

УДК 66.081.6-278

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ПРИМЕСИ ИЗ ЛАМИНАРНОГО ПОТОКА В СИСТЕМЕ ПОЛОВОЛОКОННЫХ МЕМБРАН

© 2023 г. В. А. Кирш^{a, b, *}

^aИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук,
Ленинский проспект, 31, Москва, 119071 Россия

^bИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук,
Ленинский проспект, 29, Москва, 119991 Россия

*e-mail: va_kirsch@mail.ru

Поступила в редакцию 08.06.2023 г.

После доработки 18.07.2023 г.

Принята к публикации 07.08.2023 г.

Рассчитаны внешнее стационарное течение вязкой несжимаемой жидкости и конвективно-диффузионный массоперенос растворенного вещества в упорядоченной системе параллельных полволоконных мембран, расположенных перпендикулярно потоку, в диапазонах чисел Рейнольдса $Re = 0.01-100$ и чисел Шмидта $Sc = 1-1000$. Уравнения Навье–Стокса и уравнение конвективной диффузии решались с помощью методов вычислительной гидродинамики с граничным условием прилипания и условием постоянной концентрации примеси на внешней поверхности обтекаемого волокна. Расчеты выполнены для одного ряда волокон и для системы, состоящей из четырех и шестнадцати рядов волокон. Рассчитаны концентрации на выходе и коэффициенты поглощения примеси волокном η в зависимости от плотности упаковки волокон α и чисел Re и Sc . Показано, что коэффициент поглощения η волокна в изолированном ряду волокон может быть использован для расчета эффективности поглощения волокнистого слоя большой толщины.

Ключевые слова: течение в пористых средах, конвективная диффузия, число Рейнольдса, число Шмидта, число Пекле, полволоконная мембрана, мембранный контактор

DOI: 10.31857/S2218117223060068, **EDN:** HONCTM

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования в области гидродинамики и конвективного массопереноса в волокнистых средах важны для расчета и оптимизации процессов разделения и очистки технологических сред с использованием мембранных контакторов с полыми волокнами [1–4], а также для расчета сорбционных и волокнистых фильтров, используемых для улавливания молекулярных примесей и взвешенных частиц. Перенос вещества в потоке жидкости (газа), обусловленный конвективной диффузией [5], и гидродинамическое поле течения вблизи волокон наиболее подробно исследовано в стоковом приближении при малых числах Рейнольдса $Re \ll 1$, когда линии тока симметричны относительно обтекаемого волокна, а скорость конвективного потока и сила сопротивления волокна зависят только от плотности упаковки системы волокон [5, 6].

Современные численные методы позволяют рассчитывать конвективный тепломассоперенос в системах волокон с заданной геометрией [7, 8]. В предыдущих сообщениях [9–11] мы рассчитали

конвективный массоперенос при поперечном внешнем обтекании одного ряда параллельных полых волокон. Целью же данной работы является исследование поглощения вещества из внешнего потока в модели, состоящей из конечного числа рядов волокон, с учетом стесненного характера течения и гидродинамической тени от волокон, расположенных в предыдущих слоях. Трансмембранный перенос и внутреннее течение в полых волокнах не рассматриваем, а на внешней обтекаемой поверхности волокна задаем приближенное условие постоянной концентрации. В качестве модели будем рассматривать гексагональную систему волокон (рис. 1), расположенную перпендикулярно направлению потока, для которой рассчитаем поглощение примеси в широком диапазоне чисел Рейнольдса и Шмидта, характерных для реальных условий использования полых волокон.

2. ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ УРАВНЕНИЯ

Двумерное ламинарное поле течения вязкой несжимаемой жидкости (газа) и распределение в

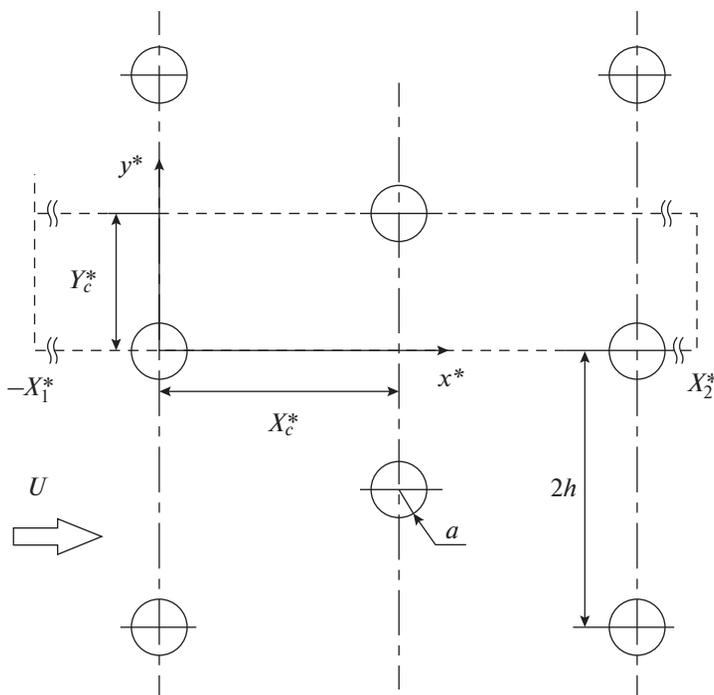


Рис. 1. Гексагональная упаковка параллельных волокон (поперечное сечение): $2h$ – расстояние между осями волокон радиуса a , U – скорость набегающего потока.

потоке концентрации растворенного вещества при обтекании системы параллельных волокон, перпендикулярных направлению потока, рассчитывались в ячейке, показанной на рис. 1. Безразмерные уравнения Навье–Стокса в стационарном приближении, описывающие установившееся течение жидкости,

$$\Delta \mathbf{u} - (\text{Re}/2)(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla p, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

и стационарное уравнение конвективной диффузии, описывающее распределение концентрации вещества в потоке,

$$2\text{Re}^{-1} \Delta C - \nabla \cdot (\mathbf{u}C) = 0, \quad (2)$$

решались с помощью методов вычислительной гидродинамики. В этих уравнениях $\text{Re} = 2aU/\nu$ – число Рейнольдса, определенное на основе диаметра волокна, ν – кинематическая вязкость, Δ – оператор Лапласа, ∇ – оператор Набла, $p = p^*a/U\mu$ – давление, $\mathbf{u} = (u, v)$ – вектор скорости потока, $\text{Re} = \text{Re}(U) \text{Sc} = 2aU/D$ – число Пекле, $\text{Sc} = \nu/D$ – число Шмидта, D – коэффициент диффузии, $C = C^*/C_0$ – концентрация примеси в потоке, $\mathbf{u} \cdot \nabla C \equiv u \partial C / \partial x + v \partial C / \partial y$. Звездочкой * обозначены размерные величины. Здесь и далее все значения приведены к безразмерному виду нормированием на радиус волокна a , скорость U и концентрацию C_0 на входе в ячейку. Уравнения

Навье–Стокса (1) были сведены к системе уравнений для функции тока Ψ и завихренности ω [12].

$$\Delta \Psi = -\omega, \quad (3)$$

$$2\text{Re}^{-1} \Delta \omega - \nabla \cdot (\mathbf{u}\omega) = 0, \quad (4)$$

где $u = \partial \Psi / \partial y$, $v = -\partial \Psi / \partial x$, $\omega = \partial v / \partial x - \partial u / \partial y$. Уравнения (2)–(4) решались методом конечных разностей на сетках большой размерности. В качестве граничных условий для уравнений (2)–(4) на входной границе ячейки при $x = -X_1$ задавалось условие невозмущенного потока и условие постоянной концентрации примеси

$$\psi = y, \quad \omega = 0, \quad C = 1, \quad (5)$$

а на выходе при $x = X_2$ ставилось условие отсутствия вязких напряжений и условие выравнивания концентрации

$$\partial u / \partial x = 0, \quad \omega = 0, \quad \partial C / \partial x = 0. \quad (6)$$

Как показали расчеты в [13], на выходе из ячейки возможна постановка условия $C = 0$ для малых и промежуточных чисел Пекле, когда за волокном имеется широкий след обедненной концентрации, и $C = 1$ для больших чисел Пекле, когда диффузионный след на выходной границе при $x = X_2$ узок и его влияние на поле концентрации вблизи волокна пренебрежимо мало.

На нижней и верхней гранях ячейки соответственно при $y = 0$ и $y = Y_c$ ставились условия непротекания и отсутствия тангенциальных напряжений (условия симметрии)

$$\Psi(x, 0) = 0, \quad \Psi(x, Y_c) = Y_c, \quad \omega = 0, \quad \partial C / \partial y = 0. \quad (7)$$

На поверхности волокна при $r = 1$ ставилось условие прилипания

$$\Psi = 0, \quad \partial \Psi / \partial r = 0, \quad (8)$$

и дискретное условие Вудса второго порядка для завихренности (индекс k – по θ -линиям конечноразностной сетки с шагом h_z) [14]

$$\omega_{1,k} = -\omega_{2,k} / 2 - 3\Psi_{2,k} / h_z^2 \quad (9)$$

и условие нулевой концентрации

$$C(1, \theta) = 0, \quad (10)$$

где r и θ – безразмерные полярные координаты. Здесь вместо условия (9) возможна постановка условия более высокого порядка (см. [14]). Отметим, что условие (10) следует из условия постоянной концентрации на всей поверхности волокна C_W при замене переменной $C = (C^* - C_W) / (C_0 - C_W)$.

При этом уравнения конвективной диффузии (2) и переноса завихренности (4) решались с помощью монотонной абсолютно устойчивой конечноразностной схемы второго порядка, предложенной в [15], и применимой для решения задач с тонкими граничными слоями концентрации при больших числах Пекле. В работе использовалась комбинация декартовых и полярных сеток [7]. Строилась равномерная декартова $\{x, y\}$ сетка во всей области, за исключением коаксиальных зон вокруг волокон, для которых строились полярные сетки в локальных системах координат, связанных с волокнами. Решения на декартовой и полярной сетках сшивались условиями интерполяции на их границе на радиусе $r = \rho > 1 + \delta$, где δ – толщина диффузионного слоя у поверхности волокна. После замены переменной $r = \exp(z)$ [16] в уравнениях (2)–(4) и граничных условиях (5)–(10) расчеты концентрации вблизи волокна велись на равномерной декартовой сетке $\{z = 0 \dots \ln \rho, \theta = 0 \dots \pi/2\}$, которая соответствовала полярной сетке $\{r = 1 \dots \rho, \theta = 0 \dots \pi/2\}$, сгущающейся в области граничного слоя. При малых и промежуточных Re концентрация в потоке начинает понижаться на большом расстоянии (на макро-масштабе) перед слоем обтекаемых волокон [17], поэтому здесь было важно отдалить входную границу на расстояние $x = -X_1 \sim 100$, чтобы учесть входные эффекты.

На рис. 2а показаны линии тока при обтекании волокна в гексагональной системе волокон.

Из рисунка видно, что переход от стокового течения к инерционному связан с появлением асимметрии линий тока, которая усиливается с ростом Re . Изолинии концентрации, рассчитанные для этого же поля скоростей, показаны на рис. 2б.

Рассчитав поля скоростей и концентрации, можно определить перепад давления и эффективность поглощения в системе волокон. Перепад давления в слое волокон равен [17]

$$\Delta p^* / U \mu = LF,$$

где $L = lH$ – общая длина волокон на единице площади волокнистого слоя с толщиной H , $l = \alpha / \pi a^2$ – длина волокон на единице площади, α – плотность упаковки волокон, а безразмерная сила сопротивления единицы длины волокна $F = F^* / U \mu = C_D Re / 2$ находится по формуле [18]:

$$F = \int_S T_x d\Sigma,$$

где $\mathbf{T} = (-pI + \sigma')$ – локальное полное напряжение, σ' – тензор вязких напряжений, I – единичный тензор, \mathbf{n} – вектор внешней нормали к поверхности, $d\Sigma$ – элемент поверхности, S – площадь всей поверхности волокна, μ – динамическая вязкость, $2h$ – расстояние между осями параллельных волокон в ряду, C_D – коэффициент сопротивления. Для слоя из последовательно расположенных рядов монодисперсных параллельных волокон разность безразмерных давлений на входе p_1 и выходе p_2 равна

$$p_1 - p_2 = (1/2Y_c) \sum_{i=1}^N F_i, \quad (11)$$

где N – число рядов, Y_c – высота расчетной ячейки (для одного ряда волокон и для гексагональной системы, изображенной на рис. 1, $Y = 2, Y_c = h/a$). Общая эффективность поглощения E слоя волокон рассчитывается по формуле Ленгмюра [17]:

$$E = 1 - C^*(X_2) / C_0 = 1 - \exp(-2aL\eta), \quad (12)$$

где C_0 и $C^*(X_2)$ – однородная концентрация до и за слоем волокон. Здесь безразмерный коэффициент поглощения вещества из потока волокном η определен как интегральная плотность нормального диффузионного потока на единицу длины волокна. В локальной полярной системе координат с началом в центре поперечного сечения волокна коэффициент поглощения η находится по формуле

$$\eta = \frac{2}{Pe} \int_0^\pi \left. \frac{\partial C(r, \theta)}{\partial r} \right|_{r=1} d\theta. \quad (13)$$

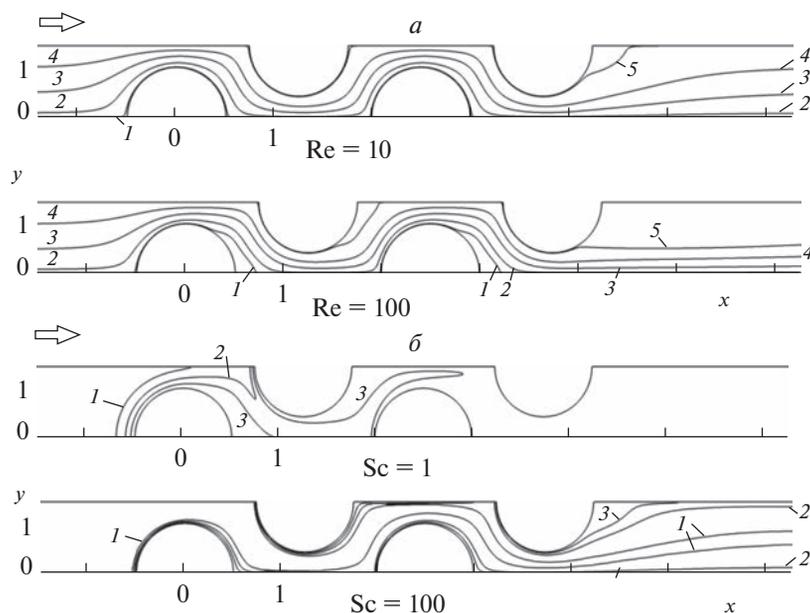


Рис. 2. (а) Линии тока с ординатами на входе $y = 0.001$ (1), 0.1 (2), 0.5 (3), 1 (4) и $h/a = 0.001$ (5) при обтекании гексагональной системы волокон в расчетной ячейке: $N = 4$, $a/h = 0.7$, значения Re указаны на рисунках. Направление потока указано стрелкой. (б) Изолинии концентрации $C = 0.999$ (1), 0.9 (2), 0.5 (3) в расчетной ячейке при $Re = 100$: $N = 4$, $a/h = 0.7$, значения Sc указаны на рисунках.

В общем случае C и η определяются из численного решения уравнения конвективной диффузии (2), но для пределов больших и малых чисел Пекле и при малых числах Рейнольдса $Re \ll 1$ известны асимптотические формулы, выведенные аналитически. В пределе малых чисел Пекле $Pe \ll 1$, когда диффузионный перенос доминирует, формула для η была впервые выведена в [19] в приближении однородного потока $\mathbf{u} = (1, 0)$ для одного разреженного ряда волокон

$$\eta = 2\pi Pe^{-1} \left[K_0(Pe/4) + 2 \sum_{m=1}^{\infty} K_0(mPe/2a) \right], \quad (14)$$

где $K_0(z)$ – модифицированная функция Бесселя мнимого аргумента. Особенности поглощения при $Pe \ll 1$ и $Re \ll 1$ в ряду плотноупакованных волокон были рассмотрены в [20]. При больших числах Пекле $Pe \gg 1$ доминирует конвективный перенос, и на обтекаемой поверхности формируется тонкий граничный слой концентрации примеси. В пределе $Pe \gg 1$ и $Re \ll 1$ в рамках теории граничного слоя в [21, 22] было аналитически найдено решение для поля концентрации

$$C = \frac{1}{\Gamma(1/3)} \wp\left(\frac{1}{3}, \frac{F}{36\pi} Pe(r-1)^3 \sin^{3/2} \theta f(\theta)^{-1}\right), \quad (15)$$

$$f(\theta) = \int_{\theta}^{\pi} \sin^{1/2} x dx,$$

определены локальный диффузионный поток на единицу длины волокна

$$\frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r=1} = \frac{(3/2\pi)^{1/3}}{\Gamma(1/3)} F^{1/3} Pe^{-2/3} \sin^{1/2} \theta f(\theta)^{-1/3}$$

и коэффициент поглощения. Здесь угол $\theta = \pi$ соответствует точке набегания потока, \wp – нижняя неполная гамма-функция. В наших обозначениях формула для η , выведенная в [21], имеет вид:

$$\eta = 2.892 (F/4\pi)^{1/3} Pe^{-2/3} = 1.244 F^{1/3} Pe^{-2/3} = 0.987 C_D^{1/3} Re^{-1/3} Sc^{-2/3}. \quad (16)$$

Как было показано в [10, 11], формула (16) применима также для волокна в ряду при конечных числах Рейнольдса в режиме ламинарного течения (расчеты были выполнены до $Re \sim 100$). Формулы (15), (16) связывают концентрацию вблизи волокна и эффективность поглощения примеси волокном с числом Пекле $Pe = Re Sc$, а также с силой сопротивления волокна потоку, которая в общем случае зависит от плотности упаковки волокон и числа Рейнольдса. Подчеркнем, что, как в пределе $Re \ll 1$ для ползущего течения, так и при конечных, но малых числах Рейнольдса $Re \sim 0.1$, в случае плотных систем волокон поле течения и сила сопротивления практически не зависят от Re , оставаясь функцией только плотности упаковки волокон. Это объясняется влиянием стесненности течения в системе волокон.

Далее, переходя к рассмотрению теории поглощения в упорядоченной системе, состоящей из нескольких рядов волокон, рассчитаем по формуле (13) из найденного по (2) поля концентрации интегральный диффузионный поток η_i на волокно в i -м ряду, отнесенный к концентрации частиц C_0 на входе. Величины η_i связаны с эффективностью поглощения и с безразмерной концентрацией (коэффициентом проскока P) на выходе из слоя, состоящего из N рядов волокон, следующей формулой

$$P = C(X_2) = 1 - E = 1 - (1/Y_c) \sum_{i=1}^N \eta_i, \quad (17)$$

которая применима при любом N и Re . Рассчитав по (2) выходную концентрацию, определим среднюю величину η в слое из N рядов. Введя обозначение $b = a/h$, преобразуем формулу (12) к виду

$$P = \exp(-2aL\eta) = \exp(-bN\eta), \quad (18)$$

откуда выразим средний коэффициент поглощения η в слое из N рядов волокон:

$$\eta = -\ln(P)/bN. \quad (19)$$

Эффективность системы из большого числа слоев волокон рассчитываем по формулам (12) и (17). В заключение данного раздела отметим, что формула (19) применима только в области больших и промежуточных чисел Пекле. При малых числах Пекле средний коэффициент поглощения примеси волокном в слое волокон может быть оценен из формулы, впервые предложенной в [23]

$$P = (1 - \eta/Y_c)^N. \quad (20)$$

При стремлении проскока к нулю $P \rightarrow 0$ эта формула, в отличие от (18), не дает лишнего физического смысла бесконечного роста η .

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Изолированный цилиндр и ряд параллельных волокон

Задача об обтекании изолированного цилиндра является тестовой для контроля работоспособности расчетной программы. В то же время, следует подчеркнуть, что эта модель неприменима для описания системы волокон, т. к. не учитывает влияние соседних волокон. Наши расчеты для силы сопротивления изолированного цилиндра при $Re = 0.01-100$ практически совпали с расчетами по аппроксимационной формуле, постро-

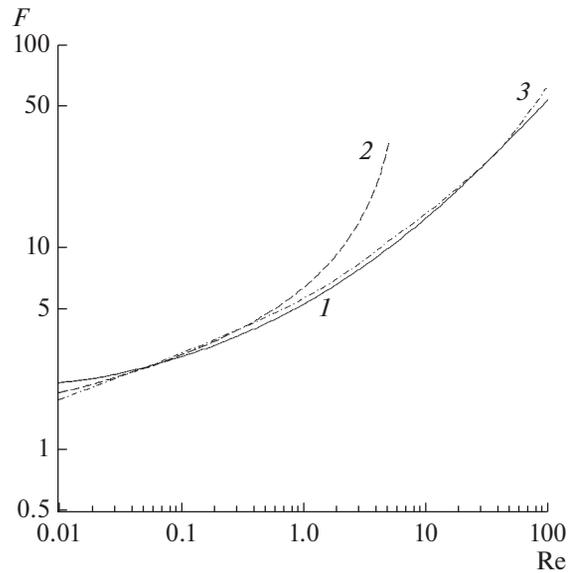


Рис. 3. Зависимости силы сопротивления изолированного волокна от числа Рейнольдса: 1 – расчет по (1), 2 – по (22), 3 – по (21).

енной в [24] по результатам численного моделирования

$$F = C_D Re/2, \quad C_D = 9.689 Re^{-0.78} (1 + A Re^B), \quad (21)$$

где $A = 0.147, B = 0.82$ в диапазоне $0.1 < Re \leq 5$; $A = 0.227, B = 0.55, 5 < Re \leq 40$; $A = 0.0838, B = 0.82, 40 < Re \leq 400$, и с формулой Лэмба [25]

$$F = 4\pi/(2 - \ln Re), \quad (22)$$

применимой при малых числах Рейнольдса (рис. 3). На следующем рисунке (рис. 4) приведены зависимости коэффициента поглощения примеси, рассчитанные по формулам (1), (2), (13) для изолированного волокна и для волокна в ряду параллельных волокон, в котором реализуется условие стесненности течения. Из рисунка видно, что коэффициенты поглощения примеси волокном в ряду заметно превышают η изолированного цилиндра, и указанное различие увеличивается с ростом плотности упаковки волокон. Здесь для сравнения также приведена кривая, построенная по аппроксимационной формуле

$$\eta = 2.2272 Re^{-2/3} Re^{0.108} \quad \text{при } 0.2 < Re < 2, \quad (23)$$

полученной в [26] на основе расчетов с использованием аналитического поля скоростей [27] (где авторы [26] исправили ошибки, допущенные в [27]). На рис. 4 также приведены эмпирические данные для чисел Нуссельта $\eta = \pi Nu/Pe$ из [28] (с учетом подобия диффузионных и тепловых конвективных процессов). Все кривые рассчитаны

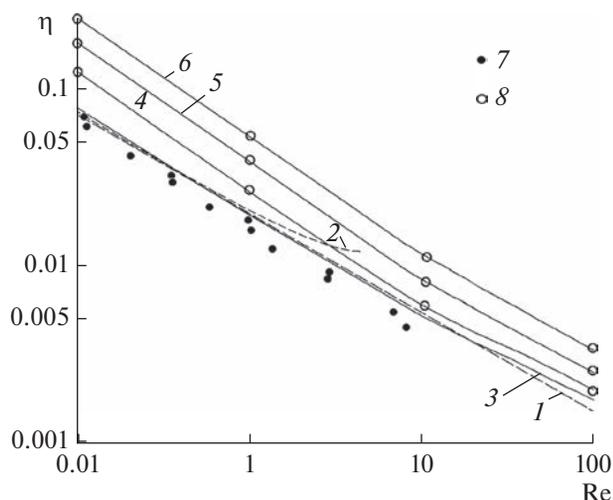


Рис. 4. Безразмерный коэффициент поглощения примеси изолированным цилиндром (1–3, 7) и волокном в ряду волокон (4–6) в зависимости от Re при $Sc = 1200$: 1 – по (23) [26], 2 – по (16), где F – по (22), 3 – численное решение (1) для ряда волокон с $b = 0.215$ (4), 0.537 (5), 0.752 (6), 7 – эксперимент [28], 8 – средние коэффициенты поглощения для волокон в слое волокон с $N = 4$ и $N = 16$.

при $Sc = 1200$, при котором были проведены эксперименты в [28]. Отметим, что наши расчеты η для изолированного цилиндра практически совпали с оценками по (23).

Гексагональная система волокон

Результаты расчетов средних сил сопротивления волокон F в модельной системе из нескольких слоев волокон с разной плотностью упаковки представлены на рис. 5. Из рис. 6 видно, что рост силы сопротивления начинается при тем больших Re , чем плотнее упаковка волокон. (Отметим, что для ползущего течения в пределе малых чисел Рейнольдса при $b < 0.5$ и $b > 0.7$ расчеты F для ряда волокон совпадают с оценками по аналитическим формулам Мияги [29] и Келлера [30].)

Расчитанные значения η волокон в модельной системе из нескольких рядов с $N = 4$ даны на рис. 6 в зависимости от Re и Re при разных значениях Sc . На рис. 7 представлены расчетные кривые зависимостей коэффициентов поглощения волокнами от номера ряда в многослойной модели с $N = 16$. Здесь на рис. 6а и рис. 7а проиллюстрированы особенности поглощения из потока в пределе малых чисел Пекле (при транспорте в газах при малых числах Рейнольдса и Шмидта). Особенностью переноса при малых Re является то, что эффективность поглощения практически

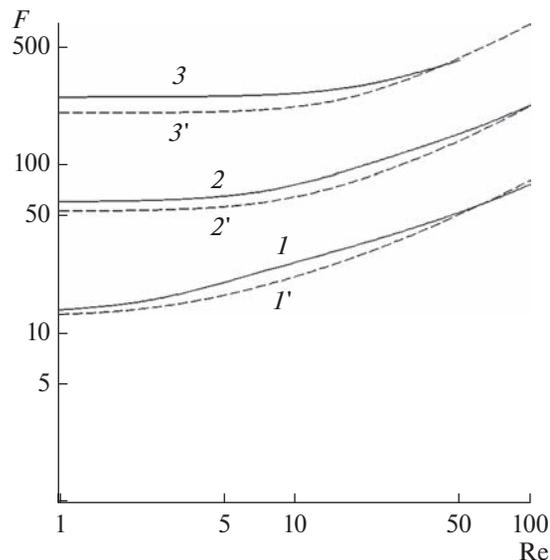


Рис. 5. Зависимости средних значений сил сопротивления волокон (1–3) от Re для гексагональной системы, состоящей из 16 рядов волокон, и F волокна в изолированном ряду волокон (1'–3') с $b = 0.2$ (1, 1'), 0.5 (2, 2'), 0.7 (3, 3').

не зависит от Re . Наклон кривых $\eta(Re)$ на рис. 6 (при $Sh = 1, 10$) изменяется, когда кривые выходят на плато при $Re \rightarrow 0$, что связано с переходом от конвективно-диффузионного режима осаждения, в котором конвекция и диффузия соизмеримы, к полностью диффузионному переносу. В этом случае особенности гидродинамического течения (кривизна линий тока) при малых Re оказывают незначительный эффект на диффузионный транспорт и поглощение. В пределе $Re \rightarrow 0$ коэффициент поглощения примесей волокном стремится к безразмерному полному входящему потоку примеси (в единицу времени) Y_c . В этом случае примесь поглощается преимущественно в первых слоях волокон, которые имеют большие значения η (рис. 6 и рис. 7, кривые 1). Кривые на рис. 6г и кривые (2, 3) на рис. 7 соответствуют промежуточным и большим числам Пекле, когда коэффициент поглощения η уменьшается для каждого следующего ряда волокон не так резко, как при малых числах Пекле.

На рис. 8 и рис. 9 приведены расчетные концентрации (коэффициенты проскока) на выходе из нескольких рядов волокон. Из этих рисунков следует, что при больших и промежуточных числах Пекле прямые расчеты P для многослойной системы волокон (кривые) практически совпадают со значениями (точки), оцененными по формулам (18) и (20), в которых коэффициент погло-

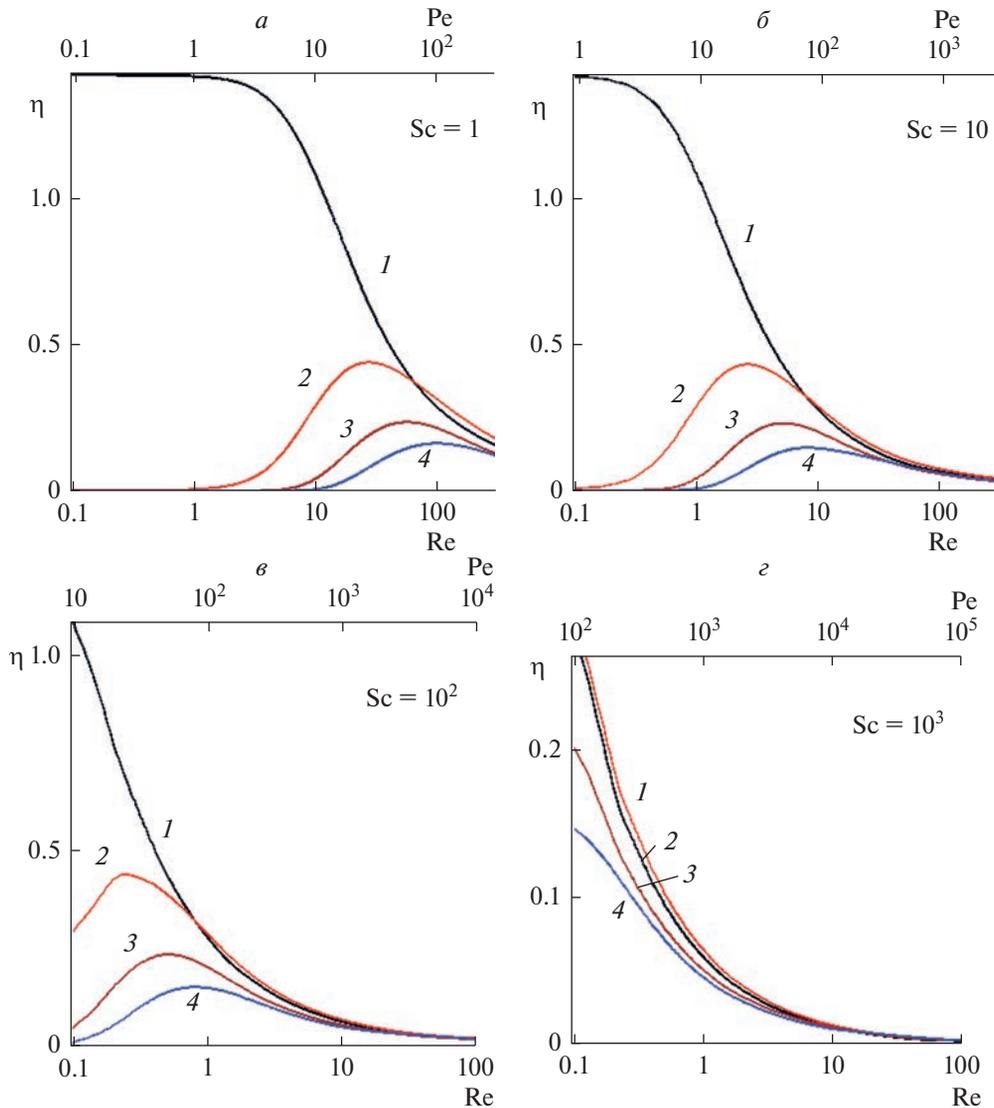


Рис. 6. Зависимости коэффициентов поглощения примеси волокнами в разных рядах волокон η_i в слое волокон с гексагональной упаковкой от Re : номера на кривых соответствуют номерам слоев волокон, $N = 4$, $b = 0.7$. Числа Шмидта указаны на рисунке.

щения определялся по (13) для изолированного ряда волокон. Видно, что для больших и промежуточных чисел Пекле применимы формулы (18) и (19), при этом формула (20) может быть использована также при $Pe \ll 1$. Этот результат подтверждает возможность использования модели ряда волокон для оценки концентрации на выходе из волокнистого слоя большой толщины.

Далее был рассчитан средний коэффициент поглощения η для многослойной системы волокон. На рис. 4 показано совпадение среднего коэффициента поглощения для системы из четырех и шестнадцати рядов волокон, рассчитанного

по (19) (точки), с η для изолированного ряда волокон (кривые) для разных b . Этот результат получен для больших и промежуточных чисел Пекле. Он показывает, что поле течения и распределение концентрации примеси в потоке в сильной степени зависят от расстояния между волокнами в ряду (для выбранной гексагональной упаковки в диапазоне рассмотренных Re , Pe), а наличие соседних рядов волокон, отстоящих на расстоянии X_c , не влияет заметно на η . Таким образом одиночный ряд параллельных волокон является репрезентативной (адекватной) моделью, учитывающей стесненность течения, что дает основа-

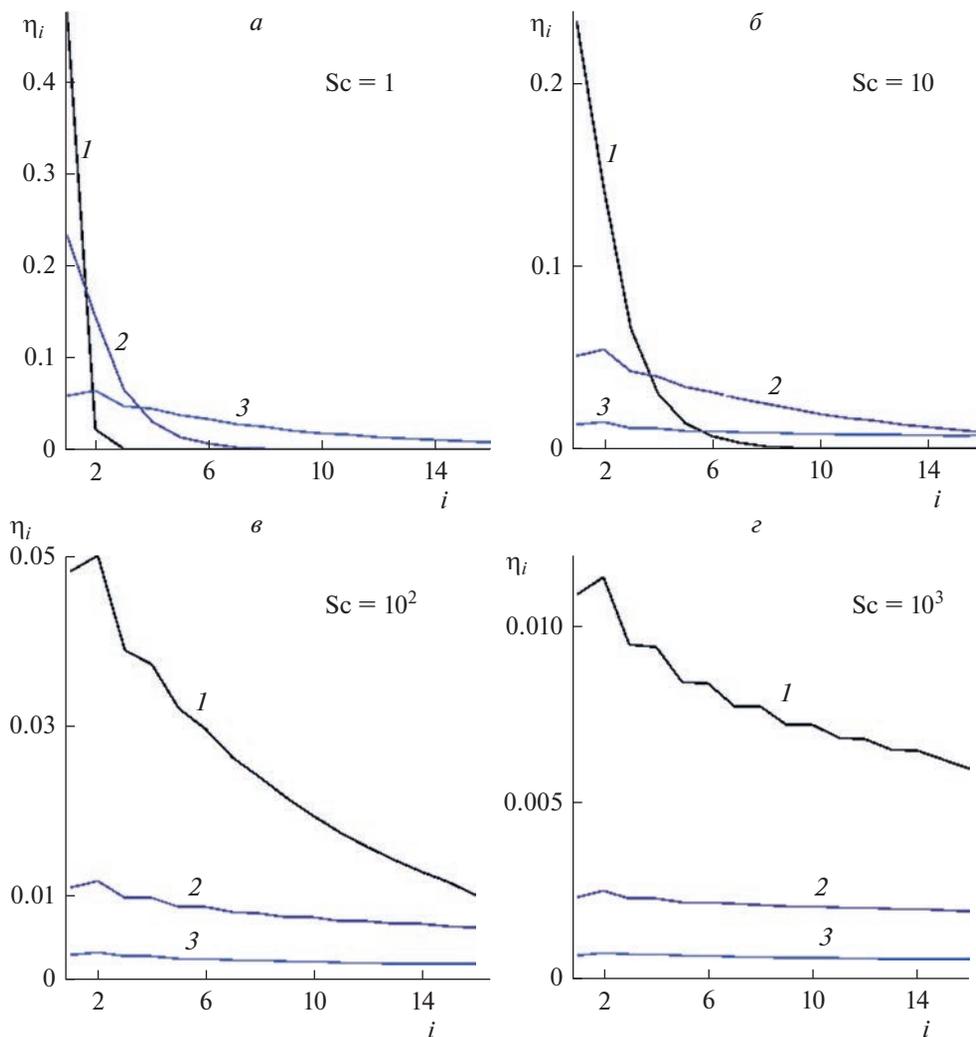


Рис. 7. Зависимости коэффициента поглощения примеси волокном от номера ряда волокон в слое волокон с гексагональной упаковкой, обтекаемых поперечным потоком, при $Re = 0.1$ (1), 10 (2), 100 (3); $N = 16$, $b = 0.7$. Числа Шмидта указаны на рисунке.

ние для расчета коэффициента проскока в многослойных системах волокон большой толщины с помощью аналитических формул для модели ряда волокон (14), (16).

4. ВЫВОДЫ

Выполнено численное моделирование стационарного ламинарного поля течения вязкой несжимаемой жидкости (газа) и конвективно-диффузионного массопереноса в модельных системах волокон (половолоконных мембран) в широком интервале чисел Рейнольдса $Re = 0.01–100$ и диффузионных чисел Пекле $Pe = 0.1–10^5$. Молекулы примеси (растворенного вещества) представлялись точечными частицами, взвешенными в конвективном потоке. Расчеты выполнены для изолированного ряда параллельных волокон,

расположенных перпендикулярно направлению потока, и для волокнистого слоя, содержащего конечное число таких рядов. Поля течения и концентрации примеси находились совместным численным решением уравнений Навье–Стокса и конвективной диффузии для ряда значений числа Шмидта $Sc = 1, 10, 100, 1000$. Для каждого волокна в системе рассчитаны зависимости силы сопротивления от Re и зависимости коэффициента поглощения примеси η от Re и Pe . Показано, что для больших и промежуточных чисел Пекле выполняется экспоненциальная зависимость поглощения примеси от числа рядов волокон и среднего коэффициента поглощения в модели из нескольких рядов волокон, который в свою очередь совпадает с коэффициентом поглощения в модели изолированного ряда волокон. Таким образом, эффективность поглощения волокнистого

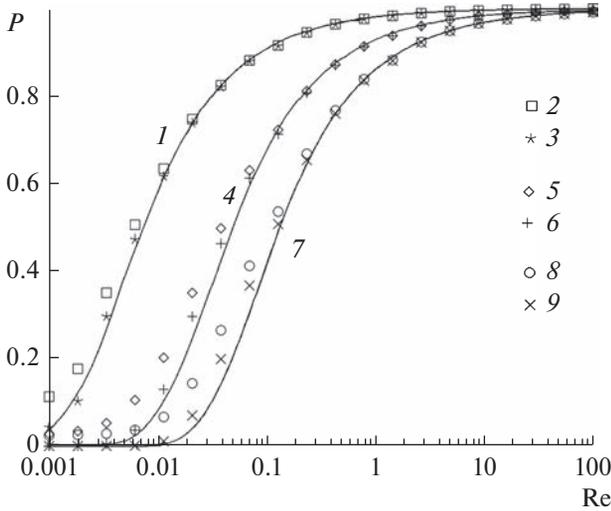


Рис. 8. Зависимости выходной концентрации за слоем рядов параллельных волокон от Re : $N = 4$, $b = 0.2$ (1–3), 0.5 (4–6), 0.7 (7–9) и $Sc = 1$; 2, 5, 8 – по (18); 3, 6, 9 – по (20), где коэффициент поглощения рассчитан по (13) для одного ряда волокон с той же плотностью упаковки, т.е. для $b = 0.215$ (2, 3), 0.537 (5, 6), 0.752 (8, 9) соответственно.

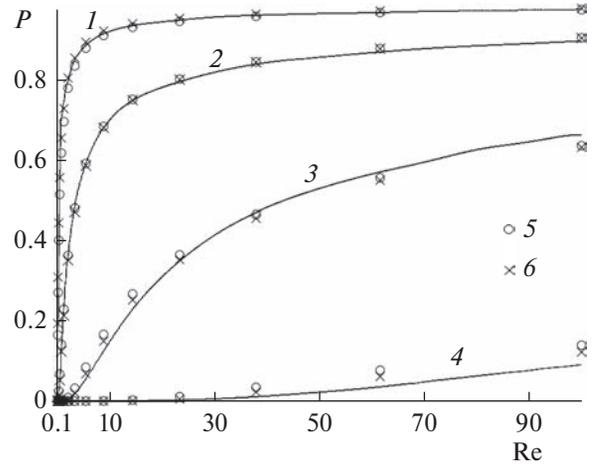


Рис. 9. Зависимости коэффициента проскока за слоем рядов параллельных волокон от Re : 1 – $Sc = 1000$, 2 – $Sc = 100$, 3 – $Sc = 10$, 4 – $Sc = 1$; $N = 16$ и $b = 0.5$, (1–4) – расчет для гексагональной системы волокон; 5 – по (18), 6 – по (20), где средний коэффициент поглощения рассчитан по (13) для одного ряда волокон с той же α .

слоя большой толщины может быть предсказана с помощью известных аналитических формул для коэффициента поглощения примеси волокном в изолированном ряду волокон. Полученные результаты могут быть использованы для расчета и оптимизации половолоконных мембранных модулей и в решении других задач конвективного массопереноса.

Работа выполнена в ИНХС им. А.В. Топчиева и поддержана Российским научным фондом в рамках проекта РНФ № 19-19-00647.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

- a внешний радиус волокна, L
- b геометрический параметр ряда волокон
- C концентрация примеси в потоке
- D коэффициент диффузии примеси в потоке, $L^2 T^{-1}$
- E эффективность улавливания примеси слоем волокон
- F сила сопротивления на единицу длины волокна
- H толщина слоя волокон, L
- $2h$ расстояние между осями параллельных волокон в ряду
- i номер ряда волокон
- N число слоев волокон
- p давление

- P коэффициент проскока (отношение концентраций на выходе и входе)
- r полярный радиус
- U входная скорость потока, $L T^{-1}$
- \mathbf{u} вектор скорости потока
- X_1 координата входной границы расчетной ячейки
- X_2 координата границы ячейки на выходе
- Y сумма проекций поперечных сечений волокон в ячейке на ось ординат
- Y_c высота расчетной ячейки
- α плотность упаковки волокон
- η коэффициент поглощения примеси волокном (на единицу длины)
- μ динамическая вязкость жидкости (газа), $N T L^{-2}$
- ν кинематическая вязкость, $L^2 T^{-1}$
- θ полярный угол

Безразмерные критерии

- Pe диффузионное число Пекле
- Re число Рейнольдса
- Sc число Шмидта

Индексы

- 0 входное значение
- * размерная величина

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Babu V.P., Kraftschik B.E., Koros W.J.* Crosslinkable TEGMC asymmetric hollow fiber membranes for aggressive sour gas separations // *J. Membr. Sci.* 2018. V. 558. P. 94–105.
2. *Bazhenov S.D., Bilyukevich A.V., Volkov A.V.* Gas-liquid hollow fiber membrane contactors for different applications // *Fibers.* 2018. V. 6. № 4. P. 76. <https://doi.org/10.3390/fib6040076>
3. *Malakhov A.O., Bazhenov S.D., Vasilevsky V.P., Borisov I.L., Ovcharova A.A., Bilyukevich A.V., Volkov V.V., Giorno L., Volkov A.V.* Thin-film composite hollow fiber membranes for ethylene/ethane separation in gas-liquid membrane contactor // *Sep. Purif. Technol.* 2019. V. 219. P. 64–73. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.02.053>
4. *Ovcharova A., Vasilevsky V., Borisov I., Bazhenov S., Volkov A., Bilyukevich A., Volkov V.* Polysulfone porous hollow fiber membranes for ethylene-ethane separation in gas-liquid membrane contactor // *Sep. Purif. Technol.* 2017. P. 183.
5. *Левич В.Г.* Физико-химическая гидродинамика. М.: ГИФМЛ, 1959.
6. *Головин А.М., Лопатин В.А.* Течение вязкой жидкости в двоякопериодических рядах цилиндров // *ПМТФ.* 1968. Т. 9. № 2. С. 99–105.
7. *Lauder B.E., Massey T.H.* The Numerical Prediction of Viscous Flow and Heat Transfer in Tube Banks // *ASME J. Heat Transf.* 1978. V. 100. P. 565–571.
8. *Martin A., Saltiel C., Shyy W.* Frictional losses and convective heat transfer in sparse, periodic cylinder arrays in cross flow // *Int. J. Heat Mass Transf.* 1998. V. 41. P. 2383–2397.
9. *Kirsch V.A., Roldugin V.I., Bilyukevich A.V., Volkov V.V.* Simulation of convective-diffusional processes in hollow fiber membrane contactors // *Sep. Purif. Technol.* 2016. V. 167. P. 63–69.
10. *Kirsch V.A., Bilyukevich A.V., Bazhenov S.D.* Simulation of Convection–Diffusion Transport in a Laminar Flow Past a Row of Parallel Absorbing Fibers // *Fibers.* 2018. V. 6. № 4. <https://doi.org/10.3390/fib6040090>
11. *Kirsch V.A., Bazhenov S.D.* Numerical simulation of solute removal from a cross-flow past a row of parallel hollow-fiber membranes // *Sep. Purif. Technol.* 2020. V. 242. P. 116834.
12. *Samarskii A.A., Vabishchevich P.N.* Computational Heat Transfer, Volume 2: The Finite Difference Methodology, 2-nd ed.; John Wiley & Sons: Chichester, UK, 1995.
13. *Курш В.А.* Осаждение аэрозольных наночастиц в волокнистых фильтрах // *Коллоидный журн.* 2003. Т. 65. № 6. С. 795–801.
14. *Weinan E., Liu J.G.* Vorticity Boundary Condition and Related Issues for Finite Difference Schemes // *J. Comput. Phys.* 1996, V. 124. № 2. P. 368–382.
15. *Berkovskii B.M., Polevikov V.K.* Effect of the Prandtl number on the convection field and the heat transfer during natural convection (English transl.) // *J. Eng. Phys.* 1973. V. 24. P. 598–603.
16. *Emi H., Okuyama K., Adachi M.* The effect of neighbouring fibers on the single fiber inertia-interception efficiency of aerosols // *J. Chem. Engng. Japan.* 1977. V. 10. № 3. P. 148–153.
17. *Kirsch A.A., Stechkina I.B.* // *Fundamentals of Aerosol Science* / Ed. by Shaw D.T. N.Y.: Wiley-Interscience, 1978. Ch. 5. P. 165.
18. *Ландау Л.Д., Лифшиц И.М.* Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. Издание 4-е. М.: Наука, 1988.
19. *Chernyakov A.L., Kirsh A.A., Roldugin V.I., Stechkina I.B.* Diffusion deposition of aerosol particles on fibrous filters at small Peclet numbers // *Colloid J.* 2000. V. 62. P. 490–494.
20. *Kirsh V.A.* Sedimentation of nanoparticles in a model fibrous filter at low Reynolds numbers // *Russian J. Phys. Chem. Ser. A.* 2005. V. 79. P. 2049–2052.
21. *Natanson G.L.* Diffusional precipitation of aerosols on a streamlined cylinder with a small capture coefficient (English transl., *Dokl. Akad. Nauk SSSR*) // *Proc. Acad. Sci. USSR Phys. Chem. Sec.* 1957. V. 112. P. 21–25.
22. *Polyanin A.D., Kutepov A.M., Kazenin D.A., Vyazmin A.V.* Hydrodynamics, Mass and Heat Transfer in Chemical Engineering. Series: Topics in Chemical Engineering (Book 14), 1st Ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 2001; ISBN-10: 0415272378.
23. *Чечуев П.В., Курш А.А.* Диффузионное осаждение аэрозолей в модельном фильтре при малых числах Пекле // *Журн. физ. хим.* 1982. Т. 56. № 5. С. 1304–1305. WOS:A1982NR32200069.
24. *Clift R., Grace J.R., Weber M.E.* Bubbles, Drops, and Particles. N.Y.: Academic Press, 1978.
25. *Lamb H.* Hydrodynamics. Cambridge Univ. Press. London/N.Y., 1932.
26. *Фукс Н.А., Курш А.А., Стечкина И.Б.* Технический отчет № 264/72 “Повышение эффективности улавливания компрессорного масляного тумана”. М.: НИФХИ им. Л.Я. Карпова, 1972.
27. *Tomotika S., Aoi T.* The steady flow of viscous fluid past a sphere and cylinder at small Reynolds number // *Quart. J. Mech. Appl. Math.* 1950. V. 3. P. 140–161.
28. *Dobry R., Finn R.K.* Mass Transfer to a Cylinder at Low Reynolds Numbers // *Ind. Engng. Chem.* 1956. V. 48. P. 1540–1543.
29. *Miyagi T.* Viscous flow at low Reynolds numbers past an infinite row of equal circular cylinders // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1958. V. 13. P. 493–496.
30. *Keller J.B.* Viscous flow through a grating or lattice of cylinders // *J. Fluid Mech.* 1964. V. 18. P. 94–96.

Simulation of the Impurity Absorption from a Laminar Flow in a System of Hollow-Fiber Membranes

V. A. Kirsh^{1, 2, *}

¹*Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119071 Russia*

²*Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991 Russia*

**e-mail: va_kirsch@mail.ru*

The external stationary flow of a viscous incompressible fluid and the convective-diffusion mass transfer of a solute in an ordered system of parallel hollow fiber membranes arranged normally to the flow direction are calculated in the ranges of Reynolds numbers $Re = 0.01-100$ and Schmidt numbers $Sc = 1-1000$. The Navier–Stokes equations and the equation of convective diffusion were solved using the methods of computational fluid dynamics with a no-slip boundary condition and with a constant solute concentration condition on the outer surface of the streamlined fiber. The calculations were performed for a row of fibers and for a multi-fiber system consisting of four and sixteen rows of fibers. The outlet concentrations and the fiber solute retention efficiencies η were calculated depending on the packing density of the fibers and the Re and Sc numbers. It is shown that it is possible to use the fiber solute retention efficiency η defined for a single row of fibers to predict the retention efficiency of an extended multi-row fibrous bed.

Keywords: flow in porous media, convective diffusion, Reynolds number, Schmidt number, Peclet number, hollow fiber membrane, membrane contactor