

На правах рукописи



АНИСИМОВА МАРИЯ АЛЕКСАНДРОВНА

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
РАЗДЕЛЕНИЯ СМЕСИ АЗОТА И КИСЛОРОДА С ПОМОЩЬЮ
СЕЛЕКТИВНОЙ МЕМБРАНЫ**

1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Тюмень – 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Тюменский государственный университет»

Научный

Шевелев Александр Павлович

руководитель:

кандидат физико-математических наук,
доцент

Официальные

Мирзоев Акмал Ахадович

оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник
лаборатории механики жидкости, газа и
систем гидроприводов Института механики
и сейсмостойкости сооружений
им. М.Т. Уразбаева Академии наук
Республики Узбекистан

Бельских Денис Сергеевич

кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник лаборатории
гидродинамики многофазных сред
Тюменского филиала Федерального
государственного бюджетного учреждения
науки «Институт теоретической и
прикладной механики
им. С.А. Христиановича Сибирского
отделения Российской академии наук»

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное
научное учреждение «Уфимский
федеральный исследовательский центр
Российской академии наук», г. Уфа

Защита состоится «24» декабря 2025 года в 13:00 на заседании диссертационного совета 24.2.479.05, созданного на базе ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий» по адресу: 450008, г. Уфа, ул. К. Маркса, д. 12.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий» <https://uust.ru/dc/dissertations/>

Автореферат разослан «__» _____ 2025 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета,

к.ф.-м.н., доцент



Киреев Виктор Николаевич

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Селективные пористые мембраны на сегодняшний день являются одними из лидеров среди газоразделительных установок благодаря длительному ресурсу работы. Практический интерес представляет группа мембран, позволяющие повысить чистоту азота на 1-3%. С помощью селективных мембран задача о разделении смеси газов на компоненты заметно упрощается, однако для ее решения необходимо моделирование всего процесса для получения высокой степени очистки газа на выходе.

Существует ряд подходов к моделированию процессов, протекающих в установках с селективными мембранами. Один из них позволяет получить результат с высокой точностью за малое время, а другой требует детальное моделирование процесса, осуществляющегося внутри мембраны. Необходима разработка нового подхода, который будет учитывать движение потоков внутри и снаружи волокон мембраны, а также движение отбираемого потока через мембрану в одной задаче, позволяющего провести анализ характерных особенностей процесса газоразделения для обоснования параметров работы мембранной установки.

Целью работы является исследование процессов массопереноса компонентов газовой смеси при фильтрации в селективной мембране на основе модельных аналитических и численных решений.

Задачи:

1. Формулировка физически обоснованных допущений и введение безразмерных комплексов для оценки эволюции процесса массопереноса компонентов газовой смеси.
2. Разработка физико-математической модели процесса разделения газовых компонентов селективными мембранами с учетом продольного массопереноса на входе и выходе из нее.
3. Численное решение задачи для определения динамики распределения концентрации компонентов газовой смеси во входящем в мембрану и выходящем из нее потоке.
4. Анализ численного решения статической задачи процесса разделения газовых компонентов смеси
5. Получение аналитических решений, позволяющих определить эффективность очистки компонентов газовой смеси.
6. Валидация полученных решений путем сопоставления с основными технологическими параметрами существующих установок по разделению газов на основе селективных мембран.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Физико-математическая модель процесса фильтрации многокомпонентного газа через селективную пористую мембрану,

описывающая динамику массопереноса на входе и выходе из мембраны, позволяющая определить эффективное расположение точки отбора газа (пункт 8. *Течение жидкостей и газов в пористых средах*; пункт 20. *Разработка математических методов и моделей гидромеханики*).

2. Критерий, определяющий преобладание градиента давления или градиента концентрации в процессе массопереноса газа через мембрану. (пункт 8. *Течение жидкостей и газов в пористых средах*; пункт 19. *Точные, асимптотические, приближенные аналитические, численные и комбинированные методы исследования уравнений континуальных и кинетических моделей однородных и многофазных сред*).

3. Безразмерные комплексы, позволяющие оценивать продольный массоперенос и эволюцию соотношения компонентов газовой смеси (пункт 8. *Течение жидкостей и газов в пористых средах*; пункт 19. *Точные, асимптотические, приближенные аналитические, численные и комбинированные методы исследования уравнений континуальных и кинетических моделей однородных и многофазных сред*).

4. Аналитическое решение упрощенной задачи о разделении смеси газов в пренебрежении продольным переносом массы вдоль фильтрационной мембраны для расчета коэффициента ее селективности, позволяющее минимизировать влияние флуктуаций давления на выходе из установки (пункт 19. *Точные, асимптотические, приближенные аналитические, численные и комбинированные методы исследования уравнений континуальных и кинетических моделей однородных и многофазных сред*).

Научная новизна:

1. Разработана новая физико-математическая модель процесса фильтрации многокомпонентной газовой смеси с учетом массопереноса входящего и выходящего газовых потоков вдоль трубчатой мембраны, позволившая установить зависимость между скоростью подаваемого в нее газа и концентрацией получаемых компонентов.

2. Определено влияние фильтрационных параметров мембранной установки на скорость установления стационарного распределения концентрации отфильтрованных компонентов, обосновывающее применимость мембраны непосредственно после начала процесса фильтрации.

3. Сформулированы безразмерные комплексы, с помощью которых установлена корреляция между радиусом поровых каналов мембраны и размером молекул газовых компонентов, позволяющая оценивать влияние продольного массопереноса на эффективность разделения.

4. Получено точное аналитическое решение упрощенной задачи о разделении смеси газов в пренебрежении продольным переносом массы

вдоль мембраны, позволяющее определить зависимость коэффициента селективности от давления на выходе из установки.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическую значимость работы составляют:

1. Установленная зависимость коэффициента селективности фильтрационной мембраны от давления, при котором осуществляется отбор разделяемых компонентов газовой смеси.

2. Корреляция между коэффициентом проницаемости материала мембраны и временем достижения стационарного распределения концентрации получаемых компонентов газовой смеси.

Практическую значимость работы составляют:

1. Полученные аналитические решения, позволяющие оценивать возможность статических моделей для расчетов параметров проточных мембранных установок по разделению газовых смесей.

2. Численные решения задачи массопереноса многокомпонентной газовой смеси в фильтрационных селективных мембранах, дающие возможность определять эффективные характеристики этих установок.

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением фундаментальных уравнений механики многофазных сред при построении математических моделей; формулировкой физически обоснованных допущений при постановке задач; использованием апробированных методов численного моделирования. Обоснованность результатов гарантируется валидацией решений посредством сопоставления с экспериментальными данными промышленных установок.

Апробация работы. Основные положения и результаты, представленные в диссертации, докладывались на следующих конференциях: XIX Всероссийская конференция-конкурс студентов и аспирантов «Актуальные проблемы недропользования» (Санкт-Петербург, 2021), XVII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы Свободный — 2021» (Красноярск, 2021), X Молодежная международная научно-практическая конференция «Новые технологии в газовой отрасли: опыт и преемственность» (Тюмень, 2022), X школа-семинар молодых ученых по теплофизике и механике многофазных систем «Трансформация нефтегазового комплекса 2030» (Тюмень, 2023), XIV Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященная 75-летию профессоров Я.Т. Султанаева и М.Х. Харрасова «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании» (Уфа, 2023), XI школа-семинар молодых ученых по теплофизике и механике многофазных систем «Трансформация

нефтегазового комплекса 2030» (Тюмень, 2024), Конференция молодых ученых и специалистов ООО «ЛУКОЙЛ-Инжиниринг» (Тюмень, 2025).

Личный вклад заключается в формулировке физико-математических моделей процесса массопереноса многокомпонентной газовой смеси в фильтрационных селективных мембранах; получении численных и аналитических решений поставленных задач; написании научных статей и апробации работы на российских и международных конференциях.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 10 работах, из которых 2 в изданиях, входящих в международные базы данных. Получено 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, 4 глав, заключения, списка литературы, содержит 21 рисунок и 2 таблицы. Общий объем диссертации — 102 страницы. Список литературы состоит из 142 источников.

Содержание работы

Во введении отражена актуальность темы исследований, проводимых в диссертационной работе, сформулированы цели, отмечены научная новизна, достоверность и практическая значимость работы, а также кратко изложена структура диссертации.

В первой главе выполнен обзор значимых теоретических и экспериментальных работ, исследующих мембранные технологии разделения газов по их классификации и практическому применению.

В диссертационной работе рассматриваются пористые мембраны. В таких мембранах имеются промежутки размерами от 0,1 мкм до 10 мкм, через которые могут проникать оба компонента. Разделение смеси на компоненты осуществляется за счёт различной скорости фильтрации (проникновения) компонентов через мембрану при наличии градиента давления, а также за счет различных коэффициентов диффузии.

Во второй главе описана физико-математическая модель процесса разделения газовых компонентов селективными мембранами с учетом продольного массопереноса на входе и выходе из нее.

Пусть пористость мембраны (объём пустого пространства, не занятого волокнами) равна m , газ имеет динамическую вязкость μ . Мембрана представляет собой совокупность пучков волокон длиной L , заключенных в цилиндрическую трубку.

Задачу о газоразделении с помощью мембранной установки можно разделить на три подзадачи (рис. 1). В первой подзадаче учитывается движение потока только внутри волокна мембраны. Во второй подзадаче учитывается движение отбираемого потока через тело мембраны. В третьей подзадаче учитывается движение потока только вне волокна

мембраны. В такой постановке с учетом потоков, описываемых в рамках обозначенных задач, процесс описывается в настоящей работе впервые.

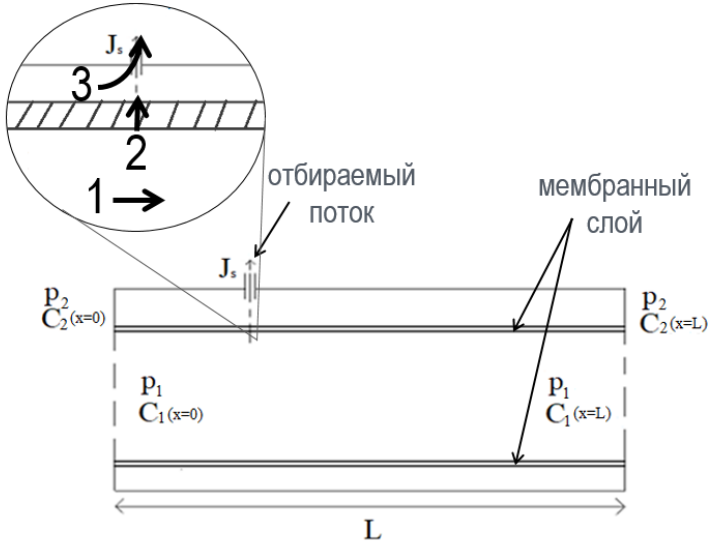


Рис. 1. Схема одного волокна мембраны.

Для описания поведения газа в трубчатой пористой мембране разработана численная модель, основанная на законах сохранения массы и законе Дарси в квазиодномерной постановке задачи с осью x , расположенной вдоль мембраны и соответствующей направлению потока смеси газов. С учетом всех законов итоговая система примет вид:

$$N\pi r_1^2 \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 C_1) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 C_1 v_1) \right) = -J_{N_2}, \quad (1)$$

$$N\pi r_1^2 \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 (1 - C_1)) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 (1 - C_1) v_1) \right) = -J_{O_2}, \quad (2)$$

$$(\pi R^2 - N\pi r_2^2) \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 C_2) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 C_2 v_2) \right) = J_{N_2}, \quad (3)$$

$$(\pi R^2 - N\pi r_2^2) \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 (1 - C_2)) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 (1 - C_2) v_2) \right) = J_{O_2}, \quad (4)$$

где J_{N_2}, J_{O_2} – отбираемые потоки газа через мембрану:

$$J_{N_2} = D_{N_2} k_{hN_2} \rho_2 (p_1 C_1 - p_2 C_2),$$

$$J_{O_2} = D_{O_2} k_{hO_2} \rho_2 (p_1 (1 - C_1) - p_2 (1 - C_2)),$$

ρ_1 – плотность смеси газов внутри волокна мембраны, ρ_2 – плотность смеси газов вне волокна мембраны, C_1 – концентрация азота внутри волокна мембраны, C_2 – концентрация азота вне волокна мембраны.

Первые два уравнения в системе учитывают движение внутри волокна мембраны (1 подзадача). Первое слагаемое из уравнения (1) представляет собой изменение со временем массы единицы объема азота внутри мембраны, второе слагаемое – изменение скорости азота при изменении координаты внутри мембраны. Правая часть уравнения (1) представляет собой поток азота из пространства внутри трубок мембраны в пространство снаружи них. Уравнение (2) является аналогичным уравнением для кислорода.

Уравнения (3) и (4) учитывают движение вне волокна мембраны (3 подзадача). Первое слагаемое из уравнения (3) представляет собой изменение со временем массы единицы объема азота снаружи мембраны, второе слагаемое – изменение скорости азота при изменении координаты снаружи мембраны. Правая часть уравнения (3) представляет собой поток азота, прошедшего через мембрану из пространства внутри трубок мембраны, а также поток, связанный с отбором газа. Уравнение (4) является аналогичным уравнением для кислорода.

Плотность и давление газа связываются через уравнение состояния, газ считается идеальным (что при нормальных условиях с высокой точностью допустимо для азота и кислорода), с диапазоном давлений 8-10 атмосфер, используется уравнение Менделеева-Клапейрона.

Основные допущения, принятые для получения решения задачи: изотермическая модель, квазиодномерное приближение, воздух состоит из двух компонентов, все волокна мембраны одинаковые, газы идеальные, справедлив закон Дарси, в 1 и 3 подзадачах односкоростная модель.

Для решения системы уравнений (1) – (4) необходима постановка начальных и граничных условий, которые показаны на рис. 1.

В данной задаче имеется четыре начальных и шесть граничных условий. Начальные и граничные условия определяются для переменных C_1, C_2, p_1, p_2 .

Значения концентраций азота $C_1(t=0)$, $C_2(t=0)$ в начальный момент времени внутри и вне трубок мембраны и $C_1(x=0)$ на входе внутри трубок мембраны равны 0,79. Эти условия соответствуют концентрации азота в воздухе.

Значение для начального распределения давления внутри трубок мембраны можно выразить из закона Дарси для одномерной плоскопараллельной фильтрации:

$$\frac{Q}{S} = \frac{k_1}{\mu} \frac{dp_1}{dx}.$$

Линейное распределение давления внутри трубок мембраны в начальный момент времени после преобразований имеет вид:

$$p_1(T = 0) = p_1(x = 0) - \frac{p_1(x = 0) - p_1(x = L)}{L} x.$$

Аналогичное распределение давления снаружи трубок мембраны имеет вид:

$$p_2(T = 0) = p_2(x = 0) - \frac{p_2(x = 0) - p_2(x = L)}{L} x.$$

Давление на границах для наружной и внутренней части будут отличаться, для начальных расчетов будет задана разница давлений относительно левой и правой границ в 0,1 МПа. Следовательно, $p_1(x = 0) = 1$ МПа, $p_1(x = L) = 0,9$ МПа, $p_2(x = 0) = 0,2$ МПа, $p_2(x = L) = 0,1$ МПа. Эти условия необходимы для расчета начальных давлений по всей длине модуля.

Отсутствие потока массы на границе $\left. \frac{\partial c_2}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$ соответствует левому граничному условию вне трубок мембраны.

Система уравнений для описания динамики смеси азота и кислорода в полупроницаемой мембране обезразмеривается для оценки вклада различных слагаемых, входящих в данные уравнения. При обезразмеривании вводятся следующие безразмерные переменные: безразмерное время T , безразмерная координата X , безразмерные плотности внутри и снаружи мембраны Ro_1 и Ro_2 , безразмерные давления внутри и снаружи мембраны P_1 и P_2 :

$$T = \frac{t}{t_0}, \quad X = \frac{x}{l}, \quad Ro_1 = \frac{\rho_1}{\rho_{in}}, \quad Ro_2 = \frac{\rho_2}{\rho_{in}}, \quad P_{in} = \frac{p_1}{p_{in}}, \quad P_{out} = \frac{p_2}{p_{in}},$$

где t_0 – характерное время, ρ_{in} – плотность смеси на входе в установку, $p_{in} = p_1(x = 0)$ – давление азота на входе в установку.

При обезразмеривании получаются следующие безразмерные комплексы подобия:

$$A_1 = \frac{N\pi r_1^6(1-m)}{8\mu L^2 r_2^2 D_{N_2} K_{hN_2}}, \quad A_2 = \frac{D_{N_2} K_{hN_2}}{D_{O_2} K_{hO_2}},$$

$$A_3 = \frac{(\pi R^2 - N\pi r_2^2) r_1^2 m}{8\mu L^2 D_n K_{hN_2}}, \quad A_4 = \frac{R^2}{N r_1^2} - \frac{r_2^2}{r_1^2}$$

и характерное время:

$$t_0 = \frac{N\pi r_1^2}{D_{N_2} K_{hN_2} p_{in}}.$$

Конечный вид безразмерной системы уравнений следующий:

$$\frac{\partial}{\partial T} (Ro_1 C_1) - A_1 \frac{\partial}{\partial X} \left(Ro_1 C_1 \frac{\partial P_1}{\partial X} \right) = -\overline{J_{N_2}}, \quad (5)$$

$$A_2 \left(\frac{\partial}{\partial T} (Ro_1(1 - C_1)) - A_1 \frac{\partial}{\partial X} \left(Ro_1(1 - C_1) \frac{\partial P_1}{\partial X} \right) \right) = -\overline{J_{O_2}}, \quad (6)$$

$$A_4 \frac{\partial}{\partial T} (Ro_2 C_2) - A_3 \frac{\partial}{\partial X} \left(Ro_2 C_2 \frac{\partial P_2}{\partial X} \right) = \overline{J_{N_2}}, \quad (7)$$

$$A_2 \left(A_4 \frac{\partial}{\partial T} (Ro_2(1 - C_2)) - A_3 \frac{\partial}{\partial X} \left(Ro_2(1 - C_2) \frac{\partial P_2}{\partial X} \right) \right) = \overline{J_{O_2}}, \quad (8)$$

где $\overline{J_{N_2}}$, $\overline{J_{O_2}}$ – отбираемые потоки газа через мембрану в безразмерном виде:

$$\begin{aligned} \overline{J_{N_2}} &= Ro_2(P_1 C_1 - P_2 C_2), \\ \overline{J_{O_2}} &= Ro_2(P_1(1 - C_1) - P_2(1 - C_2)). \end{aligned}$$

Концентрация является безразмерной величиной, поэтому начальные и граничные условия для концентрации в системе будут прежними: задаются концентрации азота $C_1(T=0) = 0,79$, $C_2(T=0) = 0,79$, $C_1(X=0) = 0,79$, $\left. \frac{\partial C_2}{\partial X} \right|_{X=0} = 0$, концентрация кислорода рассчитывается из замыкающего соотношения.

При обезразмеривании начального условия для давления внутри и вне трубок мембраны получается условие

$$\begin{aligned} P_1(T=0) &= 1 - X + \frac{P_1(X=L)}{P_1(X=0)} X, \\ P_2(T=0) &= 1 - X + \frac{P_2(X=L)}{P_2(X=0)} X. \end{aligned}$$

Входное давление равно 10 атм. Тогда безразмерные давления $P_1(X=0)$ слева на границе внутри трубок мембраны будет равно 1, $P_1(X=L)$ принимает значение 0,9, $P_2(X=0) = 0,2$, $P_2(X=L) = 0,1$.

В ходе моделирования процесса была получена зависимость времени выхода концентрации отбираемого азота на стационарные значения от проницаемости трубок мембраны (рис. 2).

Различные проницаемости мембраны оказывают влияние не только на качество отбираемого газа, но и на время выхода системы на стационарный режим. Как видно из рис. 2, время достижения концентрацией стационарного значения может достигать нескольких десятков секунд, при увеличении проницаемости трубок мембраны оно уменьшается, поскольку в этом случае смесь газов проходит через трубку быстрее. При этом уменьшается концентрация отбираемого азота при увеличении проницаемости трубок мембраны, поскольку в этом случае не успевает произойти более полное разделение смеси из-за её более высокой скорости прохождения по установке. Было установлено, что чем дольше система выходит на стационарный режим работы, тем с большей концентрацией отбирается газ.

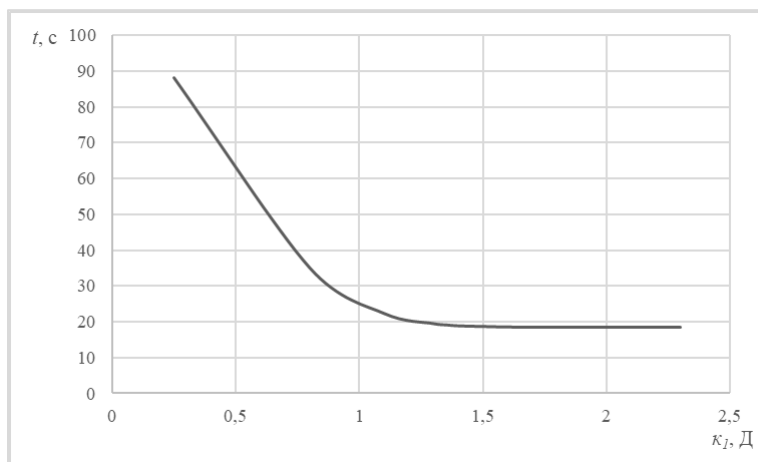


Рис. 2. Зависимость времени выхода концентрации газов на стационарные значения от проницаемости трубок мембраны.

В третьей главе получено решение и анализ статической задачи процесса разделения газовых компонентов смеси.

Вязкость μ рассчитывается как средняя вязкость компонентов.

Комплекс A_1 является отношением скорости газа во внутренней части мембраны к скорости газа в мембране.

Комплекс A_2 является отношением коэффициента переноса азота через мембрану к коэффициенту переноса кислорода через мембрану, умноженным на отношение коэффициента Генри для азота к коэффициенту Генри для кислорода и являются характеристикой разделения газов, поскольку эффект разделения основан на разнице этих коэффициентов.

Комплекс A_3 является отношением скорости газа во внешней части мембраны к скорости газа в мембране.

Комплекс A_4 является отношением площади поперечного сечения пучка волокон к суммарной площади поперечного сечения внутренней части волокна для всех волокон и характеризует плотность расположения волокон в мембране, умноженным на отношение площади поперечного сечения волокна с внешней частью к площади поперечного сечения внутренней части волокна и является геометрической характеристикой мембраны.

Характерное время t_0 является временем перераспределения потоков из внутренней части во внешнюю.

Безразмерный вид модели позволяет провести анализ влияния комплексов подобия.

Коэффициент, стоящий перед производной по координате в уравнении (5) равен:

$$A_1 = \frac{N\pi r_1^6(1-m)}{8\mu L^2 r_2^2 D_{N_2} k_{hN_2}} = 0,0014.$$

Коэффициент, стоящий перед производной по времени в уравнении (5), равен 1.

Коэффициент, стоящий перед производной по координате в уравнении (6), равен:

$$A_1 A_2 = \frac{N\pi r_1^6(1-m)}{8\mu L^2 r_2^2 D_{N_2} k_{hN_2}} \frac{D_{N_2} k_{hN_2}}{D_{O_2} k_{hO_2}} = 0,0028.$$

Коэффициент, стоящий перед производной по времени в уравнении (6), равен:

$$A_2 = \frac{D_{N_2} k_{hN_2}}{D_{O_2} k_{hO_2}} = 1,975.$$

Коэффициент, стоящий перед производной по координате в уравнении (7), равен:

$$A_3 = \frac{(\pi R^2 - N\pi r_2^2)r_1^2 m}{8\mu L^2 D_{N_2} k_{hN_2}} = 0,056.$$

Коэффициент, стоящий перед производной по времени в уравнении (7), равен:

$$A_4 = \frac{R^2}{Nr_1^2} - \frac{r_2^2}{r_1^2} = 6,25.$$

Коэффициент, стоящий перед производной по координате в уравнении (8), равен:

$$A_2 A_3 = \frac{D_{N_2} k_{hN_2}}{D_{O_2} k_{hO_2}} \frac{(\pi R^2 - N\pi r_2^2)r_1^2 m}{8\mu L^2 D_{N_2} k_{hN_2}} = 0,11.$$

Коэффициент, стоящий перед производной по времени в уравнении (8), равен:

$$A_2 A_4 = \frac{D_{N_2} k_{hN_2}}{D_{O_2} k_{hO_2}} \left(\frac{R^2}{Nr_1^2} - \frac{r_2^2}{r_1^2} \right) = 12,31.$$

Проведённый расчёт показывает, что коэффициенты перед различными слагаемыми в разработанной математической модели компонентного разделения газов в селективной мембране имеют несопоставимые значения и неодинаковые по порядку величины, поэтому слагаемые с производными по координате могут быть исключены из системы уравнений (5) – (8) для удовлетворительной точности расчётов.

Конечный вид системы уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial T} (R_{O_1} C_1) = R_{O_2} (P_2 C_2 - P_1 C_1), \quad (9)$$

$$A_2 \frac{\partial}{\partial T} (Ro_1(1 - C_1)) = Ro_2(P_2(1 - C_2) - P_1(1 - C_1)), \quad (10)$$

$$A_4 \frac{\partial}{\partial T} (Ro_2 C_2) = Ro_2(P_1 C_1 - P_2 C_2), \quad (11)$$

$$A_2 A_4 \frac{\partial}{\partial T} (Ro_2(1 - C_1)) = Ro_2(P_1(1 - C_1) - P_2(1 - C_2)), \quad (12)$$

С использованием явной конечно-разностной схемы с аппроксимацией первой производной левой разностью и метода последовательного исключения неизвестных система уравнений (9) – (12) была преобразована в два уравнения относительно плотности внутри и вне трубок мембраны для следующего шага по времени. После расчета плотности внутри и вне трубок мембраны идет перерасчет концентраций на следующем шаге по времени. Затем процесс циклически повторяется.

В ходе моделирования процесса получены два графика распределения концентрации азота внутри и вне волокна мембраны от координаты, которые отличаются различными эффектами при разделении: когда преобладает фильтрация и когда преобладает диффузия. А также выведен критерий, определяющий, когда какой эффект возникает:

$$K_{eff} = \frac{v_d}{v_f} = \frac{D \cdot \Delta C \cdot \mu_{mix}}{k_1 \cdot \Delta P},$$

где $\Delta P = \frac{P_1 + P_2}{2} - P_{at}$.

В случае, когда преобладает фильтрация, значение критерия K_{eff} меньше единицы, так как градиент давления будет преобладающим параметром, тогда отбираемым компонентом является газ с большей концентрацией – азот (рис. 3). В случае, когда преобладает диффузия, значение критерия K_{eff} больше единицы, так как градиент концентрации будет преобладающим параметром, тогда отбираемым компонентом является газ с большим коэффициентом диффузии – кислород (рис. 4).

Концентрация азота на выходе из одноступенчатой мембранной установки, когда преобладает диффузия, увеличилась на 1 %. При использовании многоступенчатой схемы очистки, где на вход одной мембраны подается поток, вышедший из предыдущей мембраны, можно достигать требуемой степени очистки.

В четвертой главе описана физико-математическая модель процесса фильтрационного разделения смеси газов на компоненты мембраной в пренебрежении продольным переносом массы.

В работе рассматривается экспериментальная установка для определения коэффициента проводимости мембраны. Смесь газов поступает в ячейку и под давлением разделяется на компоненты с помощью мембраны, отфильтровываясь в место отбора.

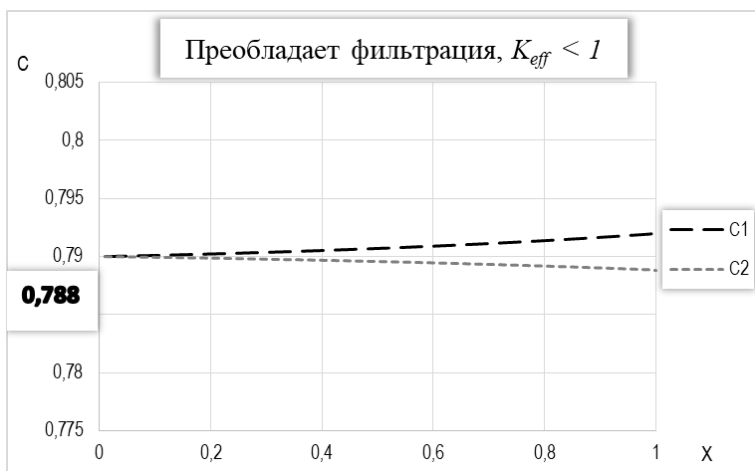


Рис. 3. Распределение концентрации азота внутри и вне трубок мембраны от координаты, преобладает фильтрация.

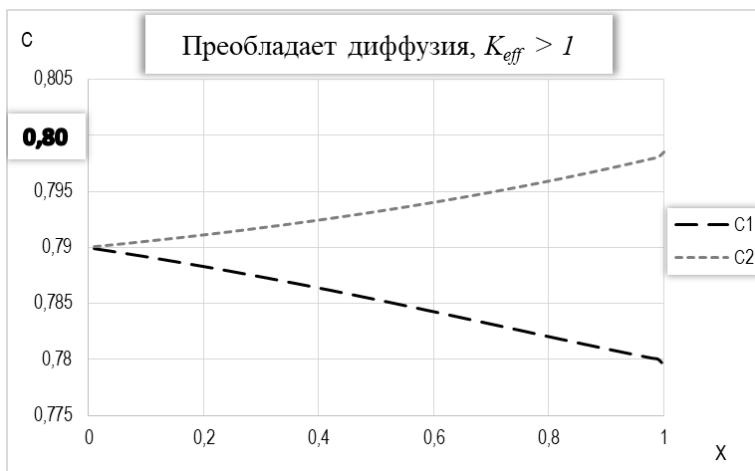


Рис. 4. Распределение концентрации азота внутри и вне трубок мембраны от координаты, преобладает диффузия.

Закон, определяющий массовый поток для смеси газов при проводимости через мембрану, записывается в виде:

$$J_i = k_i S (P_i^1 - P_i^{10}), i = 1, 2,$$

где $k_i = k_{hi} D_i \rho_i / S$ – коэффициент проводимости i -го компонента газа, характеризующий способность разделять газы в теле мембраны.

В силу малости времени адсорбционно-диффузионных потоков слагаемые, отвечающее за диффузионный перенос массы в приведённых ниже уравнениях отсутствуют. Тогда изменение массы i -го компонента газа в ячейке описывается следующим уравнением неразрывности:

$$\frac{dM_i}{dt} = -J_i, \quad V \frac{d\rho c_i}{dt} = -k_i S (P_i^1 - P_i^{10}) \quad \text{или} \quad \frac{dP_i^1}{dt} = -\frac{k_i S R_g T}{V} (P_i^1 - P_i^{10}).$$

При заданном начальном давлении в ячейке P_i^{10} и атмосферном вне ее P^{at} решение уравнения имеет вид:

$$P_i^1 = (P_i^{10} - P^{\text{at}}) e^{-K_i t} + P^{\text{at}},$$

где $K_i = k_i S R_g T / V$. Полное давление в ячейке представляется суперпозицией решений (первоначальная концентрация компонентов в ячейке соответствует концентрации этих компонентов в атмосфере):

$$P^1 = (P^{10} - P^{\text{at}}) \sum_i c_i^0 e^{-K_i t} + P^{\text{at}}.$$

Вводя безразмерное давление, можно получить:

$$\bar{P} = \frac{P^1 - P^{\text{at}}}{P^{10} - P^{\text{at}}} = \sum_i c_i^0 e^{-K_i t}. \quad (13)$$

Для ячейки с мембраной, разделяющей её внутренний объем на два сегмента, парциальные давления каждого газа будут изменяться с обеих сторон мембраны.

Для изотермического процесса сумма парциальных давлений для каждого компонента постоянна

$$\frac{dP_i^1}{dt} = -\frac{dP_i^2}{dt} \Rightarrow P_i^1 + P_i^2 = \text{const}.$$

Решение задачи о выравнивании давления в ячейке с воздухом, разделенной на две части мембраной, будет иметь вид:

$$\frac{P_i^1 - P_i^*}{P_i^{10} - P_i^*} = e^{-2K_i t}, \quad \frac{P_i^2 - P_i^*}{P_i^{20} - P_i^*} = e^{-2K_i t}, \quad P_i^* = \frac{P_i^1 + P_i^2}{2}$$

при одинаковых начальных составах газа в начальный момент времени $P_i^* = P_i^0$.

Решение для общего давления (суммируются все парциальные давления по закону Дальтона и предполагается, что концентрации компонентов смеси в обоих сегментах ячейки c_i^0 первоначально одинаковы) по разные стороны мембраны имеет аналогичный вид:

$$\bar{P}^m = \frac{P^m - P^*}{P^{m0} - P^*} = \sum_i c_i^0 e^{-2K_i t}, \quad m = 1, 2.$$

В простейшем варианте, когда в обеих частях ячейки содержится однокомпонентный газ, решение имеет вид:

$$\bar{P} = \frac{P^1 - P^*}{P^{10} - P^*} = e^{-2K t}; \quad P^* = \frac{P^{10} + P^{20}}{2}. \quad (14)$$

Интерпретация экспериментальных данных по динамике давления в ячейке строится на решении обратных задач. Учет конкуренции проводимости через селективные мембраны важен для газов, имеющих близкие проводимости, поэтому компоненты воздуха разделяются на две составляющие: азот ($i=1$), кислород ($i=2$). Тогда задача интерпретации сводится к определению двух коэффициентов проводимости.

В работе на основе решения (13) смоделирован эксперимент. Для оценки устойчивости решения к неточности входной информации анализируется зависимость давления от времени со случайными погрешностями, приведённая на рис. 5 (взяты значения коэффициентов проводимости $0,02 \text{ с}^{-1}$ и $0,01 \text{ с}^{-1}$, а начальные массовые концентрации 0,21 и 0,79 для кислорода и азота соответственно). Для оценки влияния флуктуаций входных параметров на решение предложенного метода интерпретации в условиях реального эксперимента в измерения были внесены погрешности до 2%.

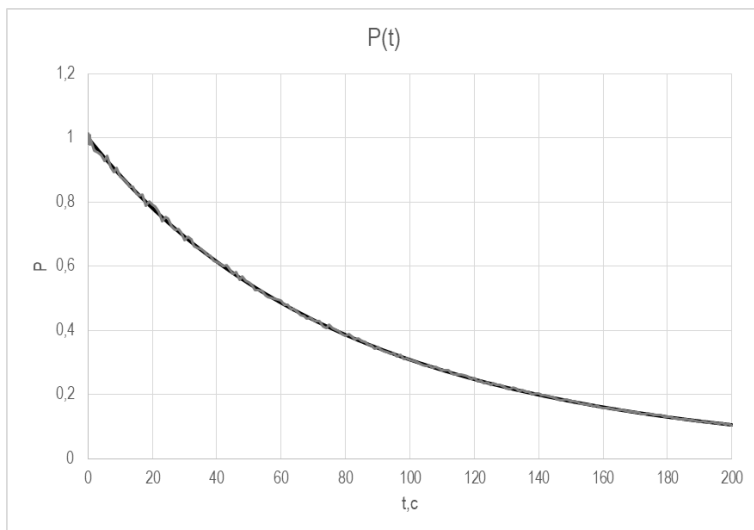


Рис. 5. Решение прямой задачи для зависимости безразмерного давления от времени $\bar{P}(t)$.

Для ячейки с двумя отсеками после того, как газ проникнул в первую ячейку, его давление в ней будет снижаться в то время, как во второй ячейке давление будет возрастать. При использовании многокомпонентного газа (воздуха) динамика изменения давления в обеих частях симметрична относительно среднего давления, рис. 6, что является следствием формулы (14), поэтому достаточно фиксировать

давление в разные моменты времени лишь в одной ячейке. Когда давления выравниваются в ячейках – газ разделится через на два компонента (азот и кислород). До конца разделение не произойдет под действием фильтрации, однако после возможно разделение за счет диффузии.

Формула, связывающая коэффициенты проводимости в случае, когда одна ячейка:

$$K_1 = \frac{1}{t} \ln \frac{c_1^0}{\bar{P} - c_1^0 e^{-K_2 t}}.$$

В случае, когда ячейка разделена мембраной на две части:

$$K_1 = \frac{1}{2t} \ln \frac{c_1^0}{\bar{P} - c_1^0 e^{-2K_2 t}}.$$

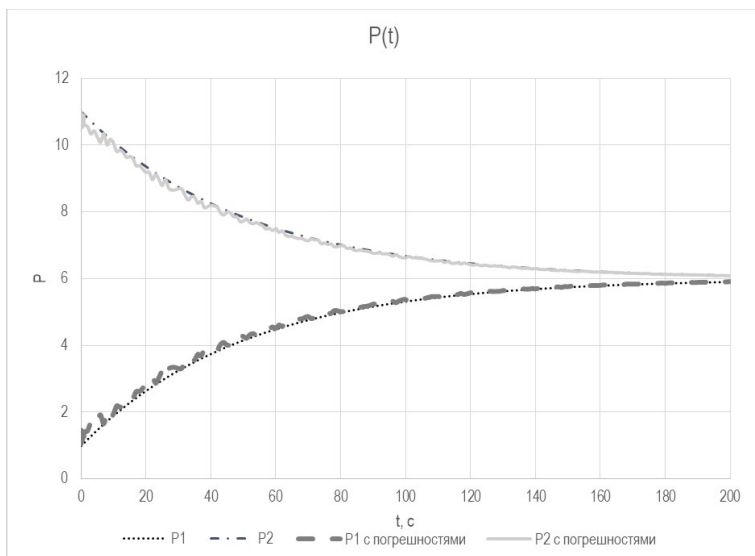


Рис. 6. Выравнивание безразмерного давления \bar{P} в ячейках, разделенных мембраной.

Предлагается графический метод поиска решения для пары газов. Он состоит в построении графиков зависимости коэффициента проводимости K_1 для азота от другого коэффициента проводимости K_2 для кислорода для нескольких известных значений t и $\bar{P}(t)$ (рис. 7). Как видно из рисунка, есть две точки пересечения всех графиков – два отношения коэффициентов проводимостей для азота и кислорода, которые со временем не меняются. Это означает, что мембрана с таким

значением отношения коэффициентов проводимости для пары газов будет работать стабильно с течением времени.

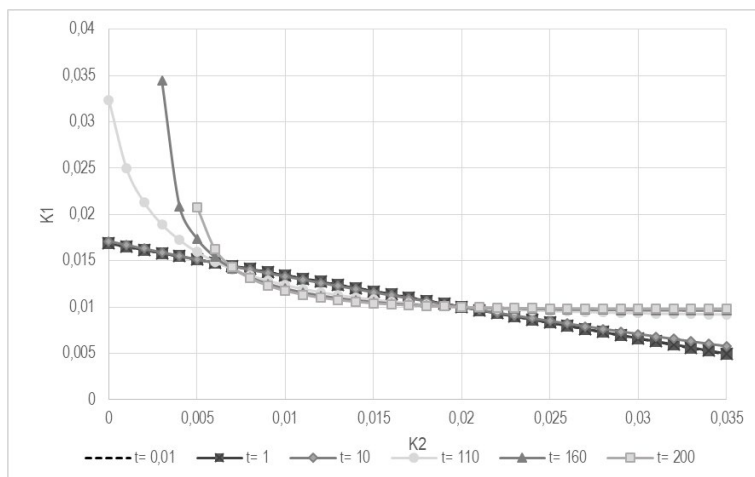


Рис. 7. График зависимости коэффициентов проводимости азота K_1 и кислорода K_2 .

В **заключении** представлены основные результаты, полученные в диссертационной работе:

1. Разработана математическая модель процесса разделения воздуха на азот и кислород при использовании пористых селективных мембран, в основе которой заложены законы сохранения массы и импульса. Впервые смоделирована установка с пористыми мембранами в динамике, учтён поток отбираемого газа.

2. Анализ модели в безразмерном виде показывает, что не все факторы вносят сопоставимый по порядку величины вклад на итоговое распределение концентрации газов и система уравнений, описывающая газоразделительный процесс в селективных мембранах, может быть упрощена.

3. Показано, что в случае, когда преобладает фильтрация будет отбираться азот из-за большей концентрации, а в случае, когда преобладает диффузия - кислород из-за большего коэффициента переноса. Введен критерий, определяющий преобладание градиента давления или градиента концентрации в процессе массопереноса газа через мембрану.

4. Проведен анализ поведения модели при варьировании различных параметров. Установлено, что проницаемость трубок мембраны

оказывает значительное влияние как на качество отбираемого газа, так и на время выхода установки в рабочий режим.

5. Показано, что чем выше проницаемость трубок мембраны, тем ниже концентрация отбираемого азота и тем быстрее происходит выход на стационарный режим, когда установкой уже можно пользоваться, поскольку она даёт устойчивые прогнозируемые значения параметров.

6. Предложена интерпретация экспериментальных данных для определения коэффициентов проводимости азота и кислорода, основанные только на анализе динамики выравнивания давления в ячейках, разделенных мембраной.

Список публикаций автора по теме диссертации

В изданиях, переводные версии которых входят в международную реферативную базу данных и систему цитирования Scopus:

1. Ганопольский Р.М., Гильманов А.Я., Деменчук М.А., Дмитриев И.О., Федоров К.М., Шевелёв А.П. Методы определения коэффициента проницаемости селективно-проницаемых мембран // Инженерно-физический журнал. 2021. Т. 94, №1. С. 234-239.

2. Анисимова М.А., Гильманов А.Я., Кузнецов А.В., Шевелёв А.П. Математическое моделирование разделения смеси азота и кислорода с помощью селективной мембраны // Инженерно-физический журнал. 2023. Т. 96, №6. С. 1552-1558.

В других изданиях:

3. Гильманов А.Я., Деменчук М.А., Шевелёв А.П. Определение параметров установки с селективными мембранами // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2021. Т. 7, № 3. С. 71-88.

4. Гильманов А.Я., Деменчук М.А., Шевелёв А.П. Определение оптимальных параметров установки с селективными мембранами // Сборник тезисов, материалы Двадцать шестой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-26). Уфа. 2020. С. 300-301.

5. Деменчук М.А. Анализ влияния параметров установки с селективными мембранами на процесс разделения газов // Тезисы докладов XIX Всероссийской конференции-конкурса студентов и аспирантов «Актуальные проблемы недропользования». Санкт-Петербург. 2021. Т. 2. С. 100-101.

6. Деменчук М.А. Оценка параметров мембранной установки, влияющих на процесс газоразделения // Материалы XVII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы - 2021». Красноярск. 2021. С. 1782-1784.

7. Анисимова М.А., Гильманов А.Я., Шевелёв А.П. Влияние параметров мембранных установок на процесс газоразделения // Тезисы докладов X Молодежной международной научно-практической конференции «Новые технологии в газовой отрасли: опыт и преемственность». п. Развилка. 2022. С. 141.

8. Анисимова М.А., Гильманов А.Я., Шевелёв А.П. Определение параметров установки с селективными мембранами // Сборник материалов X школы-семинара молодых ученых по теплофизике и механике многофазных систем «Трансформация нефтегазового комплекса 2030». Тюмень. 2023. С. 8-10.

9. Анисимова М.А., Гильманов А.Я., Шевелёв А.П. Анализ влияния положения стоков массы на распределение концентрации в установке с селективной мембраной // Тезисы докладов XIV Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 75-летию юбилею профессоров Я.Т. Султанаева и М.Х. Харрасова «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании». Уфа. 2023. С. 27.

10. Анисимова М.А., Гильманов А.Я., Шевелёв А.П. Определение параметров установки с селективными мембранами // Сборник материалов XI школы-семинара молодых ученых по теплофизике и механике многофазных систем «Трансформация нефтегазового комплекса 2030». Тюмень. 2024. С. 21-23.

Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ:

11. Анисимова М.А., Гильманов А.Я., Шевелёв А.П. Программа для расчета технологических параметров установки с селективными мембранами // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2024611813 от 10.10.2024 г.