниктік газдар шығарындыларын бағалау және азайтуға байланысты көптеген зерттеулер бар.

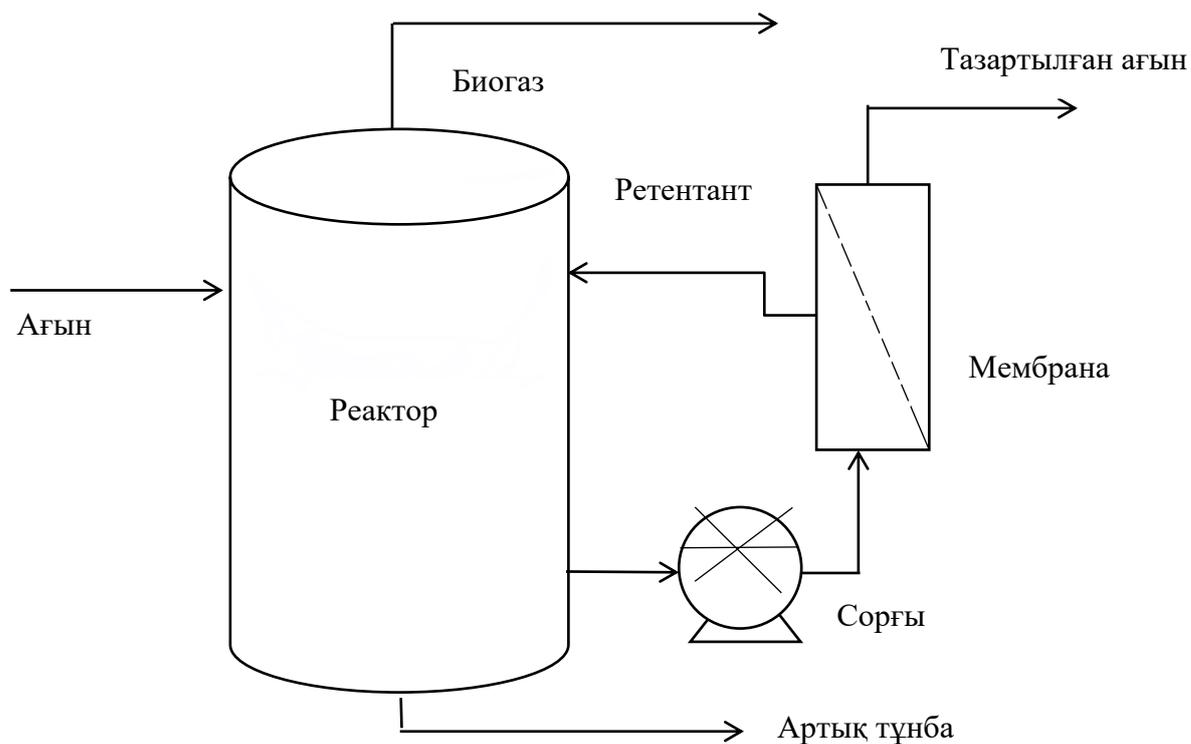
Жаһандық энергетикалық дағдарыс пен климаттың өзгеруіне қатысты алаңдаушылықтың артуына байланысты көптеген дамыған мемлекеттер қалдықтарды қайта өңдеуге назар аударып, энергияны үнемдейтін және үнемді жүйелерді дамытуға көшті. Жалпы алғанда, ағынды суларды аэробты тазарту энергияны көп қажет етеді, өйткені органикалық заттардың тотығуы үшін энергия қажет [4]. Сонымен қатар, аэробты жүйелер биосолидтердің көп мөлшерін шығарады.

Анаэробты ашыту аз энергия жұмсайды, өйткені оттегі органикалық заттарды кетіруді қажет етпейді, биологиялық ыдырайтын органикалық заттарды CH_4 энергия тасымалдаушысына айналдырады және өңдеу үшін аз биосолиттер шығарады. Анаэробты ашыту қоректік заттар мен энергияны қалпына келтіруге қабілетті [5], бірақ жұмыс жағдайларына байланысты кейбір мәселелерді тудыруы мүмкін (мысалы, гидравликалық ұстау уақыты, температура және т.б.) және негізінен микроорганизмдердің өсу қарқынының төмен болуына және олардың өңделуі керек қалдықтардың процестер динамикасының сезімталдығына байланысты. Анаэробты ашыту мен мембраналық технологияның үйлесімі қалдықтардың әртүрлі түрлерін өңдеудің перспективалы шешімі болып табылады [6]. Бұл комбинацияның ішкі артықшылығы бар: қатты бөлшектерді ұстап тұру уақытын гидравликалық ұстау уақытынан бөлу үшін мембраналарды пайдалану және жоғары сапалы ағынды суларды шығаратын ластаушы заттарды өзіндік ұстауы болып табылады [7].

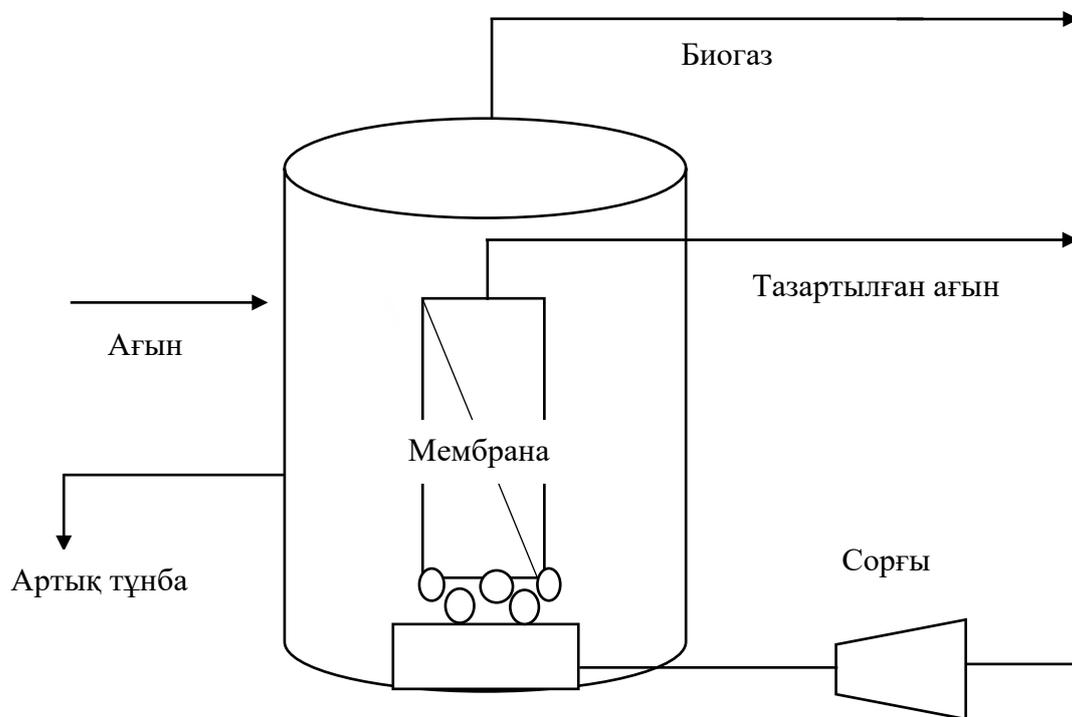
Қазіргі уақытта анаэробты мембраналық биореакторы бар бірқатар өнеркәсіптік қондырғылар өндірістік ағынды суларды тазарту үшін қолданылады, ал төмен беріктігі бар ағынды суларды тазарту үшін анаэробты мембраналық биореактор тәжірибелік масштабта қолданылады. Мембраналардың биореактормен қалай біріктірілгеніне байланысты анаэробты мембраналық биореактор екі негізгі конфигурациясын анықтауға болады: көлденең ағын және биореакторға батырылған мембрана. Көлденең ағынды конфигурация, әдетте, жоғары ағынды суларды тазарту үшін қолданылады (мысалы, өндірістік ағынды сулар). Биореакторға батырылған мембрана конфигурациясы, әдетте, төменгі ағынды суларды тазарту үшін қолданылады.

Анаэробты мембраналық биореактор көлденең ағындарында (1 – сурет) мембрана реактордан тыс, қайта өңдеу тізбегінде орналасады, онда аралас ерітінді жоғары жылдамдықпен айналады. Көлденең ағын конфигурациясының басты артықшылығы - мембрана беті арқылы өтетін көлденең ағынға байланысты мембраналардың беті физикалық түрде тазартылады. Алайда, көлденең ағынның қажетті жылдамдығына жету үшін жоғары энергия талаптары қажет. Батырылған анаэробты мембраналық биореакторларда (2 – сурет) мембраналар тікелей аралас ерітіндіге батырылады, бұл көлденең ағынның конфигурацияларымен салыстырғанда аз энергия шығынын қажет етеді, өйткені пермеат вакууммен алынады немесе ауырлық күшімен басқарылады.

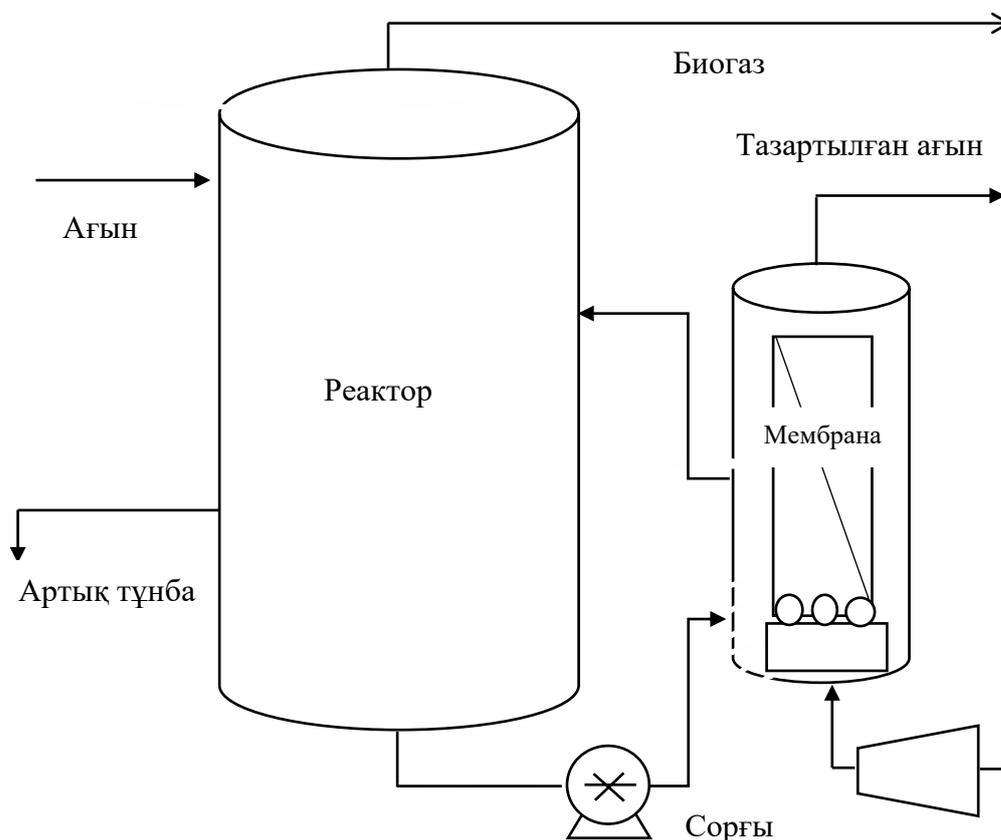
Басқа аспектілердің арасында мембрананың ластануы биогазды мембраналық тазарту арқылы батырылған анаэробты мембраналық биореакторда бақыланады. Көлденең ағын мен батырылған конфигурациясының комбинация тәсілдері анаэробты мембраналық биореакторға әкеледі, онда мембрана сыртқы мембраналық резервуарға батырылады (3 – сурет). Бұл конфигурация кішірек, арнайы мембраналық реакторда жоғары ығысуды, демек, жоғары энергияны шоғырландыру арқылы мембрананың ластануын азайтады.



Сурет 1 – Көлденең ағынды мембраналық биореактордың конфигурациясы [6]



Сурет 2 – Батырылған анаэробты мембраналық биореактор конфигурациясы [6]



Сурет 3 – Анаэробты мембраналық биореактордың көлденең ағынмен және батырылған тәсілдің комбинациялық конфигурациясы [6]

Анаэробты мембраналық биореактор технологиясының бірқатар артықшылықтары бар:

- Анаэробты микробтарды толығымен сақтайды, өйткені гидравликалық ұстау уақыты мен қатты бөлшектерді ұстап тұру уақыты бір-бірімен байланысты емес. Бұл жоғары жылдамдықты Анаэробты ашыту жүйесі баяу өсіп келе жатқан метан түзетін метаногендердің сілтіленуіне жол бермейді.

- Анаэробты ашыту қоршаған орта температурасында жұмыс істеуге мүмкіндік береді, тіпті суық климатта да, жоғары температурамен бәсекелесетін жоғары жылдамдықты процестермен салыстырғанда үнемді және экономика, қоғам және қоршаған орта тұрғысынан артықшылықтарға ие [8].

- Анаэробты биомассаның төмен шығымдылығына байланысты, жоюға болатын биосолидтердің аз болуына алып келеді. Сонымен қатар, ұзаққа созылған қатты бөлшектерді ұстап тұру уақыты түзілетін биосолидтердің тұрақтануын жақсартады.

- Микрон деңгейінде ағынды суларды сүзу арқылы пермеаттың керемет қасиеттерін қамтамасыз етеді, олардың бастапқы сапасына қарамастан бактерияларды, балдырларды, әртүрлі паразиттерді және тіпті вирустарды жою арқылы микробиологиялық дезактивацияны қоса алғанда, мембраналардың тиісті кесілуі жүзеге асырылады.

• Наносүзгілеу немесе озондау сияқты басқа да қолданыстағы технологиялармен бірге тиімділікті төмендетуі мүмкін органикалық заттарды алып тастау арқылы микро ластағыштарды жою үшін одан әрі үшінші өңдеуді жеңілдетеді [9].

• Қоректік заттарды жоймайды, оны қалпына келтіруге немесе ағынды суларда тікелей қайта пайдалануға мүмкіндік береді (мысалы, струвиттің кристалдануы, микробалдырларды өсіру, құнарландыру) [10].

• Биологиялық ыдырайтын органикалық заттарды энергияны өндіруге жарамды CH_4 энергия газына айналдырады. Шынында да, анаэробты мембраналық биореактор қоршаған орта температурасында аз ағынды суларды тазарту кезінде де таза энергия өндірушісі бола алады. Екінші жағынан, басқа аралық өнімдерді анаэробты мембраналық биореактор көмегі арқылы алуға болады, мысалы, H_2 энергия тасымалдаушысы немесе ұшпа май қышқылдары [11].

• Энергияны тұтынуды үнемдеу және энергия көзі ретінде пайдалануға жарамды CH_4 өндірісі арқылы парникті газ шығарындыларын азайтады.

Алайда, анаэробты мембраналық биореактор технологиясы, өңделетін қалдықтарға байланысты, негізгі үш мәселелерді ұсынады:

– Ағынды суларда еріген метанның концентрациясы жұмыс температурасының төмендеуімен жоғарылайды, бұл суық/қоңыржай аймақтарда жұмыс істеу үшін үлкен маңызға ие [12]. Энергияны қалпына келтіруден басқа, бұл ерітілген метанды ашық ауада кейінгі кезеңдерде атмосфераға шығарылмас үшін ұстап алу керек.

– Мембраналардың ластануы және тазалануы анаэробты мембраналық биореактор технологиясының классикалық негізгі мәселесі болып табылады. Ластану жүйенің жұмысын төмендетеді және химиялық тазарту талаптарын арттырады, осылайша мембрананың қызмет ету мерзімін қысқартады және пайдалану шығындарын арттырады [13].

– Қабылдау резервуарына байланысты қоректік заттарды алып тастау/қалпына келтіру үшін кейінгі өңдеу кезеңі қажет болуы мүмкін.

Осы мақсатта әртүрлі озық әдістерді қолдануға болады [10]:

- струвиттердің тұнбасы;
- микробалдырларды өсіру;
- анамокс-аммиакты нитрит арқылы тотықтыруға арналған процесс;
- фертигация;
- осмостық мембраналар;
- ион алмасу;
- микробтық отын элементтері және микробтық электролизерлер.

Анаэробты мембраналық биореакторға негізделген процестерді күшейту және жақсы басқару қажеттілігі жоғарыда аталған негізгі мәселелер сияқты қалдықтардың әртүрлі түрлерін өңдеудің негізгі технологиясы ретінде анаэробты мембраналық биореактордың кеңінен қолданылуын шектейтін әртүрлі шектеулерді жеңуді қажет етеді. Алайда, математикалық модельдер мен басқарудың туынды заңдары, әдетте, бұл шектеулермен нашар байланысады.

Осыған байланысты, барлық негізгі мәселелерді процестің модельдеуіне қосу анаэробты мембраналық биореактор технологиясын әр түрлі сценарийлерде өңдеу қабілетін бағалау арқылы осы технологияны қолдануды кеңейтуге, сонымен қатар процесті бақылау мен оңтайландыруға арналған құнды құралдарды, жаңа міндеттерді шешуге қызмет ете алатын механизмдерді одан әрі түсінуге мүмкіндік береді.

Бұл тарауда анаэробты мембраналық биореакторды модельдеу мен басқаруды жақсарту үшін бар мәселелер мен болашаққа шолу, сонымен қатар модельді іске асыруды жеңілдету және шектеулерді бағалау үшін, модельдеу мен басқару арасындағы байланысты жеңілдету үшін қазіргі қажеттіліктерді анықтау ұсынылған.

1.2 Биологиялық процестер мен сүзу процестерін модельдеу жағдайы

Мембраналық биореактор негізіндегі жүйе сияқты күрделі жүйені түсіну және оңтайландыру қиындығы, әдетте, бір уақытта болатын ішкі процестердің үлкен санына байланысты және уақытты қажет ететін, бір-біріне өте тәуелді процестер әсерінен болуы мүмкін. Анаэробты мембраналық биореактор жүйелеріне қатысатын биологиялық процестерді бір сатылы стандартты анаэробты модельдер арқылы сәтті модельдеуге болады [14]. Сүзу процестерін модельдеу үшін ағынды сулардың сипаттамалары немесе жұмыс жағдайлары мен мембрананың ластануы арасындағы байланысты білдіру үшін бірнеше эмпирикалық / жартылай эмпирикалық модельдер ұсынылды. Сонымен қатар, осы тарауда биологиялық сүзу процестерінің біріктірілген модельдерінің әртүрлі тәсілдері талқыланады.

Анаэробты процестерді модельдеу – бұл негізгі процестерді түсіну арқылы анықталған механикалық модельдің құрылымын басшылыққа алатын жетілген және қалыптасқан сала. Алайда, анаэробты ашыту модельдеудің мүмкін мәселелерінің бірі анаэробты мембраналық биореактор сияқты жаңа процестер мен қосымшалардың өнімділігін көбейтуге қабілетті модельдерді таңдау және бейімдеу болып табылады. Анаэробты мембраналық биореактор жүйелерін модельдеу кезінде ескеретін басқа мәселелер, әсіресе тұрмыстық ағынды сулар үшін, ағынды суларда еріген метанның жоғалуы және сүзгі мембранасынан туындаған микробтық қауымдастықтағы өзгерістер.

Анаэробты ашыту модельдерінде барабар қиындық деңгейлерін таңдау метаболизм жолдарын түсіну немесе сарқынды сулардың сапасын, сондай-ақ биогаз өндірісі мен сапасын бағалау сияқты модельдеудің қажетті мақсатына қол жеткізу кезінде жүйенің пайдалы көрінісін қамтамасыз ету үшін қажет. Егер зерттеу мақсатымен немесе ластану үшін субстратпен салыстырғанда тым күрделі модель таңдалса, бұл параметрлерді бағалауды қиындатуы мүмкін. Мысалы, метан өндірісі үшін анаэробты мембраналық биореакторда төмен ағынды суларды модельдеу және ағынды сулардың стандарттарына сәйкес келетін оттектің химиялық шығынын жою жоғары берік ағынды суларды модельдеуге қарағанда органикалық заттардың тозуының метаболикалық

жолдары елемей мүмкін, өйткені төмен рН немесе аммиакты тежеу мәселесі болуы екіталай. Екінші жағынан, неғұрлым күрделі субстраттардың (мысалы, тамақ қалдықтары) жойылуын немесе күкірттің болуын модельдеу қазіргі кездегі модельдермен салыстырғанда күрделіліктің жоғарылауын қажет етуі мүмкін.

Ғылыми әдебиеттерге, зерттеулерге сүйенсек ең көп қолданылатын модель IWA ADM1 болып табылады [15,16], ол ағынды суларды тазарту кезінде анаэробты қондырғыларды зерттеуде және әртүрлі мақсаттарда тиімді қолданылады. Модельдеу тапсырмасының мақсатына байланысты ADM әртүрлі модификациялары ұсынылған. Керісінше, қысқартылған тапсырыс модельдерін нақты қолдану үшін анаэробты мембраналық биореактор ұсынды.

Barat R. және т.б. [14] ұсынған BNRM2 коллекциялық моделі, төмен беріктігі бар ағынды сулар немесе ағынды сулардың тұнбасы сияқты төмен күрделіліктегі органикалық заттардың анаэробты деградациясына арналған модельді қамтиды. Осы модельге сүйене отырып, Ferrer J. және т.б. [17] ағынды суларды тазарту үшін анаэробты мембраналық биореактор технологиясын жобалау әдістемесін ұсынды, бұл капиталды да, операциялық шығындарды да азайтады. Pretel R. және т.б. [18] ұсынған модель бастапқы ағартқыш пен анаэробты ашыту жанама процесінің негізгі анаэробты мембраналық биореактормен үйлесімінің экономикалық әсерін бағалау үшін пайдаланылды.

Анаэробты мембраналық биореакторда қолданылатын биологиялық модельдер де биохимиялық процестердің мембраналардың жұмысына әсерін де ескеру керек. Мысалы, Aquino S.F. және Stuckey D.C. [19] анаэробты ашыту кезінде еритін микробтық өнімдерді (ЕМӨ) және жасушадан тыс полимерлі заттарды (ЖТПЗ) модельдеу қажеттілігін атап өтті. Модельдеудің бұл тәсілі, әсіресе, анаэробты мембраналық биореактор үшін жүйеде еритін микробтық өнімдердің жиналуына байланысты өте маңызды, өйткені ЕМӨ мембраналардың ластануында маңызды рөл атқаратыны белгілі, бұл процестің жұмысына (ағынды сулардың сапасына) әсер етеді. Мысалы, Беньяхия және т.б. [20] AM2b анаэробты моделін ұсынды, ол қарапайым екі сатылы AM2 моделін, соның ішінде еритін микробтық өнімдердің өндірісі мен деградациясының жолдарын модификациялаудан тұрады. Бұл математикалық модель негізінен басқаруды жобалау мақсатында жасалды.

Сульфатты қалпына келтіру моделінің күрделілігін таңдауға келетін болсақ, Ahmed W., Rodríguez J. [21] ADM1 негізіндегі бес модель құрылымының күрделілігін бағалады, олар қолданылатын электронды донорлар негізінде қарастырылып отырған сульфатты тотықсыздандыратын организмдер (СТО) топтарының санымен ерекшеленеді. Алынған нәтижелер күрделі модельдік құрылымдар тек ерекше жағдайларда қажет екенін баса көрсете отырып, ацетат пен сутекті сульфатты тотықсыздандыратын организмдерді қолдана отырып, қамыс мелассасын анаэробты ашытуды модельдеуге болатындығын көрсетті. Сонымен қатар, Duran F. және т.б. [22] жоғары сульфатты ағынды суларды тазарту үшін анаэробты мембраналық биореактор өнімділігін модельдеді. Сульфатты тотықсыздандыратын организмдердің екі тобының субстратын пайдаланудың күрделілігінің төмендеуіне байланысты стационарлық және

стационарлық емес жағдайларда алынған эксперименттік деректерді қиыстыру үшін жеткілікті болды.

Анаэробты ашыту модельдері ағынды суларда еріген метан мөлшерін бағалауды қамтамасыз етеді, бұл еріген метанды ұстау үшін қолайлы тәсілдерді әзірлеуге және таңдауға мүмкіндік береді. Әдетте, бұл үшін бір басқару пленкасы бар динамикалық газ тасымалдау теңдеуі қолданылады, газдың берілу коэффициенті k_{La} динамикалық параметр болып табылады. Stone В.С. және т.б. авторлардың жұмыстарында [12], анаэробты ағындылардан еріген метанды алудың бірнеше тәсілдері ұсынылды. Кеуекті емес мембраналар мен микроторлы мембраналық контакторлар көмегімен газсыздандыру, еріген метанды алудың перспективалы технологиясы ретінде атап өтілді [23]. Бұл мембраналар бөлу процесінің оң энергия балансы бар анаэробты ағындарды тікелей деметанизациялауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар стандартты химиялық инженерия принциптерін қолдана отырып, тиімді модельдеуге болады.

Метанды жоюдың басқа үнемді әдістері бар, олар туралы Pelaz L. және т.б. жұмыстарында келтірілген [24], анаэробты мембраналық биореактор ағынды суларын кейінгі өңдеуде денитрификация үшін электронды донор ретінде ерітілген метанды қолданудың тиімділігін жоғары жою жылдамдығына қол жеткізді. Chen S. пен Smith A.L. [25] энергияны алу және парниктік газдар шығарындыларын болдырмау үшін анаэробты мембраналық биореактор негізгі ағынының жолдарында еріген метанды қалпына келтіру үшін микробтық отын элементтерін қолданды.

Анаэробты ашыту модельдеуінің жетілуіне қарамастан, микробтық экологияны модельдеу қазіргі заманғы молекулалық құралдар ұсынатын жаңа идеялардың арқасында дамып келеді. Мембраналардың анаэробты ашыту процесіне қосылуы микробтық қоғамдастықтың елеулі өзгерістеріне әкеледі, олардың негізгі және мембраналық биопленкалық микробтық экологиясы мен микроорганизмдердің сақталуының арасындағы айырмашылығына алып келеді [26].

Көлемді сипаттамалар мен жұмыс жағдайларының мембрананың ластану бейімділігіне әсерін білдіру үшін бірнеше жартылай эмпирикалық модельдер ұсынылды [27,28]. Карман-Козени теңдеуі, Дарси заңы және дәйекті қарсылық ұғымы модельдеуде жиі қолданылатын тәсілдер болып табылады. Классикалық түрде, бұл модельдеу тәсілдері аэробты МБР үшін жасалған, дегенмен олардың көпшілігін анаэробты мембраналық биореактор ретінде басқа МБР негізіндегі жүйелерге бейімдеуге немесе қолдануға болады.

Кеуек саңылауын бұғаттау заңының модельдері төрт модельге негізделген, олар жеке-жеке ластанудың төрт механизмін, кеуек саңылауын тарылтуды (ішкі ластану), толық оқшаулауды, аралық оқшаулауды және сүзгіде тұнбаның пайда болуын сипаттайды. Бұл модельдер тұрақты пермеат ағыны үшін трансмембраналық қысым вариациясын білдіру үшін және МБР-ды ластануды сипаттау үшін алынды [29]. Wu J. және т.б. [30], әрбір ластану механизмін бөлшектердің немесе молекулалардың мөлшеріне байланысты МБР құрамындағы әртүрлі материалдармен байланыстырды. Қатты қалқыма

бөлшектер тұнба түзілу механизміне, ерітінді затпен саңылауларды толығымен бұғаттауға және тарылтатын коллоидты материалға байланысты болды. Соған қарамастан, кеуекті бұғаттау заңдарында қарастырылған гипотеза түзу және цилиндрлік кеуектерді қарастыру, сондай-ақ мембрана бағытында конвективті күштерді теңестіретін кез келген құбылыстардың болмауы сияқты кейбір шектеулерді ұсынады. Олар сонымен бірге бір уақытта пайда болатын механизмдердің әсерін елемейді. Сондықтан, көптеген жұмыстар осы модельдерді көлденең ағынды сүзу режиміне бейімдеу және ығысудың мембрананың жанындағы қоректік ерітіндінің қайта айналуынан туындаған ластануды бақылауға әсерін қарастыру арқылы жақсартуға тырысты. Chellam S., және Cogan N.G. [31], тұнбаның сығылуын қосу арқылы тұнбаның пайда болу моделін жақсартты. Ластануды неғұрлым нақты модельдеу үшін бір мезгілде ластану механизмдерін есепке алу үшін кеуек саңылауын бұғаттау заңының модельдері біріктірілді.

Дәйекті кедергісі бар модельдер сүзгілеу үшін Дарси заңын қолдана отырып, әр дәйекті орта арқылы өтетін ағынды сипаттайды. Дәйекті қарсылық модельдері ластанудың әртүрлі механизмдерінің бір уақытта әсер етуін ескеру үшін қабылданды, бұл бір ластану механизмінің моделіне қарағанда (кеуек саңылауын оқшаулау заңдары) неғұрлым шынайы. Қарастырылған негізгі механизмдер ішкі ластанудан, саңылаулардың бітелуінен және шөгінділердің пайда болуына байланысты саңылаулардың тарылуы болды. Ішкі кедергі мембрананың кеуекті қабырғаларында адсорбциясы және десорбция нәтижесінде жиналған ерітінді массасына пропорционал болады деп болжанады [32]. Кеуек саңылауларының бұғаттау кедергісі, бос мембрана немесе бос мембрана аймағының кеуектерінің өзгеруіне пропорционалды деп есептеледі [33]. Кейбір модельдер сүзу процесі кезінде кеуек саңылауын бұғаттау механизмінің үздіксіз өсуін қарастырады [34], ал басқа модельдер ластануды жоюға қабілетті екінші қабат ретінде қызмет ететін және олардың мембраналардың саңылауларына енуіне жол бермейтін шөгінді қабаттың дамуымен қиындаған кеуек саңылауын бұғаттау механизмін ұсынады [30]. Тұнбаға төзімділік, әдетте, тұнбаның массасын шламның кедергісіне көбейту арқылы есептеледі. МБР-де тұнба қабаты негізінен ілінген қатты заттардан және еритін микроб өнімдерінен тұрады. Алайда, МБР суға батқан немесе сыртқы процестерінің көпшілігінде шламның дамуы аэрация, газ көпіршігі, сұйық қатты заттар және көлемді рециркуляция сияқты мембрана бетіне жақын ығысу күштерімен бақыланады. Анаэробты мембраналық биореактор үшін тұйық сүзуге қарағанда, көлденең ағынды сүзу қолайлы, себебі тұнбаның массасын бағалау үшін тұнбаның жылжу күшінің бөлінуін қосуға болады [33].

Тұнбаның меншікті кедергісі шлам сияқты сығылатын тұнбалар үшін әр түрлі болуы мүмкін және әдетте Козени-Карман теңдеуі арқылы тұнба кеуектілігінің функциясы ретінде көрсетіледі. Ластануды дәлірек модельдеу үшін МБР биопленкасының дамуына байланысты кедергіні де ескереді. Chellam S., және Cogan N.G. [31] жеке клеткалардың кеуектерінің бітелуін, шламның түзілуін, бактериялық экзополимердің секрециясын және ластанушы заттардың

біртекті емес кеңістіктік шөгуін ескеретін дәйекті кедергі моделін жасады. Robles A. және т.б. [35], МБР процестерінде кең таралған қайтымсыз ластануға төзімділікті анықтау үшін көпіршікті биогаздың әсерін, сондай-ақ шламды тазалау кезінде кері жууды ескере отырып, батырылған МБР-ға бейімделген модельді әзірледі. Шынында да, бұл модельдің негізгі әсер етуші факторы қайтымсыз ластанумен байланысты болды [36]. Сонымен қатар бұл модель өнеркәсіптік мембраналармен жабдықталған анаэробты мембраналық биореактор жүйесінде тексерілген [37].

Field R. W. және т.б. [38], ұсынған критикалық ағын тұжырымдамасы, уақыт өте келе ластану қабаты көбейетін ағынды анықтау үшін қолданылады. Критикалық ағынның астында ластанған қабат тереңдігі тұрақты, ал бөлшектердің тұндыру жылдамдығы көлденең бөлшектер ағынының ығысуына сәйкес келеді. Бұл тұжырымдама тұрақты жұмысты қамтамасыз ету үшін оңтайлы жұмыс жағдайын анықтауға көмектеседі. Ластану критикалық ағыннан төмен болады, негізінен кеуек саңылауының ластануы мен тұнбаның шөгуіне байланысты (нәтижесінде шлам гетерогенділігі пайда болады). Ластану екі кезеңде жүреді, біріншісі трансмембраналық қысымның аздап және баяу өсуінде көрінеді, содан кейін ластану қабатының біртекті еместігіне байланысты трансмембраналық қысымның кенеттен тым өсуі байқалады, бұл ағынның мембрананың бетіне қайта бөлінуіне әкеледі. Осы гипотезаға сүйене отырып, Ognier S. және т.б. [39], тұрақты ағын жылдамдығымен жұмыс істейтін МБР-де ТМҚ және жергілікті ағынның өзгеруін модельдеуге арналған модель жасады.

Есептеу гидродинамикасы – өлшенуі қиын немесе мүмкін емес бірқатар маңызды факторларды, соның ішінде ішкі ағынның таралуы мен мембрананың ығысу жылдамдығын анықтай алады. Есептеу гидродинамикасы (CFD) биохимиялық конверсия арқылы биометан мен биосутекті алуға бағытталған әртүрлі жүйелерді модельдеу үшін қолданылды [40].

Vöhm L. және т.б. [41], газ көпіршігімен мембраналық ластануды жұмсарту үшін көп фазалы гидродинамиканың маңыздылығын атап өтті. Алайда, газды тазартудың әсері ортогональды және көлденең ағындар мен турбулентті құйындар арасындағы күрделі гидродинамикалық әрекеттесулерге байланысты әлі де толық зерттелмеген. Осыған байланысты Boyle-Gotla A. және т.б. [42], жазық мембраналармен жабдықталған анаэробты мембраналық биореактор жүйесіндегі газдың көпіршігі кезінде мембрананың ығысу әсерін болжады. Осы мақсатта сұйық және газ фазаларын бір уақытта модельдеу үшін екі сұйық (эйлер-эйлер) тәсіліне негізделген CFD моделі қолданылды. Модель мембрананың біркелкі емес ығысуын талдауға, критикалық ағынды болжауға, жобалау мен оңтайландыруға арналған әлеуетті көрсетті. Grad Z. және т.б. [43], тангенциалды көлденең ағын режимінде жұмыс істейтін қуыс талшықтары бар сыртқы микросүзгілеу мембраналық модуліне қосылған механикалық араластырғыш резервуардан тұратын анаэробты мембраналық биореакторда гидродинамикалық пен араластыру модельдері оңтайландырылды. Осы зерттеуде қолданылатын есептеу стратегиясы 1D және 3D CFD әдіснамаларын, соның ішінде бір фазалы және екі сұйық CFD модельдерін біріктірді. CFD

модель араластыру уақытын, күйынның пайда болуын және бөлшектердің суспензиясын болжап, масштабтау үшін қажетті ақпаратты берді.

Көлденең фильтрация кезіндегі тангенциалды ағын гидравликалық жуудың мембранаға әсер етуі үшін қызмет етеді, содан кейін ластану қабатының тереңдігін азайтады. Көлденең ағын кезінде концентрациялық поляризация қабаты мембрана бетінен көлемді суспензия бағытында таралады. Көлденең ағынды сүзгілеу кезінде бөлшектердің тасымалдануы екі механизмге байланысты: аяқас ағыннан туындаған дисперсия және конвективті ағын мен беттік өзара әрекеттесуден туындаған мембранаға қарай қозғалыс. Мембранадан (немесе мембрана арқылы) дисперсия, диффузия мен көлденең қозғалыстың ығысуынан туындаған броундық қозғалыстан (1 мкм-ден төмен бөлшектер үшін) тұрады. Броундық қозғалыс өте ұсақ бөлшектердің кері берілуінде басым болады, ал ығысудан туындаған дисперсия үлкен бөлшектердің берілуінде басым болады. Choo K. мен Lee C. [44], гидродинамикалық факторлар тұнба қабатының пайда болуының бастапқы әрекетіне қатты әсер ететінін атап өтті, бірақ бөлшектер мембрана бетіне жақындаған кезде беттік әрекеттесуді маңызды деп санаған. Hu D. және т.б. [45], көлденең ағын жылдамдығының жоғарылауы, құрамында ағынды сулар бар анаэробты мембраналық биореактор бактерияға қарсы еріткішіндегі органикалық қосылыстардың биологиялық ыдырау қабілетін арттыратынын анықтады. Алайда, концентрация мембраналық биопленкада жасушадан тыс полимерлі заттар көлденең ағын жылдамдығының жоғарылауымен өсті, бұл оның тығыздау мен жабысудағы рөліне байланысты ұзақ уақытқа теріс әсер етеді. Сонымен қатар, беттік бөлшектердің өзара әрекеттесулері, беттік қасиеттер мен бөлшектердің өлшемдерінің таралуын ескере отырып, қосымша зерттеуді қажет етеді.

Соңғы уақытта, энергияны аз тұтыну кезінде мембраналарды кішірейту үшін анаэробты мембраналық биореакторға тазартқыш заттарды қосуға деген қызығушылық артты. Түйіршікті белсендірілген көмір немесе ұнтақты белсендірілген көмір бөлшектері мембранаға механикалық тазарту әсерін беру үшін тазартқыш ретінде кеңінен қолданылады [46,47]. Мұнда түйіршікті белсендірілген көмір бөлшектері мембрана бойымен тек анаэробты псевдо-сұйылтылған мембраналық биореактор арқылы қайта өңделетін көлемді ағынға байланысты сұйылтылған. Түйіршікті белсендірілген көмірдің псевдо-сұйылтылған бөлшектері биопленка мен физикалық тазарту мембранасын қалыптастыру үшін үлкен беткі аймақты қамтамасыз ете алады, оның астында гидродинамикалық шарттар ластануды азайту үшін ығысу жылдамдығын арттыра алады [48].

Бөлшектерді тазартуға байланысты механикалық тазалаудың негізгі мақсаты – мембрана бетіне жақын ығысу кернеуін арттыру және ластануды мембранадан ажыратуға қабілетті тазарту әсерін жасау. Бөлшектердің қозғалысымен басқарылатын тазарту механизмдері ластаушы заттарға әсер ететін түйіршікті белсендірілген көмір бөлшектерімен берілетін импульске негізделген [49]. Huang X. және т.б. [50], тұнба бөлшектерін тасымалдау екі әрекетке байланысты деп санады: инерциялық көтеру күші мен тұнба

бөлшектерінің енуіне кедергі күші. Олар стационарлық жағдайда инерциялық көтеру жылдамдығы ену ағынына тең, ал диаметрі критикалық диаметрден аз бөлшектер мембрана бетіне түсуі мүмкін деп болжады. Сұйылтқыш ортаны қосқанда критикалық диаметрдің мәні төмендейді. Содан кейін бөлшектердің массасының өзгеруін анықтай алатын модель ұсынылды. Ол сұйылтылған бөлшектерді тазартудың оң әсерін және мембрананың кедергісінің өзгеруіне шөгінділердің теріс әсерін қамтиды. Бұл модель сұйылтылған заттың өлшемі мен мөлшерінің әсерін атап көрсетті.

Анаэробты мембраналық биореактор процесін модельдеу өрісі салыстырмалы түрде жетілмеген болса да, оның осы жүйелерді жобалау, пайдалану және басқаруды жақсарту үшін күшті әлеуеті бар. Ол жүйе өнімділігін одан әрі оңтайландырады, шығындарды азайтады және технологияның қолданылуын арттырады.

Мембраналық ластану гетерогенді жағдайда ластаушы материалдың табиғатына байланысты айтарлықтай өзгереді. Биологиялық процестер мен ластану динамикасы арасындағы негізгі өзара әрекеттесулерді көрсету арқылы тиімділігін жақсырақ болжау үшін жеке және ұжымдық ластаушы әрекеттерді жақсырақ түсіну қажет. Өнеркәсіптік масштабта анаэробты мембраналық биореакторларды оңтайландыру үшін ашық және жабық циклді басқару стратегияларын одан әрі зерттеу, негізінен, анаэробты мембраналық биореакторда ластану туралы механикалық білімнің болмауына байланысты қажет.

1.3 Сутекті өндіру үшін интегралдық мембраналық биореакторларды қолдану

Қазба органикалық отындардың тапшылығы жаһандық экологиялық мәселелермен бірге, сутекті, стационарлық және жылжымалы қондырғылар үшін әмбебап энергия тасымалдаушысы ретінде пайдалануға үлкен қызығушылық тудырады. Қазіргі уақытта әлемде, сутек қорынын шексіз ресурстарының, жоғары энергия сыйымдылығының, технологиялық икемділіктің және сутек қатысатын энергияны түрлендіру процестерінің экологиялық тазалығының арқасында, оны болашақтың ең перспективалы энергия тасымалдаушысы ретінде қарастыру керек деген пікір қалыптасқан [51].

Сутек өндірісіндегі биологиялық процестер, биомасса сияқты жаңартылатын энергия көздерін адамзатқа пайдалануға ең таза энергия өндіру үшін қолдануға болатын әдісті ұсынады [52].

Аэробты және анаэробты биореакторлар үздіксіз биотехнологиялық схемаға біріктірілген жағдайда, атмосфераға көмірқышқыл газын шығармай, жанғыш газдарды (сутек пен метан) өндіру процестерінде, биомассаны тиімді өңдеуде, ауыл шаруашылығында, ағынды суларды тазартуда, коммуналдық шаруашылықта және тамақ өндіруде келешегі мол болып табылады [53].

Пайда болған төменгі қысымды газ қоспаларынан энергия алу өте қиын, бірақ төменгі энергетикалық компоненттерді алу ғана емес, сонымен қатар CO₂-

ны толығымен қайта өңдеу процесін қамтамасыз ету үшін арнайы таңдалған газды бөлу технологиясы арқылы жүзеге асырылуы мүмкін [54,55].

Биогендік қоспалардың құрамында макрокомпоненттер (метан, сутек және көмірқышқыл газы) және басқа да қоспалар болады. Мұндай қоспалардан энергияның бөлінуі, олардың тазартылуын тұжырымдайды. Газ бөлу технологиясының жоғары даму деңгейіне қарамастан, биологиялық синтез өнімдерін химиялық технологияның стандартты әдістерімен бөлу, алынған сұйық және газ қоспаларының техникалық параметрлерінің төмен болуына байланысты экономикалық тұрғыдан тиімсіз. Газды мембраналық бөлу биогендік шыққан газ қоспаларын бөлудің ең перспективалы процестеріне жатқызылуы мүмкін. Мембраналық биореакторлар – жоғары дәлдікті, селективті және тиімді процестер. Олар жасыл және қарқынды дамып келе жатқан технологияларды қолдану қажеттілігімен байланысты мәселелерді шешуге өз үлестерін қоса алады [56].

Қараңғы ашытудың нәтижесінде пайда болған биосутек негізінен H_2 , CO_2 және сұйық ағынды сулардан тұратын, айтарлықтай мөлшерде ұшпа май қышқылдары бар газ қоспасын шығарады [57]. Сондықтан өндіріс сатысынан кейінгі әдістер кем дегенде екі мақсатқа ие болуы керек:

- сутек газын отын элементтерінде тиімді бастапқы материал болу үшін тазарту керек (сутек газында сақталған химиялық энергияны электр энергиясына түрлендіру);

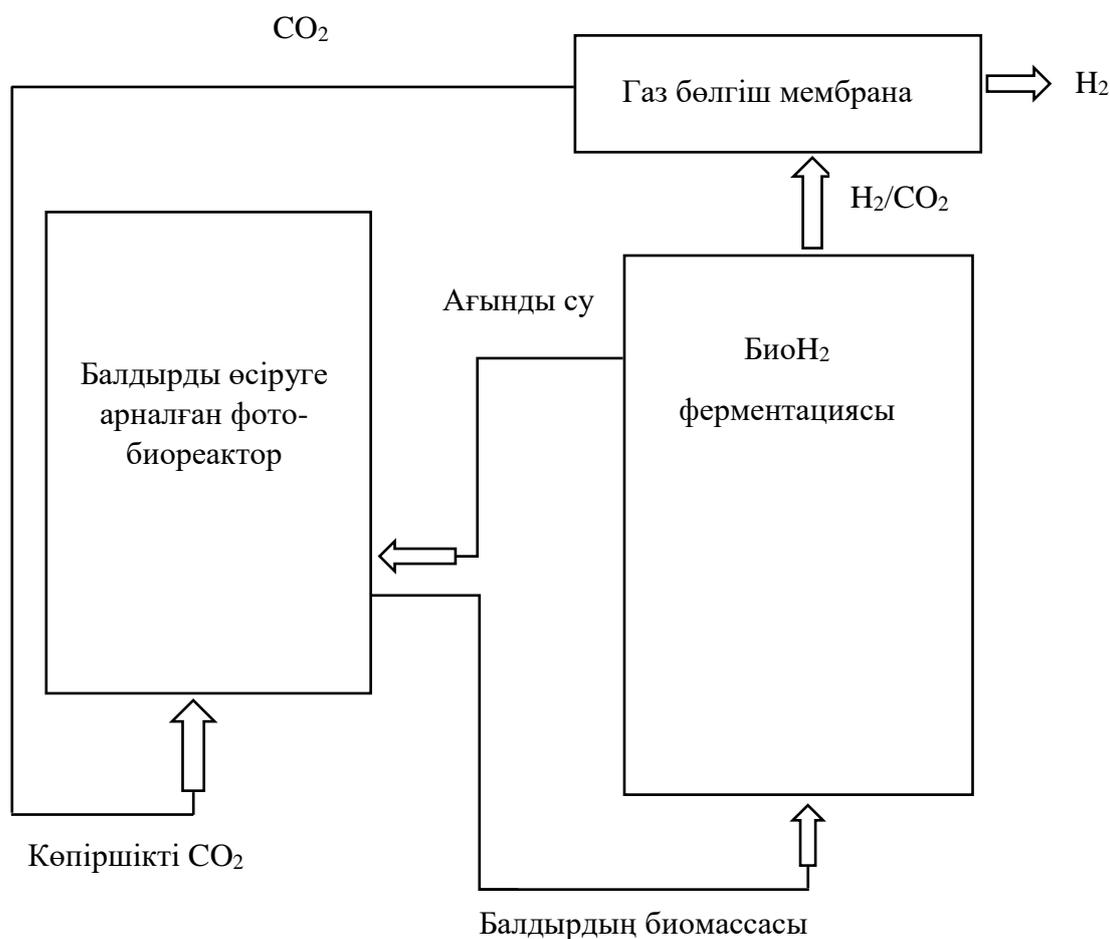
- ағынды сулар қалдық және органикалық заттарға байланысты одан әрі өңделуі және пайдалануы қажет [58,59].

Тиісінше, биосутекті өндіру қарапайым, автономды процесс болмауы керек, керісінше маңызды деп танылған қосылыстарда жанама өнімдердің (газ тәрізді және сұйық) құндылығын арттыруға қамтамасыз ететін көп сатылы биоөңдеу жүйесінің бөлігі болуы керек. Іс жүзінде, газдың сапасын жақсарту үшін CO_2 -ні алып тастау және CO_2 алу үшін микробтардың немесе микробалдырлардың электрохимиялық платформасын қолданып, кейіннен биомасса алу үшін басқа биоөнімдерге айналдыру керек [60,61]. Балдырлардың биомассасы газ тәрізді биоотын өндірудің перспективалы шикізаты болып танылды. Осының негізінде қараңғы ферменттік биосутекті өндіру технологиясына арналған биоөңдеудің «жабық» кешенді және толық шешімін ұсынуға болады. Газды бөлетін мембрана биореакторының инновациялық жүйесін әзірлеу және қолдану осы мақсаттарға жетудің мүмкін болатын әдісі болуы мүмкін. Кәдімгі мембраналық биореакторлар, әдетте, сутек газын шығару және байланысты жоғары технологияны күшейту үшін қолданылған. Мүмкін, бұл биосутек процесінің жоғарғы және төменгі жағына тиетін мембраналық биопрцестерді дамытудың қосымша құндылығы бар жаңа жол. Газды бөліп алатын мембраналық биореактор CO_2 -ні тікелей және тиімді аулауға қол жеткізеді, ол H_2 шығаратын ферменттер ішіне салынған газ шығаратын мембрана блогын біріктіреді. CO_2 балдырларды өсіру үшін қолданыла алады. Биомассаны жинағаннан кейін, 4 – суретте ұсынылған жүйенің схемалық интерпретациясына сәйкес, жаңа айналмалы биопрцесс құру үшін, биосутекті өндіру технологиясының газ

тәрізді және сұйық ағындарын қолдана отырып, қараңғы ашыту үшін шикізат бола алады.

Газды бөліп алатын мембраналық биореактор әзірлеу кезінде келесі био және мембраналық-технологиялық бағыттарды ескеру қажет:

- газды бөлу мембраналық процесінің теориялық негізін ескеру;
- газды бөлу мембраналарының практикада қолданылуын түсіну, сутек диоксидінен тазарту;
- биосутекті интегралдық өндіру мен бөлу саласындағы қолданыстағы әдебиеттерді бағалау;
- биосутек түзетін ағынды суларды (газ тәрізді және сұйық) биореакторларды қолдануға негізделген балдырларды өсіру аспектілері [62].

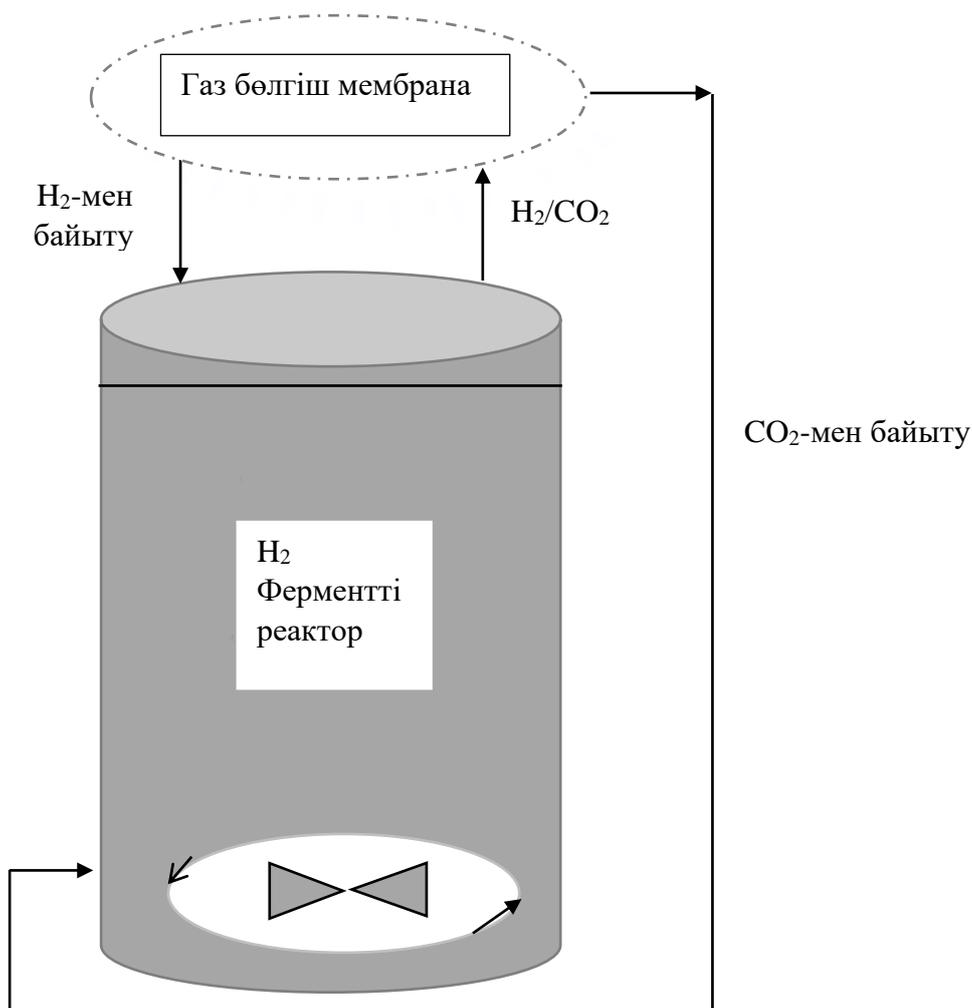


Сурет 4 – Газды бөлуге арналған мембраналық биореактор тұжырымдамасының схемасы [62]

Péter Vakyóyi және т.б. [63], газды бөлуге арналған мембраналық биореакторды мембраналық технологиямен интеграциялау арқылы, үздіксіз биосутек өндірісін ұсынды. Сутекті өндіру қуатын жақсарту үшін осы жаңа конфигурацияны енгізудің орындылығы биореактордың тікелей кеңістігінен алынған CO_2 мен H_2 -ге бай газдардан ферменттеу сұйықтығын тазарту арқылы тексерілді (5 - сурет). Нәтижесінде, CO_2 концентрациясы бар мембраналық бөлу

фракциясы (екі PDMS модулінен тұратын) арқылы биореактордың көпіршігі араластырғышы бар үздіксіз жұмыс істейтін реактормен салыстырғанда H_2 өнімділігін тұрақты режимде (8,9-9,2 Л/К) жоғарылағанын көрсетті.

Екінші жағынан, H_2 -ге газбен үрлеу қол жетімді өнімділікті едәуір төмендетті (2.7-3.03 Л/К). Газды бөлуге арналған мембраналық биореактор әрекетін бағалау үшін микробтар қауымдастығының құрылымы мен еритін метаболикалық өнімдер бақыланды. Зерттеу көрсеткендей, био H_2 ферментаторын өзін-өзі шығаратын атмосферасымен тазарту, оның құрамын түзеткеннен кейін (CO_2 -нің жоғары құрамына дейін) ферментативті H_2 шығаруды күшейтудің перспективті тәсілі бола алатынын көрсетті.



Сурет 5 – Газ бөліп алуға арналған интегралдық мембраналық биореактордың негізгі концепциясы [63]

J. E. Ramı rez-Morales және т.б. [64], мембраналық модульдердің (Подиметилсилоксан) (PDMS) және SAPO 34-тің H_2 және CO_2 газ қоспасын үздіксіз ену жүйесінде бөлу қабілетін зерттеп, олардың сутек өндірісінің биологиялық процесіне сәйкес келетіндігін анықтады. Өткізгіштігін зерттеу 110-нан 180 кПа-ға дейінгі диапазонда салыстырмалы түрде төмен қысым кезінде

жүргізілді. SAPO 34 мембраналық модулінің бөліну қабілеті жоғарылаған болатын, өйткені өткізгіштік параметрлерін бағалау кезінде концентрациялық поляризацияның әсері ескерілмеген. Екінші жағынан, PDMS мембранасы бинарлы газ қоспасын бөлуге ең қолайлы болды. Бұл мембрана 120 кПа қысым беру кезінде CO_2/H_2 6.1 бөлудің максималды селективтілігіне жетті. CO_2 және H_2 өткізгіштігінің қысымға тәуелділігі шамалы болды, ал CO_2 және H_2 үшін аз ғана төмендеу байқалды. CO_2 және H_2 үшін өткізгіштік коэффициенттерінің орташа мәні сәйкесінше 3285 ± 160 және 569 ± 65 баррерді құрады. Ашыту жүйесіне қосылған PDMS мембраналық модулінің бастапқы жұмысына неғұрлым қолайлы жұмыс қысымы 296 к-да 180 кПа болатындығы анықталды, бұл жағдайда CO_2/H_2 бөлінуінің 5,8-ге тең болатын селективтілігіне және пермеат ағынында CO_2 -нің жеткілікті қалпына келуіне қол жеткізуге болатынын болжады.

J. E Ramı rez-Morales және т.б. авторлардың тағы бір жұмысында [65], газдарды бөлу және ашыту технологиясы үшін мембраналарды біріктіруге негізделген процестің жаңа тұжырымдамасының функционалды әрекетін ұсынды. Пайдаланылған мембраналар екі зертханалық мембраналық модульден тұрды. Құрылымдық сипаттамалары, CO_2 және H_2 өткізгіштігі және CO_2/H_2 бөлу коэффициенті сияқты мембраналық модуль туралы ақпарат [64] зерттеу жұмысында толық көрсетілген. Биосутекті жаңартудың екінші кезеңі ретінде қолданылатын мембрана жоғарыда аталған материалдан тұрды, бірақ ауданы 10 cm^2 және 30 қуыс талшықтан тұрды. Үздіксіз эксперименттік қондырғы 6 – суретте схемалық түрде көрсетілген.

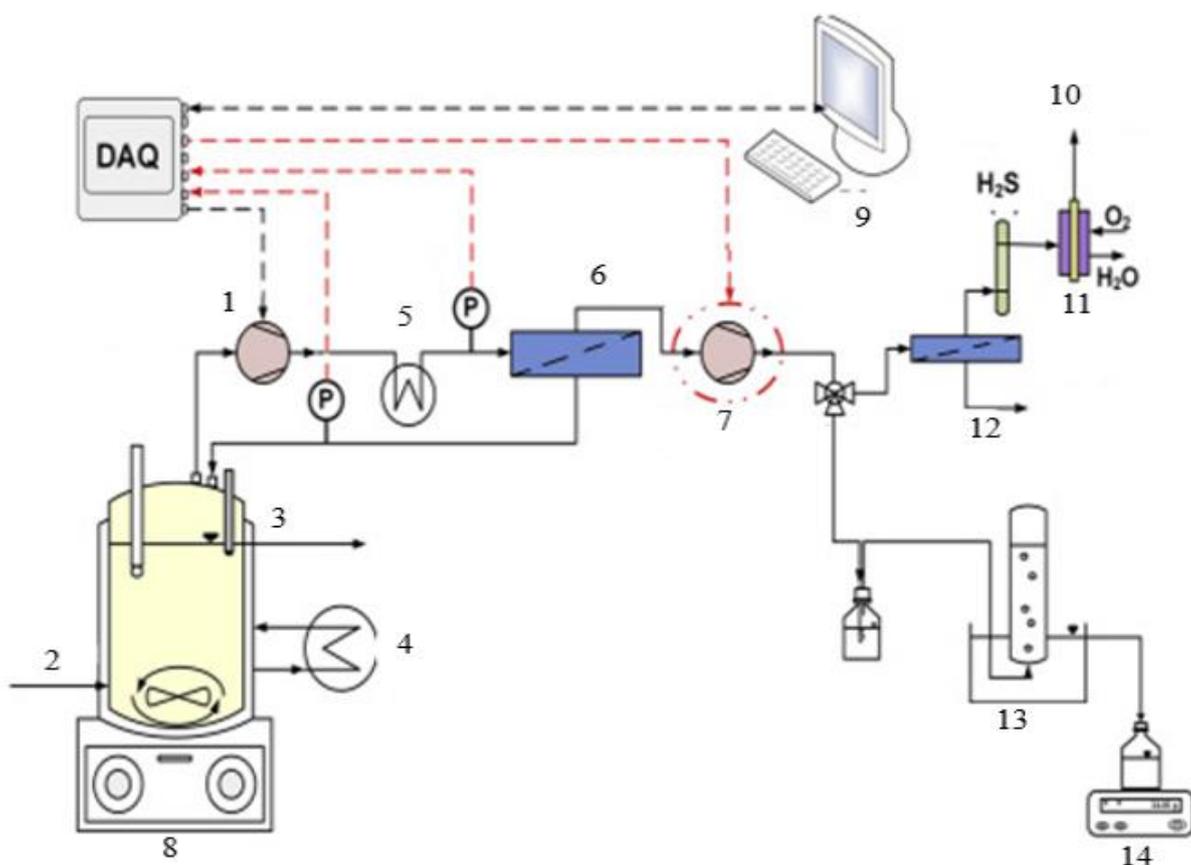
6 – суретке сәйкес, сутек өндірісі тұрақты күйге жеткенде мембрана (6) араластырғышы бар үздіксіз жұмыс істейтін реакторына (8) қосылды. Жүйе перистальтикалық сорғылардан, қысым датчиктерінен және әртүрлі жұмыс желілеріндегі тұзақтардан тұрды. Мембранадан (6) шығатын газ ағыны реактордың бос кеңістігіне қайта оралды, өйткені ол CO_2 -мен байытылды. Мембрана (6) перистальтикалық сорғымен (1) үздіксіз қамтамасыз етілді. Суық тұзақ (5) бұл ағында су буының конденсациясы үшін орналасқан, бұл мембрана бетінде су қабатының пайда болуына жол бермейді.

Бұл процесс екі тығыз полимер мембраналарын сутек себінділерімен байланыстырудан тұрады. Бұл жүйенің процесін автоматтандыру мембраналық модульде және биореактордың газ фазасында тиісті жұмыс қысымын ұстап тұру үшін қажет болды.

Бұл жүйе, пайда болған сутек пен көмірқышқыл газын шығарып, ішінара бөліп алуға қабілетті болды.

Сутектің парциалды қысымы 55,5–тен 49 кПа-ға дейін төмендеді, бұл сутектің шығымдылығын 16,3%-ға арттырды. Бір мезгілде енгізілген жүйе сутектің соңғы ағынын әдеттегі процеске қарағанда 13%-ға көп шоғырландырды.

Биореакторларда алынған сутекті қолдану оны қоспадан бөлуді қажет етеді. Бөлудің оңтайлы әдісі қоспаның құрамын, бөлінетін газдың көлемін (биореактордың өнімділігімен анықталады) және өнімнің қажетті сапасын ескеруі керек.



1 – перистальтикалық сорғы; 2 – кіріс ағыны; 3 – шығыс ағыны; 4 – термостатикалық ванна; 5 – суық тұзақ; 6 – мембрана М1; 7 – перистальтикалық сорғы; 8 – араластырғышы бар үздіксіз жұмыс істейтін реактор; 9 – ПК; 10 – электр энергиясы; 11 – отын элементі; 12 – мембрана М2; 13 – суды бғыстырушы; 14 – электронды баланс

Сурет 6 – Үздіксіз эксперименттік қондырғының сызбасы [64]

Мембраналық газ бөлу процестері (пермселективті фазалық кедергілер арқылы газдың әртүрлі ену жылдамдығын қолдана отырып) биосутекті тазарту үшін өте қолайлы. Негізінен, мембрана жартылай өткізгіш қабат/сепаратор болып табылады, ол қосылыстардың бөлінуіне қол жеткізу үшін масса тасымалының селективті кедергісі ретінде әрекет етеді.

Кнудсен диффузиясы кезінде H_2 және CO_2 газдарына қатысты мінсіз селективтілік H_2 және CO_2 молекулалық массаларының қатынасымен шектеледі, нәтижесінде бөлу тиімділігі тым төмен болып шығады [66]. Молекулалық елеу жағдайында сутектің H_2 молекулалық диаметрі (0,289 нм), көмірқышқыл газының (CO_2) молекулалық диаметріне (0,33 нм) карағанда төмен, сондықтан H_2 және CO_2 газ қоспасын бөлуге болады. Мұнда, мембрананың саңылаулары дәл орнатылуы керек және материал кеуектер мөлшеріндегі үлкен ауытқуларды болдырмас үшін жеткілікті қатты болуы керек. Беттік диффузия молекулалардың адсорбциясы мен беттік қозғалғыштығына байланысты. Капиллярлық конденсация оңай конденсацияланатын газға (CO_2) қатысты жоғары

селективтілік бере алады, ол кеуектердің ішіндегі конденсациядан кейін конденсацияланбайтын газдың (H_2) енуіне жол бермейді және бұғаттайды. Жеңілдетілген тасымалдау H_2 және CO_2 газ қоспасын тиімді бөлу үшін қолданылады, мұнда химиялық заттар және/немесе биологиялық агенттер, мысалы, көміртегі диоксиді ангидразы белгілі бір компоненттің, әдетте, CO_2 -нің басқаларына белгілі бір өзара әрекеттесу арқылы енуін тездетеді. CO_2 жеңіл тасымалдауының және оның H_2 -ден бөлінуінің көрнекі мысалдары [67,68] әдебиеттерде көрсетілген.

Арнайы тасымалдау механизмдері бар мембраналар қол жетімді болғанымен, практикалық қолдану арзан әрі сенімді шешімдерді қажет етеді. Оңай қалыптасатын және арзан полимерлі мембраналар негізінен H_2 және CO_2 газдарды бөлу үшін кеңінен қолданылады. H_2 және CO_2 газ қоспасын бөлу, жоғарыда айтылған ойларға сәйкес, кеуекті мембраналарды қолданумен шектеледі, яғни Кнудсен ағыны режимінде, мұндай мембраналар биосутектің жақсы бөліну тиімділігіне қол жеткізу үшін кеуекті емес мембраналармен бірге қолданылуы мүмкін немесе керісінше, еріту-диффузия түріндегі тасымалдау механизмімен жұмыс істейтін кеуекті емес полимерлі мембраналармен толығымен ауыстырылуы керек [69,70]. Жалпы алғанда, сутекті тазарту үшін кеуекті емес мембраналарға негізделген газ бөлетін мембраналық жүйелер ұсынылуы мүмкін. Бұл дәстүрлі анаэробты мембраналық биореакторлармен қабылданған тәжірибеге қарама-қайшы, мұнда микро және ультрасүзгілеу сияқты кеуекті (су сүзгілері) мембраналармен жобаланған суасты және сыртқы контурлы жүйелерді қолдануға болады.

Газды бөлу кезінде газ қоспасы мембрананың берілу жағында (ағыннан жоғары) қысыммен беріледі. Мембрана арқылы өтетін қоспаның бөлігі пермеат деп аталады. Қоспаның қалған бөлігі ретентат түзеді.

Сутекті бөлуге арналған материалдар органикалық (яғни полимерлер) немесе бейорганикалық болуы мүмкін бірнеше түрлерден тұрады. Екі топты да кеуекті және кеуекті емес материалдарға бөлуге болады. Кеуекті мембраналармен тәжірибе көбінесе бөлінудің жеткіліксіз тиімділігін көрсететіндіктен, олар тікелей пайдаланылмайды, бірақ жанама түрде сұйық мембраналарды жасау үшін қолданылады, онда сұйықтықтар мембраналық тірек матрицасының саңылауларын толтырады. Қазіргі уақытта иондық сұйықтықтар негізінен қолданылатын сұйықтықтардың қатарына жатады, осылайша, CO_2 енуін тездету үшін көмірқышқыл ангидраза сияқты биокатализаторлармен бірге биосутекті тазарту сияқты газдарды бөлу үшін иондық-сұйық мембраналарды дайындауға болады.

Газдарды бөлуге арналған материалдардың маңызды тобы кеуекті емес полимерлі мембраналардан тұрады. Биосутекті тазарту үшін CO_2 жою негізгі және күрделі міндет болып табылады. Иондық сұйықтықтар сияқты полимерлер мен сұйықтықтарда CO_2 жоғары полярлыққа және жоғары конденсацияға байланысты H_2 сияқты басқа жеңіл молекулалық газдарға қарағанда жоғары ерігіштігін көрсетеді (критикалық температурасы жоғары газдар полимерлерде көбірек ериді) [69]. CO_2 жақсартылған селективтілікке ие көптеген полярлық

полимерлермен күшті әрекеттесулер жасай алады. Сонымен қатар, CO₂ полимерлермен өзара әрекеттесуінің көп болуына және молекулалық диаметрінің H₂-ге қарағанда үлкен болуына байланысты, салыстырмалы түрде баяу жылдамдықпен таралады. Керісінше, сутектің диффузия коэффициенті жоғары, бірақ ол CO₂-ге қарағанда көптеген полимерлермен әрекеттеспейді. Негізінен, бұл екі әсер бір-бірімен бәсекелеседі және бұл құбылыс көптеген полимерлерде H₂ және CO₂ газ қоспасының селективтілігін шектеуі мүмкін. Сонымен қатар, полимерлердің едәуір саны кері селективтілікке ие (H₂ емес, CO₂ пермеатпен байытылған) (1 – кесте) және CO₂-селективті полимерлер деп аталады, мысалы, полидиметилсилоксан (PDMS), бұл биосутекті бөлу процесінде әртүрлі зерттеулерде сәтті қолданылған материал. Сонымен қатар, РЕВАХ – бұл полиамид сілтемелері бар полиэтиленгликоль сілтемелерінің блок-сополимері болып табылатын тренд полимері.

Кесте 1 – Газды бөлу кезінде жиі қолданылатын таңдалған полимерлердің газ тасымалдау қасиеттерінің мысалы

Полимер	Өткізгіштік (30 °C) (Баррер)			Селективтілік	
	H ₂	N ₂	CO ₂	H ₂ /N ₂	CO ₂ /H ₂
Ацетат целлюлозы	2.63	0.21	6.3	12.5	2.4
Полисульфон	14	0.25	5.6	56.0	0.40
Полиимид (Матримид)	28.1	0.32	10.7	87.8	0.38
Ultem 1000	8.35	0.069	2.63	121	0.31
Этилцеллюлоза	87	8.4	26.5	10.4	0.30
Полидиметилсилоксан	550	250	2700	2.2	4.9
РЕВАХ	10.1	1.71	80.6	6.2	8.0

Жоғары қысымда бөлінуден өтетін қоспада CO₂ газының болуы пластификациялық әсерге байланысты полимерлі мембраналардың өнімділігін нашарлатады. Пластификацияланған мембрана өзгертілген құрылымға ие болады, газды тасымалдау төзімділігі төмендейді, өткізгіштігі жоғарылайды және селективтілігі төмендейді. Газ қоспасының жекелеген құрамдас бөліктерінің (тек CO₂ ғана емес) өзара әсері жиі кездеседі. Көп компонентті газ қоспаларында бір газдың болуы басқа газдың тасымалдануына әсер етеді. Нәтижесінде, аралас газ мембраналарының өнімділігі тек жеке газдардың өткізгіштігінен алынған селективтілікпен сипатталуы мүмкін.

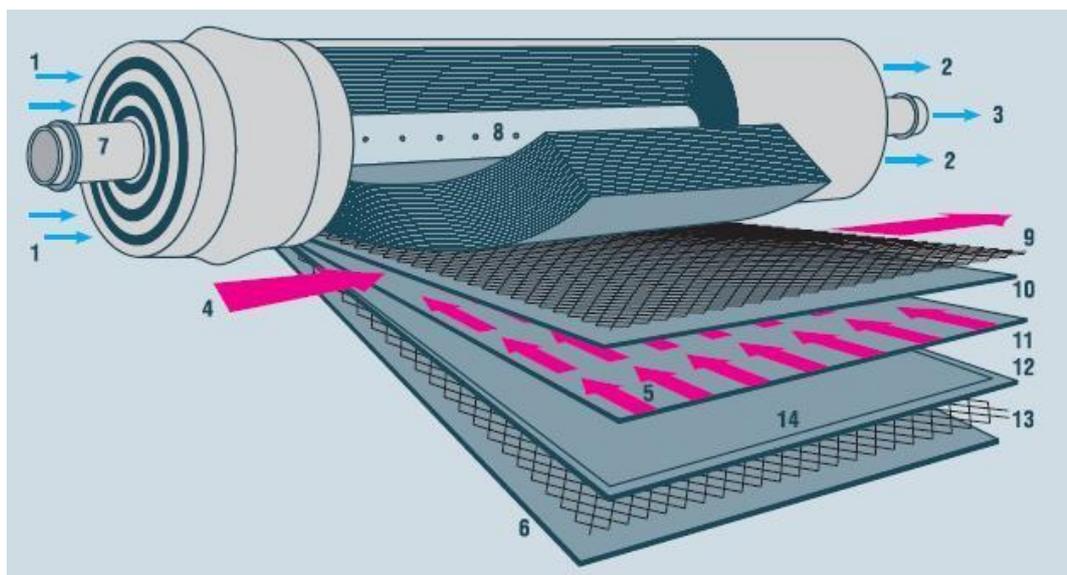
Газды бөлу процесін үнемдеу жоғары ағындарды қажет етеді; яғни селективті полимер қабаты өте жұқа болуы керек. Алайда, мембрананың төмен қалыңдығы нашар механикалық тұрақтылық пен өңдеудің қиындықтарын тудырады. Бұл мәселе мембраналардың күрделі құрылымымен шешіледі. Кеуекті емес полимерлі мембраналар, әдетте, қалың кеуекті төменгі қабаты бар

өте жұқа кеуекті емес жоғарғы қабатпен (қабықпен) түзіледі. Кеуекті емес қабық – бұл бөлу қабаты, ал кеуекті төменгі қабат мембранаға механикалық күш береді. Кеуекті және кеуекті емес қабаттар бірдей полимерден немесе екі түрлі полимерден тұруы мүмкін. Бір полимерлі екі қабаты бар мембраналар (асимметриялық мембраналар деп аталады) полимер ерітіндісін құю арқылы жасалады, содан кейін бақыланатын тұнба болады. Әр түрлі полимерлердің екі немесе одан да көп қабаттары бар мембраналар (құрама мембраналар) кеуекті мембрананы (алдыңғы сатыда дайындалған) басқа полимердің жұқа қабатымен жабу арқылы жасалады. 1 – кестеде көрсетілген барлық коммерциялық мембраналар асимметриялық немесе құрама болып табылады.

Мембраналар автономды емес, сондықтан бөлу жүйелеріндегі негізгі элементтер ретінде модульдерге салынуы керек. Жоғарыда айтылғандай, модуль конфигурациясы тазарту жұмысына айтарлықтай әсер етуі мүмкін, өйткені ол ағын режиміне, қозғаушы күшке және мембрана бетіндегі концентрацияның поляризациясына әсер етеді.

Жалпы, мембраналық модульдерді үш түрге бөлуге болады, атап айтқанда: иілімді мен қаңқалық, спиральды оралған және қуыс талшықты. Мембраналық газ бөлу қондырғыларының 80%-дан астамы қуыс талшықтардан жасалған модульдерді пайдаланады. Әдетте, мембрана бетінің ауданының көлемге қатынасы иілімді мен қаңқалық модульдер үшін шамамен $200 \text{ м}^2/\text{м}^3$, спиральды орамалы модульдер үшін $500\text{-}3000 \text{ м}^2/\text{м}^3$ және қуыс талшықты модульдер үшін $1500\text{-}10,000 \text{ м}^2/\text{м}^3$ құрайды.

Спиральды оралған модуль мембраналық қосымшалар үшін модульдің маңызды түрі болып табылады. Ол бастапқыда кері осмос жүйелерінде қолдануға арналған және қазіргі уақытта ультрасүзгілеу және газ өткізгіштік жүйелерінде де қолданылады. Спиральды оралған модульдер қысымның төмендеуін ескеру қажет болған кезде және газдарды бөлудің максималды тиімділігі үшін қарсы ағын қажет болмаған кезде қолданылады. Спиральды орау модулі жалпақ мембранамен салыстырғанда келесі логикалық қадам болып табылады. Бұл шын мәнінде сэндвич орамына ұқсас орталық коллекторлық түтікке оралған тақталар мен жақтаулар жүйесі. Берілу және пермеат жағынан төсеу материалы мембраналық қабықты қалыптастыру үшін үш жиекке жабыстырылады [71]. Спиральды оралған мембраналық модульдің конструкциялық мысалы 7 – суретте көрсетілген.

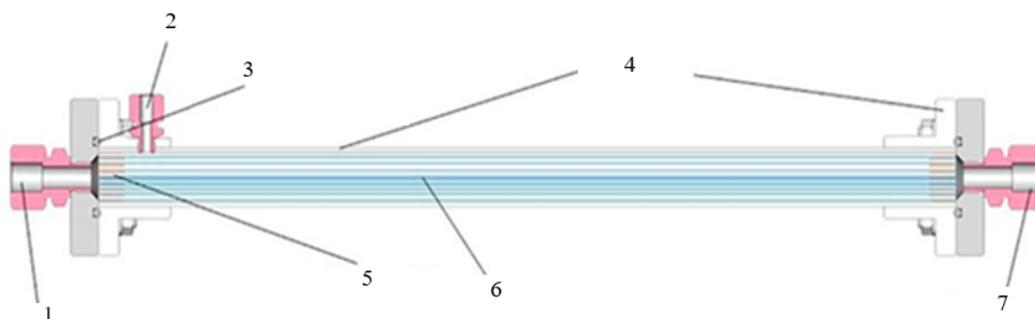


1 – газ ағыны; 2 – концентрат шығысы; 3 – пермеат шығысы; 4 – мембрана ішіндегі газ ағынының бағыты; 5 – пермеат ағынының бағыты; 6 – қабық немесе қорғаныс жабыны; 7 – байланыстырғыш; 8 – пермеатты жинауға арналған перфорацияланған құбыр; 9 и 13 – аралық бөлгіш; 10 и 12 – мембрана; 11 – коллектор; 14 – екі мембрананы байланыстыратын тігіс сызығы

Сурет 7 – Спиральды оралған мембрана [71]

Берілу жағындағы аралық бөлгіштер турбуленттілікті күшейткіш ретінде әрекет ете отырып, екі жалпақ мембрананың жоғарғы қабатын бөледі.

Биосутекті бөлуге арналған қуысты талшықты CO_2 селективті модулінің потенциалды конструкциясының мысалы 8 – суретте көрсетілген. Бұл жағдайда газ қоспасы талшық саңылауларының жағына беріледі. Содан кейін газ қоспасы модульдің екінші жағындағы талшықтар бойымен қозғалады, ал CO_2 талшықтарға еніп, оның талшықтар ішіндегі концентрациясы төмендейді.



1 – ағын; 2 – пермеат; 3 – тығыздағыш сақина; 4 – корпус; 5 – эпоксидті шайырмен тығыздалған талшықтар; 6 – қуыс талшықтар; 7 – ретентант

Сурет 8 – Биосутекті бөлуге арналған қуыс талшықты модульдің конструкциялық сызбасы [70]

Содан кейін сутекке бай ағын модульдің ретентант жағынан шығады. Қаныққан CO_2 пермеат талшықтар мен модуль корпусы арасындағы көлемде жиналады және ол модульді пермеаттың шығатын саңылауынан шығып кетеді. Жоғары өнімді модульді жобалау әрқашан патенттелген ноу-хау ретінде қарастырылатын күрделі мәселе.

1.4 I тарау бойынша қорытынды

Анаэробты мембраналық биореакторларды технологиялық модельдеу саласы салыстырмалы түрде жетілмеген болса да, бұл жүйелерді жобалау, пайдалану және басқаруды жақсарту үшін үлкен әлеуетке ие. Бұл жүйенің өнімділігін одан әрі оңтайландыруға және шығындарды азайтуға, сондай-ақ технологияның қолданылуын арттыруға мүмкіндік береді. Мембраналардың ластануы гетерогенді жағдайда ластаушы материалдың сипатына байланысты әр түрлі болады. Ластаушы заттардың жеке және ұжымдық мінез-құлқын жақсы түсіну биологиялық процестер мен ластану динамикасы арасындағы негізгі өзара әрекеттесуді ұсыну арқылы қалпына келтіру тиімділігін жақсы болжау үшін қажет.

Зерттеу нәтижелері бойынша жанғыш газдарды өндірудің биологиялық әдістерінің мембраналық бөлу әдістерімен үйлесуі, атмосфераға көмірқышқыл газын шығармай жанғыш газдардың қоспаларын алуға мүмкіндік береді деп тұжырымдауға болады.

Жанғыш газ қоспаларын микробиологиялық интегралдық жүйелер көмегімен өндіру мүмкіндігі – тиімді даму жолдарына алып келеді, ал төмен энергия сыйымдылығы оларды өнеркәсіптік әзірлемелер үшін тартымды етеді.

Мембраналық жүйелердегі масса тасымалдау процестерін модельдеуге, сорбат пен сорбенттердің реакция жылдамдығының модельдік коэффициенттеріне, мембраналық материалдарды қоса алғанда, әртүрлі ортадағы диффузия және ерігіштік коэффициенттеріне кіретін анықтамалық мәндерді дәл анықтау кедергі келтіретінін атап өткен жөн.

Сондықтан мұндай процестерді математикалық модельдеу қазіргі уақытта әзірленуде. Интегралдық мембраналық биореакторлардағы масса тасымалдау мен гидродинамикасын CFD модельдеу – биосутек өндірісін оңтайландыруға, сондай-ақ технологияның қолданылуын арттыруға мүмкіндік береді.

2 КЕУЕКТІ МЕМБРАНА АРҚЫЛЫ КӨЛДЕНЕҢ АҒЫННЫҢ НЕГІЗГІ ГИДРОДИНАМИКАЛЫҚ МОДЕЛІ

Есептеу гидродинамика (CFD) әдістері – есептеудің өнімділігінің жоғарылауы мен сандық-математикалық әдістердің дамуына байланысты мембраналық сүзу және бөлу жүйесін талдаудың негізгі құралына айналды. Бұл тарауда кеуекті мембрана арқылы көлденең ағынның негізгі гидродинамикалық моделі қарастырылады. CFD көмегімен мембраналық сүзу және бөлу жүйелерінің әрекетін сипаттайтын әр түрлі тәсілдер егжей-тегжейлі талқыланады.

Тұтқыр сұйықтықтың ағысы массаның сақталуының негізгі принциптерімен және сызықтық импульстің сақталуымен реттеледі, оны сәйкесінше келесі теңдеулермен сипаттауға болады.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (p v u) = \frac{-\partial P}{\partial y} + \nabla \cdot (\mu \nabla v) + S M_y \quad (2)$$

мұндағы ρ – сұйықтың тығыздығы (кг/м^3), v – x бағыты бойынша сұйықтық жылдамдығының компоненті (м/с), P – қысым (Па), μ – тұтқырлық ($\text{Па}\cdot\text{с}$), ал $S M_y$ – y бағыты бойынша бастапқы мүше [72].

Сұйықтық ағынын басқаратын жартылай туындылардағы дифференциалдық теңдеулерді шешу үшін тиісті сандық іріктеу схемалары қолданылуы қажет. Сандық әдістердің үш негізгі түрі бар: соңғы айырмашылық әдісі (САӘ), соңғы элемент әдісі (СЭӘ) және соңғы көлем әдісі (СКӘ). Әр әдістің негізгі сипаттамалары 2 – кестеде келтірілген.

Ламинарлы және турбулентті ағын режимдеріне арналған есептеу әдістерін қолдана отырып, тұтқыр ағынның негізгі теңдеулерін теориялық тұрғыдан шешуге болады. Алайда, турбулентті ағындарда ұзындық пен уақыттың ауқымы әлдеқайда үлкен. Турбуленттілік мәселесін негізгі үш жолмен қарастыруға болады [73]:

– Тікелей сандық модельдеу, мұнда үлкен және кіші турбуленттіліктің барлық масштабтарын шешу үшін нақтыланған есептеу торлары қолданылады. Есептеу ресурстарына қойылатын жоғары талаптарға байланысты, әдетте, бұл практикалық қызығушылық тудыратын мәселелер үшін қиындықтар туғызады;

– Рейнольдс бойынша орташаланған Навье-Стокс әдісінде (RANS), турбулентті қозғалыс уақыт бойынша орташа мәндер тұрғысынан сипатталады, сондықтан уақытқа байланысты ағынның шамалары уақыт бойынша орташа және өзгертін тербелмелі компоненттер түрінде беріледі. Турбуленттіліктің барлық ауқымы тікелей есептеумен салыстырғанда осы әдісті қолдана отырып модельденеді;

– Үлкен көлемді турбуленттілік тікелей есептелетін және кішігірім турбуленттілік орташа уақытты әдістермен модельденетін үлкен құйынды модельдеу (LES). Бұл әдіс барған сайын танымал болып келеді, өйткені ол тікелей сандық модельдеу әдістеріне үлкен есептеу шығындарынсыз кең көлемді турбуленттіліктің қосымша ажыратымдылығын ұсынады.

Кесте 2 – Дискреттеу әдістері сипаттамаларының қысқаша түсініктемесі

Әдіс	Тұжырымдау бойынша ұсыныстар	Тор ерекшеліктері	Шекаралық шарттар
Соңғы айырмашылық әдісі (САӘ)	Тұжырымдау оңай	Торлар екі немесе үш өлшемде құрылымдалуы керек. Қисық торларды құрылымдық декарттық координаттарға айналдыру керек. Күрделі геометрияларды бейімдеу қиынырақ.	Нейманның шекаралық шарттары (шекарада көрсетілген айнымалылардың туындылары) қатаң сақталмайды, тек шамамен.
Соңғы элемент әдісі (СЭӘ)	Тұжырымдау кем қарапайым	Күрделі геометрияларды бейімдеу оңайырақ. Декарттық емес координаттар және құрылымданбаған торлар мүмкін.	Нейманның шекаралық шарттары дәл орындалады.
Соңғы көлем әдісі (СКӘ)	САӘ немесе СЭӘ негізінде тұжырымдалуы мүмкін	Тұжырымға байланысты (САӘ немесе СЭӘ).	Нейманның шекаралық шарттары дәл орындалады.

Мембраналық каналдардың гидродинамикасын зерттеу негізінен [74] кеуекті қабырғалары бар тікбұрышты каналдағы ламинарлық ағынды зерттеуден басталды, онда каналдың көлеміне, сұйықтықтың қасиеттеріне және каналдағы орналасуына байланысты сұйықтықтың жылдамдығы мен қысымы туралы өрнектер алынды. Өрнектер Навье-Стокс теңдеулерінен келесі болжамдармен алынды:

- тұрақты жағдай үстемдік етеді;
- сұйық сығылмайды;
- сұйықтыққа ешқандай сыртқы күштер әсер етпейді;
- ағын ламинарлы;
- канал қабырғаларынан шығатын сұйықтықтың жылдамдығы орынға байланысты болмайды.

Алынған негізгі нәтижелер кеуекті каналдағы қысымның төмендеуі кеуекті емес каналға қарағанда едәуір аз және каналда байқалған жылдамдық профилі Пуазейл ағынының классикалық параболалық профиліне қарағанда центрге жақын және қабырғаларға жақын орналасқан.

Кейінгі зерттеулерді Friedman M. [75], тұтқыр сұйықтығы бар кеуекті түтік үшін жүргізді, оны әрі қарай ауыспалы қабырғалық сору жағдайында Mizushima T және т.б. [76] нақтылады. Берманның көзқарасын [74] S.K. Karode де [77] кеңейтті, ол кеуекті қабырғадан шығатын сұйықтықтың жылдамдығы тұрақты емес, бірақ жергілікті трансмембраналық қысымға пропорционалды екенін айтты. Бұл қайта қаралған аналитикалық шешім Берманның тұрақты қабырға жылдамдығының нәтижелерімен жақсы келісімін көрсетті.

Кеуекті мембрана арқылы ламинарлық ағынның соңғы сандық өңдеулері мембраналық модульдің негізгі "каналы" арқылы сұйықтықтың қозғалысын сипаттау үшін Навье-Стокс теңдеулерін және мембраналық модульдің кеуекті қабырғалары арқылы сұйықтық ағынын сипаттау үшін Дарси теңдеуін қолдана отырып, ұқсас тәсілді ұстанды. Цилиндрлік құбыр арқылы өтетін жағдай үшін үзіліссіздік теңдеулері мен Навье-Стокс теңдеулерін цилиндрлік координаттарда келесідей жазуға болады:

$$\frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} = 0, \quad (3)$$

$$\rho v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \rho v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{\partial \rho}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial r} \left(2\eta \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) - 2\eta \frac{\partial v_r}{\partial r} + 2\eta \frac{v_r}{r^2} - \frac{\partial}{\partial z} \left[\eta \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \right] - \rho g_r, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \rho v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \rho v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{\partial \rho}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) - \frac{\eta}{r} \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) - \\ - \frac{\partial}{\partial r} \left[\eta \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \right] - \rho g_r = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

мұндағы r және z сәйкесінше радиалды және осьтік координаттар.

Сол сияқты Дарси теңдеуін төмендегідей жазуға болады:

$$\frac{\mu_f}{L_r} v_r + \frac{\partial P}{\partial r} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\mu_f}{L_z} v_z + \frac{\partial P}{\partial z} = 0 \quad (7)$$

мұндағы μ_f – сүзгіш тұтқырлығы, ал L_r және L_z – сәйкесінше радиалды және осьтік бағыттағы кеукті қабырғаның өткізгіштігі, v_r және v_z – сәйкесінше радиалды және осьтік бағыттағы жылдамдық компоненттері, P – қысым.

Бұл тәсілдің мысалы ретінде, соңғы элемент әдісін қолдана отырып, екі теңдеулер жүйесін байланыстыру әдісін ұсынған Нассехидің [78] жұмысынан алуға болады. Дарси теңдеуінде екінші ретті туындылардың болмауы екі теңдеу жүйесін біріктіруде қиындықтар туғызады. Демек, екінші ретті мүшелері бар Бринкман теңдеуі (төменде көрсетілген) кейде Дарси теңдеуінің орнына қолданылады, өйткені Бринкман теңдеуі идеалды емес, жоғары кеуктілермен шектелген, әдетте, мембраналық модульдерде кездеспейді. Бринкман теңдеуі келесідей түрде болады

$$\Delta P - \mu^* \nabla^2 v = -\frac{\mu}{K} v \quad (8)$$

мұндағы μ^* – кеукті қабырға арқылы өтетін сұйықтықтың тиімді тұтқырлығы, K – Дарси өткізгіштігі, μ – Ньютондық тұтқырлық, v – жылдамдық.

Нассехи бұл мәселені Лагранж элементтерін қолдануға негізделген Галеркиннің соңғы элементтерінің сызбасын жасау арқылы шешті, онда кеукті қабырғаны шешім аймағының қалған бөлігімен байланыстыратын элементтер қабаты біріктірілген ағын өрісін білдіретін етіп алынды. Яғни, кеукті қабырғада орналасқан түйіндерге сәйкес келетін қаттылық матрицаларындағы элементтер Дарси теңдеуінен іріктелгенге ауыстырылады, ал қалған матрицалар Навье-Стокс теңдеулеріне сәйкес қалады. Нәтижелер схеманың тиімді екенін және ағынның үздіксіздігін дәл сақтағанын көрсетті [78].

Навье-Стокс және Дарси теңдеулерін байланыстырудың тағы бір әдісін Damaк К. және т.б. [79] көрсетті. Қабырғаның өткізгіштігі L_v осьтік және радиалды бағытта бірдей болатынын және ағын мен сүзгіштің тұтқырлығы η бірдей болатынын болжады. Бұл кеукті қабырға арқылы ағынды түтік арқылы еркін ағынды басқаратын Навье-Стокс теңдеулерінің шекаралық шарты ретінде қарастыруға мүмкіндік береді. Шекаралық шартты келесі түрде жазуға болады:

$$v_r = \frac{L_r}{\eta} + \frac{\Delta P}{e}, \quad v_z = 0 \quad \text{егер } r = R, \text{ және } 0 \ll z \ll L \quad (9)$$

мұндағы e – кеукті қабырғаның қалыңдығы, ΔP – трансмембраналық қысым, ал R және L – сәйкесінше құбырдың радиусы мен ұзындығы.

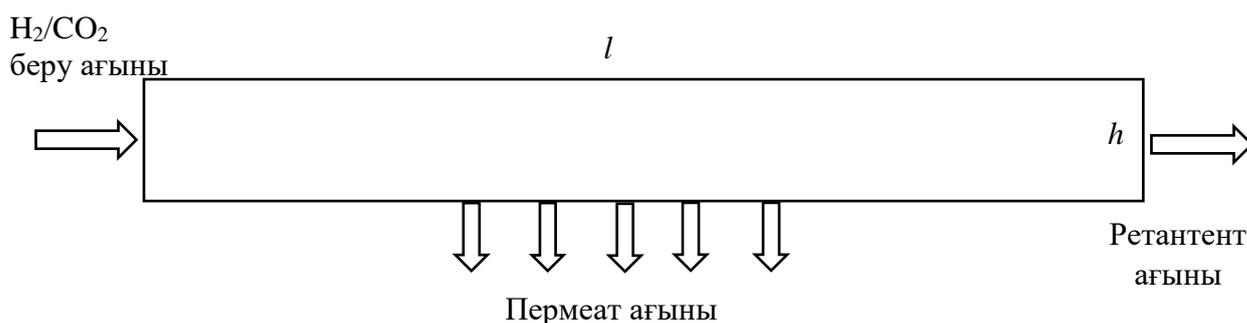
Қабырғаға осьтік жылдамдықты орнатудың негіздемесін Schmitz P. және Prat M. [80] жүргізген жұмыста осьтік жылдамдық нөлге дейін орнатылады, бұл қабырғаның кеукті бетіндегі сырғу жылдамдығы шамалы екенін көрсетті. Содан кейін Навье-Стокс теңдеулерін соңғы айырмашылық әдісімен шешуге болады. Модель эксперименттік түрде өлшенген жылдамдық профильдерімен салыстыру арқылы сыналды және жақсы келісімді көрсетті. Нәтижелер сонымен қатар Берман [74] алдын-ала болжаған Пуазейлдің параболалық профилінің ауытқуы, қабырғаның сіңуіне тікелей байланысты екенін көрсетті.

2.1 2D көлденең ағынның гидродинамикалық модель геометриясы, шекаралық және бастапқы шарттары

Мембраналық бөлу процесінің ең негізгі гидродинамикалық моделі екі өлшемді (2D) тікбұрышты мембраналық каналдан тұрады, онда бір немесе екі қабырға өткізгіш болып саналады. Бұл конфигурация концентрациялық поляризацияның әсерін зерттеу үшін мембрана геометриясының диапазонын жергілікті түрде көрсетуге жеткілікті. 2D-ге дейін жеңілдету көптеген мембраналық канал арақатынасының төмен екендігін ескере отырып негізделген және есептеу тұрғысынан айтарлықтай арзан [81]. FLUENT бағдарламалық жасақтама пакеті (Ansys, Inc., АҚШ) мембраналық каналдың гидродинамикасының барлық симуляцияларында қолданылады. FLUENT – бұл жалпы мақсаттағы есептеу гидродинамикасының жиынтығы, ол тордың біріктірілген орналасуы бар элементтерге негізделген соңғы көлем әдісін қолданады, сондықтан бақылау көлемдері барлық тасымалдау теңдеулерінде бірдей болады. Үзіліссіздік және импульстің сақталу заңының теңдеулері бір жүйе ретінде бір уақытта біріктіріліп шешіледі.

Осылайша, бұл модельдеудің мақсаты CFD-дің мембраналық бөлу процесінің толық болжамды моделін қамтамасыз ету үшін мембраналық бөлудің негізгі модельдеу құралы ретінде пайдалылығын анықтау болып табылады.

Модель геометриясы 9 – суретте көрсетілгендей тікбұрышты каналдан тұрады. Канал арқылы өтетін ағын x осі бойымен бағытталған және кіріс беті арқылы $x=0$ нүктесіне енеді. Ағын каналдан концентрация беті арқылы $x=l$ нүктесінен шығады, ал ену $y=-h$ нүктесінде каналдың төменгі бетінің біреуі немесе екеуі арқылы және $y=h$ нүктесінде каналдың жоғарғы беті арқылы өтеді, ол мембрананың беттерін көрсетеді. Айта кету керек, 9 – суретте бұл ену тек каналдың төменгі беті арқылы көрсетілген. Каналдың сол және оң жақ "қабырғалары" оссиметриялық ағынның болжамымен байланысты.



Сурет 9 – Кеуекті мембраналық канал арқылы ламинарлық ағынның негізгі 2D моделіне арналған модель геометриясы

Каналдың ені (яғни, ені бірдей элементтің қалыңдығы), әдетте, тордағы ең кіші ұяшықпен бірдей болуы керек. Бұл қарапайым геометрия үшін қарапайым тікбұрышты призмалық элементтер қолданылды, модельді кез-келген еркін 2D немесе 3D геометрияға жалпылауға болады.

Шекаралық шарттар каналдың кірісінде осьтік жылдамдық профилі түрінде және каналдың шығысында орташа статикалық қысым түрінде беріледі. Каналға кіре берісте ламинарлық ағынның профилі біркелкі деп болжанады.

Ерітіндінің көлемдік құрамы каналға кіре берісте әр ерітінді үшін ерітіндінің массалық үлесі түрінде көрсетіледі және ерітіндінің бастапқы жағдайы мембраналық каналдың бүкіл көлемі бойынша осы массалық үлесті қолдана отырып, FLUENT шешушісімен автоматты түрде жасалады.

Каналдың ұзындығы l және h биіктігінің жартысы екенін ескере отырып, шекаралық шарттар келесідей алынды

$$x = 0, \forall y, u = u_0, v = 0, \omega_A = \omega_{A0}, \quad (10)$$

$$x = l, \forall y, \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \frac{\partial \omega_A}{\partial x} = 0 \quad (11)$$

мұндағы u_0 – канал кірісіндегі газ ағынының жылдамдығы, ω_A – канал кірісіндегі көмір қышқыл газының массалық үлесі.

Мембрана арқылы пермеат ағынын көрсету үшін мембрананың бетіне масса ағыны қолданылады. Бұл жағдайда мембрананың бетіндегі әрбір есептеу нүктесінде мембрана ағынының көбейтіндісі ретінде масса сіңіргіш қолданылады.

$$J_v = L_v (\Delta P - \Delta \Pi_w) \quad (12)$$

мұндағы L_v – мембрананың гидродинамикалық өткізгіштігі, ΔP – трансмембраналық қысым, ал $\Delta \Pi_w$ – мембрана бетіндегі қоректік ерітінді мен пермеат арасындағы осмостық қысымның айырмашылығы.

Трансмембраналық қысым модельге нақты қолданылмайды, өйткені жоғарыда айтылғандай дөңгелектеу қатесіне байланысты мембрана бетіне жақын орналасқан шағын қысым градиенттерінің ажыратымдылығы төмендейді. Оның орнына, трансмембраналық қысым жай ғана кіріс параметрі ретінде пермеат ағынын білдіретін массалық ағынның өрнегін есептеу үшін қолданылады. Пермеаттағы ерітіндінің массалық үлесі мембрана бетіндегі әрбір есептік нүктеде көрсетіледі.

$$\omega_{i,p} = \omega_{i,w} (1 - R_i) \quad (13)$$

мұндағы $\omega_{i,p}$ және $\omega_{i,w}$ – i ерітіндісінің пермеат ағынындағы және мембрананың бетіндегі массалық үлестері, ал R_i – i ерітіндінің ауытқуы. Белгілі бір еріген заттың белгілі бір мембранадан ауытқуы көбінесе экспериментті түрде анықталады, алайда, көп жағдайда экспериментті қолданбай-ақ, ерітіндінің ауытқуын болжауға болады.

Симметрия шарты 2D модельдеуге мүмкіндік беру үшін мембраналық каналдың сыртқы "қабырғалары" үшін қолданылады (X-Y жазықтығына параллель). Мембраналық каналдың қалған жоғарғы және төменгі қабырғалары стандартты шекаралық шарттарды қолдана отырып, x бағытында сырғып кетпестен, жоғарыда айтылғандай мембрананың беті арқылы өткізгіштігін көрсету үшін масса сіңіргішімен қолданылады. Y бағыты бойынша жылдамдықты FLUENT шешімі автоматты түрде жергілікті тасымалдау қасиеттеріне және ерітінді мен ауытқудың жергілікті массалық үлесінің функциясы болып табылатын масса сіңіргіш мүшесі салған пермеат ағынына негізделген.

Модельдеуге арналған модельдің кіріс параметрлері 3 – кестеде келтірілген.

Кесте 3 – Модельдің кіріс параметрлері

Параметр	Мәні
Мембраналық канал ұзындығы l	200 мм
Мембраналық каналдың биіктігі h	2 мм
Мембраналық канал ені w	тордың ең кішкентай элементінің мөлшеріне тең
Кірістегі Рейнольдс саны Re	200, 400 , 600, 800
CO ₂ – нің кірістегі массалық үлесі	0,1
H ₂ және CO ₂ газ қоспасының тығыздығы, ρ	0,126 кг/м ³
300 К температурадағы газ қоспасының динамикалық тұтқырлығы	8,65*10 ⁻⁵ Па с
Диффузия коэффициенті, D	5.76*10 ⁻⁵ м ² /с

2.2 Мембрана бетінде концентрациялық поляризация әсерінің қосылуы

Кеуекті қабырғаларды өңдеуге концентрациялық поляризация әсерін қосу қосымша қиындықтар туғызады. Концентрациялық поляризация нәтижесінде пайда болған шекаралық қабатты, мембранаға қарағанда өткізгіштігі төмен екінші кеуекті қабырғаның бір түрі ретінде қарастыруға болады. Бұл жағдайды модельдеудегі негізгі қиындық, қабырғадағы концентрацияның тиісті шекаралық шарттарын анықтау болып табылады, өйткені ерітіндінің концентрациясы қабырғада үнемі өзгеріп отырады, ал бөлшектердің тұнбасына

байланысты кабырға геометриясының өзі уақыт өте келе өзгеруі мүмкін. Мұны ескеру үшін төменде талқыланған бірнеше тәсілдер әзірленді.

Бұл мәселеге қатысты салыстырмалы түрде қарапайым тәсілді L. Huang және M.T. Morrissey [82] қолданған болатын. Олар сұйықтық жылдамдығын Берман әдісіне ұқсас [74] әдіспен анықтау үшін Навье-Стокс теңдеулерін шешу арқылы тікбұрышты көлденең ағыны бар ультрасүзгілік мембранадағы концентрациялық поляризациялық шекара қабатының дамуын модельдеу үшін соңғы элемент әдісін қолданды. Содан кейін олар шекара қабатының қалыптасуын сипаттайтын, соңғы элемент әдісінің көмегімен конвективті диффузиялық масса тасымалдау теңдеуін шешу үшін қолданылды:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{v}{H} \frac{\partial C}{\partial \lambda} = \frac{D}{H^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \lambda^2}. \quad (14)$$

Төмендегі шекаралық шарттар

$$\frac{\partial C}{\partial \lambda} = 0 \text{ егер } \lambda = 0, \quad (15)$$

$$\frac{\partial C}{\partial \lambda} = \frac{J_w C}{D} \text{ егер } \lambda = 1, \quad (16)$$

$$C = C_0 \text{ егер } x = 0 \quad (17)$$

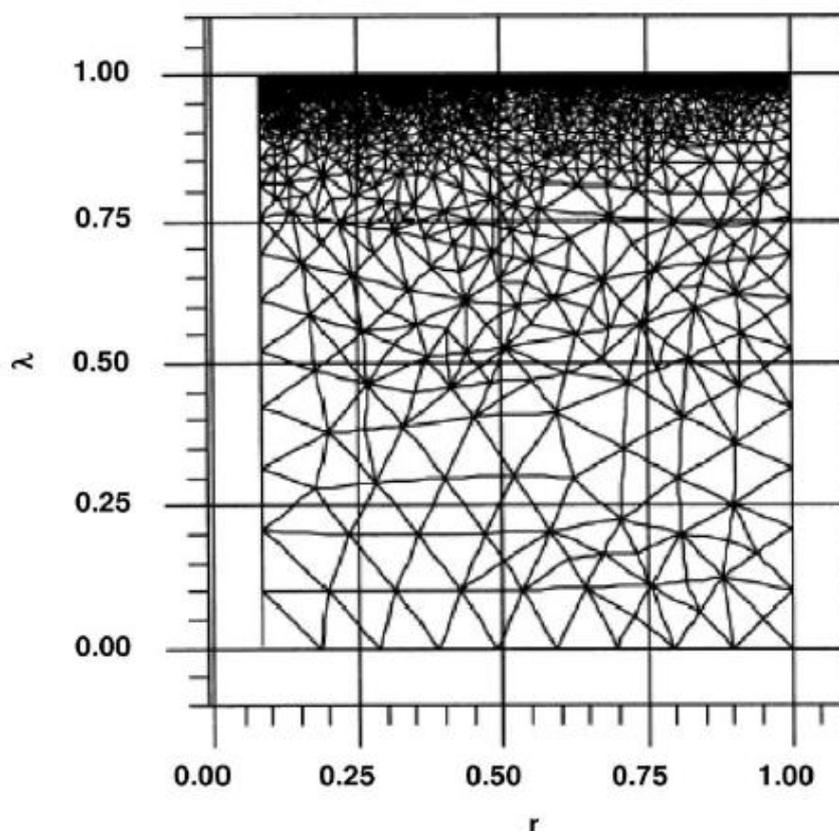
мұнда J_w (18) теңдеуге сәйкес анықталады.

$$J_w = \frac{\Delta P - \Delta \Pi}{\eta R_M} \quad (18)$$

мұндағы η – еріткіштің динамикалық тұтқырлығы, R_M – таза мембрананың кедергісі, ΔP – трансмембраналық қысым, $\Delta \Pi$ – осмостық қысымның айырымы, λ – өлшемсіз вертикаль арақашықтық.

Үлкен концентрация градиентін шекаралық қабаттың жанында орналастыру үшін мембрана бетінде ұсақ торы бар Pdease2D[®] соңғы элементтер пакеті 10 – суретте көрсетілгендей қолданылды.

Симуляция нәтижелері альбумин ерітінділерінің көмегімен эксперименттік нәтижелермен салыстырылды. Нәтижелер пленка теориясы мен гель поляризациясының классикалық модельдері болжаған диффузия коэффициенті мен концентрация поляризациясының шекаралық қабатының қалыңдығы арасындағы сызықтық байланысты көрсетті. Модель, сонымен қатар мембрана бетіндегі масса тасымалдау коэффициенті мен концентрациясы бойынша эксперименттік болжамдармен жақсы келіседі [82].



Сурет 10 – Концентрациялық поляризацияның құбылысын модельдеу үшін пайдаланылатын соңғы элементтер торы [82]

С.Ж. Richardson мен V. Nassehi [83], кеуекті қабырғалары бар жерлерде шешім біркелкі араласпайды деп болжап, күрделі тәсілді қолданды. Әр уақыт қадамында сұйықтықтың физикалық қасиеттері (тұтқырлық пен тығыздық) әр есептелген концентрация қатынастарын қолдана отырып жаңартылады. Олардың моделінде канал көлеміндегі сұйықтықтың ағыны Навье-Стокс теңдеулерімен сипатталады, ал массаның кеуекті қабырға арқылы берілуі, екі өлшемді конвективті дисперсия теңдеуімен келесідей сипатталады

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} = \left[\frac{\partial}{\partial x} D(C) \right] \frac{\partial C}{\partial x} + \left[\frac{\partial}{\partial y} D(C) \right] \frac{\partial C}{\partial y}. \quad (19)$$

Ағынның және конвективті диффузияның теңдеулерін шешу ажыратылған түрде жүзеге асырылады, яғни, жеке қадамдарда Навье-Стокс теңдеулері жылдамдық пен қысым өрістерін алу үшін шешіліп, содан кейін жылдамдық өрісі конвективті диффузия теңдеуін шешу үшін қолданылады. Содан кейін тығыздық пен тұтқырлық, жылдамдық пен концентрацияның ағындағы мәндерін қолдана отырып жаңартылады және процесс ерітінді кеткенше қайталанады. Тығыздық концентрациядан анықталатын қатты заттың көлемдік үлесінің бірліктерімен және төменде көрсетілгендей қатты ρ_s және сұйық ρ_f тығыздығымен төменде көрсетілгендей есептеледі

$$\rho = \rho_s \Phi + \rho_f (1 - \Phi). \quad (20)$$

Тұтқырлық екі сатылы процесс арқылы есептеледі, онда тұтқырлық алдымен дәрежелік заңының келесі моделін қолдана отырып өзгертіледі

$$\eta = \eta_0 \gamma^{\bullet n-1} \quad (21)$$

мұндағы η_0 – сәйкестік коэффициенті, n – дәрежелік заңының индексі, ал γ – ығысу жылдамдығы.

Содан кейін тұтқырлық келесі қатынас арқылы қатты заттардың көлемдік үлесі үшін өзгертіледі

$$\frac{\eta_f}{\eta} = 1 + \Lambda \Phi \quad (22)$$

мұндағы η_0 – тасымалдаушы сұйықтықтың тұтқырлығы, Λ – эксперименттік түрде құрылған эмпирикалық фактор, Φ – қатты заттардың көлемдік үлесі.

Бұл теңдеулер соңғы элементтер әдісімен Петров-Галеркиннің жетілдірілген техникасын қолдану арқылы шешілді. Нәтижесінде, модель, әртүрлі аудандар үшін, соның ішінде жазық және иілген кеуекті қабырғалар үшін тасымалдау үлгілерінің ағындарын да, массаларын да болжай алатындығын көрсетті.

S. Geissler және U. Werner [84] мембранада тұнба қабатының пайда болуын ескере отырып, жазық мембраналық жүйеде көлденең ағын фильтрациясын модельдеді. Шөгінді қабатының өсуі концентрациялық поляризацияға байланысты, бөлшектердің мембранаға конвективті тасымалын және басқа бағыттағы диффузиялық тасымалын ескере отырып модельденді. Модельді әзірлеу кезінде келесі болжамдар жасалды:

- ағын екі өлшемді, сығылмайтын, ламинарлы және Ньютондық суспензиясының жергілікті тұтқырлығымен η_{sus} сипатталады;
- сұйықтықтың ішіндегі бөлшектер бейтарап жүзгіш;
- өткізгіште бөлшектер жоқ;
- түзілген тұнба қабаты қозғалыссыз.

Бөлшектердің жүйе ішіндегі тасымалын сипаттау үшін төмендегі теңдеулер арқылы сипатталады.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(uC - D^* \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(vC - D^* \frac{\partial C}{\partial y} \right) = 0, \quad (23)$$

$$D^* = \widehat{D}_\Phi r_p^2 \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (24)$$

$$v_f(x) = \frac{\Delta P(x)}{\eta [R_M + R_k(x)]}, \quad (25)$$

$$R_k(x) = \frac{\delta_k(x)}{K_k}, \quad (26)$$

$$d\delta_k(x) = \frac{[dm_k(x) - dm_{\text{diff}}(x)] dt}{\rho_p (1 - \varepsilon_k) dA(x)} \quad (27)$$

мұндағы D^* – ығысудан туындаған диффузия коэффициенті, \widehat{D}_Φ – өлшемсіз диффузия коэффициенті, r_p – бөлшектердің радиусы, u және v – мембранаға қатысты осьтік және қалыпты мөлшердегі жылдамдық, R_k – тұнбаның гидравликалық кедергісі, v_f – пермеат жылдамдығы, K_k – тұнбаның өткізгіштігі, δ_k – тұнбаның биіктігі, ε_k – тұнбаның кеуектілігі, m – масса ағыны, ал k және diff индекстері сәйкесінше тұнба мен диффузияны білдіреді.

Модель, пермеат ағыны мен шөгінді қабатының биіктігі эксперименттік бақылау арқылы сыналды және жақсы келісімді көрсетті (болжамды мәндердің 15% шегінде). Дегенмен, модель пайдалы нәтижелерге қол жеткізу үшін эксперименттік деректерді талдау арқылы эмпирикалық параметрлерді (атап айтқанда, тұнба қабатының гидравликалық кедергісін) анықтауды талап етеді.

Y. Lee мен M.M. Clark [85] тікбұрышты көлденең ағынды ультрасүзгілеу жүйесі үшін тұнбаларды қалыптастырудың жетілдірілген моделін жасады. Тағы да, масса тасымалдау екі өлшемді конвективті дисперсия теңдеуімен өрнектеледі, ал стационарлық концентрация өрісін келесі теңдеулерді шешу арқылы алуға болады

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}. \quad (28)$$

Келесі шекаралық шарттар арқылы

$$x = 0, \quad y = C_B, \quad (29)$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial y} \right)_{y=0} = 0, \quad (30)$$

$$\left(vC - D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right)_{y=H_0} = 0 \quad (31)$$

мұндағы H_0 – канал биіктігінің жартысы, ал D_y – көлденең бағыттағы диффузия коэффициенті.

(31) теңдеу мембрананың бетінде бөлшектердің жинақталмауы (яғни, тұрақты күйге жету) дегенді білдіреді, бұл толық ауытқу мембранасына қатысты. Содан кейін стационарлық модель шөгінділердің пайда болуына байланысты ағынды төмендетудің қадамдық псевдостационарлық моделін ұсынуға бейімделеді. Бұл C_w мембранасының бетіндегі бөлшектердің концентрациясы $C_{\max} = \rho_p (1 - \varepsilon_k)$ және ол шекті мәнінен аспайды және бөлшектердің артық мөлшері бетінде тұнба қабатын қалыптастыру үшін біріктіріледі деген болжаммен жасалады.

Осмостық қысым наносүзгілік мембраналарында маңызды рөл атқарады. Бірнеше авторлар осмостық қысым эффектісін CFD моделіне қосуға тырысты, оған кеуекті мембрана қабырғасының шекаралық шарттары кіреді, оларды осмостық қысым функциясы ретінде көрсетуге болады.

Geraldes V. және т.б. [86], саңылау түріндегі канал конфигурациясы ретінде модельдеуге болатын спиральды және пластиналы қаңқалы жүйелердегі наносүзгілеу процестерін модельдеу үшін соңғы көлемдік әдісті қолдана отырып, сандық модель әзірледі (яғни, канал биіктігі каналдың ұзындығы мен енімен салыстырғанда өте аз). Бұл геометриялар концентрация поляризациясының шекаралық қабатының әсері маңызды операциялық мәселе екенін білдіреді. Geraldes V. және т.б. [86], жасаған модель осмостық қысым әсерін қоса алғанда, еріген заттың мембранада тасымалдануын ескеретін шекаралық шарттармен сұйық фазаны имитациялау үшін CFD қолданады. Сұйықтықты имитациялау үшін қолданылатын үзіліссіздік теңдеулері, қозғалыс теңдеулері және тасымалдау теңдеулері келесідей болды:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0, \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial y} = & -\frac{\partial P}{\partial x} + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] - \\ & - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right], \end{aligned} \quad (33)$$

$$\frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} + 2\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\right] - \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial y}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right)\right], \quad (34)$$

$$\frac{\partial(\rho u\omega_A)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\omega_A)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\rho D_{AB}\left(\frac{\partial\omega_A}{\partial x}\right)\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\rho D_{AB}\left(\frac{\partial\omega_A}{\partial y}\right)\right] \quad (35)$$

мұндағы ω_A – А ерітіндісіндегі бөлшектердің массалық үлесі, ал D_{AB} – массалық диффузияның бинарлық коэффициенті. Каналдың ұзындығы l және h биіктігінің жартысы екенін ескере отырып, шекаралық шарттар келесідей анықталады

$$x=0, \forall y, u=u_0, v=0, \omega_A=\omega_{A0}, \quad (36)$$

$$x=l, \forall y, \frac{\partial u}{\partial x}=0, \frac{\partial v}{\partial x}=0, \frac{\partial\omega_A}{\partial x}=0, \quad (37)$$

$$y=0, \forall x, u=0, \rho v=\rho_p v_p, \rho D_{AB}\frac{\partial\omega_A}{\partial y}=\rho_p v_p \omega_A f' \quad (38)$$

мұндағы u_0 – канал кірісіндегі газ ағынының жылдамдығы, ω_A – канал кірісіндегі көмір қышқыл газының массалық үлесі, f' – ішкі ауытқу коэффициенті, ал p индексі пермеатқа қатысты қасиеттерді білдіреді. Ішкі ауытқу коэффициенті f' Диннің тасымалдау үлгісімен сипатталуы мүмкін

$$f' = \left(1 + \frac{8u}{r_0^2} \frac{HD_{AB}^0}{\Delta P}\right)^{-1} \quad (39)$$

мұндағы r_0 – мембраналық саңылаулардың орташа радиусы, H – ерітіндінің диффузиялық тасымалына кедергі келтіретін фактор, ал D_{AB}^0 – шексіз сұйылту кезінде бинарлық массалық диффузия коэффициенті.

Пермеаттың жылдамдығы трансмембраналық қысым мен осмостық қысымға байланысты. Алайда, басқа зерттеушілердің жұмыстарында [87,88] мембрана бетіндегі ерітінді концентрациясының жоғарылауымен пермеат жылдамдығы төмендейтіні анықталды (яғни концентрациялық поляризация қабаты болған кезде). Осылайша, мұны түсіндіру үшін авторлар концентрацияға байланысты түзету коэффициентін енгізді. Содан кейін пермеат жылдамдығы келесідей анықталады

$$v_p = -\Lambda \omega_{Am} A_h (\Delta P - \Delta \Pi), \quad (40)$$

$$\Delta \Pi = \Pi (\omega_{Am} - \omega_{Ap}) \quad (41)$$

мұндағы v_p – пермеат жылдамдығы, A_h – мембрананың гидравликалық өткізгіштігі, ал m және p индекстері сәйкесінше мембрана бетіне және пермеатқа қатысты. Жоғарыда келтірілген теңдеулер соңғы көлемді тұжырымдау арқылы іріктелді. Есептеу нәтижелерін салыстыру эксперименттік нәтижелермен тамаша келісімді көрсетті. Түзету коэффициентін пайдаланбай, пермеат жылдамдығын сипаттау үшін бірдей тәсілдерді D.F. Fletcher мен D.E. Wiley [89] және J.M. Miranda мен J.V. Campos [90] қолданды.

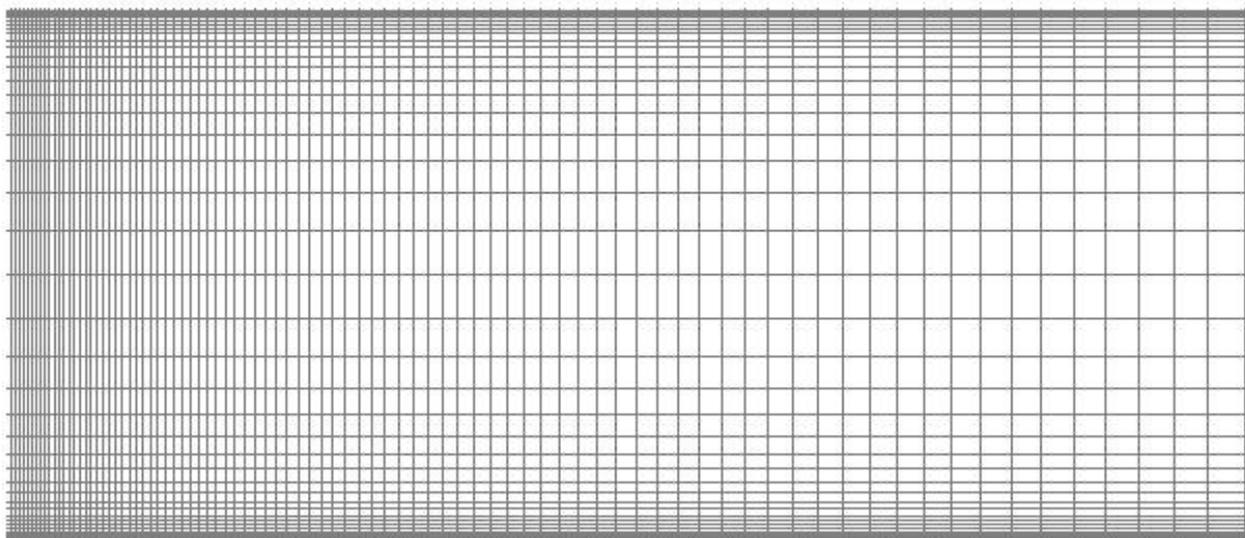
Концентрациялық поляризация – қабылданбаған ерітінді мембрана бетінің жанында жиналып, шекаралық қабатты құрайтын кезде пайда болады [91]. Еріген заттың бұл жинақталуы бастапқы материалға диффузиялық ағынды тудырады, ол ақырында еріген заттың мембрана бетіне ағыны мембрана арқылы өтетін ағынның мембрананың бетінен диффузиялық ағын қосындысына тең болатын тұрақты күйге жетеді. Бұл шекаралық қабаттың орнатылуы мембраналық қабаттың кейінгі ластануын қамтамасыз етеді; Концентрациялық поляризация қабатын азайту немесе алып тастау мембраналық зерттеудің негізгі мақсаты болып табылады.

Мембраналық каналдағы базалық деңгейдегі концентрация поляризациясының әсерін модельдеу үшін FLUENT-те көп компонентті ағын опциясы қолданылады. Бұл газ компоненттері микроскопиялық деңгейде араласады, сондықтан олардың қысым, жылдамдық және температура өрістері бірдей болады және масса тасымалдау тек конвекция мен диффузия арқылы жүреді деп болжайды. Бұл болжамдар мембраналық фильтрацияны қолданудың көпшілігінде орынды.

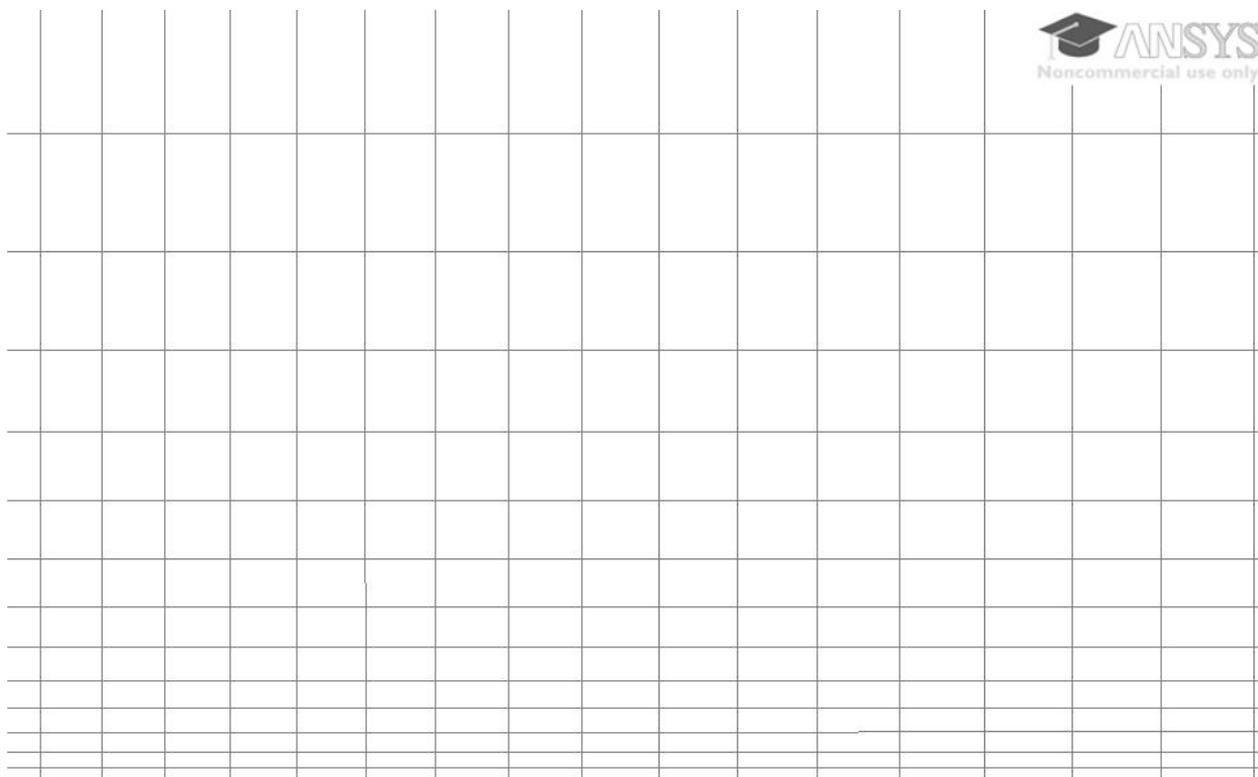
Концентрациялық поляризацияның мембрананың бетіндегі әртүрлі нүктелердегі ерітіндінің өткізгіштігіне әсерін сипаттау үшін ерітіндінің диффузия коэффициенті, тығыздығы және тұтқырлығы сияқты тасымалдау қасиеттері есептеу аймағында ерітінді концентрациясының функциясы ретінде кеңістікте өзгеруі қажет. Қарапайым тәсіл мен бақылау мысалы Geraldes және т.б. [86] жұмысынан алынды, онда бірнеше қосылыстардың сулы ерітінділерінің тұтқырлығы, диффузиялық қабілеті және осмостық қысымы ерітіндінің массалық үлесінің көпмүшелік функциялары ретінде сипатталады.

Мембрана бетіне жақын жерде концентрациялық поляризацияның жұқа шекаралық қабатын жеткілікті түрде шешу үшін, торды едәуір кішірейту қажет. Алдыңғы гидродинамикалық модельдерде торлардың қатынасы шамамен 30-60 болғанда, қолайлы нәтижелер көрсетті. Ол Geraldes және т.б. [86] геометриясын қолдана отырып, тордың тәуелсіздігін зерттеудің бастапқы нүктесі ретінде пайдаланылды. Соңғы таңдалған тор конфигурациясы 60 тік ұяшыққа 200 осьтік ұяшықтан тұрды, тор өлшемі тік бағытта өзгерді, осылайша ең үлкен тор

ұяшығының биіктігі (каналдың ортасында) ең кішкентай тор ұяшығынан (мембрана қабырғасының беті) 334 есе үлкен болды. Есептеу торының иллюстрациялық бөлігі 11, 12 – суреттерде көрсетілген.



Сурет 11 – Канал кірісіндегі концентрациялық поляризациялық шекаралық қабатын ескеру үшін 2D каналға арналған есептеу торы



Сурет 12 – Мембрана бетіндегі концентрациялық поляризациялық шекаралық қабатын ескеру үшін 2D каналға арналған есептеу торы

Сонымен қатар, модельдің бастапқы көрінісі концентрациялық поляризацияның шекаралық қабатының "алдыңғы шетін" біртіндеп сипаттау үшін каналға кіре берісте қосымша нақтылау қажет екенін көрсетті. Тор кірістегі алғашқы ұяшықтардың бір-біріне қатынасы бірдей болатындай етіп алынды. X осі бойынша біртіндеп $X=30$ мм-ге дейін ұлғайып, содан кейін ұяшықтар каналдың қалған бөлігі үшін бірдей ұзындыққа ие болды.

2.3 Мембраналық масса тасымалын болжау және масса тасымалдау коэффициентін анықтаудың аналитикалық әдісі

Осы тарауда талқыланған CFD модельдерінің көпшілігі әдетте мембраналық каналдағы немесе модульдегі гидродинамикалық шарттарды модельдеуге тырысты. Мембрананың ең маңызды қасиеті не екенін, атап айтқанда, қоректену ағынынан компоненттерді іріктеп алып тастау мүмкіндігін елемейді; яғни мембрананың өзі арқылы массаның берілуі. Болжамды масса тасымалдау моделін CFD моделімен біріктіру арқылы мембраналық сүзу және бөлу процесінің ақылға қонымды моделін жүзеге асыруға болады [92]. Алайда, қысыммен басқарылатын мембраналық фильтрацияның әртүрлі түрлеріндегі алып тастау механизмдеріне байланысты, бір модель мембрананың масса тасымалдауын тұтастай сипаттай алмайды. Төмен қысымды процестер үшін, шикізат ағынындағы бөлшектердің компоненттері ортақ және мембрананың саңылаулары салыстырмалы түрде үлкен болған кезде, CFD моделінің өзінде кеуекті мембрананың микроқұрылымы арқылы ағынды нақты модельдеуге болады деп болжауға болады. Яғни, егер мембраналық кеуек саңылауларының құрылымдық геометриялық моделін жасау мүмкін болса, онда осы жүйелердің жұмысын болжау үшін мембраналық микроқұрылымда бөлшектерді бекіту мен бөлуді модельдеу үшін кейбір әдіспен біріктірілген коммерциялық CFD пакеттеріне кіретін стандартты Лагранж бөлшектерін тасымалдау модельдерін қолдануға болатын еді. Бұл бөлшектерді тасымалдау модельдерінде бөлшектер негізінен CFD ағынының аймағына енгізіледі, содан кейін бөлшектердің орналасуын, жылдамдығын, температурасын және массасын сипаттайтын дифференциалдық теңдеулерді шешу арқылы аймақ арқылы бақыланады [106]. Алайда, кейбір күрделі қиындықтар бұл тәсілге кедергі келтіреді:

- Мембраналық микроқұрылымдардың геометриясы өте күрделі және әртүрлі мембраналар арасында айтарлықтай өзгеруі мүмкін, сондықтан жалпы пайдалану үшін геометрия құру қиын;

- Бөлшектердің бөлшектермен, бөлшектердің мембранамен әрекеттесуін сипаттау үшін үлгіні енгізу өте қиын;

- Технологиялық процестердегі басқа қосымшалар үшін бірқатар модельдер жасалды, бірақ олардың мембраналық қосымшаларға қаншалықты қолданылатыны белгісіз;

- Сонымен, және ең бастысы, мұндай модельдеудің нәтижесінде пайда болған есептеу шығындары қазіргі уақытта өте үлкен. Бұл, әсіресе, бөлшектер-бөлшектермен өзара әрекеттесуінің, бөлшектердің мембраналармен өзара

әрекеттесуінің және мембраналық микроқұрылымның геометриясының күрделі болу себебіне байланысты.

Қазіргі уақытта, бұл әдіс іс жүзінде мүмкін емес болып көрінеді. Жоғары қысымды процестерді ескере отырып, жалпы болжау моделін жасауға болады. Бұл процестерде шикізат компоненттері ретінде әдетте ерітіндіде ерітілген иондар немесе молекулалар болып табылады, ал мембрананың саңылаулары салыстырмалы түрде аз. Бұл кеуек өлшемдері жеке су молекулаларының масштабына жақындай бастағанда, CFD көмегімен мембрананың микроқұрылымын модельдеу әрекеттері пайдасыз, өйткені гидродинамиканың дәстүрлі сипаттамалары бұл масштабта қолданылмайды. Оның орнына, берілген ерітіндідегі еріген заттың ауытқуын болжау үшін математикалық модельді қолдану пайдалы әдіс болып табылады, ол содан кейін мембраналық канал көлемінің CFD моделіне шекаралық ағын шарты ретінде қолданылады. Осылайша, CFD моделін ағынның құрылымын және мембраналық каналдағы концентрациялық поляризация әсерін, тіпті күрделі геометриялар үшін де қолдануға болады, ал ауытқу моделін мембрананың өзі арқылы масса тасымалын сипаттау үшін қолдануға болады. Төменде келтірілген мембраналық фильтрацияны сипаттау үшін осы CFD әдісін қолдана отырып бірнеше әрекет жасалды.

Geraldes V. және т.б. [86] 2.2 – бөлімде талқыланғандай, CFD моделімен бірге наносүзгілеу мембранасының бір ерітінді ерітінділеріндегі әртүрлі зарядталған және зарядталмаған қосылыстардың қабылданбауын болжау үшін Диннің қиын тасымалдау моделін қолданды. Бұл тәсілмен ерітіндінің масса тасымалдауы (қабылданбауы) CFD ерітіндісінен алынған мембранадағы қысымның жергілікті айырмашылығына байланысты болады. Алайда, (39) теңдеуіне сәйкес ауытқуды есептеу белгіленген параметрге байланысты $(8\mu/r^2)(HD_{AB}^0/\Delta P)$, бұл мембраналық бір компонентті ерітіндінің берілген жүйесі үшін тұрақты. Бұл тәсілді тұтастай алғанда қолдану қиынға соғады, әсіресе көп компонентті шешімдер қарастырылған кезде. CFD-де көп компонентті ерітінділерді модельдеудегі тағы бір маңызды қиындық-әр ерітіндінің бүкіл ерітіндіге таралуын сипаттау. Мұны CFD-де шешудің классикалық әдісі-Фик заңының модификацияланған нұсқасын қолдану, мұнда әр компоненттің диффузия жылдамдығы диффузия коэффициентімен анықталады, бұл ерітіндідегі әр компонент өздігінен таралады деп болжайды. Алайда, бұл әдіс зарядталған ерітінділер жағдайында ерітіндінің электронейтралдығын міндетті түрде қамтамасыз ете бермейді. Мұны шешу үшін Фик заңының тәсілін қолдануға болады, егер тұздар ыдырамай және әр жеке тұз үшін орташа диффузия коэффициенті қолданылатын болса.

Алайда, кейбір жағдайларда бір компоненттің диффузиясы басқа компоненттерге байланысты болуы мүмкін. Бұл жағдай үшін әр компоненттің диффузия коэффициентінің барлық басқа компоненттерге тәуелділігін тиімді сипаттайтын диффузия коэффициенттерінің матрицасын қолдана отырып, Фик заңының өзгертілген түрін қолдануға болады. Бұл тәсіл жалпы және теориялық

тұрғыдан негізделген болса да, диффузиялық коэффициенттердің матрицаларын анықтау өте қиын және ол аз ғана шешімдер үшін жасалды.

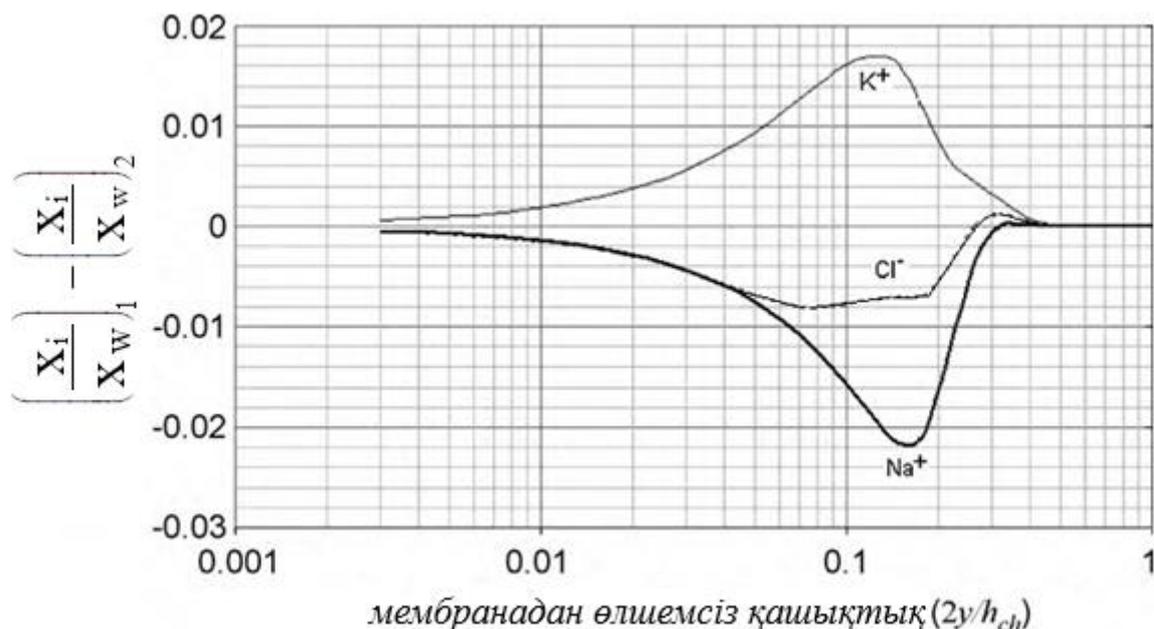
Балама тәсіл ретінде, диффузияны, молекулалар компоненттерінің арасында әр түрлі үйкеліс күштерінің әсер етуінің нәтижесі ретінде қарастыратын Максвелл-Стефан [93] диффузиялық моделін қолдану болып табылады. Максвелл-Стефан тәсілінің тұжырымы күрделі және мұнда егжей-тегжейлі талқыланбайды, бірақ кейбір мембраналық қосымшаларда сәтті қолданылды. Дегенмен, бұл әлі де диффузиялық коэффициенттердің матрицасын тиімді қолдануды талап етеді, бұл оларды жалпы жағдайда қолдануды қиындатады.

Алайда Максвелл-Стефанның диффузиялық моделін жеңілдету Нернст-Планк моделіне әкеледі. Фик заңына сәйкес, бұл әр компонент үшін тек бір диффузия коэффициентін қажет етеді, бірақ электрлік эффектілерді де ескереді. Fimbres-Weihs және Wiley [94] CFD ANSYS CFX-10.0 коммерциялық пакетімен бірге осы әдісті қолданатын әдісті сипаттайды. Олар бұл әдісті 2D тікбұрышты мембраналық канал арқылы NaCl:KCl ерітіндісінің ағынын модельдеу үшін қолданды. Каналдың қабырғалары бойымен сырғанаусыз шекаралық шарттар енгізілді, мембрананың бетіне қабырғалардың бекітілген концентрациясымен шекаралық шарт немесе тұрақты ағынмен шекаралық шарт орнатылды.

Бұл әдіс Фик заңының классикалық тәсілімен болжанғаннан қарағанда, керемет нәтиже көрсететін конвергентті шешімдер берді. Бұл 13 – суретте көрсетілген, ол кеңейтілген Нернст-Планк диффузиялық моделі мен Фик диффузиялық моделін қолдана отырып, ерітінділер арасындағы шекара қабатындағы ион концентрациясының айырмашылығын көрсетеді. Алайда, қатаң диффузиялық модельді қолдану кейбір қиындықтарды тудырды.

S. Deon және т. [95] сондай-ақ, DSPM-DE көмегімен масса тасымалдауды мембрана арқылы сипаттау үшін бірлескен модель түрін және концентрациялық поляризациялық шекара қабаты арқылы көптеген иондардың диффузиясын сипаттау үшін кеңейтілген Нернст-Планк теңдеулерін қолданатын 2D моделін қабылдады. Бұл тәсіл [96] тәсіліне ұқсас, тек CFD мембраналық каналдың гидродинамикасын анықтау үшін қолданылмайды. Оның орнына, концентрациялық поляризация қабатындағы жылдамдық профилдерін анықтау үшін құбырдағы турбулентті ағынның классикалық гидродинамикалық теңдеулері қолданылады.

Жоғарыда талқыланған мембраналық масса тасымалдау болжам модельдерінде концентрациялық поляризация әсері ескерілмейді. Бұл зерттеу жұмысында газдарды мембраналық бөлу процесінде пайда болатын концентрациялық поляризациялық шекаралық қабаттың қалыңдығын басқару мақсатында негізгі гидродинамикалық модель жасалды. Енді біз назарымызды осы пайда болған жұқа концентрациялық поляризациялық қабат арқылы масса тасымалдау процесіне бөле аламыз.



$\left(\frac{X_i}{X_w}\right)_1$ – Нернст-Планк Моделі; $\left(\frac{X_i}{X_w}\right)_2$ – Фик заңының диффузиялық моделі

Сурет 13 – Нернст-Планк және Фик заңының диффузиялық модельдерін қолдана отырып, концентрациялық поляризациялық шекара қабатында болжанған иондық концентрациядағы айырмашылық [94]

Концентрациялық поляризацияны сипаттау үшін, пленка теориясының тәсілін пайдалануға болады [97]. Пленка теориясы, мембрананың бетіне жақын орналасқан ерітіндінің осьтік конвекциясы елеусіз деп болжай отырып, бір өлшемді масса тасымалдау мәселесін жеңілдетеді. Конвективті диффузиялық массаның бір өлшемді (көлденең) тепе-теңдігін мембрана бетінен соңғы массаның шекаралық қабатының (пленкасының) қалыңдығына δ интегралдай отырып, біз концентрациялық поляризация мен пермеат ағынының арақатынасын аламыз.

$$\frac{C_w - C_p}{C_b - C_p} = \exp\left(\frac{v_w \delta}{D}\right) \quad (42)$$

мұндағы C_w – қабылданбаған CO_2 үшін мембрана бетіндегі концентрация, C_b және C_p – көлемдік концентрация мен ерітінді концентрациясы, v_w – канал қабырғасына H_2 -нің ену жылдамдығы, ал D – ерітіндінің диффузия коэффициенті.

Еритін немесе тез әсер ететін қабырғалары бар каналдағы конвективті-диффузиялық қабаттың қалыңдығын бағалау процедурасы пленка теориясының көптеген модельдерінің негізінде жатыр. Жұқа тікбұрышты каналдағы толық

дамыған ламинарлық ағын үшін пленка қабатының қалыңдығы келесідей сипатталады

$$\frac{\delta(x)}{x} = 1.475 \left(\frac{h}{x} \right)^{2/3} \left(\frac{D}{u_{\max} h} \right)^{1/3} \quad (43)$$

мұндағы x – бойлық координата, h – канал биіктігінің жартысы, ал u_{\max} – канал ортасындағы көлденең ағынның максималды жылдамдығы.

Диффузия коэффициентін тұрақты деп болжайтын болсақ, жергілікті масса тасымалдау коэффициенті төмендегідей сипатталады

$$k(x) = \frac{D}{\delta(x)} = \frac{1}{1.475} \left(\frac{3\bar{u}D^2}{2hx} \right)^{1/3} = 0.538 \left(\frac{\tau D^2}{x} \right)^{1/3} \quad (44)$$

мұндағы \bar{u} – көлденең ағынның орташа көлемдік жылдамдығы және τ – тангенциалды кернеу.

Мембраналық бөліну процесіне пленка теориясын қолданудың негізгі шектелуі – конвекцияның көлденең компоненті (пермеат ағыны) шекара қабатының қалыңдығына δ әсер етпейдігі.

Канал бойымен орташаланған масса тасымалдау коэффициенті k , (42) және (44) теңдеулермен анықталатын $v_w(x)$ ағынының интегралынан алынады, бұл жағдайда өткізгіштік пен көлемдік концентрация, сондай-ақ өткізгіштік пен көлденең ағын жылдамдығы, мембраналық каналдың ұзындығы l бойынша тұрақты болып қалады.

Бұл болжам үлкен масштабты кері осмос жүйелері үшін мүмкін емес, бірақ қалпына келтіру шамалы болатын қысқа мембраналық каналдар үшін орынды. Каналдың орташа масса тасымалдау коэффициенті келесідей сипатталады

$$\bar{k} = 0.807 \left(\frac{\tau D^2}{L} \right)^{1/3}, \quad (45)$$

ол әдетте Шервуд санымен өрнектелген жұқа каналдағы ламинарлы ағынның масса тасымалдауының корреляциясына ұқсас болады

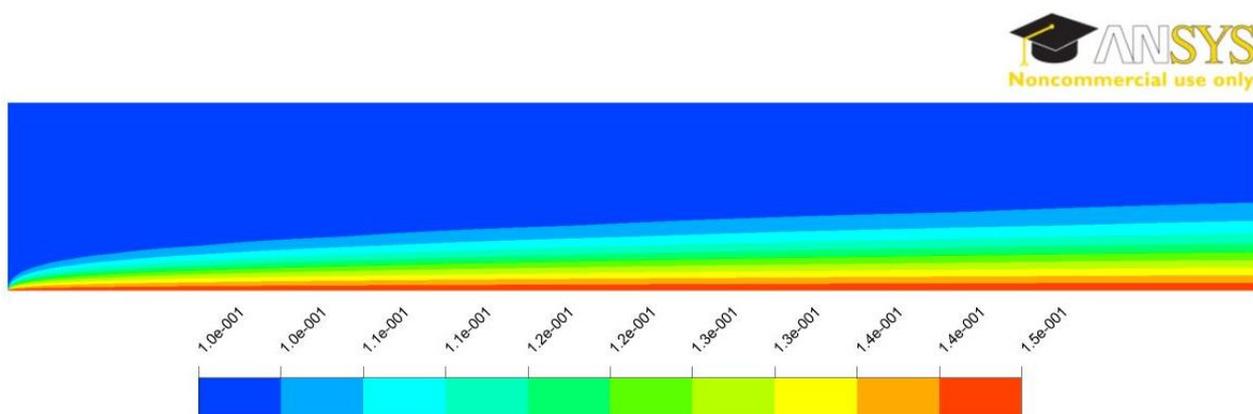
$$Sh = \frac{\bar{k}d_H}{D} = 1.85 \left(\text{Re} \cdot Sc \cdot \frac{d_H}{L} \right)^{1/3}. \quad (46)$$

(46) өрнек арқылы Шервуд санының Рейнольдс санына сәйкес өзгерісі алынады.

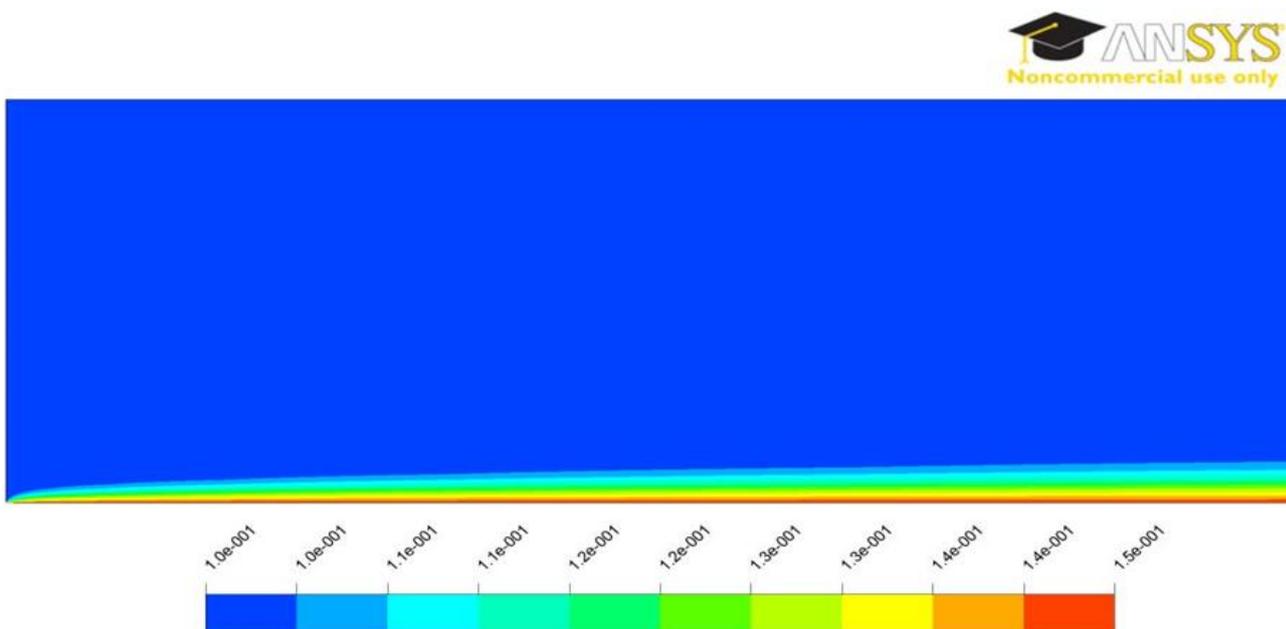
2.4 Бастапқы гидродинамикалық модель нәтижелері және оларды талқылау

Осы тарауда, газдарды мембраналық бөлу процесінің ең негізгі гидродинамикалық моделінің нәтижелері көрсетілген және талқыланған. Сонымен қатар алынған нәтижелер әдебиетте көрсетілген эксперименттік зерттеу жұмыстармен салыстырылып, гидродинамикалық модельдің сәйкестігі дәлелденді.

Мембраналық каналдағы ерітіндінің массалық үлесінің өзгеруі 14 және 15 – суретте көрсетілген, бұл каналдың төменгі бөлігіндегі мембрана бетіне іргелес концентрациялық поляризациялық шекара қабатының жиналуын көрсетеді [91].

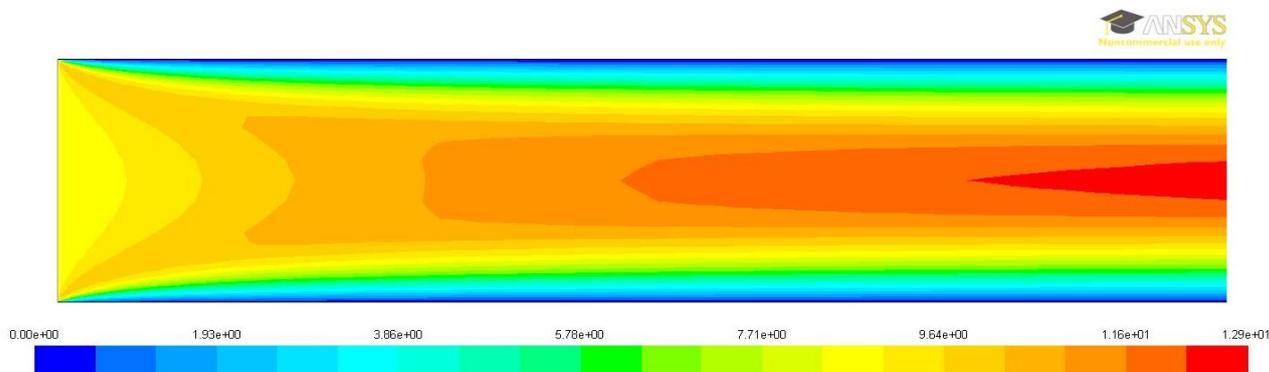


Сурет 14 – $Re=200$ үшін мембраналық канал бойымен CO_2 -нің массалық үлесінің өзгеруі

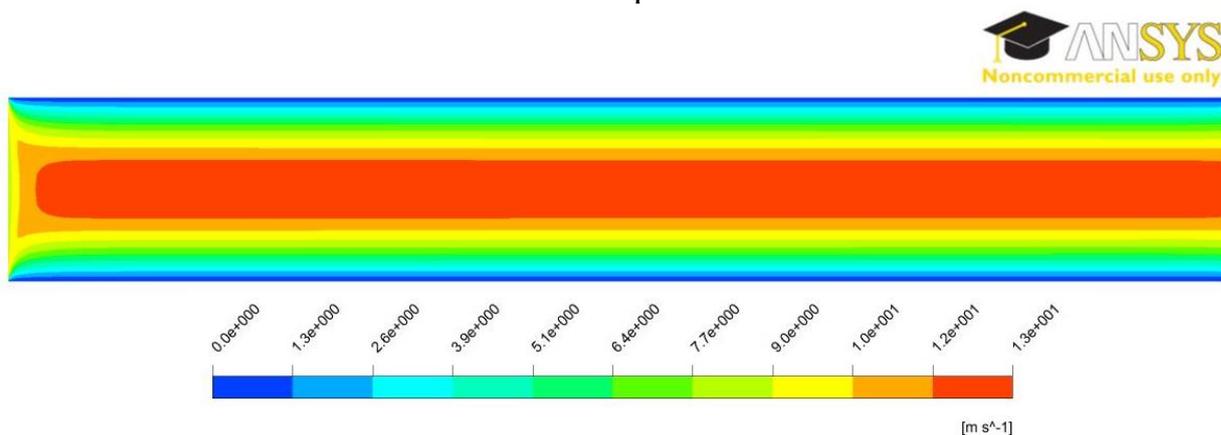


Сурет 15 – $Re=600$ үшін мембраналық канал бойымен CO_2 -нің массалық үлесінің өзгеруі

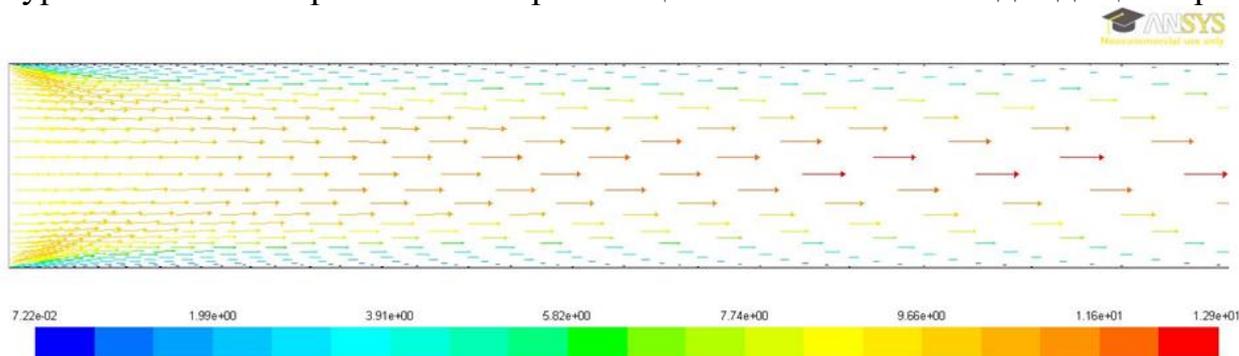
Мембрана каналындағы жылдамдық өрісін канал кіреберісінің жанындағы 16 – суретте және бүкіл канал үшін 17 – суретте де көруге болады. 18 – суретте 2D мембраналық каналдағы жылдамдық векторы көрсетілген. Модельдеу нәтижесінде алынған жылдамдық контурларында, ламинарлық жылдамдықтың классикалық профилі каналдың ішінде айқын көрініп тұр [91].



Сурет 16 – $Re=200$ үшін 2D мембраналық каналдың кірісіндегі жылдамдықтың өзгерісі



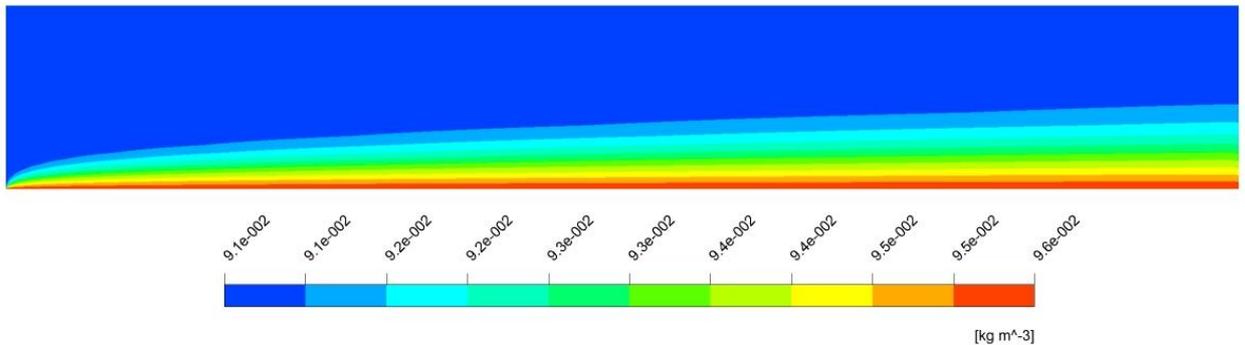
Сурет 17 – $Re=200$ үшін 2D мембраналық канал бойымен жылдамдық өзгерісі



Сурет 18 – $Re=200$ үшін 2D мембраналық каналдағы жылдамдық векторы

Ерітіндінің тасымалдау қасиеттерінің өзгеруін сандық шешімнен де байқауға болады. Тығыздықтың өзгеруі 19 – суретте және тұтқырлықтың өзгеруі 20 – суретте көрсетілген. Тығыздық мембрананың бетіне жақын жерде,

күтілгендей, салыстырмалы түрде аз мөлшерде (шамамен бірнеше пайыз) артады, ал тұтқырлық керісінше кемиді.



Сурет 19 – $Re=200$ 2D мембраналық канал үшін тығыздықтың өзгеруі

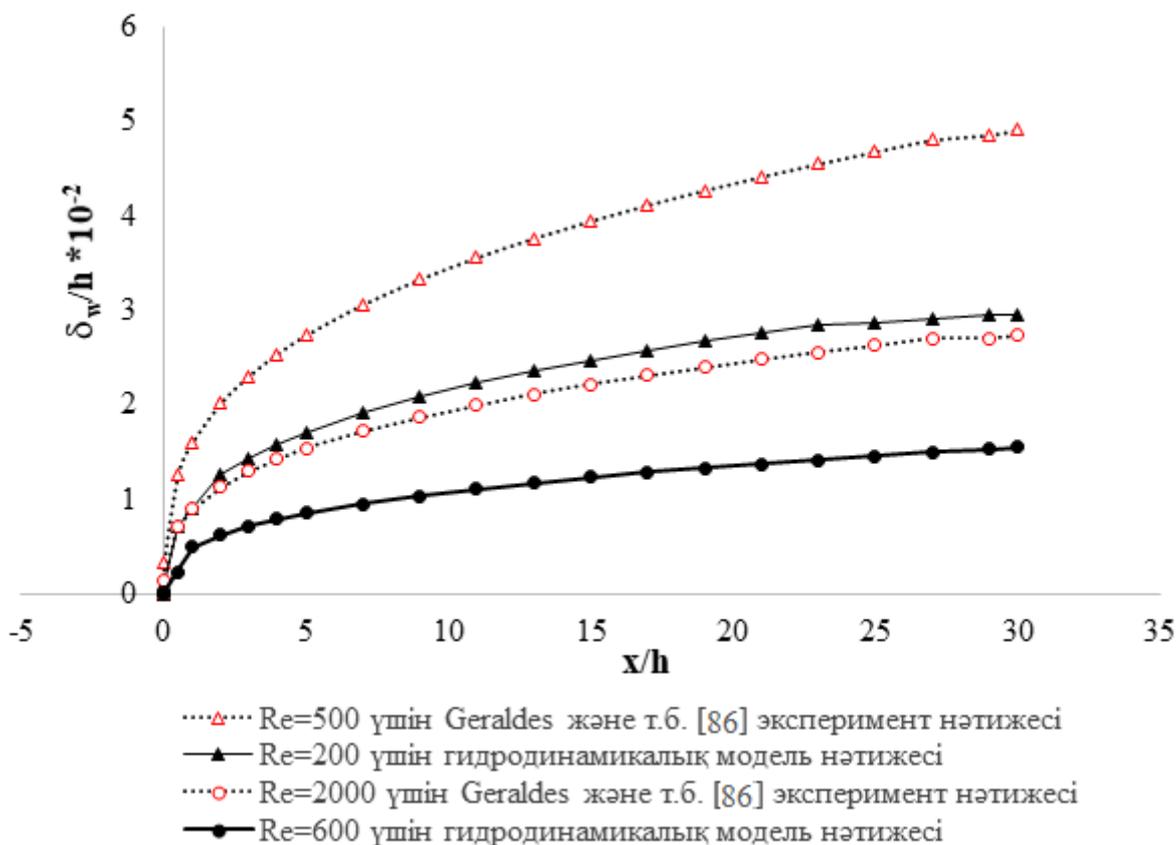


Сурет 20 – $Re=200$ 2D мембраналық канал үшін тұтқырлықтың өзгеруі

Модельдің концентрациялық поляризация шекаралық қабатының пайда болуын болжау қабілеттілігі, өлшемсіз концентрациялық поляризация шекаралық қабатының болжамды профильдерін Geraldes және т.б. [86] ұсынған профильдермен салыстыру арқылы бағаланды. 21 – суретте өлшемсіз концентрациялық поляризация шекаралық қабатының биіктігі δ_w / h , өлшемсіз осьтік ұзындықтың x / h функциясы ретінде көрсетілген. Профильдер Geraldes және т.б. [86] анықтаған мәліметтермен жақсы келісімді көрсетеді (21 – сурет).

Geraldes және т.б. [86] моделіндегі концентрациялық поляризацияның шекаралық қабаты осы модельге қарағанда үлкен болып шықты, себебі сұйықтықтың диффузиялық коэффициенті, тұтқырлығы мен тығыздығы сияқты физикалық қасиеттері (3 – кестеде көрсетілгендей) газдардан ерекшеленеді. Күтілгендей, канал кірісіндегі Рейнольдс санының жоғары болуы, концентрациялық поляризация шекаралық қабатын бұзатын, ығысудың

ұлғаюына байланысты концентрациялық поляризация шекарасының жұқа қабатына сәйкес келеді.

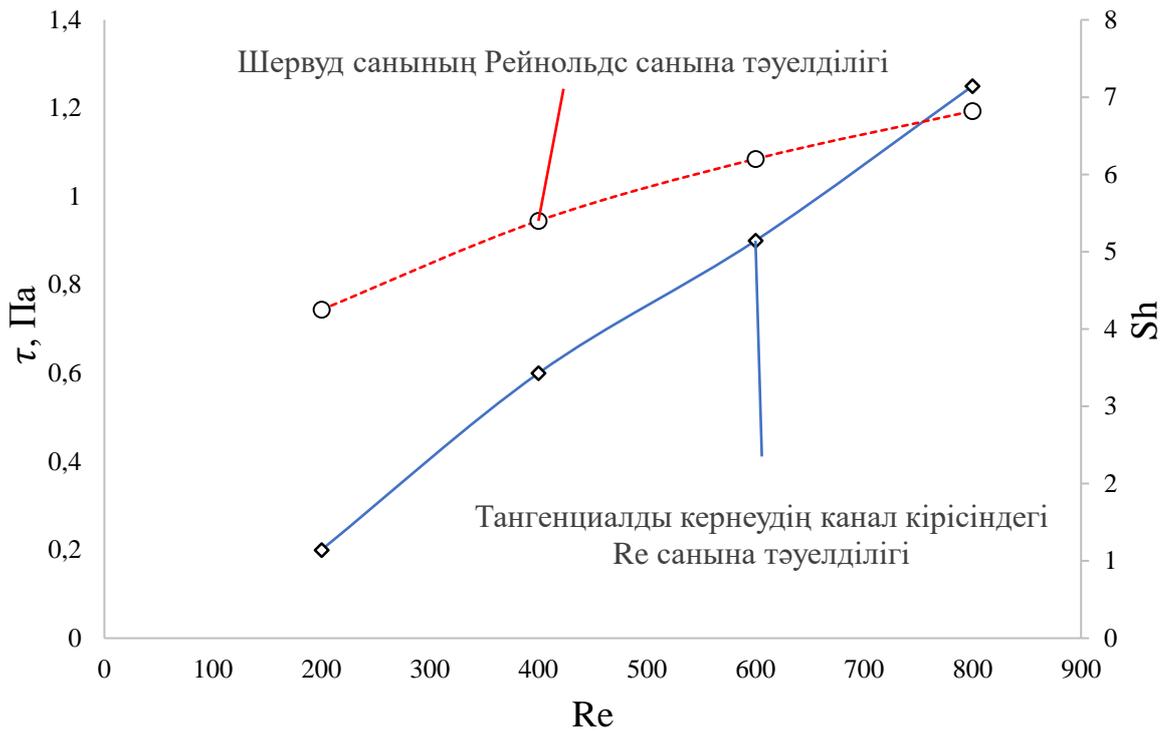


Сурет 21 – Концентрациялық поляризацияның шекаралық қабатының өлшемсіз профилі

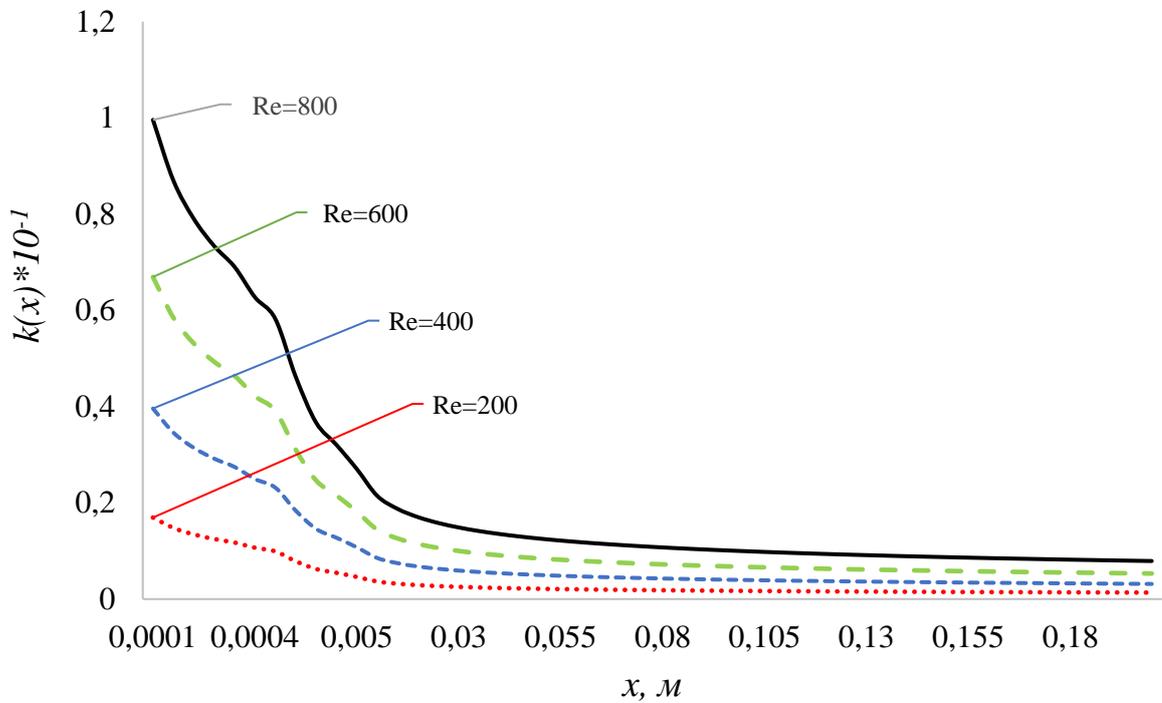
Тангенциалды кернеудің канал кірісіндегі Re санына тәуелділігі 22 – суретте көрсетілген. Алынған нәтижеден, канал кірісіндегі жылдамдық артқан сайын тангенциалды кернеу артатыны көрініп тұр. Тангенциал кернеудің мәндері модельдеу нәтижелерінен алынды. Осылайша, мембрана кірісіндегі жоғары Рейнольдс саны концентрация поляризациясының жұқа шекаралық қабатына сәйкес келетінін растайды.

Осы тарауда жасалған гидродинамикалық модельдің нәтижелерін пайдалана отырып, (45) теңдеу бойынша аналитикалық жолмен, канал ұзындығы бойынша орташа масса тасымалдау коэффициенті есептелді.

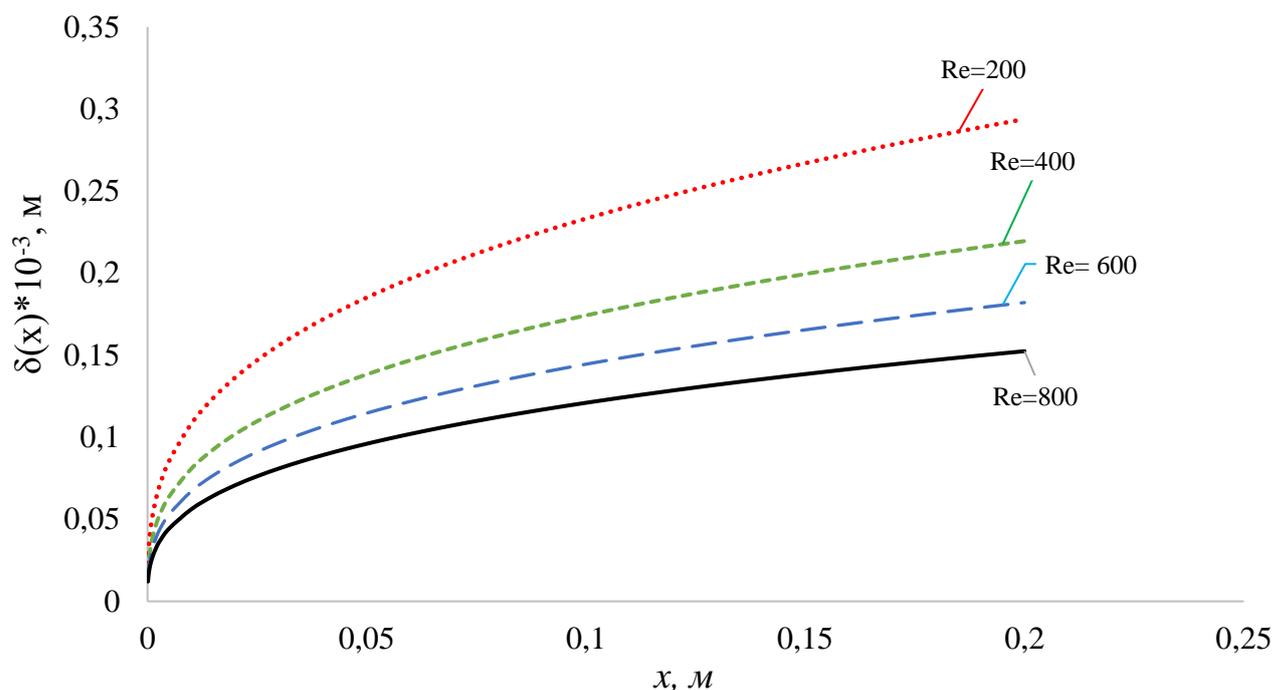
Сәйкес Рейнольдс саны үшін масса тасымалдау коэффициентінің орташа мәнін біле отырып, (46) теңдеу арқылы канал ұзындығы бойынша орташа Шервуд саны есептелді. 22 – суретте канал кірісіндегі Рейнольдс санының масса тасымалдауға әсері көрсетілген. Сондай-ақ, 23 – суретте канал ұзындығы бойынша масса тасымалдау коэффициентінің өзгеруі алынды.



Сурет 22 – Тангенциалды кернеудің каналға кірісіндегі Re санына тәуелділігі және канал кірісіндегі Рейнольдс санының масса тасымалдауға әсері



Сурет 23 – Канал ұзындығы бойынша масса тасымалдау коэффициентінің өзгеруі



Сурет 24 – Канал ұзындығы бойынша концентрациялық поляризациясының шекаралық қабатының қалыңдығының өзгеруі

24 – суреттен көрініп тұрғандай, концентрациялық поляризация қабатының қалыңдығы каналдың ұзындығы бойымен артады [98]. Күтілгендей, кірістегі жоғары Рейнольдс саны концентрация поляризациясының шекаралық қабатын бұзатын ығысудың ұлғаюына байланысты жіңішке концентрациялы поляризация қабатына сәйкес келеді.

2.5 II тарау бойынша қорытынды

CFD әдістері мембраналық бөлу жүйелерінің әрекетін сипаттаудың пайдалы және қолжетімді әдісі екені анық. Дегенмен, қысыммен басқарылатын мембраналық процестердің (микросүзгілеу, ультрасүзгілеу, наносүзгілеу және кері осмос) жалпы үлгісін жасау кейбір қиындықтарды тудырады. Төменгі қысымдағы процестер (микросүзгілеу және ультрасүзгілеу) мен жоғары қысымды процестер (наносүзгілеу және кері осмос) арасындағы жою механизмдеріндегі айырмашылықтар ластаушы заттарды жоюдың жалпы үлгісі қазіргі уақытта мүмкін емес екенін білдіреді. Атап айтқанда, микросүзгілеу және ультрасүзгілеу процестеріндегі ластаушы заттардың бөлшектердің табиғаты CFD модельдеуге бөлек және айтарлықтай қымбатырақ тәсілді талап етеді. Сонымен қатар, мұндай жүйелердің ластану әрекетін жалпы мағынада болжау өте қиын.

Жоғарыда айтылғандай 2D және 3D ағынының үлгілерін пайдалану да қызығушылық тудырады. 3D модельдері мембраналық модульдердегі күрделі

ағын үлгілерін толық сипаттай алуы және модельдің мүмкін болатын жалпы орындалуын қамтамасыз етуі керек.

Дегенмен, 3D модельдеріне жұмсалған үлкен есептеу шығындары оларды кеңістіктік мерзімді ағын жағдайлары бар мембраналық каналдың шағын бөліктері үшін ғана қолдануға болатынын білдіреді, бірақ бұл жалпы жағдай емес.

2D модельдерін пайдалану – бұл есептеу шығындарын ақылға қонымды деңгейде ұстауға мүмкіндік береді, осылайша модельдеуді жалпы жағдай үшін орындауға болады, сонымен қатар жоғарыда талқыланған масса тасымалдау процестерін қамтиды.

Осылайша, осы зерттеу жұмысында қабылданған тәсіл тек сутек пен көмірқышқыл газының бинарлы қоспасын бөлудің жалпы есептеу үлгісін жасау болды. Модель 2D форматындағы көлденең ағынның ламинарлы режимде мембраналық каналдың гидродинамикалық сипаттамасын, соның ішінде концентрациялық поляризацияның әсерлерін және осы сутек газының пайда болатын концентрациялық поляризациялық шекаралық қабат арқылы масса тасымалдау моделін қамтиды.

Аналитикалық, эксперименттік және есептік мәліметтермен салыстыру CFD модельдеудің заманауи тәсілі 2D мембраналық каналдар үшін ағынның жағдайын сипаттауға қабілетті екенін көрсетті. Өткізгіш ағыны мен концентрация поляризациясының шекаралық қабатының қалыптасуы бойынша жақсы келісім байқалды. Бұл мембраналық бөлу процесінің негізгі гидродинамикалық моделі қанағаттанарлық екендігіне сенімділік береді, енді біз назарымызды неғұрлым күрделі геометриялық және гидродинамикалық конфигурацияларға аударуымызға болады.

3 АРАЛЫҚ БӨЛГІШТЕРМЕН ТОЛТЫРЫЛҒАН КЕУЕКТІ МЕМБРАНА АРҚЫЛЫ КӨЛДЕНЕҢ АҒЫННЫҢ ГИДРОДИНАМИКАЛЫҚ ЖӘНЕ МАССА ТАСЫМАЛДАУ МОДЕЛІ

II тарауда айтылған зерттеулер, мембраналық модуль ішіндегі ламинарлық ағындарға қатысты болды. Алайда, турбулентті жағдайлар іс жүзінде ультрасүзгілеу жүйелерінде кездеседі деген болжам кең таралған [99]. Сонымен қатар, турбулентті ағынмен қамтамасыз етілген араласу, концентрациялық поляризация әсерін төмендетуде айтарлықтай артықшылықтар бере алады. Турбулентті мембраналық процестерді зерттеу CFD-дің айқын қолданылуы болып табылады, дегенмен бұл ламинарлық жағдайға қарағанда теориялық қиындықтарды тудырады.

Бұл тарауда Рейнольдс сандары $Re=200\div 800$ аралығында екі параллель мембранамен шектелген каналдағы H_2 және CO_2 бинарлы қоспасының стационарлық екі өлшемді ағындары зерттеледі. Рейнольдстың кіші сандарындағы турбулентті ағынды сипаттау үшін, $k-\omega$ турбулентті моделі қолданылады.

Мембраналық процестерді модельдеу үшін CFD-ді қолдануға қатысты айқын сұрақтардың бірі – турбулентті модельдерді қашан қолдану қажет екендігі. Әдетте, тар каналдағы ағын шамамен 2000-ға тең Рейнольдс сандарына дейін ламинарлы болып қалады. Алайда, зерттеулер бұл мембраналық модульдердің кейбір түрлеріне жатпайтынын көрсетті; Мысалы, Schwinge J. және т.б. [100], спиральды оралған мембраналық модульдердегі турбуленттілікке көшуді зерттеді, бұл ауысу Рейнольдс сандарының 300-ден 400-ге дейінгі мәндерінде, аралық бөлгіштермен толтырылған каналда болуы мүмкін деген қорытындыға келді. Ranade V. мен Kumar A. [101] аралық бөлгіштермен толтырылған каналда тікелей сандық модельдеуді жүргізді, бұл Рейнольдс саны шамамен 350 болғанда турбуленттілікке ауысатындығын көрсетті. Belfort G. мен Nagata N. [102] сонымен қатар құбырлы каналдардағы турбуленттілікке ауысуы Рейнольдс саны шамамен 4000-ға дейін аралықта ауысатындығын көрсетті.

Алайда, тұрақты емес ағынды құрылымдардың пайда болуы және турбуленттілікке ауысу, турбуленттіліктің дәстүрлі модельдерін қолдану, ең жақсы тәсіл екенін білдірмейді. Турбуленттілік модельдері тек Рейнольдстың үлкен сандары үшін жарамды (әдетте, 30 000-нан асады), онда турбуленттілік толығымен дамыған және изотропты деп санауға болады [94]. Pellerin E. және т.б. [103] Belfort G. мен Nagata N. [102] ұсыныстарына сүйене отырып, Рейнольдс 20,000 және 30,000 сандары бар ультрасүзгілеу және микросүзгілеу ағынының кейбір мысалдарын келтірген. Алайда, мембраналық ағындардың көпшілігі осы деңгейден төмен; мысалы, спиральды оралған мембраналық модульдер үшін ағындардың көпшілігі Рейнольдс санының $Re=1000-3000$ аралығында болады. Осы фактіні ескере отырып, осы ағын режимдеріндегі тұрақсыз ағындарды сипаттаудың басқа әдістері, мысалы, тікелей сандық модельдеу әдісі тиімдірек болуы мүмкін және біз бұл мәселені кейінірек келесі бөлімдерде толығырақ

қарастырамыз. Алайда, біз алдымен турбуленттіліктің дәстүрлі модельдерін қолдана отырып, зерттеулерді шолудан бастаймыз.

Pellerin E. және т.б. [103], турбулентті әсерлерді, сондай-ақ күрделі геометрияларды және қысыммен байланысты шекаралық шарттарды мембрананың беті арқылы масса тасымалын сипаттау үшін есепке алу мүмкіндігі бар жалпы гидродинамикалық модельді ұсынды. Қолданылатын тасымалдау теңдеуін жалпы түрде келесідей жазуға болады

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \nabla(\rho u\varphi - \Gamma_\varphi \nabla\varphi) = S_\varphi \quad (47)$$

мұндағы Γ_φ – алмасу коэффициенті, S_φ – ағынның көлемдік жылдамдығы, ал φ – өрістің жалпы айнымалысы. Айнымалы өрістегі турбулентті әсерлер RANS тәсілі арқылы орташа уақытты құрайтын $\langle \varphi \rangle$ және уақыт бойынша өзгеретін компонент φ' комбинациясы арқылы ұсынылған

$$\varphi = \langle \varphi \rangle + \varphi' \quad (48)$$

Екі теңдеуі бар турбуленттіліктің k-ε моделі турбулентті қозғалысты шешу үшін қолданылады, мұндағы k – турбулентті кинетикалық энергия, ал ε – турбулентті энергияның диссипация жылдамдығы. K-ε моделін одан әрі талқылауды көптеген әдебиеттерден табуға болады [104]. Мембрана қабырғасындағы шекаралық шарттар Дарси теңдеуін қолдана отырып, v_w трансмембраналық жылдамдығымен анықталады

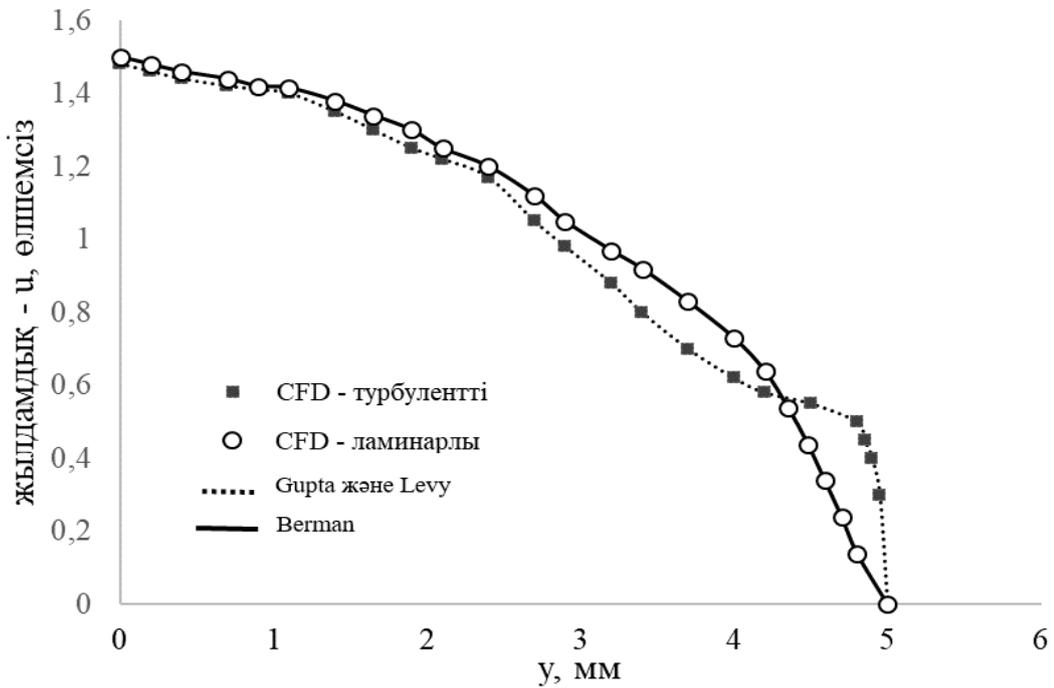
$$v_w = A(\Delta P - \sigma \Delta P) \quad (49)$$

мұндағы A – мембранаға тән коэффициент, σ – рефлексия коэффициенті, мембрананың ауытқу өлшемі, ΔP – осмостық қысымның айырымы. Соңында, ерітіндінің концентрация өрісін жалпыланған тасымалдау теңдеуі түрінде жазуға болады

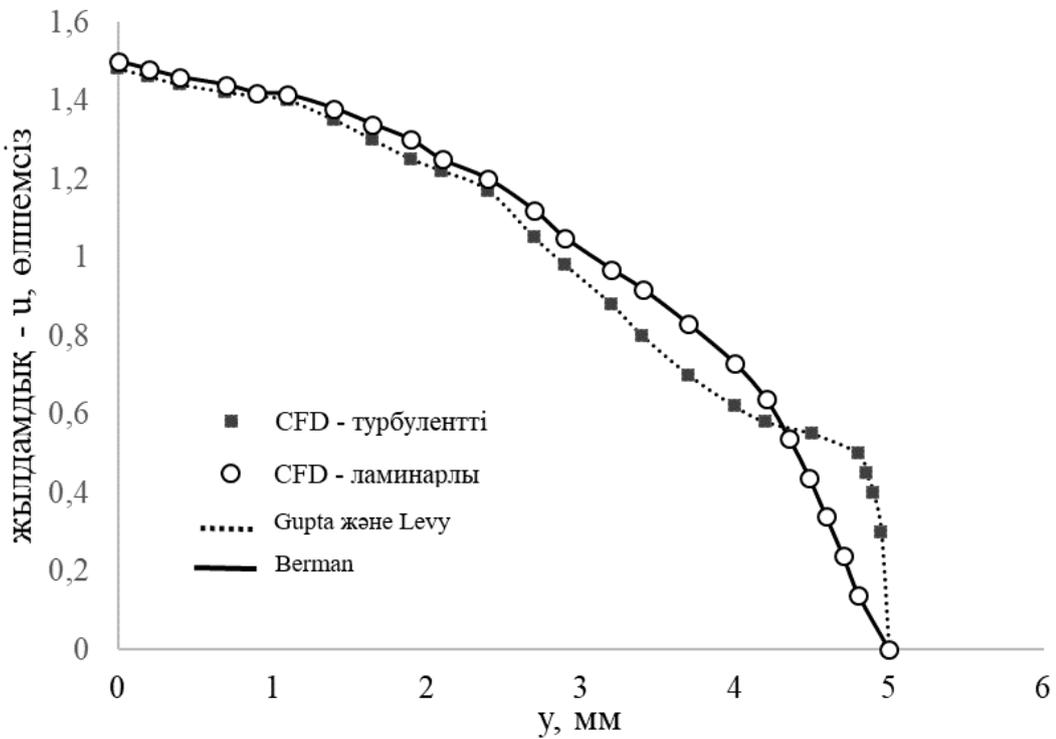
$$\frac{\partial \left[\rho \left(\frac{\rho_k}{\rho} \right) \right]}{\partial t} + \nabla \left[\rho u \left(\frac{\rho_k}{\rho} \right) - D \rho \nabla \left(\frac{\rho_k}{\rho} \right) \right] = 0 \quad (50)$$

мұндағы ρ_k – k түрінің тығыздығының үлесі. Жоғарыда аталған теңдеулер TURCOM компьютерлік кодын қолдана отырып, соңғы көлем түрінде тандалды, ультрасүзгілеу және микросүзгілеу жағдайларын көрсету үшін модельдеу жүргізілді. Нәтижелер Рейнольдстың кіші сандары үшін классикалық аналитикалық шешімдермен жақсы келісімді көрсетті. Алайда, 25, 26 – суреттерде көрсетілгендей Рейнольдс санының үлкен мәндері (50 000-ға дейін)

үшін аналитикалық шешімдерде жылдамдық профилдерінен айтарлықтай ауытқу байқалды.



Сурет 25 – Ультрасүзгілеу үшін Pellerin E. және т.б. [103] моделінің аналитикалық және сандық жылдамдық профилдерінің ауытқуы



Сурет 26 – Микросүзгілеу үшін Pellerin E. және т.б. [103] моделінің аналитикалық және сандық жылдамдық профилдерінің ауытқуы

V. Ranade мен A. Kumar [105] спиральды оралған мембраналардағы аралық бөлгіштердің әсерін зерттеу үшін k-ε турбулентті моделін қолдана отырып модельдеді. Турбулентті моделі тек 300-ден асатын Рейнольдс сандары үшін әдебиет ұсыныстары мен авторлардың тікелей сандық есептеулеріне негізделген. FLUENT коммерциялық пакеті барлық модельдеу үшін қолданылды. A.R. Da Costa және т.б. [106,107] ұсынған эксперименттік нәтижелермен сәйкес келетін әртүрлі аралық бөлгіштердің геометрияларын модельдеуге қол жеткізді. Сондай-ақ, олар турбулентті жағдайда бүкіл мембраналық модульді толық CFD модельдеу есептеу тұрғысынан өте қымбат болып қала беретінін атап өтті, бірақ олардың модулінің өкілдік "ұяшығын" қарастыру кезінде жақсы нәтижелер алуға болады.

Тікелей сандық модельдеу әдістері турбулентті модельдерді жақындатпай-ақ, шағын және ауқымды турбулентті әсерлерді тікелей есептеуге мүмкіндік береді. Бұл Рейнольдс сандары жеткілікті аз болған кезде (әдетте 30 000-нан аз) мембраналық сүзу жағдайларының көпшілігі үшін турбуленттілік толық дамымаған және турбуленттіліктің дәстүрлі модельдері қатаң қолданылмайтын пайдалы тәсіл болып саналады. Алайда, бұл тәсіл практикалық қызығушылық тудыратын көптеген тапсырмалар үшін есептеу өте қымбат. Алайда, осы әдістерді қолдана отырып бірнеше зерттеулер жүргізілді.

Miyake Y. және т.б. [108], тікелей сандық модельдеу әдістерін қолданды, онда барлық турбуленттік шкалалар бір кеуекті қабырғасы бар тікбұрышты каналдағы периодты қысым градиенті бар турбулентті ағынды модельдеу үшін тікелей есептеді. Kim J. және т.б. [109] жасаған спектрлік әдістерді қолдану, үш өлшемді Навье-Стокс теңдеулерді шешу үшін кеуекті қабырғадағы периодты шекаралық қысым жағдайлары бар ағын модельденді. Зерттеу көрсеткендей, бұл ағын үшін жақсы нәтижелер (тікелей сандық шешіммен салыстырғанда) үлкен құйынды модельдеу (LES) модельдері арқылы алынуы мүмкін, өйткені периодты қысым градиенті үлкен құйындарға қарағанда кішігірім құйындарға аз әсер етеді. Бұл нәтиже мембраналық модельдеу әдебиетіндегі LES модельдерінің салыстырмалы жетіспеушілігін ескере отырып, қызықты болып табылады. Алайда, бұл нәтиженің мембрананың неғұрлым нақты жұмыс жағдайларына қолданылуы белгісіз болып қалады.

Мембраналық каналдардағы стационарлық емес ағындарды шешу үшін өте аз уақыт қадамдарымен және шағын есептеу торларымен өтпелі кезеңдерді орындау үшін CFD коммерциялық кодтарын қолдану арқылы бірнеше зерттеулер жүргізілді. Бұл тәсілдің кейбір мысалдарын Schwinge J. және т.б. [110,111] және Fimbres-Weihs G. және т.б. [112,113] ANSYS CFX кодын қолдана отырып, сонымен қатар FLUENT көмегімен Koutsou C. және т.б. [114] зерттеулерінен көруге болады. Бұл модельдер тікбұрышты мембраналық каналдардағы аралық бөлгіштердің әсерін зерттеу үшін қолданылды, осы зерттеулерде қарастырылған барлық жағдайлар өткізілмейтін қабырғалардың қабылдануымен немесе "еритін қабырға" шекаралық шартын қолдану арқылы жеңілдетілді, онда концентрациялық поляризацияның әсерін имитациялау үшін қабырға концентрациясы жоғары бекітілген мәнге ие болды. Koutsou C. және т.б.

[114], цилиндр маңындағы тұрақсыздық Рейнольдс 60 санында пайда бола бастады, ал қабырғадағы құйындар түріндегі одан әрі тұрақсыздық Рейнольдс 78 санында пайда бола бастады. Schwinge J. және т.б. [110] сондай-ақ, тіректердің геометриялық конфигурациясына байланысты Рейнольдс сандары 300-ден 600-ге дейін пайда болатын стационарлық емес ағынға көшу анықталды. Бұл модельдер осы жүйелердегі стационарлық емес ағынды сипаттау үшін пайдалы түсінік береді, бірақ қолданылатын жеңілдетілген қабырғаның шекаралық шарттары нақты мембраналық жүйені толықтай сипаттай алмайды.

S. Wardeh мен H. Morvan [115] зерттеулерінде мембраналық канал арқылы өткізгіштіктің нақты сипаттамалары енгізілді. Бұл зерттеу [111] ұқсас жағдайлар үшін аралық бөлгіштермен толтырылған екі өлшемді каналдағы стационарлық емес ағынды модельдеді, бірақ Дарси заңының өрнегін қолдана отырып, өткізгіш қабырға жағдайын қамтыды. Бұл саладағы одан әрі ілгерілеушілік гидродинамикалық модельдің толық үлгісін жасау үшін міндетті түрде мембраналық өткізгіштік эсерлерін қамтуы орынды сияқты.

Мембраналық модульдердегі турбуленттілікті модельдеуге қатысты әдебиеттердегі барлық зерттеулер спираль тәрізді мембраналардағы аралық бөлгіштерді модельдеуге және оңтайландыруға бағытталған. Сонымен қатар, турбуленттік модельдердің көпшілігінде стандартты K- ϵ моделі немесе K- ϵ RNG моделі қолданылады, олар тек Рейнольдстың үлкен сандарына жарамды, олар мембраналық қосымшалардың кең спектріне ортақ бола алмайды. CFD турбулентті әдістерін басқа мембраналық конфигурацияларға қолдану үшін аз жұмыс жасалды, сәйкесінше LES әдістерін қолдану арқылы аз жұмыс жасалды, дегенмен олар CFD бағытында кеңінен танымал бола бастады.

Сонымен қатар, өтпелі ламинарлық ағын моделі өте кішкентай торларды және уақытша кадамды қолдану барысында, Рейнольдстың кішігірім сандары үшін стационарлық емес ағынды жақсы сипаттайды, мұнда мембраналарды қолданудың көптеген жағдайлары орын алуы мүмкін.

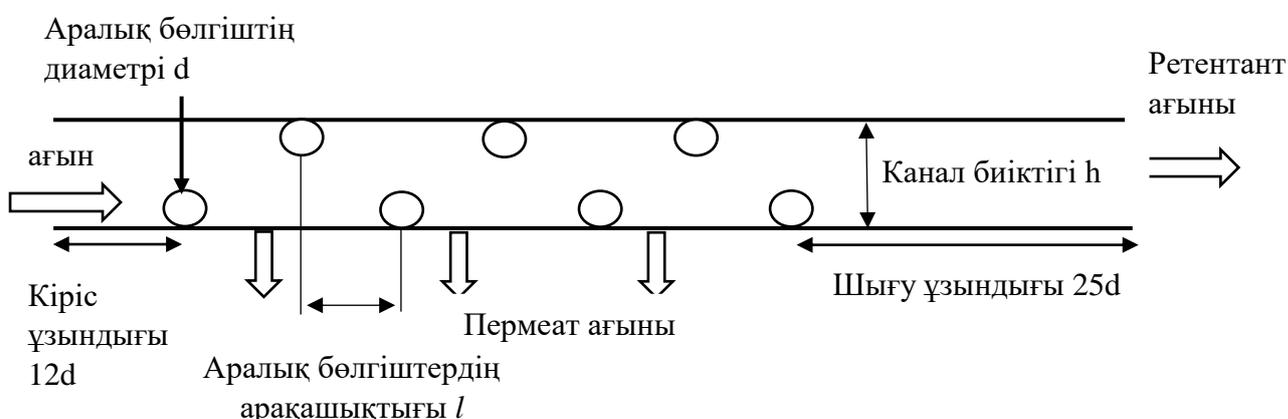
CFD әдістері айтарлықтай байқалатын салалардың бірі – спиральды-оралған мембраналардың модульдерін модельдеу болып табылады. Бұл модульдер гидродинамика мен масса тасымалының күрделі құбылыстарын, негізінен, мембрананың жапырақтарын бөлумен қатар, концентрациялық поляризацияның пайда болуын азайтуға, мембрана бетіндегі араласу мен ағынның тұрақсыздығына ықпал етеді, сондықтан мембрана арқылы масса тасымалын арттырады. Жаппай тасымалданудың бұл өсуі энергияны жоғалту арқылы жүреді, дегенмен көбінесе жаппай тасымалданудың экономикалық пайдасы энергияны жоғалтудан гөрі үлкен. Спираль тәрізді мембраналардың модульдеріндегі ағын өрісін тікелей эксперименттік бақылау қызығушылық тудыратын ағын құрылымдарын бұзбай жұмыс істеуді қиындататындықтан, CFD – масса тасымалын оңтайландыру мен энергия шығынын азайту арасындағы келіссөздерді зерттеудің қуатты құралына айналды.

3.1 Аралық бөлгіштермен толтырылған мембраналық каналдың геометриясы және есептеу торы

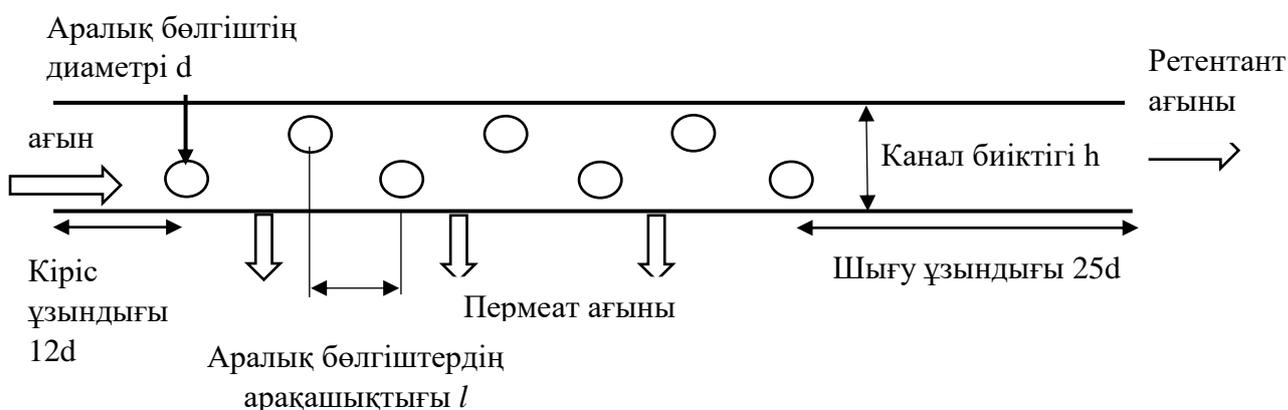
Модель геометриясы 27, 28 және 29 – суреттерде көрсетілгендей, S. Wardeh мен H. Morgan [115] қолданған модельге ұқсас, шахматтық ретпен және сызықты цилиндрлік тәріздес аралық бөлгіштермен толтырылған төртбұрышты 2D каналдан тұрады.

Бұл модельде аралық бөлгіштердің орналасуының үш түрлі геометриясы қарастырылды:

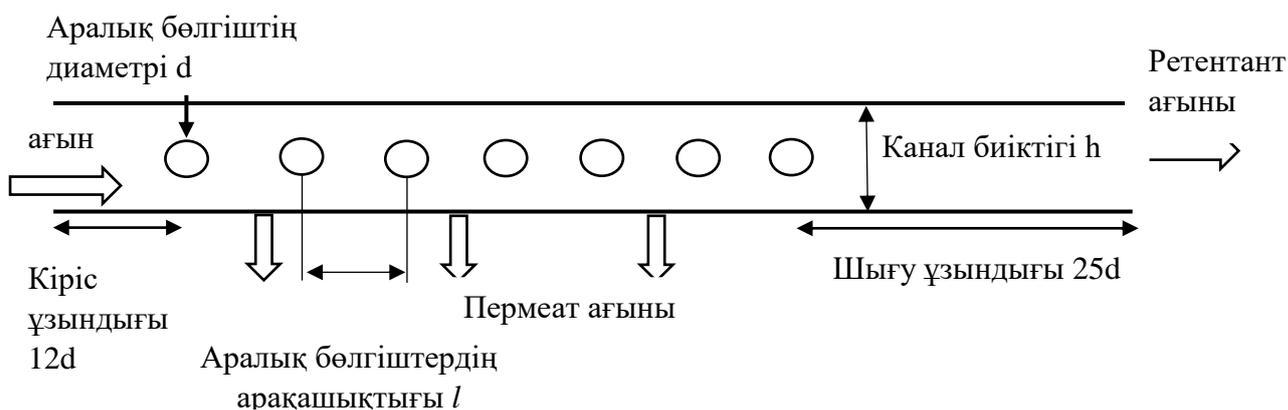
- 1) аралық бөлгіштер мембрананың беті бойымен шахматтық ретпен орналастырылған;
- 2) аралық бөлгіштер мембрананың бетінен 0,1 мм қашықтықта шахматтық ретпен орналастырылған;
- 3) аралық бөлгіштер каналдың ортасы бойынша сызықтық орналастырылған.



Сурет 27 – Аралық бөлгіштер мембрана бетінің бойымен шахматтық ретпен орналасқан 2D канал арқылы ағынды модельдеуге арналған модель геометриясы



Сурет 28 – Аралық бөлгіштер мембрананың бетінен 0,1 мм қашықтықта шахматтық ретпен орналасқан 2D канал арқылы ағынды модельдеуге арналған модель геометриясы



Сурет 29 – Аралық бөлгіштер каналдың ортасында сызықты орналасқан 2D канал арқылы ағынды модельдеуге арналған модель геометриясы

Аралық бөлгіштердің шахмат ретінде орналасуы, ең көп таралған геометрияларының бірі болып табылатын тоқылған аралық бөлгіштер торының екі өлшемді көрінісі. Канал арқылы өтетін ағын x осі бойымен бағытталған және аралық бөлгіш диаметрінен d 12 еселенген кіріс ұзындығынан өтеді. Содан кейін ол жеті аралық бөлгіштерден өтеді. Ал шығыс ұзындығы аралық бөлгіштердің диаметрінен 25 есе көп. Барлық модельдеу үшін келесі конфигурация қолданылды: $h = 2 \text{ мм}$, $l / h = 4$, $d / h = 0.5$ [116]. Ағынның аралық бөлгіштер бар элементар ұяшықтарға дейін толық дамуы үшін және шығу жағдайлары соңғы аралық бөлгіштер жасаған рециркуляция аймақтарына әсер етпеуі үшін үлкен кіріс және шығыс ұзындығы қажет. Тек жеті аралық бөлгіштерді қолдану – бұл кеңістіктік периодтық жылдамдық өрісі мен қысымды іс жүзінде әлдеқайда ұзақ көрсететін есептеудің экономикалық әдісі. Fimbres-Weihs G. және т.б. [112], тұрақсыз ағында құйындылар алу үшін кемінде алты аралық бөлгіштер қажет екенін көрсетті, ал соңғы аралық бөлгіштерді ағып өтуі, шығу эффектісінің әсерінен түрлі сипатқа ие болды. Осыны ескере отырып, бақылаудың бесінші және алтыншы аралық бөлгіштерге жақын аймақ репрезентативті бақылау орны ретінде пайдаланылады, өйткені ол ағыс бойында жылдамдық пен қысымның периодты құрылымдарын орнату үшін жеткілікті, сонымен қатар шығу әсерінен жеткілікті алыс орналасқан.

Торды құрудың негізгі мақсаты – физикалық аймақтан есептеу аймағына дейінгі тор түйіндерінің көрінісі, дифференциалдық есептің ең дәл шешімін беретіндей етіп, есептеу аймағын ұяшықтарға немесе элементтерге бөлінуі болып табылады. Ansys Meshing бағдарламалық жасақтамада тор ұяшықтарының реттілігімен ерекшеленетін торлардың екі түрін құру мүмкіндігі қарастырылған: құрылымды және құрылымды емес. Құрылымды емес торлардың құрылымды торлардан негізгі ерекшелігі – ол, физикалық аймақта ұяшықтардың ерікті орналасуында және тор бағыттарын таңдау немесе оны кез келген координаталар жүйесіне қосу арқылы тор ұяшықтарын ретке келтіру мүмкін еместігінде.

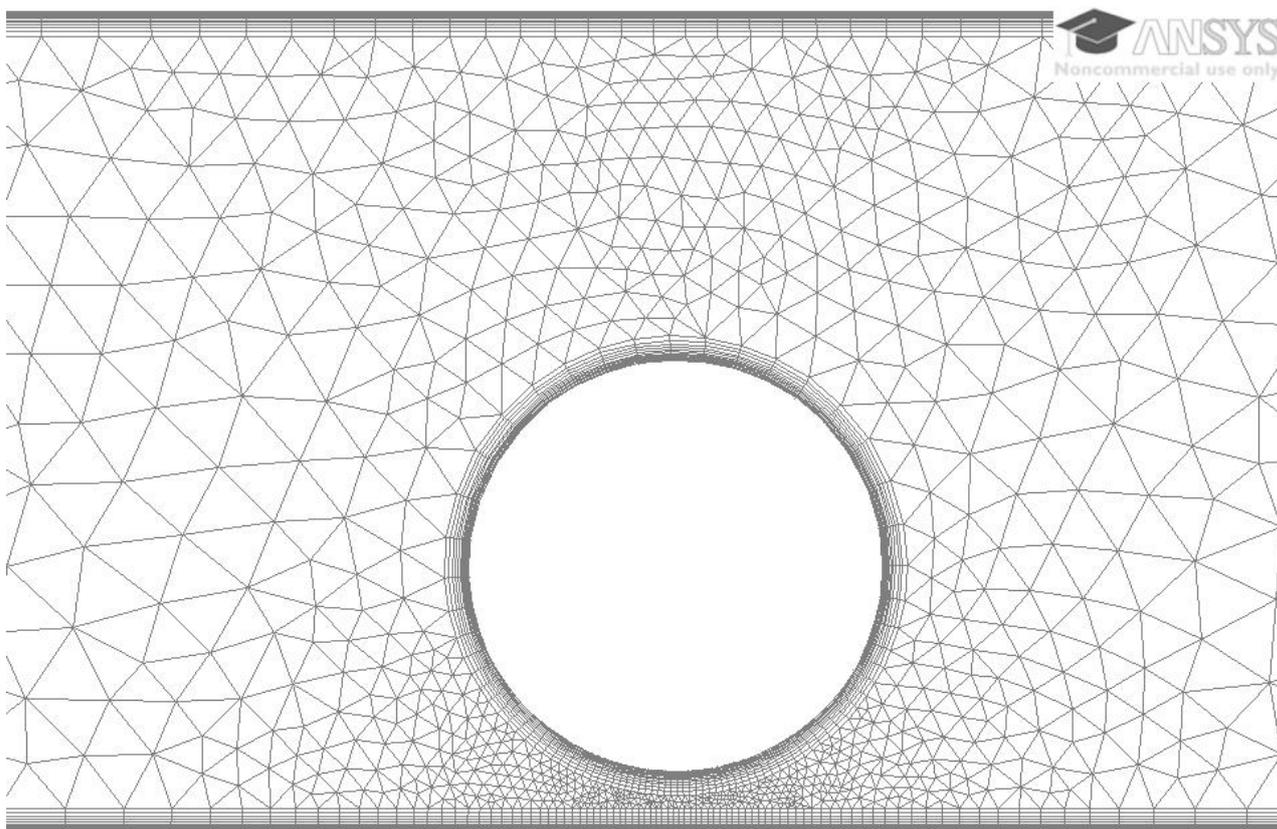
Құрылымды емес торлардың топологиясы көбінесе құрастыру процесінде қалыптасады, сондықтан ол дискреттелген аумақта айтарлықтай өзгеруі мүмкін.

Құрылған тордың біртектілігі немесе бірқалыптылығы кездейсоқ пайда болуы мүмкін емес. Ол тор құрылымының белгілі геометриялық сипаттамаларына белгілі бір шектеулер қою есебінен қол жеткізіледі. Осылайша, құрылымдалмаған тәсілдің маңызды артықшылығы - есептеу аймағының пішінін дәл көрсетуге және адам ресурстарының аз шығындарымен торды құруға мүмкіндік беретін құрылыстың икемділігі мен салыстырмалы қарапайымдылығында.

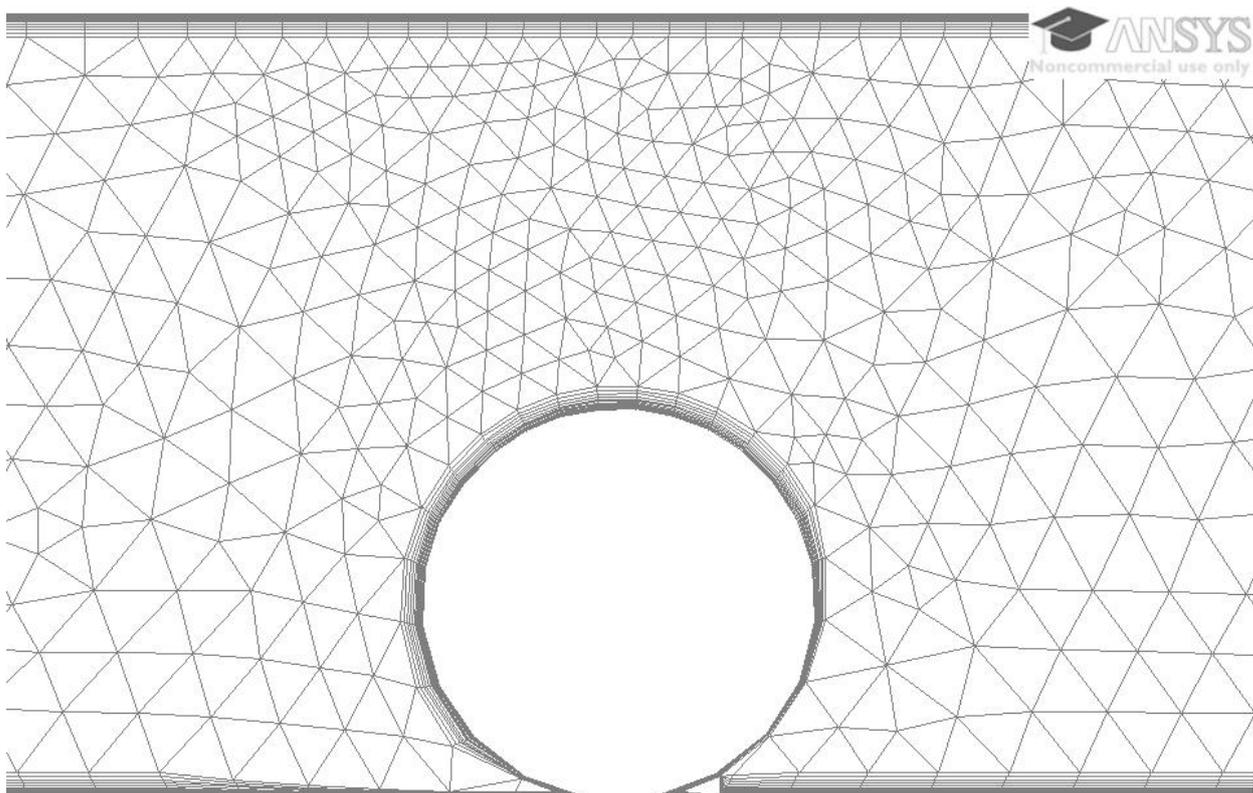
Бұл жағдайда торлар мүмкіндігінше ортогональға жақын болуы керек (тор элементтерінің шекаралары 90° -қа жақын бұрыштармен қиылысуы керек) және тор элементінің жақтарының арақатынасы тым үлкен болмауы шарт.

Үзіліссіз шешімдері бар есептер (соның ішінде мембраналық каналдың гидродинамикалық есептері) есептеу аймағы күрделі біртекті емес құрылымның әр-түрлі масштабты элементтерін қамтиды. Жеткілікті кең аймақтарда есептеу параметрлерінің шағын немесе орташа градиенттері болады.

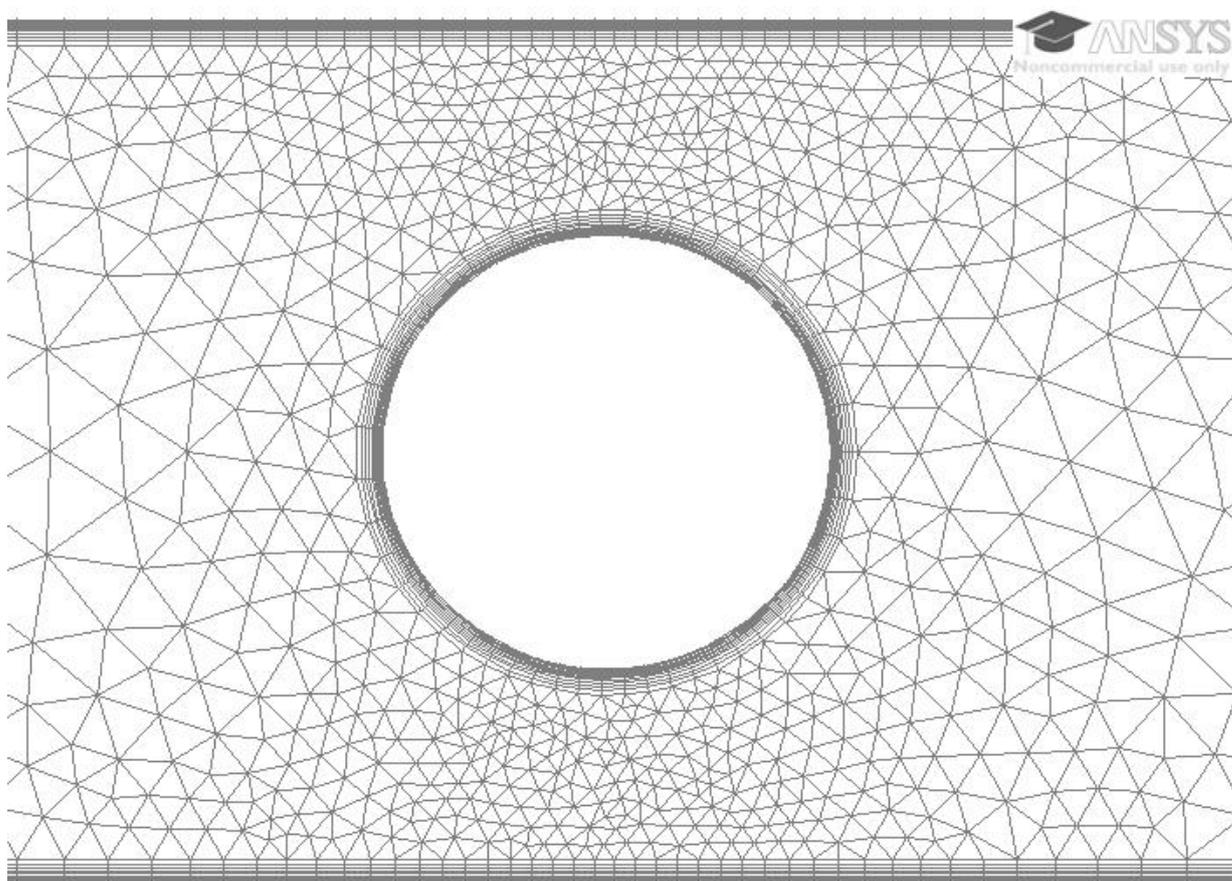
Аралық бөлгіштердің жанындағы типтік есептелген тордың сұлбасы 30, 31 және 32 – суреттерде көрсетілген [116].



Сурет 30 – Аралық бөлгіштер мембранадан 0,1 мм қашықтықта шахматтық ретпен орналасқан екі өлшемді канал моделіне арналған CFD есептеу торы



Сурет 31 – Аралық бөлгіштер мембрананың бетінде шахматтық ретпен орналасқан екі өлшемді канал моделіне арналған CFD есептеу торы



Сурет 32 – Аралық бөлгіштер каналдың ортасында сызықты орналасқан екі өлшемді канал моделіне арналған CFD есептеу торы

Белгіленген сызықсыз ағынның үзілу аймақтарын қарастыратын есептерде шекара қабатын дұрыс модельдеуге, оның ішінде көлденең негізгі бағытта дұрыс параметрлерді алуға үлкен мән беріледі. Ол үшін қабырғаға жақын орналасқан жіңішке төртбұрышты призмалардан тұратын арнайы «шекаралық» тор енгізіледі.

Аралық бөлгіштермен толтырылған каналдың неғұрлым күрделі геометриясына байланысты, барлық канал модельдері үшін құрылымданбаған торлар қолданылды. 2.2 тарауда айтылғандай, концентрациялық поляризациямен шекаралық қабатты шешу үшін мембрананың бетіне жақын жерде торды едәуір тегістеу қажет, бұл жағдайда аралық бөлгіштердің беттеріне жақын қосымша ұнтақтау қажет [116].

Тордың тәуелділігін зерттеу тордың тығыздығын анықтау үшін біртіндеп кішірек торлар сериясын қолдана отырып жүргізілді, содан кейін ерітіндідегі өзгеріс шамалы болып саналды. Қабылданған торда канал көлемінде шамамен 0,01 мм элемент қолданылады, ол мембрана мен аралық бөлгіштердің бетіне жақын жерде біртіндеп азаяды, мұнда элементтің ең кіші мөлшері шамамен 0,5 мкм құрайды. Бұл S. Wardeh мен H. Morvan [115] қолданатын торға ұқсас, элементтің ең аз өлшемі 5 мкм және канал көлемінде элементтің өлшемі 0,05 мм-ге жуық.

3.2 Аралық бөлгіштермен толтырылған көлденең ағынның гидродинамикалық және масса тасымалдау моделінің шекаралық және бастапқы шарттары

Аралық бөлгіштер арқылы өтетін ағын өтпелі болады, ал аралық бөлгіштердің артындағы Карман құйынды ағыны Рейнольдс санының $Re=300$ -ден жоғары мәндері үшін үлкен және кіші құйындарды туғызады.

k - ω моделі k - ε моделіне ұқсас, тек осы жерде ω кинетикалық энергиясының меншікті диссипация жылдамдығының теңдеуі шешіледі. Бұл модельді Рейнольдстың төмен мәндері үшін және қабырғаға жақын функциялармен бірге пайдалануға болады. Оның сызықтық еместігі жоғары, сондықтан стандартты k - ε моделіне қарағанда нашар жинақталады, сонымен қатар, бастапқы жақындауға өте сезімтал. Аралық бөлгіштермен толтырылған мембраналық каналдағы турбуленттілікті модельдеуде k - ω моделін қолдану жақсы нәтиже береді.

k - ω турбулентті моделі келесі теңдеумен сипатталады [116]

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \left[(v + v_T) \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right] \quad (51)$$

мұндағы $u = u_1$, $v = u_2$, $x = x_1$ және $y = x_2$, $v_T = k/\omega$ – құйынды тұтқырлық және ол келесі теңдеумен анықталады

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + \sigma v_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \tau_{nj} \frac{\partial u_n}{\partial x_j} - \beta^* k \omega, \quad (52)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + u_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + \sigma v_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] - \beta_1 \omega^2 + \lambda \frac{\omega}{k} \tau_{nj} \frac{\partial u_n}{\partial x_j} + 2(1 - F_1) \frac{\sigma}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (53)$$

мұндағы k – турбулентті кинетикалық энергия, ω – меншікті диссипация жылдамдығы, τ – тангенциалды кернеу, тұрақтылар $\sigma = 0.05$, $\beta^* = 0.09$, $\beta_1 = 0.075$ және $\lambda = 0.556$ -ға тең [117].

(52) және (53) теңдеулерде j және n қосынды индекстері болып табылады. Ал F_1 араласу функциясы келесідей анықталады

$$F_1 = \tanh \left(\left[\max \left(\min \left(\frac{\sqrt{k}}{0.09 \omega y^+}; 45 \frac{\omega}{\Omega} \right); \frac{400v}{y^{+2} \omega} \right) \right] \right) \quad (54)$$

мұндағы Ω – құйындылықтың абсолютті мәні, ал y^+ – қабырғаға дейінгі ең жақын қашықтық.

k - ω түрдегі моделі үшін тасымалдау теңдеуі келесідей жазылады

$$\frac{\partial CN_a}{\partial t} + u_j \frac{\partial CN_a}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(D + \sigma D_T) \frac{\partial \rho C}{\partial x_j} \right] \quad (55)$$

мұндағы N_a – « a » компонентінің мольдік үлесі, D – диффузия коэффициенті, ал C – бинарлы қоспаның концентрациясы. D_T – құйынды диффузия коэффициенті. Бұл жұмыста Шмидтің турбуленттілік саны $Sc_T = 0,85$ болып таңдалған және ол келесідей анықталады

$$Sc_T = \frac{v_T}{D_T}. \quad (56)$$

Кіріс ағыны толығымен дамыған және CO_2 концентрациясы тұрақты және $N_{CO_2} = 0.1$ -ге тең. Аралық бөлгіштердің бетінде және каналдың жоғарғы қабырғасында сырғуды және енудің болмауын қамтамасыз ететін жағдайлар қолданылады. Әр түрдің молярлық үлесі аралық бөлгіштердің бетінде және каналдың жоғарғы қабырғасында нөлге тең. Мембрананың бетінде сырғу жылдамдық өрісі қолданылады.

Мембрана бойындағы моль үлесіне қолданылатын шекаралық шарттар бетіне қолданылатын массаның сақталуымен анықталады

$$J_a = -D \frac{\partial C_a}{\partial y} = -D \frac{\partial}{\partial y} (C \cdot N_a) \quad (57)$$

мұндағы C_a – "a" компонентінің концентрациясы. Концентрацияның өзгеруін ескере отырып, мембрана бетіндегі "a" компонентінің моль үлесінің шекаралық шарты келесідей алынады

$$D \frac{\partial N_a}{\partial y} = \frac{1}{C^2} \left(C_b D \frac{\partial C_a}{\partial y} - C_a D \frac{\partial C_b}{\partial y} \right) = \frac{1}{C^2} (-C_b J_a + C_a J_b) \quad (58)$$

мұндағы C_b – "b" компонентінің концентрациясы, J_a – бірлік аудандағы «a» бөлшектердің молярлық ағыны, J_b – бірлік аудандағы «b» бөлшектердің молярлық ағыны.

Моль үлесінің анықтамасын қолдана отырып, (58) теңдеуден келесі теңдеуді аламыз

$$\frac{\partial N_a}{\partial y} = \frac{1}{C} \left(-\frac{C_b}{C} J_a + \frac{C_a}{C} J_b \right) = \frac{1}{C} (-N_b J_a + N_a J_b), \quad (59)$$

$$J_a = P_a \Delta P_a \quad \text{және} \quad J_b = P_b \Delta P_b \quad (60)$$

мұндағы N_b – "b" компонентінің мольдік үлесі, P_a – «a» компонентінің парциал қысымы, P_b – «b» компонентінің парциал қысымы, ΔP_a – мембранадағы «a» компонентінің парциалды қысымдар айырымы, ΔP_b – мембранадағы «b» компонентінің парциалды қысымдар айырымы.

Парциал қысым мен селективтіліктің анықтамасын $\alpha = P_a / P_b$ қолдана отырып, мембрана бетіндегі молярлық үлесінің шекаралық шарты төмендегідей болады

$$D \frac{\partial N_a}{\partial y} = \frac{1}{C} (N_b P_a \Delta P_a - N_a P_b \Delta P_b) = \frac{P_b \Delta P}{C} (1 - \alpha) N_a N_b \quad (61)$$

мұндағы ΔP – мембранадағы жалпы қысым айырымы, α – селективтілік.

Масса тасымалдаусыз, сырғанаусыз шекаралық шарттар канал қабырғалары бойымен, кіру және шығу ұзындығы бойымен, сондай-ақ мембраналық аралық бөлгіштердің қисық беттерінде қолданылады. Қоспаның көлемдік құрамы каналға кіре берісте әр ерітінді үшін ерітіндінің массалық үлесі түрінде көрсетілген. Мембрана бетінің қалған бөлігі арқылы пермеат ағынын ұсыну үшін мембрананың бетіне қайтадан масса ағыны қолданылады. Модельдеуге арналған тиісті параметрлер 4 – кестеде көрсетілген.

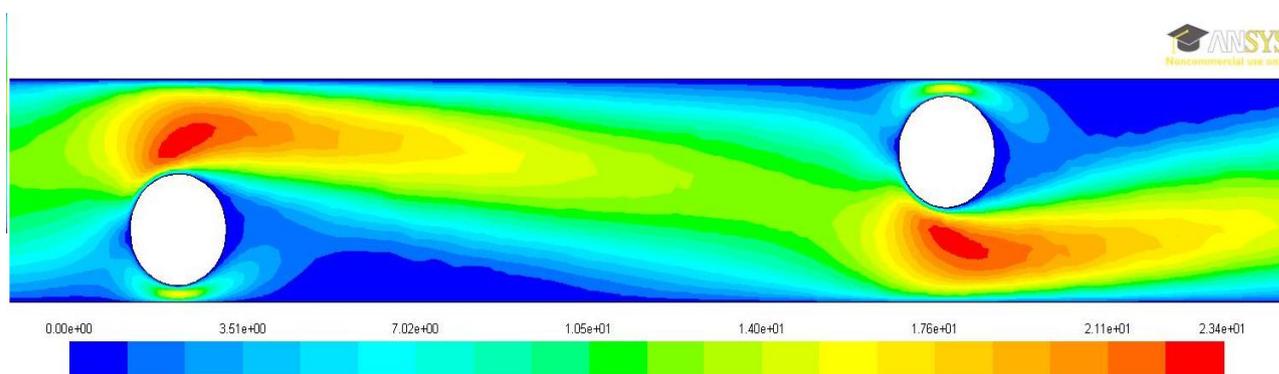
Кесте 4 – Модельдеуге арналған модельдің кіріс параметрлері

Параметр	Мәні
Мембрананың өткізгіштігі, L_p	$1,4 \cdot 10^{-11} \text{ м Па}^{-1} \text{ с}^{-1}$
Кірістегі Рейнольдс саны, Re	200, 400, 600, 800
Кедергі коэффициенті, R	0,95
Шмидт саны, Sc	1.5
Молярлық селективтілік $\alpha = P_{CO_2}/P_{H_2}$	0,0086
Мембранадағы қысымның жалпы айырмашылығы, ΔP	1 Мпа

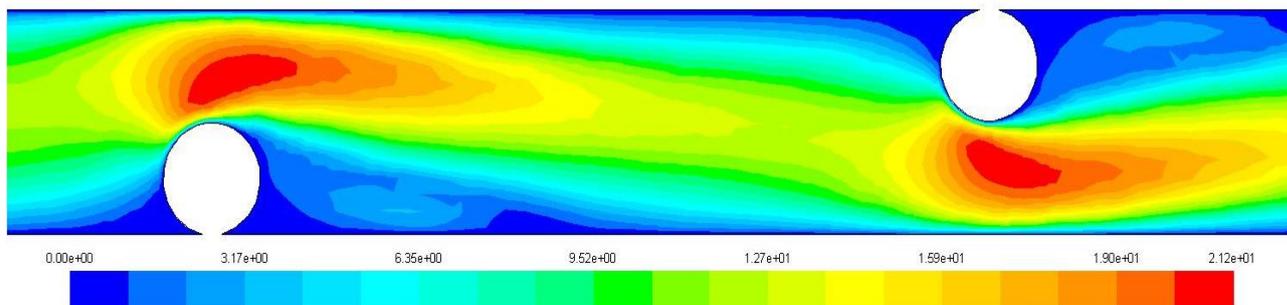
3.3 Аралық бөлгіштермен толтырылған көлденең ағынның гидродинамикалық және масса тасымалдау моделінің нәтижелері мен талқылаулары

$Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің сызықтық және шахматтық ретпен орналасқан геометрияларының айналасындағы стационарлық күйдегі жылдамдық контурлары [116] 33, 34 және 35 – суреттерде көрсетілген. Бұл суреттерде көрсетілген стационарлық ағынның құрылымы – бұл периодті ағынның уақыт бойынша орташа көрінісі екендігін көрсетеді [116].

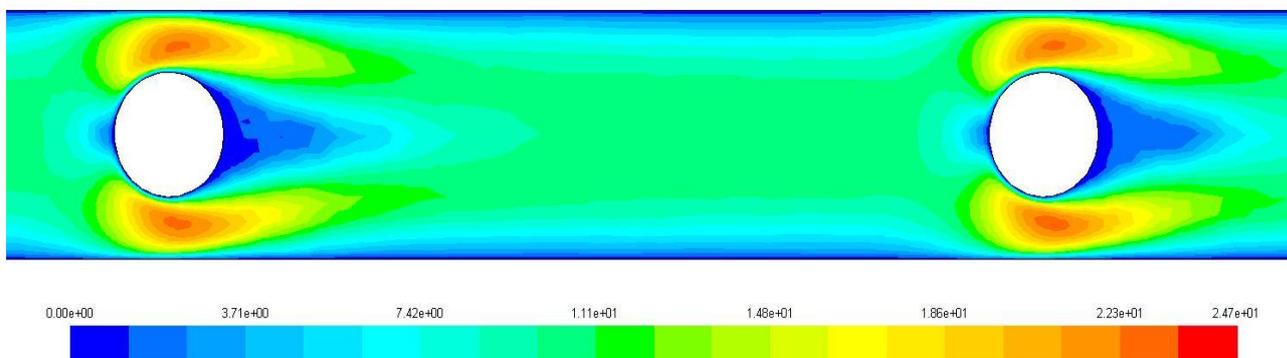
Нақты ағынның құрылымы – дененің артында құйындар пайда болатын және мезгіл-мезгіл төмен түсетін, денені орағыта аққан ағыстың классикалық жағдайы. Дененің артындағы бұл ағын үлгісі Карман құйынды жолы деп аталады. 33, 34 және 35 суреттерінің арасында ағынның құрылымында айтарлықтай айырмашылықтар бар. Үлкен және кіші құйындар әр аралықтың жолында және мембранаға қарай ортаңғы аймақта болады. Карман құйынды жолынан туындаған импульстің араласуы концентрацияның біркелкі таралуына және мембраналар арқылы масса тасымалдаудың ұлғаюына әкеледі. Құйынды ағын жүйе бойынша қысымның төмендеуіне әкеледі; егер мұндай дизайн нақты жүйеде жүзеге асырылатын болса, мұны ескеру қажет [116].



Сурет 33 – Аралық бөлгіштер мембранадан 0,1 мм қашықтықта шахматтық ретпен орналасқан $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы стационар күйдегі жылдамдық контурлары

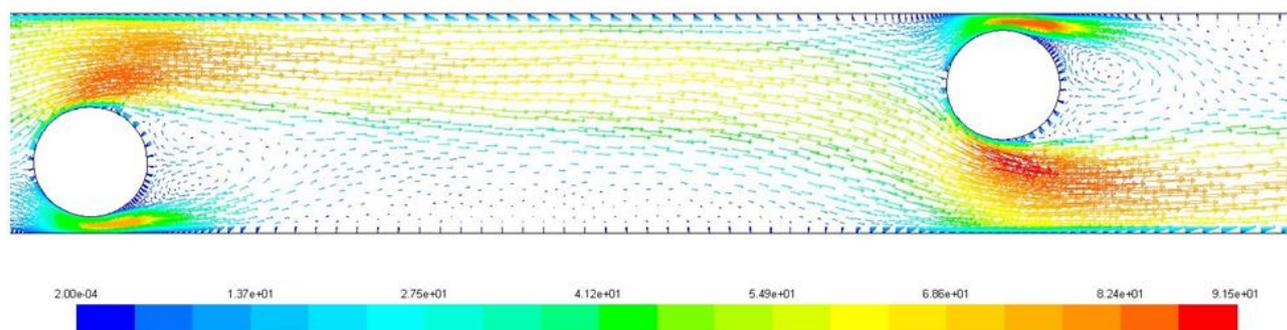


Сурет 34 – Аралық бөлгіштер мембрананың бетінде шахматтық ретпен орналасқан $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы стационар күйдегі жылдамдық контуры [116]



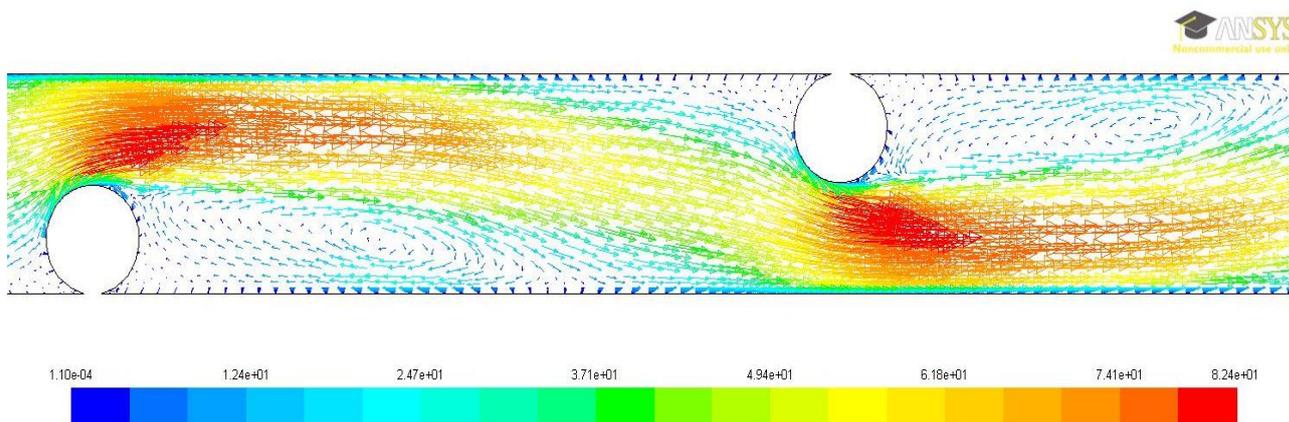
Сурет 35 – Аралық бөлгіштер каналдың ортасында сызықты орналасқан $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы стационар күйдегі жылдамдық контуры

36, 37 және 38 – суреттерде $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы стационарлық күйдегі жылдамдық векторының контурлары көрсетілген [116].

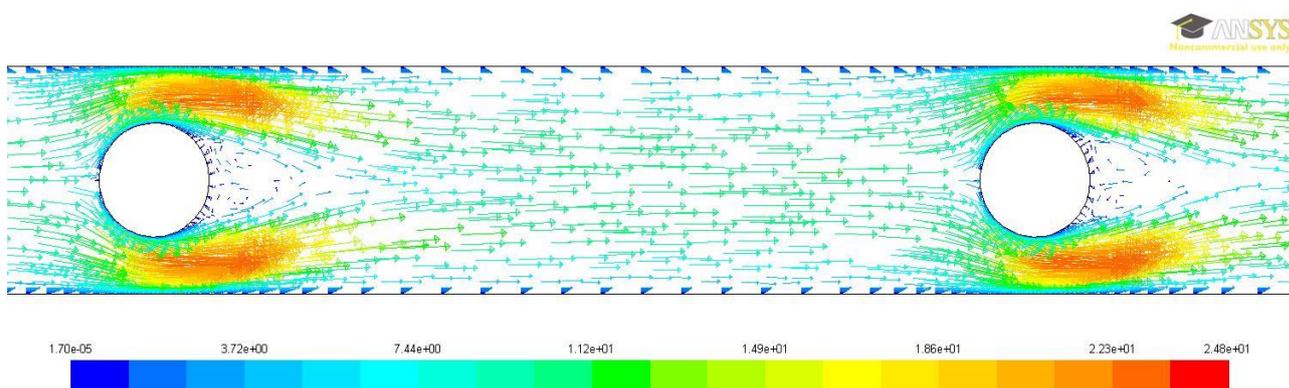


Сурет 36 – Аралық бөлгіштер мембранадан 0,1 мм қашықтықта шахматтық ретпен орналасқан $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық

бөлгіштердің айналасындағы стационар күйдегі жылдамдық векторларының контуры



Сурет 37 – Аралық бөлгіштер мембрананың бетінде шахматтық ретпен орналасқан $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы стационар күйдегі жылдамдық векторларының контуры [116]



Сурет 38 – Аралық бөлгіштер каналдың ортасында сызықты орналасқан $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы стационар күйдегі жылдамдық векторларының контуры

36 – суреттен көрініп тұрғандай, газ ағыны аралық бөлгішті орай ағып өткенде, цилиндр тәріздес аралық бөлгіштің артында асимметриялы емес екі құйын пайда болады. Аралық бөлгіштің артындағы жылдамдық ақаулығы, цилиндрден алыстаған сайын тегістеледі. Сонымен қатар, ағынның әрекет ету аймағында қабырғаға жақын жерде, аралық бөлгіш пен канал қабырғасы арасындағы алшақтықта жылдамдықтың ең үлкен болуы байқалады [116]. Цилиндрден алыстаған сайын қабырғадан ең төменгі және ең жоғары жылдамдық позициясына дейінгі қашықтық өседі. Алайда, аралық бөлгіштерден бірдей қашықтықта Рейнольдс санының өсуімен жылдамдық профильдерінің өзгеру сипаты монотонды емес.

Цилиндр мен канал қабырғасы арасындағы кеңістіктен ағынды ағыс арқасында цилиндрді орап ағу асимметриялық болып табылады. Сондықтан

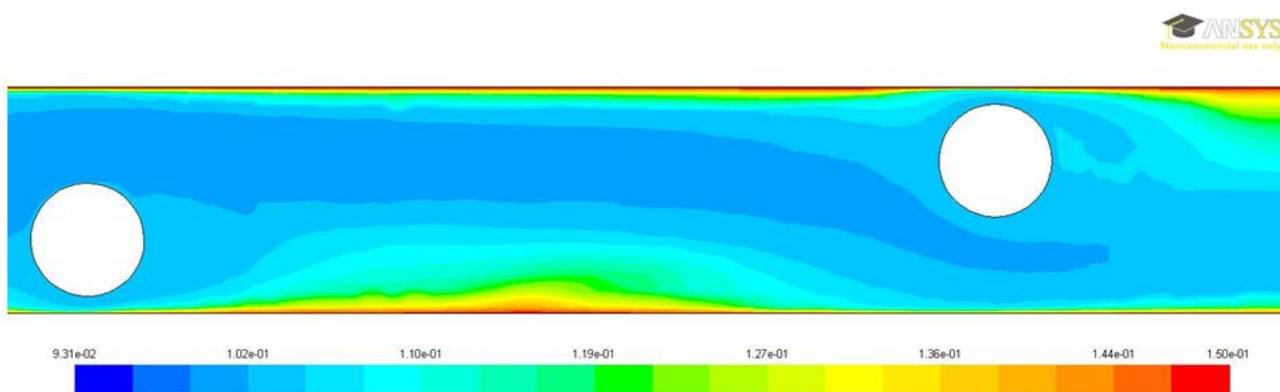
цилиндрдің тікелей артындағы ламинарлы рециркуляция аймағының симметрия жазықтығы, қабырғаға белгілі бір бұрышпен көлбеу орналасқан. Ағынды ағыс цилиндрдің төменгі (қабырғаға жақын) бетінде құйындардың пайда болуына мүмкіндік бермейді және тұрақты құйынды құрылымдар тек цилиндрдің жоғарғы (қабырғадан алыс) бетінде қалыптасады.

Ығысу қабатының тұрақтылығын жоғалтудың басталуына және құйындардың пайда болуына сәйкес келетін режимде цилиндрдің ізіндегі ағын оның бүйір қабырғаларындағы шекара қабатының аймағын қоспағанда, каналдың бүкіл ені бойынша квази-екі өлшемді сипатты сақтайды [116].

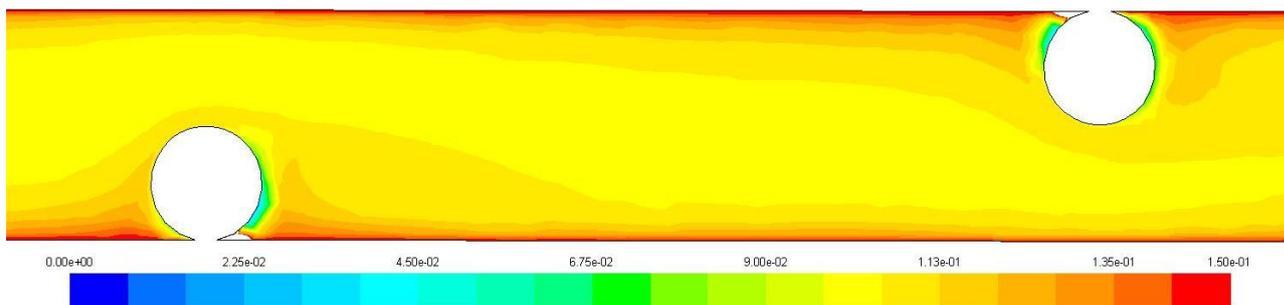
37 – суреттен көрініп тұрғандай құйын көршілес екі аралық бөлгіштің арасында пайда болады [116]. Ығысу қабатының тұрақтылығын жоғалтуға байланысты, цилиндрдің артында ламинарлық ағын турбулентті ағын режиміне ауысады. Жақын арада ағын ламинарлы және дерлік тегіс болып келеді, ал цилиндрдің артында қалыптасқан құйындар канал ені бойынша тұтастығын сақтайды [116].

38 – суретте көрсетілгендей, аралық бөлгіштердің артында симметриялық екі құйын пайда болды. Аралық бөлгіш каналдың ортасында сызықтық орналасқандықтан, симметриялы ағын сипаты байқалады. Осы режимдегі ағын, ығысудың пайда болуына байланысты концентрациялық поляризация қабатын жояды. Нәтижесінде мембраналық масса тасымалдау коэффициенті артады.

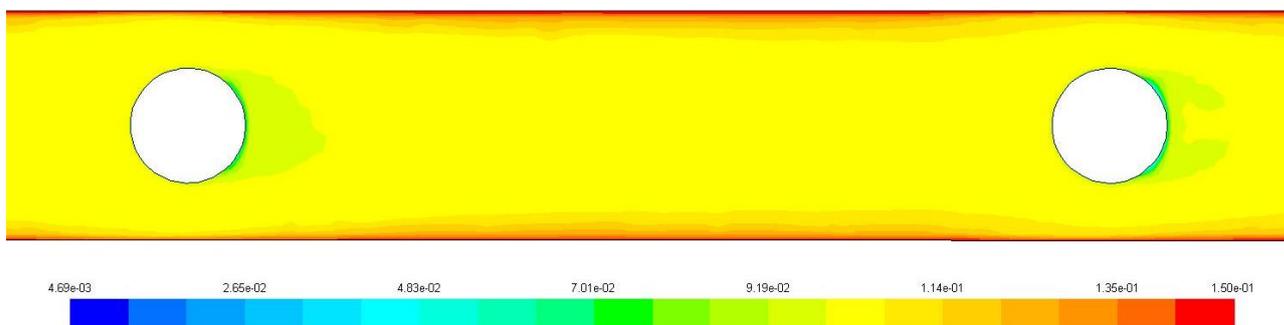
39, 40, 41 – суреттерде $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы CO_2 концентрациясының контурлары көрсетілген [116].



Сурет 39 – Аралық бөлгіштер мембранадан 0,1 мм қашықтықта шахматтық ретпен орналасқан $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы CO_2 концентрациясының контурлары



Сурет 40 – Аралық бөлгіштер мембрананың бетінде шахматтық ретпен орналасқан $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы CO_2 концентрациясының контуры [116]



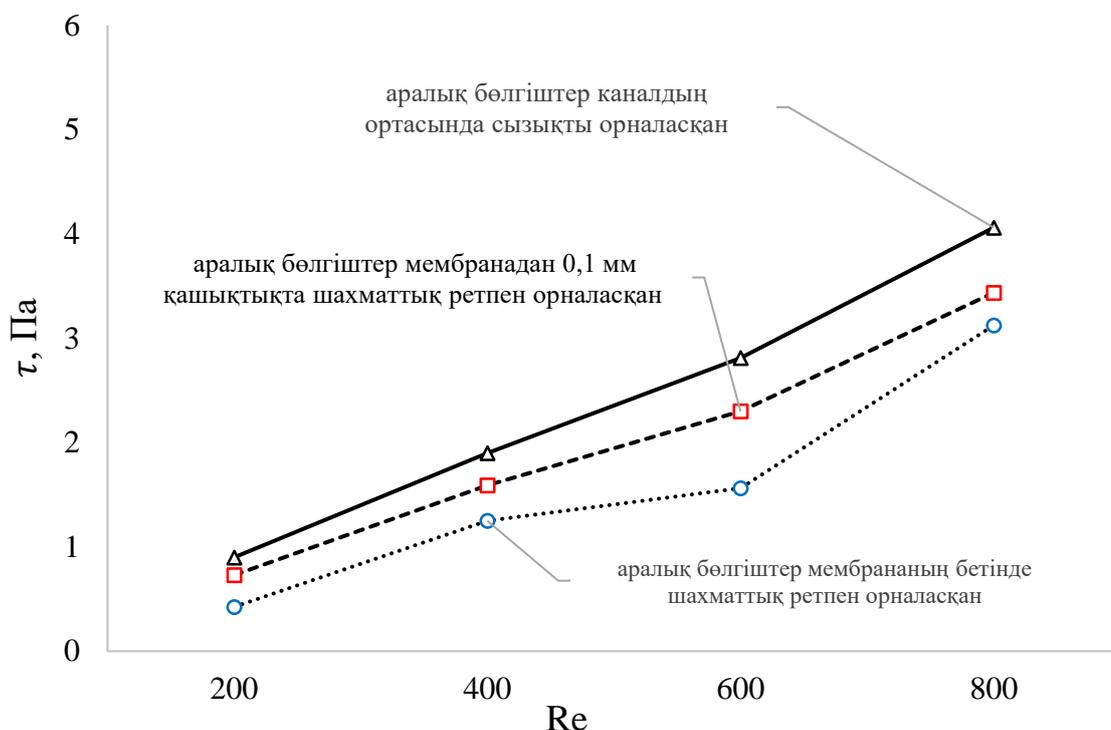
Сурет 41 – Аралық бөлгіштер каналдың ортасында сызықты орналасқан $Re=400$ үшін каналдағы бесінші және алтыншы аралық бөлгіштердің айналасындағы CO_2 концентрациясының контуры

Жасалған гидродинамикалық модель көмегімен ANSYS Fluent бағдарламасы арқылы мембраналық канал ұзындығы бойынша орташа тангенциалды кернеу алынды.

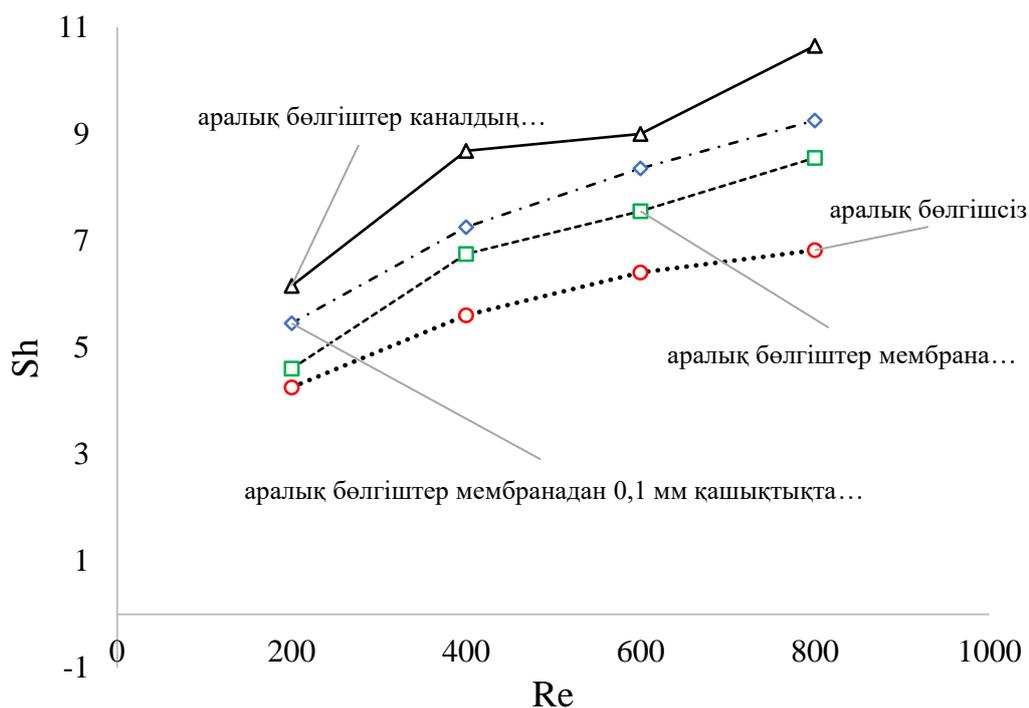
Тангенциалды кернеудің канал кірісіндегі Re санына тәуелділігі 42 – суретте көрсетілген. Алынған суреттен көріп отырғанымыздай, канал кірісіндегі жылдамдықтың артуымен тангенциалды кернеу артады. Осылайша, канал кірісіндегі Рейнольдс санының көп мөлшері концентрациялық поляризацияның неғұрлым жұқа шекаралық қабатына сәйкес келетінін растайды.

Нәтижесінде, CFD арқылы алынған тангенциалды кернеу мәндерін пайдаланып, қарастырған Рейнольдс сандарының барлық диапазонында (46) – теңдеумен канал ұзындығы бойынша орташа Шервуд саны есептелді.

Канал кірісіндегі Рейнольдс санының масса тасымалдауға әсері 43 – суретте көрсетілген.



Сурет 42 – Тангенциалды кернеудің канал кірісіндегі Re санына тәуелділігі

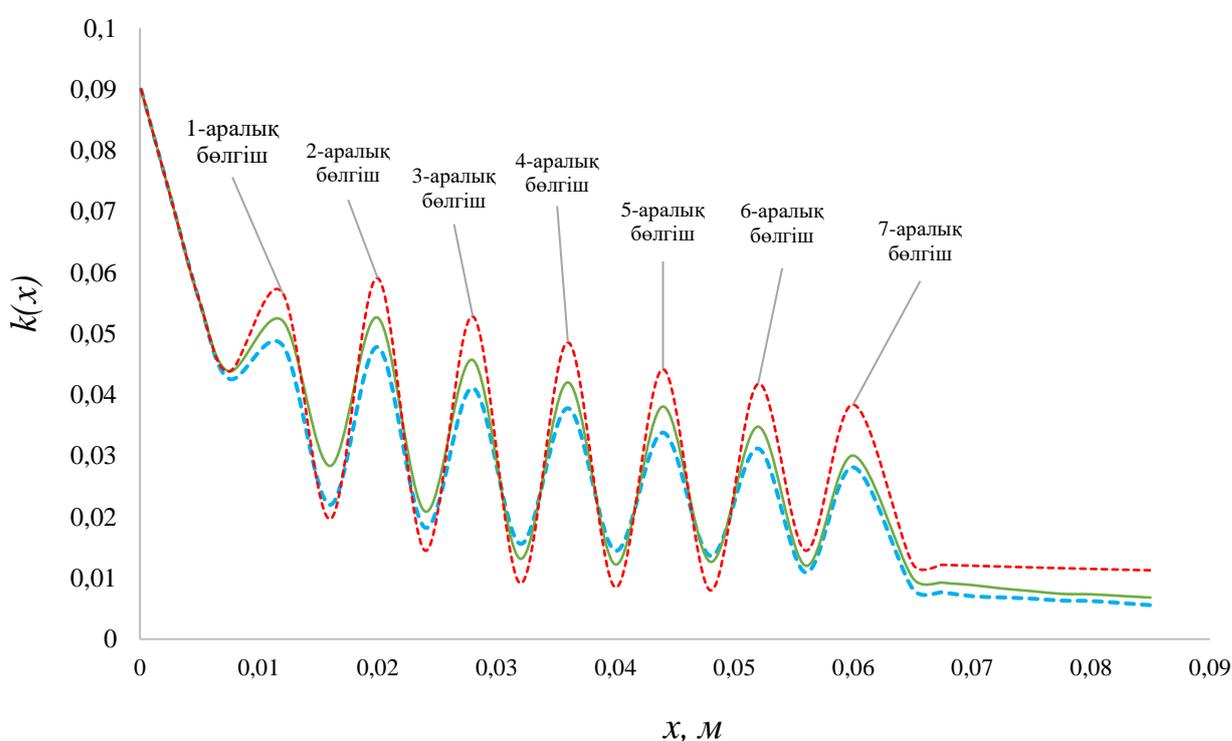


Сурет 43 – Канал кірісіндегі Рейнольдс санының масса тасымалдауға әсері

Сызықтық және шахмат бойынша орналастырылған аралық бөлгіштер бар каналдағы Шервуд санының орташа мәні аралық бөлгіштер жоқ каналдың Шервуд санымен салыстырылады. Шервуд саны барлық Re сандары үшін аралық бөлгіштердің болуына байланысты артады [116]. Мембраналық сипаттамалардың жақсару дәрежесі Re санының жоғары мәндерінде әлдеқайда

жоғары. Сонымен қатар, сызықтық геометрия Рейнольдстың барлық сандары үшін шахматтық геометриясымен салыстырғанда жоғары масса тасымалын қамтамасыз етеді.

Шервуд саны мембраналық сипаттамалардың ең жақсы көрсеткіші болып табылады, өйткені ол кірісте таңдалған концентрация жағдайларының әсерін және сынақ аймағының ұзындығын жояды. Шервуд саны аралық бөлгішсіз ағын үшін және аралық бөлгіштердің сызықтық және шахматтық геометриясы үшін есептеледі. Аралық бөлгіштер жағдайында Шервуд санының орташа мәні бөлгішсіз жағдайға қарағанда 1.5 есе көп [116]. Бұл аралық бөлгіштердің артында құйынның әсерінен пайда болатын араласуға байланысты. 44 – суретте $Re=400$ үшін канал ұзындығы бойынша масса тасымалдау коэффициентінің өзгерісі көрсетілген.



- Аралық бөлгіштер мембрананың бетінде шахматтық ретпен орналасқан
- Аралық бөлгіштер мембранадан 0,1 мм қашықтықта шахматтық ретпен орналасқан
- Аралық бөлгіштер каналдың ортасында сызықты орналасқан

Сурет 44 – $Re=400$ үшін канал ұзындығы бойынша масса тасымалдау коэффициентінің өзгеруі

44 - суретте канал кірісінен алғышқы аралық бөлгішке дейін концентрациялық поляризациялық шекаралық қабат қалыңдығы артып, масса тасымалдау коэффициенті төмендейтіні көрініп тұр. Аралық бөлгіш айналасында құйынның әсерінен пайда болатын араласуға байланысты концентрациялық шекаралық қабат қалыңдығы төмендеп, масса тасымалдау

коэффициенті артып жатыр. Осы құбылысты 39, 40 және 41 суреттерде байқауға болады. Аралық бөлгіштермен толтырылған мембраналық каналдың гидродинамикалық және масса тасымалдау моделінің нәтижесінде, аралық бөлгіштер каналдың ортасында сызықты орналасқан геометриясы, масса тасымалдау коэффициентінің жоғары мәніне ие болатыны байқалды.

3.4 III тарау бойынша қорытынды

Рейнольдс сандары 200-ден 800-ге дейін аралық бөлгіштермен толтырылған екі параллель мембранамен шектелген каналдағы сутек және көмірқышқыл газдарының бинарлық қоспасының стационарлық екі өлшемді ағыны, $k-\omega$ турбуленттік режимде модельденді. Гидродинамикалық модельдеу барысында аралық бөлгіштердің, мембрана бетінде шахматтық ретпен орналасқан, мембрана бетінен 0,1 мм қашықтықта шахматтық ретпен орналақан және каналдың ортасында сызықтық ретпен орналасқан геометриясы зерттелді.

Сонымен қатар, қазіргі модель мембрана беттері үшін шынайы өткізгіш қабырға шекарасының шартын қосу арқылы ағынның физикалық тұрғыдан нақтырақ көрінісін қамтиды, оны басқа зерттеушілер аралықпен толтырылған арна ағыны үшін елеусіз қалдырды.

Концентрациялық поляризация әсерлерін, ерітіндінің тасымалдау қасиеттерінің әрбір ерітінді құрамдас бөлігінің жергілікті концентрацияларына сәйкес кеңістікте өзгеруіне мүмкіндік беру арқылы осындай көп компонентті модельдер арқылы жақсы сипаттауға болады. Дегенмен, бұл қасиеттерді болжаудың жалпы әдісі сөзсіз пайдалы болатыны атап өткен жөн. Пайда болатын концентрациялық поляризациялық шекаралық қабат арқылы масса тасымалдау моделі, ақылға қонымды нәтиже берді және осылайша, модель, пермеат ағынының азаюын дәл болжауға мүмкіндік берді.

Сонымен қатар, мембраналық модульді оңтайландыру және сутек өндірісін жақсарту мақсатында, канал ішіндегі аралық бөлгіштердің тиімді геометриясы анықталды.

ҚОРЫТЫНДЫ

1. Су тек және көмірқышқыл газ қоспаларының мембраналық бөліну процесінің ламинарлық ағында гидродинамикалық моделінің негізгі жиынтығы құрастырылды. Гидродинамикалық модель нәтижесінде тангенциалды кернеудің канал кірісіндегі Re санына тәуелділігі алынды. Канал кірісіндегі жылдамдық артқан сайын тангенциалды кернеу артатыны және кірістегі жоғары Рейнольдс саны концентрация поляризациясының жұқа шекаралық қабатына сәйкес келетіні байқалды.

2. Концентрациялық поляризация қабатының қалыңдығын басқару мақсатында мембрана бетіндегі CO_2 газының концентрация контуры алынды. Нәтижесінде кірістегі жоғары Рейнольдс саны, концентрациялық поляризациясының шекаралық қабатын бұзатын ығысудың ұлғаюына байланысты жіңішке концентрациялық поляризация қабатына сәйкес келетініне көз жеткізілді. Гидродинамикалық модель нәтижелері арқылы Пленка теориясы негізінде аналитикалық жолмен масса тасымалдау коэффициентінің есептеу әдістемесі құрастырылды. Нәтижесінде масса тасымалдау коэффициенті канал ұзындығы бойымен төмендеп, ал концентрациялық поляризация қабатының қалыңдығы каналдың ұзындығы бойымен артатыны байқалды.

3. Аралық бөлгіштермен толтырылған екі параллель мембранамен шектелген каналдағы H_2 және CO_2 бинарлық қоспасының стационарлық екі өлшемді ағыны, Рейнольдстың төмен мәндері үшін турбуленттілікті сипаттауға және арнайы функцияларды енгізбестен қабырғаға жақын турбуленттілікті есептеуге қабілетті $k-\omega$ турбулентті моделінің көмегімен шешілді. Нәтижесінде, аралық бөлгіштердің артында құйынның әсерінен пайда болатын араласуға байланысты, концентрациялық поляризациялық шекаралық қабат қалыңдығының жұқаратындығы анықталды.

4. Гидродинамикалық модель көмегімен ANSYS Fluent бағдарламасы арқылы мембраналық канал ұзындығы бойынша орташа тангенциалды кернеу алынып, аралық бөлгіштердің артында құйынның әсерінен пайда болатын араласуға байланысты, аралық бөлгіштер жағдайында Шервуд санының орташа мәні бөлгішсіз жағдайға қарағанда 1.5 есе жоғары болатыны анықталды.

5. Аралық бөлгіштердің сызықтық орналастырылған геометриясы қарастырылған Re -тің барлық мәндері үшін аралық бөлгіштердің шахматты орналастырылған геометриясымен салыстырғанда жоғары масса тасымалын қамтамасыз ететіні анықталды.

Алға қойылған міндеттердің толықтай шешілуін бағалау

Диссертациялық жұмыста қойылған барлық міндеттер толығымен шешілді. Жұмыста алынған нәтижелер, заңдылықтар интегралдық мембраналық биореактор арқылы арзан су тек өндірісін жақсартуға және оңтайландыруға, мембраналық бөлу процестерін дамытуға қосатын теориялық және практикалық маңыздылығы зор. Сондай-ақ, ЖОО-да «Жылу энергетикасы» мамандығын оқытуда ұсынылады.

Диссертациялық жұмыстың ғылыми деңгейін бағалау

Диссертациялық жұмыстағы зерттеулер әл-Фараби атындағы ҚазҰУ-дың физика-техникалық факультеті, жылуфизика және техникалық физика кафедрасында, сонымен қатар Болгария ғылым академиясы, Химиялық технология институтында орындалды. Диссертациялық жұмыста келтірілген жаңа шешімдер әдебиетте бұрыннан белгілі нәтижелермен салыстырылды. Диссертациялық жұмыстың нәтижелері шет ел және отандық ғылыми журналдарда жарияланып, халықаралық ғылыми конференциялар мен семинарларда талқыланды.

ҚОЛДАНЫЛҒАН ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ

- 1 Puyol D., Batstone D.J., Hülsen T., Astals S., Peces M., Krömer J.O. Resource Recovery from Wastewater by Biological Technologies: Opportunities, Challenges, and Prospects // *Frontiers in Microbiology*. – 2017. – Vol. 7. – P. 1-23.
- 2 Sgroi M., Vagliasindi F.G.A., Roccaro P. Feasibility, sustainability and circular economy concepts in water reuse // *Current Opinion in Environmental Science and Health*. – 2018. – Vol. 2. – P. 20–25.
- 3 Hao X., Batstone D., Guest J.S. Carbon neutrality: An ultimate goal towards sustainable wastewater treatment plants // *Water Research*. – 2015. – Vol. 87. – P. 413-415.
- 4 Lee M., Keller A.A., Chiang P.C., Den W., Wang H., Hou C.H., Wu J., Wang X., Yan J. Water-energy nexus for urban water systems: A comparative review on energy intensity and environmental impacts in relation to global water risks // *Applied Energy*. – 2017. – Vol. 205. – P. 589-601.
- 5 Batstone D.J., Viridis B. The role of anaerobic digestion in the emerging energy economy // *Current Opinion in Biotechnology*. – 2014. – Vol. 27. – P. 142-149.
- 6 Becker A.M., Yu K., Stadler L.B., Smith A.L. Co-management of domestic wastewater and food waste: A life cycle comparison of alternative food waste diversion strategies // *Bioresource Technology*. – 2017. – Vol. 223. – P. 131-149.
- 7 Stazi V., Tomei M.C. Enhancing anaerobic treatment of domestic wastewater: State of the art, innovative technologies and future perspectives // *Science of the Total Environment*. – 2018. – Vol. 635. – P. 78–91.
- 8 Pileggi V., Parker W.J. AnMBR digestion of mixed WRRF sludges: Impact of digester loading and temperature // *Journal of Water Process Engineering*. – 2017. – Vol. 19. – P. 74-80.
- 9 Shi X., Leong K.Y., Ng H.Y. Anaerobic treatment of pharmaceutical wastewater: A critical review // *Bioresource Technology*. – 2017. – Vol. 245. – P. 1238-1244.
- 10 Batstone D.J., Hülsen T., Mehta C. M., Keller J. Platforms for energy and nutrient recovery from domestic wastewater: A review // *Chemosphere*. – 2015. – Vol. 140. – P. 2-11.
- 11 Khan M.A., Ngo H.H., Guo W.S. et al. Comparing the value of bioproducts from different stages of anaerobic membrane bioreactors // *Bioresource Technology*. – 2016. – Vol. 214. – P. 816-825.
- 12 Crone B.C., Garland, J.L., Sorial G., Vane L. Significance of dissolved methane in effluents of anaerobically treated low strength wastewater and potential for recovery as an energy product: A review // *Water Research*. – 2016. – Vol. 104. – P. 520-531.
- 13 Aslam M., Charfi A., Lesage G., Heran M., Kim J. Membrane bioreactors for wastewater treatment: A review of mechanical cleaning by scouring agents to control membrane fouling // *Chemical Engineering Journal*. – 2017. – Vol. 307. – P. 897-913.

- 14 Barat R., Serralta J., Ruano M.V. et al. Biological nutrient removal model no. 2 (BNRM2): A general model for wastewater treatment plants // *Water Science and Technology*. – 2013. – Vol. 67, № 7. – P. 1481-1489.
- 15 Batstone D.J., Puyol D., Flores-Alsina X., Rodríguez J. Mathematical modelling of anaerobic digestion processes: applications and future needs // *Reviews in Environmental Science and BioTechnology*. – 2015. – Vol. 14, № 4. – P. 595-613.
- 16 Batstone D.J., Keller J., Angelidaki I. et al. The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). // *Water science and technology*. – 2002. – Vol. 45, № 10. – P. 65–73.
- 17 Ferrer J., Pretel R., Durán F. et al. Design methodology for submerged anaerobic membrane bioreactors (AnMBR): A case study // *Separation and Purification Technology*. – 2015. – Vol. – 141. – P. 378-386.
- 18 Pretel R., Moñino P., Robles, A. et al. Economic and environmental sustainability of an AnMBR treating urban wastewater and organic fraction of municipal solid waste // *Journal of Environmental Management*. – 2016. – Vol. 179. – P. 83-92.
- 19 Aquino S.F., Stuckey D.C. Integrated model of the production of soluble microbial products (SMP) and extracellular polymeric substances (EPS) in anaerobic chemostats during transient conditions // *Biochemical Engineering Journal*. – 2008. – Vol. 38, № 2. – P. 138-146.
- 20 Benyahia B., Sari T., Cherki B., Harmand J. Anaerobic membrane bioreactor modeling in the presence of Soluble Microbial Products (SMP) - the Anaerobic Model AM2b // *Chemical Engineering Journal*. – 2013. Vol. – 228. – P. 1011-1022.
- 21 Ahmed W., Rodríguez J. Modelling sulfate reduction in anaerobic digestion: Complexity evaluation and parameter calibration // *Water Research*. – 2018. – Vol. 130. – P. 255-262.
- 22 Durán F., Robles Á., Giménez J. B., Ferrer J., Ribes J., Serralta J. Modeling the anaerobic treatment of sulfate-rich urban wastewater: Application to AnMBR technology // *Water Research*. – 2020. – Vol. 184. – P. 2-9.
- 23 Henares M., Izquierdo M., Peña-Roja, J. M., Martínez-Soria V. Comparative study of degassing membrane modules for the removal of methane from Expanded Granular Sludge Bed anaerobic reactor effluent // *Separation and Purification Technology*. – 2016. – Vol. 170. – P. 22-29.
- 24 Pelaz L., Gómez A., Garralón G., Letona A., Fdz-Polanco M. Recirculation of gas emissions to achieve advanced denitrification of the effluent from the anaerobic treatment of domestic wastewater // *Bioresource Technology*. – 2018. – Vol. 250. – P. 758-763.
- 25 Chen S., Smith A.L. Methane-driven microbial fuel cells recover energy and mitigate dissolved methane emissions from anaerobic effluents // *Environmental Science: Water Research and Technology*. – 2018. – Vol. 4, № 1. – P. 67-79.
- 26 Skouteris G., Hermosilla D., López P., Negro C., Blanco Á. Anaerobic membrane bioreactors for wastewater treatment: A review // *Chemical Engineering Journal*. – 2012. – Vol. 198–199. – P. 138-148.

- 27 Naessens W., Maere T., Ratkovich N., Vedantam S., Nopens I. Critical review of membrane bioreactor models - Part 2: Hydrodynamic and integrated models // *Bioresource Technology*. – 2012. – Vol. 122. – P. 107-118.
- 28 Zuthi M.F.R., Ngo H.H., Guo W.S. Modelling bioprocesses and membrane fouling in membrane bioreactor (MBR): A review towards finding an integrated model framework // *Bioresource Technology*. – 2012. – Vol. 122. – P. 119-129.
- 29 Zheng Y., Zhang W., Tang B., Ding J., Zhang Z. Membrane fouling mechanism of biofilm-membrane bioreactor (BF-MBR): Pore blocking model and membrane cleaning // *Bioresource Technology*. – 2018. – Vol. 250. – P. 398-405.
- 30 Wu J., He C., Jiang X., Zhang M. Modeling of the submerged membrane bioreactor fouling by the combined pore constriction, pore blockage and cake formation mechanisms // *Desalination*. – 2011. – Vol. 279, № 1–3. – P. 127-134.
- 31 Chellam S., Cogan N.G. Colloidal and bacterial fouling during constant flux microfiltration: Comparison of classical blocking laws with a unified model combining pore blocking and EPS secretion // *Journal of Membrane Science*. – 2011. – Vol. 382, № 1-2. – P. 148-157.
- 32 Katsoufidou K., Yiantsios S.G., Karabelas A.J. A study of ultrafiltration membrane fouling by humic acids and flux recovery by backwashing: Experiments and modeling // *Journal of Membrane Science*. – 2005. – Vol. 266, № 1–2. – P. 40-50.
- 33 Charfi A., Park E., Aslam M., Kim J. Particle-sparged anaerobic membrane bioreactor with fluidized polyethylene terephthalate beads for domestic wastewater treatment: Modelling approach and fouling control // *Bioresource Technology*. – 2018. – Vol. 258. – P. 263-269.
- 34 Charfi A., Thongmak N., Benyahia B. et al. A modelling approach to study the fouling of an anaerobic membrane bioreactor for industrial wastewater treatment // *Bioresource Technology*. – 2017. – Vol. 245. – P. 207-215.
- 35 Robles A., Ruano M. V., Ribes J., Seco A., Ferrer J. A filtration model applied to submerged anaerobic MBRs (SAnMBRs) // *Journal of Membrane Science*. – 2013. – Vol. 444. – P. 139-147.
- 36 Robles A., Ruano M. V., Ribes J., Seco A., Ferrer J. Global sensitivity analysis of a filtration model for submerged anaerobic membrane bioreactors (AnMBR) // *Bioresource Technology*. – 2014. – Vol. 158. – P. 365-373.
- 37 Robles A., Ruano M. V., Ribes J., Seco A., Ferrer J. Mathematical modelling of filtration in submerged anaerobic MBRs (SAnMBRs): Long-term validation // *Journal of Membrane Science*. – 2013. – Vol. 446. – P. 303-309.
- 38 Field R.W., Wu D., Howell J. A., Gupta B. B. Critical flux concept for microfiltration fouling // *Journal of Membrane Science*. – 1995. – Vol. 100, № 3. – P. 259-272.
- 39 Ognier S., Wisniewski C., Grasmick A. Membrane bioreactor fouling in sub-critical filtration conditions: A local critical flux concept // *Journal of Membrane Science*. – 2004. – Vol. 229, № 1–2. – P. 171-177.
- 40 Wu B. Advances in the use of CFD to characterize, design and optimize bioenergy systems // *Computers and Electronics in Agriculture*. – 2013. – Vol. 93. – P. 195-208.

- 41 Böhm L., Drews A., Prieske H., Bérubé P. R., Kraume M. The importance of fluid dynamics for MBR fouling mitigation // *Bioresource Technology*. – 2012. – Vol. 122. – P. 50-61.
- 42 Boyle-Gotla A., Jensen P. D., Yap S. D., Pidou M., Wang Y., Batstone D. J. Dynamic multidimensional modelling of submerged membrane bioreactor fouling // *Journal of Membrane Science*. – 2014. – Vol. 467. – 467 p.
- 43 Trad Z., Vial C., Fontaine J. P., Larroche C. Modeling of hydrodynamics and mixing in a submerged membrane bioreactor // *Chemical Engineering Journal*. – 2015. – Vol. 282. – P. 77-90.
- 44 Choo K.H., Lee C.H. Hydrodynamic behavior of anaerobic biosolids during crossflow filtration in the membrane anaerobic bioreactor // *Water Research*. – 1998. – Vol. 32, № 11. – P. 3387-3397.
- 45 Hu D. Xiao T., Chen Z. et al. Effect of the high cross flow velocity on performance of a pilot-scale anaerobic membrane bioreactor for treating antibiotic solvent wastewater // *Bioresource Technology*. – 2017. – Vol. 243. – P. 47-56.
- 46 Kim J., Kim K., Ye H. et al. Anaerobic fluidized bed membrane bioreactor for wastewater treatment // *Environmental Science and Technology*. – 2011. – Vol. 45, № 2. – P. 576-581.
- 47 Kim M.J., Sankararao B., Yoo C.K. Determination of MBR fouling and chemical cleaning interval using statistical methods applied on dynamic index data // *Journal of Membrane Science*. – 2011. – Vol. 375, № 1-2. – P. 345-353.
- 48 Charfi A., Aslam M., Lesage G., Heran M., Kim J. Macroscopic approach to develop fouling model under GAC fluidization in anaerobic fluidized bed membrane bioreactor // *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. – 2017. – Vol. 49. – P. 219-229.
- 49 Aslam M., Kim J. Investigating membrane fouling associated with GAC fluidization on membrane with effluent from anaerobic fluidized bed bioreactor in domestic wastewater treatment // *Environmental Science and Pollution Research*. – 2019. – Vol. 26, № 2. – P. 1170-1180.
- 50 Huang X., Wei C.H., Yu K.C. Mechanism of membrane fouling control by suspended carriers in a submerged membrane bioreactor // *Journal of Membrane Science*. – 2008. – Vol. 309, № 1-2. – P. 7-16.
- 51 Тарасов Б.П., Лотоцкий М.В. Водородная энергетика: прошлое, настоящее, виды на будущее // *Российский химический журнал*. – 2006. – Т. L, № 6. – 5 с.
- 52 Kalassov N.B., Dzhonova D., Manatbaev R., Tsibranska I., Panyovskal S. Application of integrated membrane bioreactors in renewable energy industry // “Sustainable Processes, Sustainable Systems, Sustainable Environment” Seminar organized by the institute of Chemical Engineering on the occasion of the 150th anniversary of the Bulgarian Academy of Science, Sofia, Bulgaria. – 2019. – 41 p.
- 53 Adekunle K.F., Okolie J.A. A Review of Biochemical Process of Anaerobic Digestion // *Advances in Bioscience and Biotechnology*. – 2015. – Vol. 06, № 03. – P. 205-212.

- 54 Bakonyi P., Kumar G., Nemestóthy N., Lin C. Y., Bélafi-Bakó K. Biohydrogen purification using a commercial polyimide membrane module: Studying the effects of some process variables // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2013. – Vol. 38, № 35. – P. 15092-15099.
- 55 Bakonyi P., Nemestóthy N., Bélafi-Bakó K. Biohydrogen purification by membranes: An overview on the operational conditions affecting the performance of non-porous, polymeric and ionic liquid based gas separation membranes // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2013. – Vol. 38, № 23. – P. 9673-9687.
- 56 Giorno L., Mazzei R., De Bartolo L., Drioli E. Membrane bioreactors for production and separation // *Comprehensive Biotechnology*. – 2019. – P. 347–393.
- 57 Ghimire A. et al. Bio-hythane production from microalgae biomass: Key challenges and potential opportunities for algal bio-refineries // *Bioresour Technol.* – 2017. – Vol. 241. – P. 525–236.
- 58 Ghimire A., Kumar G., Sivagurunathan P. et al. A review on dark fermentative biohydrogen production from organic biomass: Process parameters and use of by-products // *Applied Energy*. – 2015. – Vol. 144. – P. 79-87.
- 59 Yun Y.M., Lee M. K., Im S. W. et al. Biohydrogen production from food waste: Current status, limitations, and future perspectives // *Bioresource Technology*. – 2018. – Vol. 248. – P. 79-87.
- 60 Franco-Morgado M., Alcántara C., Noyola A., Muñoz R., González-Sánchez A. A study of photosynthetic biogas upgrading based on a high rate algal pond under alkaline conditions: Influence of the illumination regime // *Science of the Total Environment*. – 2017. – Vol. 592. – P. 419-425.
- 61 Quijano G., Arcila J.S., Buitrón G. Microalgal-bacterial aggregates: Applications and perspectives for wastewater treatment // *Biotechnology Advances*. – 2017. – Vol. 35, № 6. – P. 772-781.
- 62 Kalassov N.B., Dzhonova D., Manatbaev R., Tsibranska I., Panyovskal S. Application of integrated membrane bioreactors in renewable energy industry // *Journal of Chemical Technology and Metallurgy*. – 2020. – Vol. 55, № 2. – P. 314-323.
- 63 Bakonyi P., Buitrón G., Valdez-Vazquez I., Nemestóthy N., Bélafi-Bakó, K. A novel gas separation integrated membrane bioreactor to evaluate the impact of self-generated biogas recycling on continuous hydrogen fermentation // *Applied Energy*. – 2017. – Vol. 190. – P. 813-823.
- 64 Ramírez-Morales J.E., Tapia-Venegas E., Nemestóthy N., Bakonyi P., Bélafi-Bakó K., Ruiz-Filippi G. Evaluation of two gas membrane modules for fermentative hydrogen separation // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2013. – Vol. 38, № 32. – P. 14042-14052.
- 65 Ramírez-Morales J.E., Tapia-Venegas E., Campos J. L., Ruiz-Filippi G. Operational behavior of a hydrogen extractive membrane bioreactor (HEMB) during mixed culture acidogenic fermentation // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2019. – Vol. 44, № 47. – P. 25565-25574.

- 66 Myers C., Pennline H., Luebke D. et al. High temperature separation of carbon dioxide/hydrogen mixtures using facilitated supported ionic liquid membranes // *Journal of Membrane Science*. – 2008. – Vol. 322, № 1. – P. 28-31.
- 67 El-Azzami L.A., Grulke E.A. Carbon dioxide separation from hydrogen and nitrogen facilitated transport in arginine salt-chitosan membranes // *Journal of Membrane Science*. – 2009. – Vol. 328, № 1–2. – P. 15-22.
- 68 Kentish S., Scholes C., Stevens G. Carbon Dioxide Separation through Polymeric Membrane Systems for Flue Gas Applications // *Recent Patents on Chemical Engineering*. – 2012. – Vol. 1, № 1. – P. 52-66.
- 69 Wijmans J.G., Baker R.W. The solution-diffusion model: a review // *Journal of Membrane Science*. 1995. Vol. 107, № 1–2. P. 1-21.
- 70 Li D., Wang R., Chung T.S. Fabrication of lab-scale hollow fiber membrane modules with high packing density // *Separation and Purification Technology*. – 2004. – Vol. 40, № 1. – P. 15-30.
- 71 Balster J. Spiral Wound Membrane Module // *Encyclopedia of Membranes*. – 2016. – P. 1812-1814.
- 72 Ghidossi R., Veyret D., Moulin P. Computational fluid dynamics applied to membranes: State of the art and opportunities // *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. – 2006. – Vol. 45, № 6. – P. 437-454.
- 73 Eslahpazir M., Krull R., Krühne U. Computational fluid dynamics // *Comprehensive Biotechnology*. – 2019. – P. 95-107.
- 74 Berman A.S. Laminar flow in channels with porous walls // *Journal of Applied Physics*. – 1953. – Vol. 24, № 9. – P. 1232-1235.
- 75 Friedman M., Gillis J. Viscous Flow in a Pipe With Absorbing Walls // *Journal of Applied Mechanics*. – 1967. – Vol. 34, № 4. – P. 819-827.
- 76 Unno G., Mizushina T., Takeshita S. Study of flow in a porous tube with radial mass flux // *Journal of Chemical Engineering of Japan*. – 1971. – Vol. 4, № 2. – P. 135-142.
- 77 Karode S.K. Laminar flow in channels with porous walls, revisited // *Journal of Membrane Science*. – 2001. – Vol. 191, № 1–2. – P. 237-241.
- 78 Nassehi V. Modelling of combined Navier-Stokes and Darcy flows in crossflow membrane filtration // *Chemical Engineering Science*. – 1998. – Vol. 53, № 6. – P. 1253-1265.
- 79 Damak K., Ayadi A., Zeghmami B., Schmitz P. A new Navier-Stokes and Darcy's law combined model for fluid flow in crossflow filtration tubular membranes // *Desalination*. – 2004. – Vol. 161, № 1. – P. 67-77.
- 80 Schmitz P., Prat M. 3D Laminar stationary flow over a porous surface with suction: Description at pore level // *AIChE Journal*. – 1995. – Vol. 41, № 10. – P. 2212-2226.
- 81 Каласов Н.Б. 2D моделирование процессов мембранной сепарации // *Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Фараби Алемі»*. – 2020. – 239 с.

- 82 Huang L., Morrissey M.T. Finite element analysis as a tool for crossflow membrane filter simulation // *Journal of Membrane Science*. – 1999. – Vol. 155, № 1. – P. 19-30.
- 83 Richardson C.J., Nassehi V. Finite element modelling of concentration profiles in flow domains with curved porous boundaries // *Chemical Engineering Science*. – 2003. – Vol. 58, № 12. – P. 2491-2503.
- 84 Geissler S., Werner U. Dynamic model of crossflow microfiltration in flat-channel systems under laminar flow conditions // *Filtration and Separation*. – 1995. – Vol. 32, № 6. – P. 533-537.
- 85 Lee Y., Clark M.M. Modeling of flux decline during crossflow ultrafiltration of colloidal suspensions // *Journal of Membrane Science*. – 1998. – Vol. 149, № 2. – P. 181-202.
- 86 Geraldes V., Semião V., de Pinho M.N. Flow and mass transfer modelling of nanofiltration // *Journal of Membrane Science*. – 2001. – Vol. 191, № 1-2. – P. 109-128.
- 87 Niwa M., Ohya H., Kuwahara E., Negishi Y. Reverse osmotic concentration of aqueous 2-butanone (methyl ethyl ketone), tetrahydrofuran and ethyl acetate solutions // *Journal of Chemical Engineering of Japan*. – 1988. – Vol. 21, № 2. – P. 164-171.
- 88 Tanimura S., Nakao S. ichi, Kimura S. Transport analysis of reverse osmosis of organic aqueous solutions // *Journal of chemical engineering of Japan*. – 1991. – Vol. 24, № 3. – P. 364-371.
- 89 Fletcher D.F., Wiley D.E. A computational fluids dynamics study of buoyancy effects in reverse osmosis // *Journal of Membrane Science*. – 2004. – Vol. 245, № 1-2. – P. 175-181.
- 90 Miranda J.M., Campos J.B.L.M. Concentration polarization in a membrane placed under an impinging jet confined by a conical wall - A numerical approach // *Journal of Membrane Science*. – 2001. – Vol. 182, № 1-2. – P. 257-270.
- 91 Каласов Н.Б., Манатбаев Р.К., Джонова Д. Гидродинамическое моделирование поперечного потока процессов мембранной сепарации // *Вестник Национальной Инженерной Академии РК*. – 2020. – Том 1, № 75. – С. 68–76.
- 92 Panyovska S., Dzhonova D., Tsibranska I., Kalassov N., Manatbayev R. CFD modelling of mass transfer through a membrane // “Sustainable Processes, Sustainable Systems, Sustainable Environment” Seminar organized by the institute of Chemical Engineering on the occasion of the 150th anniversary of the Bulgarian Academy of Science, Sofia, Bulgaria. – 2019. – P. 24.
- 93 Krishna R., Wesselingh J.A. The Maxwell-Stefan approach to mass transfer // *Chemical Engineering Science*. – 1997. – Vol. 52, № 6. – P. 861-911.
- 94 Fimbres-Weihs G.A., Wiley D.E. Review of 3D CFD modeling of flow and mass transfer in narrow spacer-filled channels in membrane modules // *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. – 2010. – Vol. 49, № 7. – P. 759-781.

- 95 Déon S., Dutournié P., Limousy L., Bourseau P. The two-dimensional pore and polarization transport model to describe mixtures separation by nanofiltration: Model validation // *AIChE Journal*. – 2011. – Vol. 57, № 4. – P. 985-998.
- 96 Mariñas B.J., Urama R.I. Modeling Concentration-Polarization in Reverse Osmosis Spiral-Wound Elements // *Journal of Environmental Engineering*. – 1996. – Vol. 122, № 4. – P. 292-298.
- 97 Manatbayev R.K., Kalassov N.B., Amankeldi L.B. Numerical investigation of the occurrence of a concentration-polarization layer // *Eurasian Physical Technical Journal*. – 2021. – Vol. 18, № 2. – P. 56-59.
- 98 Каласов Н.Б., Манатбаев Р.К. Численное исследования возникновения концентрационно-поляризационного слоя // Сборник материалов международной научной онлайн конференции «Инновационное развитие образования, наукоемких производств и альтернативные источники энергии». – 2020. – С. 83-87.
- 99 Belfort G. Fluid mechanics in membrane filtration: Recent developments // *Journal of Membrane Science*. – 1989. – Vol. 40, № 2. – P. 123-147.
- 100 Schwinge J., Wiley D.E., Fletcher D.F. A CFD study of unsteady flow in narrow spacer-filled channels for spiral-wound membrane modules // *Desalination*. – 2002. – Vol. 146, № 1-3. – P. 195-201.
- 101 Ranade V. V., Kumar A. Fluid dynamics of spacer filled rectangular and curvilinear channels // *Journal of Membrane Science*. – 2006. – Vol. 271, № 1-2. – P. 1-15.
- 102 Belfort G., Nagata N. Fluid mechanics and cross-flow filtration: some thoughts // *Desalination*. – 1985. – Vol. 53, № 1-3. – P. 123-147.
- 103 Pellerin E., Michelitsch E., Darcovich K., Lin S., Tam C. M. Turbulent transport in membrane modules by CFD simulation in two dimensions // *Journal of Membrane Science*. – 1995. – Vol. 100, № 2. – P. 139-153.
- 104 Ferziger J.H., Perić M., Street R.L. Computational Methods for Fluid Dynamics // *Computational Methods for Fluid Dynamics*. – 2020. – Vol. 4. – P. 347-363.
- 105 Ranade V. V., Kumar A. Comparison of flow structures in spacer-filled flat and annular channels // *Desalination*. – 2006. – Vol. 191, № 1-3. – P. 236-244.
- 106 Da Costa A.R., Fane A. G., Fell C., Franken, A. Optimal channel spacer design for ultrafiltration // *Journal of Membrane Science*. – 1991. – Vol. 62, № 3. – P. 275-291.
- 107 Da Costa A.R., Fane A.G., Wiley D.E. Spacer characterization and pressure drop modelling in spacer-filled channels for ultrafiltration // *Journal of Membrane Science*. – 1994. – Vol. 87, № 1-2. – P. 79-98.
- 108 Miyake Y., Tsujimoto K., Beppu H. Direct numerical simulation of a turbulent flow in a channel having periodic pressure gradient // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. – 1995. – Vol. 16, № 5. – P. 333-340.
- 109 Kim J., Moin P., Moser R. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low reynolds number // *Journal of Fluid Mechanics*. – 1987. – Vol. 177. – P. 133-166.

- 110 Schwinge J., Wiley D.E., Fletcher D.F. Simulation of the flow around spacer filaments between narrow channel walls. 1. Hydrodynamics // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. – 2002. – Vol. 41, № 12. – P. 2977-2987.
- 111 Schwinge J., Wiley D.E., Fletcher D.F. Simulation of the flow around spacer filaments between channel walls. 2. Mass-transfer enhancement // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. – 2002. – Vol. 41, № 19. – P. 4879-4888.
- 112 Fimbres-Weihs G.A., Wiley D.E. Numerical study of two-dimensional multi-layer spacer designs for minimum drag and maximum mass transfer // *J Memb Sci*. – 2008. – Vol. 325, № 2. – P. 809–822.
- 113 Fimbres-Weihs G.A., Wiley D.E., Fletcher D.F. Unsteady flows with mass transfer in narrow zigzag spacer-filled channels: A numerical study // *Ind Eng Chem Res*. – 2006. – Vol. 45, № 19. – P. 6594–6603.
- 114 Koutsou C.P., Yiantsios S.G., Karabelas A.J. Numerical simulation of the flow in a plane-channel containing a periodic array of cylindrical turbulence promoters // *Journal of Membrane Science*. – 2004. – Vol. 231, № 1-2. – P. 81-90.
- 115 Wardeh S., Morvan H.P. CFD simulations of flow and concentration polarization in spacer-filled channels for application to water desalination // *Chemical Engineering Research and Design*. – 2008. – Vol. 86, № 10. – P. 1107-1116.
- 116 Каласов Н.Б., Манатбаев Р.К. Күрделі геометриялы мембраналық арнаның математикалық моделі // *АЭЖБУ Хабаршысы*. – 2022. – Том 3, № 58. – Б. 5–15.
- 117 Menter F.R. Improved two-equation k - ω turbulence models for aerodynamic flows - NASA Technical Memorandum TM-103975 // *NASA Technical Memorandum, NASA*. – 1992. – 8 p.