УДК 519.87+004.421 DOI: <u>10.26102/2310-6018/2021.35.4.026</u>

# Формула для расчета теоретической вольтамперной характеристики 3D канала обессоливания ЭДА

А.В. Коваленко<sup>1</sup>, И.В. Гудза<sup>1</sup>, Н.О. Чубырь<sup>2</sup>, М.Х. Уртенов<sup>1</sup>, А.А. Хромых<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Кубанский государственный университет, Краснодар, Российская Федерация <sup>2</sup>Кубанский государственный технологический университет, Краснодар, Российская Федерация <sup>3</sup> Краснодарский университет МВД России, Краснодар, Российская Федерация chubyr-natalja@mail.ru<sup>⊠</sup>

Резюме. Вольтамперная характеристика является одной из наиболее значимых характеристик переноса ионов соли в мембранных системах. К настоящему времени имеются лишь экспериментальные исследования вольтамперных характеристик, которые показывают сложное, нестационарное, неустойчивое поведение. Это одна из причин, из-за которой отсутствуют исследования теоретических вольтамперных характеристик. Другой причиной являются математические и вычислительные трудности. В статье выведена с использованием закона Гаусса-Остроградского и проанализирована формула для расчета теоретической вольтамперной характеристики для трехмерного канала обессоливания электродиализного аппарата в потенциодинамическом режиме. Показано, что эта формула устойчива относительно ошибок округления по пространственным переменным, сохраняя при этом сложное нестационарное поведение вольтамперной характеристики по времени. Для применения формул необходимо рассчитывать локальную плотность тока с использованием математической модели переноса ионов бинарной соли в трехмерном канале обессоливания электродиализного аппарата с учетом электроконвекции. Установлены основные закономерности изменения вольтамперной Показано, что она качественно совпадает характеристики. с экспериментальными вольтамперными характеристиками. Небольшое количественное различие может быть объяснено что тем, в математической модели не учитывается реакция диссоциации / рекомбинации воды, гравитационная конвекция и другие механизмы переноса и требует отдельных дальнейших исследований.

*Ключевые слова:* обессоливание, вольтамперная кривая, электродиализ, уравнения Нернста-Планка-Пуассона и Навье-Стокса, закон Гаусса-Остроградского, численные методы, мембранные системы, ионообменная мембрана, канал обессоливания

**Благодарности:** исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 19-08-00252 А «Теоретическое и экспериментальное исследование вольтамперных характеристик электромембранных систем».

**Для цитирования:** Коваленко А.В., Гудза И.В., Чубырь Н.О., Уртенов М.Х., Хромых А.А. Формула для расчета теоретической вольтамперной характеристики 3D канала обессоливания ЭДА. *Моделирование, оптимизация и информационные технологии.* 2021;9(4). Доступно по: <u>https://moitvivt.ru/ru/journal/pdf?id=1089</u> DOI: 10.26102/2310-6018/2021.35.4.026

# Formula for calculating the theoretical current-voltage characteristic of the 3D desalination channel EDA

A.V. Kovalenko<sup>1</sup>, I.V. Gudza<sup>1</sup>, N.O. Chubyr<sup>2</sup>, M.Kh. Urtenov<sup>1</sup>, A.A. Khromykh<sup>3</sup>

© Коваленко А.В., Гудза И.В., Чубырь Н.О., Уртенов М.Х., Хромых А.А., 2021 1 | 19

<sup>1</sup> Kuban State University, Krasnodar, Russian Federation <sup>2</sup> Kuban State Technological University, Krasnodar, Russian Federation <sup>3</sup>Krasnodar University of the Ministry of the Internal of Russia, Krasnodar, Russian Federation chubyr-natalja@mail.ru<sup>⊠</sup>

Abstract: The current-voltage characteristic is one of the most significant characteristics of salt ion transport in membrane systems. To date, there are only experimental studies of current-voltage characteristics that show complex, unsteady, unstable behavior. This is one of the reasons why there are no studies of theoretical current-voltage characteristics; another reason is mathematical and computational difficulties. In this article the formula for calculating the theoretical current-voltage characteristic for a three-dimensional desalination channel of an electrodialysis apparatus in a potentiodynamic mode is derived and analyzed, using the Gauss-Ostrogradskii law. It is shown that this formula is stable with respect to rounding errors in spatial variables, while maintaining the complex non-stationary behavior of the current-voltage characteristic over time. To apply the formulas, it is necessary to calculate the local current density using a mathematical model of the binary salt ions transport in a three-dimensional desalination channel of an electrodialysis apparatus (EDA), taking into account electroconvection. The main regularities of changes in the current-voltage characteristic are established. It is demonstrated that it qualitatively coincides with the experimental current-voltage characteristic. A small quantitative difference can be explained by the fact that the mathematical model does not take into consideration the dissociation/recombination reaction of water, gravitational convection and other transport mechanisms and requires separate further studies.

*Keywords:* desalination, current-voltage curve, electrodialysis, Nernst-Planck-Poisson and Navier-Stokes equations, Gauss-Ostrogradskii law, numerical methods, membrane systems, ion exchange membrane, desalination channel

*Acknowledgments:* This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project No.19-08-00252 A: Theoretical and experimental studies of current–voltage characteristic of electromembrane systems.

*For citation*: Kovalenko A.V., Gudza I.V., Chubyr N.O., Urtenov M.Kh., Khromykh A.A. Formula for calculating the theoretical current-voltage characteristic of the 3D desalination channel EDA. *Modeling, Optimization and Information Technology*. 2021;9(4). Available from: https://moitvivt.ru/ru/journal/pdf?id=1089 DOI: 10.26102/2310-6018/2021.35.4.026 (In Russ).

#### Введение

Вольтамперная характеристика (ВАХ) является одной из наиболее значимых характеристик переноса ионов соли в мембранных системах и интенсивно исследуется в работах многих авторов. В работах [1, 2] были проанализированы экспериментальные ВАХ и установлены основные закономерности их изменения. Показано, что ВАХ имеет сложное, нестационарное, неустойчивое поведение, причем можно выделить несколько характерных участков изменения (Рисунок 2 б):

a) первый участок практически линейного изменения, который продолжается почти до предельного тока. Этот участок обычно называют омическим участком, так как на этом участке выполняется обобщенный закон Ома, а именно плотность тока растет пропорционально скачку потенциалу;

б) «плато», на котором плотность тока меняется незначительно, хотя скачок потенциала изменяется существенно;

в) вторичный, практически линейный подъем плотности тока.

Однако, выяснить физический смысл возникновения и развития этих участков, связь между характеристиками ВАХ и массопереноса экспериментально оказалось затруднительно.

Моделирование, оптимизация и информационные технологии /	2021;9(4)
Modeling, optimization and information technology	https://moitvivt.ru

Для решения этих проблем необходимо построить и провести анализ теоретической ВАХ. Для построения теоретической ВАХ необходимо вывести формулу, позволяющую, с одной стороны, сохранить все особенности ВАХ, а с другой стороны, устойчиво рассчитывать относительно ошибок округления. Кроме того, необходимо составить математическую модель, позволяющую рассчитать плотность тока в каждой точке канала обессоливания в любой момент времени по заданному скачку потенциала.

#### 1. Математическая модель

В сверхпредельных токовых режимах в мембранных системах возникают следующие вторичные или сопряженные явления концентрационной поляризации:

1) пространственный электрический заряд занимает макроскопическую область, меньшую, но уже сопоставимую с толщиной диффузионного слоя [3-5];

2) начинается интенсивная генерация ионов водорода и гидроксила [6-9];

3) в системе возникает микроконвективные течения, гравитационная и электроконвекция, интенсифицирующая массоперенос [10-13].

В настоящее время принято считать, что электроконвекция является основным механизмом сверхпредельного массопереноса, поэтому в данной статье ограничимся исследованием расчета ВАХ с использованием модели переноса ионов бинарной соли с учетом электроконвекции [14]. Эта модель, состоящая из системы уравнений в частных производных приведена ниже.

Схема трехмерного канала обессоливания электродиализного аппарата представлена на Рисунке 1.

#### 1.1 Схема канала обессоливания



Рисунок 1 – Схема 3D – изображения канала обессоливания. Здесь AOM – анионообменная мембрана, KOM – катионообменная мембрана Figure 1 – 3D image of the desalination channel. AEM is an anion exchange membrane, CEM is a cation exchange membrane

На Рисунке 1 при x=0 расположена анионообменная мембрана, а при x=H – катионообменная мембрана. При y=0 расположен вход в канал, y=L – выход из канала. Таким образом, x – переменная по ширине канала, y – по длине канала, а z=0 – «низ» канала, на котором он лежит, z=M – высота канала. Поэтому ионообменные мембраны канала расположены перпендикулярно плоскости стола, на котором «лежит» ЭДА.

Канал обессоливания обозначим через

$$\Omega = \{(x, y, z) : 0 \le x \le H, 0 \le y \le L, 0 \le z \le M\}.$$

Плотность тока в произвольной точке канала в некоторый момент времени обозначим  $\vec{I}(t, x, y, z)$ . Прямоугольник  $\Omega$  используется ниже при применении теоремы Гаусса.

В потенциодинамическом режиме задается скачок потенциала и рассчитывается с использованием математической модели плотность тока  $\vec{I}(t, x, y, z)$  в каждой точке (x, y, z) области в момент времени t, по заданному скачку потенциала. Обозначим:

 $I_{A}(t) = \frac{1}{LM} \int_{0}^{LM} \int_{0}^{M} \int_{0}^{M} I_{X}(t,0, y, z) dz dy$  – усредненный общий ток, проходящий через

анионообменную мембрану;

$$I_K(t) = \frac{1}{LM} \int_{0}^{LM} \int_{0}^{M} I_x(t, H, y, z) dz dy$$
 – усредненный общий ток, проходящий через

катионообменную мембрану.

В стационарном случае  $I_A$  и  $I_K$  – это усредненные плотности токов, проходящих через AOM и KOM, поэтому при изменении скачка потенциала они представляют собой вольтамперную характеристику AOM и KOM, соответственно. Среднее арифметическое этих величин может рассматриваться во многих случаях как вольтамперная характеристика всего канала. Именно, поэтому  $I_A(t)$  и  $I_K(t)$  являются искомыми величинами. На первый взгляд,  $I_A(t)$  и  $I_K(t)$  несложно рассчитать, если известна  $\vec{I}(t,x,y)$ . Однако эти формулы используют значения ординаты плотности тока на границе, которые, как будет показано ниже, в свою очередь зависят от градиентов концентраций, которые вблизи ионообменных мембран принимают очень большие значения. Небольшие ошибки в вычислении этих градиентов приводят к большим погрешностям в вычислении  $I_x(t,x,y,z)$  при x=0 и x=H, поскольку интегралы берутся по переменным (y,z). Поэтому необходимо вывести формулу для вычисления  $I_A(t)$  и  $I_K(t)$ , устойчивую относительно ошибок округления.

#### 1.2 Система уравнений

Перенос ионов соли в 3D канале обессоливания с учетом электроконвекции описывается следующей системой уравнений с частными производными [15]:

$$\vec{j}_{i} = -\frac{F}{RT} z_{i} D_{i} C_{i} \vec{E} - D_{i} \nabla C_{i} + C_{i} \vec{V}, i = 1, 2,$$
(1)

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -div\vec{j}_i, \ i = 1, 2, \tag{2}$$

$$\varepsilon_r \Delta \varphi = -F\left(z_1 C_1 + z_2 C_2\right),\tag{3}$$

$$\vec{I} = F(z_1 \vec{j}_1 + z_2 \vec{j}_2),$$
(4)

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \left(\vec{V}\nabla\right)\vec{V} = -\frac{1}{\rho_0}\nabla P + \nu\Delta\vec{V} + \frac{1}{\rho_0}\vec{f},$$
(5)

$$div(\vec{V}) = 0,\tag{6}$$

$$\vec{f} = \rho \vec{E} \,. \tag{7}$$

Уравнения Нернста-Планка (1) описывают поток растворенных компонентов (ионов натрия  $i = 1 \leftrightarrow Na^+$  и хлора  $i = 2 \leftrightarrow Cl^-$ ), обусловленный миграцией в электрическом поле, диффузией и конвекцией, зарядовые числа катионов  $z_1 = 1$ , и анионов  $z_2 = -1$ ; (2) – уравнения материального баланса; (3) – уравнение Пуассона для потенциала электрического поля, (4) – уравнение протекания тока, которое означает, что ток, протекающий через диффузионный слой, определяется потоком ионов,  $\varepsilon_r$  – диэлектрическая проницаемость раствора, F – число Фарадея, R – универсальная газовая постоянная,  $\varphi$  – потенциал,  $C_i$ ,  $j_i$ ,  $D_i$ ,  $\vec{I}$  – концентрация, поток, коэффициент диффузии i-го иона, плотность тока, определяемая потоком ионов,  $\vec{V}$  – скорость течения раствора; уравнения Навье-Стокса (5) и неразрывности для несжимаемой жидкости (6) описывают поле скоростей, формируемое, в том числе, под действием вынужденного течения и пространственной электрической силы  $\vec{f} = \rho \vec{E}$  – электрическая сила, где  $\rho = F(z_1C_1 + z_2C_2)$  плотность распределения пространственного заряда, а  $\vec{E} = -\nabla \varphi$  – напряженность электрического поля,  $\rho_0$  – плотность раствора,  $\nu$  – кинематическая вязкость. Формулу (7) можно записать и по-другому, с использованием уравнения Пуассона (3):  $\vec{f} = \rho \vec{E} = -\varepsilon_r \Delta \phi \vec{E} = \varepsilon_r \Delta \phi \nabla \phi = \varepsilon_r \vec{E} di \nu \vec{E}$ .

Если подставить (1) в (2), то уравнения (2) запишутся в виде

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{F}{RT} z_i D_i div \left( C_i \nabla \varphi \right) - D_i \Delta C_i - div \left( C_i \vec{V} \right), i = 1, 2.$$

Уравнения Нернста-Планка, Пуассона и Навье-Стокса являются выражением общих законов сохранения, поэтому модель переноса ионов соли с учетом электроконвекции определяется наряду с формулой электрической силы в уравнении Навье-Стокса и, в первую очередь, краевыми условиями. Ниже описан один из вариантов краевых условий.

#### 1.2 Краевые условия

Электродиализные аппараты используют, как правило, в двух разных режимах работы: в потенциодинамическом режиме (ПДР), когда задается падение потенциала в цепи, и в гальванодинамическом, когда задается плотность тока в цепи. Далее будем изучать ПДР, причем поверхности ионообменных мембран считать эквипотенциальным, т. е. предполагается выполненным условие:

$$\varphi(t, H, y, z) - \varphi(t, 0, y, z) = \alpha t.$$
(8)

Наряду с (8) будем использовать следующие краевые условия:

1) Условия на анионообменной мембране (х=0)

$$C_2(t,0,y,z) = C_{2m},$$
(9)

$$-\vec{n} \cdot \vec{j}_{1}(t,0,y,z) = 0, \qquad (10)$$

$$\varphi(t,0,y,z) = \alpha t , \qquad (11)$$

$$-\vec{n} \cdot \vec{V}(t, 0, y, z) = 0.$$
 (12)

2) Условие на катионообменной мембране (x=H)

$$C_{1}(t,H,y,z) = C_{1m},$$
(13)

$$-\vec{n}\cdot\vec{j}_{2}(t,H,y,z) = 0, \qquad (14)$$

$$\varphi(t, H, y, z) = 0, \tag{15}$$

$$-\vec{n}\cdot\vec{V}(t,H,y,z) = 0.$$
 (16)

3) Условие на входе в канал (z=0).

Считаем заданными концентрации ионов так, чтобы на входе выполнялось условие электронейтральности, т. е.:

$$C_i(t, x, y, 0) = C_{i,0}$$
  $i = 1, 2$  (17)

$$\varphi(t, x, y, 0) = \alpha t - \frac{\alpha t x}{H}$$
(18)

$$\vec{V}(0, x, y, z) = (0, 0, 6V_0 \frac{x}{H} (1 - \frac{x}{H}))$$
(19)

4) Условие на выходе из канала (z=L).

Для концентрации будем использовать условие на поток ионов, предполагающее, что ионы соли выносятся из канала обессоливания электродиализного аппарата только за счет течения раствора:

$$-\vec{n} \cdot \vec{j}_i(t, x, y, L) = -V_z(t, x, y, L)C_i(t, x, y, L), i = 1, 2.$$
(20)

Для скачка потенциала ставится условие:

$$-\vec{n} \cdot \nabla \varphi(t, x, y, L) = 0.$$
<sup>(21)</sup>

5) Условие на боковых гранях канала, то есть изоляторах.

$$\vec{n} \cdot j_i(t, x, y, z) = 0.$$
 (22)

6) Начальные условия.

Начальные условия возьмем согласованными с граничными условиями.

$$C_i(0, x, y, z) = C_{i,0}$$
  $i = 1, 2,$  (23)

$$\varphi(0, x, y, z) = 0, \qquad (24)$$

$$\vec{V}(0,x,y,z) = (0,0,6V_0 \frac{x}{H}(1-\frac{x}{H})).$$
(25)

## 1.3. Вспомогательные формулы 1.3.1 Дивергенция плотности тока

Умножим на  $z_i$  и сложим, тогда  $\frac{\partial (z_1 C_1 + z_2 C_2)}{\partial t} = -div(z_1 \vec{j}_1 + z_2 \vec{j}_2)$ 

или 
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -Fdiv(z_1\vec{j}_1 + z_2\vec{j}_2)$$
, где  $\rho = F(z_1C_1 + z_2C_2)$  – плотность распределения

зарядов. С учетом (4) получаем закон Гаусса-Остроградского в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -div\vec{I} \tag{26}$$

Следовательно,  $div\vec{I} = 0$ , только если выполняется условие локальной электронейтральности  $\rho = F(z_1C_1 + z_2C_2) = 0$ , либо рассматривается стационарный процесс  $\rho = F(z_1C_1 + z_2C_2) = \text{Const.}$ 

Таким образом, плотность тока является соленоидальным полем лишь для стационарной задачи и (или) в тех областях, где выполняется условие локальной электронейтральности.

#### 1.3.2 Формула для расчета плотности тока

Плотность тока в канале обессоливания должна считаться с учетом потоков катионов и анионов согласно уравнению:

$$\vec{I} = F(z_1 \vec{j}_1 + z_2 \vec{j}_2)$$
  
Отсюда с учетом формулы (6):  
$$\vec{j}_i = \frac{F}{RT} z_i D_i C_i \vec{E} - D_i \nabla C_i + C_i \vec{V}, \qquad i = 1,2$$
  
имеем

$$\vec{I} = \frac{F^2}{RT} (z_1^2 D_1 C_1 + z_2^2 D_2 C_2) \vec{E} - F(z_1 D_1 \nabla C_1 + z_2 D_2 \nabla C_2) + F(z_1 C_1 + z_2 C_2) \vec{V}$$
 или  

$$\vec{I} = -\frac{F^2}{RT} (z_1^2 D_1 C_1 + z_2^2 D_2 C_2) \nabla \varphi - F(z_1 D_1 \nabla C_1 + z_2 D_2 \nabla C_2) + F(z_1 C_1 + z_2 C_2) \vec{V}$$

Из (22) следует, что на боковых гранях выполнено

$$\vec{n} \cdot \vec{I} = F(z_1 \vec{n} \cdot \vec{j}_1 + z_2 \vec{n} \cdot \vec{j}_2) = 0$$
 (27)

Таким образом,  $I_{z} = 0$  на боковых гранях

#### 2. Формула для расчета ВАХ

Формула для расчета ВАХ основана на законе Гаусса-Остроградского [4], формулировка которого зависит от того, является ли плотность тока соленоидальным полем или нет.

#### 2.1 Закон Гаусса-Остроградского

В трехмерном случае закон Гаусса-Остроградского запишется в виде [4]:

$$\oiint_{S} \vec{I} \cdot d\vec{S} = \iiint_{\Omega} div\vec{I}d\Omega$$

Здесь  $d\vec{S} = \vec{n}ds$  — элемент ориентированной границы, т. е.  $\vec{n}$  — внешняя нормаль к границе, dS — бесконечно малый элемент границы, а  $d\Omega$  — бесконечно малый элемент объема.

Если учесть отдельно скачки потенциалов через мембраны и считать их постоянными как в работах [3,9,13], то можно считать,  $\Omega = \{(x, y, z) : 0 \le x \le H, 0 \le y \le L, 0 \le z \le M\}$ тогда:

Поскольку, через боковые грани (изоляторы ток не протекает), то последние два интеграла равны нулю, то есть

$$\iint_{0}^{H} \int_{0}^{L} I_{z}(t, x, y, 0) dy dx = \iint_{0}^{H} \int_{0}^{L} I_{z}(t, x, y, M) dy dx = 0$$

и интегральный закон Гаусса-Остроградского запишется в виде:

$$- \int_{0}^{HM} \int_{0}^{I} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx + \int_{0}^{HM} \int_{0}^{I} I_{y}(t, x, L, z) dz dx - \int_{0}^{LM} \int_{0}^{I} I_{x}(t, 0, y, z) dz dy +$$
$$+ \int_{0}^{LM} \int_{0}^{LM} I_{x}(t, H, y, z) dz dy = \iiint_{\Omega} div \vec{I} d\Omega$$

2.2 Вывод формулы для расчета ВАХ в электрической цепи

#### для соленоидального случая

Для соленоидальной плотности тока  $div \vec{I} = 0$  интегральный закон Гаусса, как следует из предыдущей формулы, приобретает вид:  $\oiint \vec{I} \cdot d\vec{S} = 0$ <sub>или</sub>

$$\begin{array}{ll} & H M & H M \\ & - \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx + \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, L, z) dz dx - \int_{0}^{L} \int_{0}^{H} I_{x}(t, 0, y, z) dz dy + \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} I_{x}(t, H, y, z) dz dy = 0 \\ \end{array} \\ \begin{array}{ll} & \text{Возьмем произвольную точку } s \in (0, H) & \text{и рассмотрим сечение } \\ & \Lambda = \{(x, y, z) : x = s, 0 < y < L, 0 < z < M\} & \text{и области } \\ & \Omega_{1} = \{(x, y, z) : 0 \le x \le s, 0 \le y \le L, 0 < z < M\} & \text{и} \\ \end{array}$$

Так как поле плотности тока является соленоидальным в области  $\Omega$ , то  $div\vec{I} = 0$  в каждой из областей  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$ , и, следовательно:  $\iint_{\Omega_i} div\vec{I}d\Omega = 0$ , i = 1,2.

Из закона Гаусса-Остроградского, примененного для каждой из областей  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$ , следует:

$$-\int_{0}^{s} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx + \int_{0}^{s} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, L, z) dz dx - \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} I_{x}(t, 0, y, z) dz dy + \int_{0}^{L} \int_{0}^{L} I_{x}(t, s, y, z) dz dy = 0$$
  
$$-\int_{s}^{H} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx + \int_{s}^{H} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, L, z) dz dx - \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} I_{x}(t, s, y, z) dz dy + \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} I_{x}(t, H, y, z) dz dy = 0$$

Умножим первое уравнение на (-1) и сложим со вторым, тогда получим равенство справедливое для любого  $s \in [0, H]$ :

$$\int_{0}^{s} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx - \int_{s}^{H} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx - \int_{0}^{s} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, L, z) dz dx + \int_{0}^{H} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, L, z) dz dx + \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} I_{x}(t, 0, y, z) dz dy - 2 \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} I_{x}(t, s, y, z) dz dy + \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} I_{x}(t, H, y, z) dz dy = 0$$

$$\begin{split} & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (y_{j}(t,x,L,z)) dz dx ds + \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,0,y,z)) dz dy ds - 2 \prod_{0=0}^{J} \prod_{0=0}^{J} (x_{j}(t,s,y,z)) dz dy ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,H,y,z)) dz dy ds = 0 \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,0,y,z)) dz dy ds = H \int_{0}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,0,y,z)) dz dy \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,H,y,z)) dz dy ds = H \int_{0}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,H,y,z)) dz dy \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,H,y,z)) dz dy ds = H \int_{0}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,H,y,z)) dz dy \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dx ds - \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (y_{j}(t,x,0,z)) dz dx ds - \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,0,y,z)) dz dy dz - 2 \prod_{j=0}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(s,y,y,z)) dz dy ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (y_{j}(t,x,L,z)) dz dx ds + H \prod_{j=0}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,0,y,z)) dz dy - 2 \prod_{j=0}^{J} \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(s,y,y,z)) dz dy ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,H,y,z)) dz dy dy = 0 \\ \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,H,y,z)) dz dy dy + H \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dx ds + \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dx ds - \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dx ds + \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dx ds - \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dx ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dy ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dy ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dx ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dy ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dy ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dx ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j}(t,x,0,z)) dz dy ds + \\ & \underset{0}{\overset{HLM}{\prod}} \prod_{j=1}^{J} (x_{j=1}^{J} (x_{j=1}^{J}$$

$$I_{gx}(t) = \frac{1}{HM} \int_{0}^{M} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, 0, z) dx dz - \text{усредненный входящий ток;}$$

$$I_{gbdx}(t) = \frac{1}{HM} \int_{0}^{M} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, L, z) dx dz - \text{усредненный выходящий ток;}$$

$$I_{N}(t) = -\frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{S} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds + \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{s}^{H} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds + \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{s}^{H} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds + \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{s}^{M} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds + \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{s}^{H} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds + \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{s}^{H} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds + \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{s}^{H} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds + \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds + \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds + \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} \int_{0}^{H} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds$$

Тогда из (28) получаем  $\frac{1}{2}(I_A + I_K) = I_{av}(t) + I_N(t)$ 

Оценим  $I_N(t)$ . Для этого оценим интегралы

$$\begin{aligned} \frac{1}{2HLM} \left| \int_{0}^{Hs} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds \right| &\leq \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{Hs} \int_{0}^{M} |I_{y}(t, x, 0, z)| dz dx ds \leq \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{Hs} \int_{0}^{M} |I_{y}(t, x, 0, z)| dz dx ds \leq \frac{1}{2LM} \int_{0}^{HM} \int_{0}^{HM} |I_{y}(t, x, 0, z)| dz dx ds = \frac{H}{L} \frac{1}{2HM} \int_{0}^{HM} \int_{0}^{HM} |I_{y}(t, x, 0, z)| dz dx ds \leq \frac{H}{2L} I_{ex} \end{aligned}$$

Аналогично получим:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2HLM} \left| \int_{0}^{H} \int_{s}^{H} \int_{0}^{M} I_{y}(t, x, 0, z) dz dx ds \right| &\leq \frac{H}{2L} I_{ex} \\ \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{s} \int_{0}^{M} \left| I_{y}(t, x, L, z) \right| dz dx ds &\leq \frac{H}{2L} I_{eblx} \\ \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{s}^{H} \int_{0}^{M} \left| I_{y}(t, x, L, z) \right| dz dx ds &\leq \frac{H}{2L} I_{eblx} \end{aligned}$$

Следовательно:

$$\left|I_{N}\right| \leq \frac{H}{L}(I_{ex} + I_{eblx})$$

Если входной и выходные токи малы, или (и) канал достаточно длинный (на практике длина канала обычно в десятки и сотни раз длиннее ширины), то  $|I_N|$  мало,

поэтому получим 
$$I_{av} \approx \frac{1}{2} (I_A + I_K).$$

Таким образом, в качестве средней плотности тока, переносимого через 3D канал обессоливания, можно использовать интеграл

$$I_{av}(t) = \frac{1}{HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{LM} \int_{0}^{I} I_{x}(t, x, y, z) dz dy dx.$$
(29)

В отличие от интегралов (28) в тройном интеграле (29) ошибки при вычислении производной по переменной *х* компенсируются интегрированием по этой же переменной.

Таким образом, тройной интеграл (29) для соленоидального случая позволяет достаточно точно и адекватно вычислить ВАХ.

Формула (29) достаточно точна для длинных каналов, однако для коротких каналов дает значение величины тока со значительной ошибкой.

#### 2.3 Вывод формулы для расчета ВАХ в электрической цепи для несоленоидального случая

В общем случае для несоленоидальной плотности тока вывод формулы для расчета ВАХ аналогичен предыдущему и она имеет вид:

$$I_{av}(t) = \frac{1}{HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} I_{x}(t, x, y, z) dz dy dx - \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} (H - 2x) div \vec{I}(t, x, y, z) dz dy dx, \quad (30)$$

где усредненная плотность тока  $I_{avN}(t) = \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} (H-2x) div \vec{I}(t,x,y,z) dz dy dx$ 

связана с несоленоидальностью плотности тока.

Таким образом, из формулы (30) следует, что общая средняя плотность тока  $I_{av}(t)$  состоит, грубо говоря, из суммы соленоидальной части средней плотности тока  $I_{avS}(t) = \frac{1}{HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} I_x(t, x, y, z) dz dy dx$  и несоленоидальной части средней плотности тока

$$I_{avN}(t) = \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} (H - 2x) div \vec{I}(t, x, y, z) dz dy dx, \quad I_{av}(t) = I_{avS}(t) + I_{avN}(t).$$

Несложно показать, что

$$\left|I_{avN}(t)\right| \leq \frac{1}{2HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{LM} \int_{0}^{M} |H - 2x| div\vec{I}(t, x, y, z)| dz dy dx \leq \frac{1}{2LM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{LM} \int_{0}^{M} |div\vec{I}(t, x, y, z)| dz dy dx,$$

поэтому если  $\max_{(x,y,z)\in\Omega} |div\vec{I}|$  мало, т. е. плотность тока практически является

соленоидальной, то опять получаем  $I_{av}(t) \approx \frac{1}{HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{L} \int_{0}^{M} I_x(t, x, y, z) dz dy dx$ .

### 3. Результаты численного эксперимента

В работе проведен анализ теоретической ВАХ (Рисунок 2) и ее сравнение с экспериментальными ВАХ (Рисунок 3).





Как видно из Рисунка 2, график ВАХ можно примерно разбить на несколько участков. На первом участке от 0В и до 0,1В график практически линейный. На этом участке имеется два стационарных вихря в начале канала, которые, как следует из Рисунка 3, похожи на сильно вытянутые эллипсоиды вращения. Причем, от «эллипсоида вращения», расположенного около катионообменной мембраны образуется вихревой след вниз по течению. Поскольку, плотность тока линейно зависит от скачка потенциала, то на этом участке выполняется закон Ома, поэтому он может быть назван Омическим участком ВАХ. В промежутке от 0,1В и до 0,15В скорость увеличения графика значительно меньше, чем на первом участке, и он соответствует так называемому «плато» [15]. На участке от 0,15В до 0,17В наблюдается увеличение подъема графика функции, который вызван развитием электроконвекции около катионообменной мембраны (Рисунок 3).

Начиная с 0,17В и далее электроконвекция начинается также у анионообменной мембраны и дает свой вклад в массоперенос и поэтому график ВАХ продолжает увеличиваться до 0,18В. Эти вихри вызывают заметные колебания ВАХ. В дальнейшем, примерно до 0,42В электроконвективные вихри возле катионообменной мембраны и анионообменной мембраны практически не взаимодействуют между собой (Рисунок 3), поэтому тренд графика ВАХ практически постоянный (Рисунок 2). После 0,42В электроконвективные вихри возле катионообменной мембраны и катионообменной мембраны и взаимодействовать и практически полностью заполняют канал

обессоливания (Рисунок 3). Это приводит к усилению массопереноса и соответственно новому подъему графика ВАХ (Рисунок 2).

На Рисунке 3 приведены графики ВАХ, посчитанные с использованием двумерной и трехмерной модели (точки), а также их полиномиальные аппроксимации. Для 2D это  $y \approx 5.9x^5 - 7.8x^4 + 4.3x^3 - 1.3x^2 + 0.2x$ , а для 3D –

 $y \approx 0.6x^5 - 1.6x^4 + 1.5x^3 - 0.7x^2 + 0.2x$ . Видно, что графики этих функций совпадают с хорошей точностью до 40с (0.2B). В промежутке от 40с (0.2B) и до 100с (0.5B) график ВАХ 3D проходит ниже графика ВАХ 2D, а затем график ВАХ 3D быстро увеличивается.



---I av 3D (A/m^2) ---I av 2D (A/m^2) ·---Полиномиальная (I av 3D (A/m^2)) ·---Полиномиальная (I av 2D (A/m^2)) y = 5,8885x<sup>5</sup> - 7,8188x<sup>4</sup> + 4,2722x<sup>3</sup> - 1,2585x<sup>2</sup> + 0,2026x + 0,0003

a)



Рисунок 3 – Сравнение 2D теоретической BAX (NPP/NS) и экспериментальных BAX Figure 3 – Comparison of 2D theoretical CVC (NPP / NS) and experimental CVC



Рисунок 4 – а) сечения канала обессоливания, перпендикулярные поверхности ионообменных мембран при y = 0.75 мм, y = 0.41 мм, y = 0.25 мм; б)-г) линии тока раствора в каждом из сечений в разные времена: t = 20c, t = 30c, t = 40c, t = 50c, t = 80c, t = 90cFigure 4 – a) sections of the desalination channel perpendicular to the surfaces of ion-exchange membranes at y = 0.75 mm, y = 0.41 mm, y = 0.25 mm; b)-d) solution flow lines of current in each of the sections at different times: t = 20s, t = 30s, t = 40s, t = 50s, t = 80s, t = 90s

На Рисунке 4 приведены результаты сравнения графиков ВАХ 2D и экспериментальных ВАХ. Видно, что экспериментальные ВАХ, кроме ВАХ, измеренных с мембранами Nafion, проходят ниже ВАХ 2D, как и ВАХ 3D. Поэтому можно считать, что график ВАХ 3D ближе к экспериментальным ВАХ, чем ВАХ 2D [16]. Это объясняется тем, что трехмерная модель канала обессоливания более адекватна, чем двумерная.

#### Заключение

В работе выведены формулы, позволяющие считать ВАХ, устойчиво относительно случайных ошибок и ошибок округления, и выяснен физический смысл этих формул. Приведен расчет теоретической ВАХ с использование математической модели переноса ионов бинарной соли с учетом электроконвекции и показано, что она качественно совпадает с экспериментальными ВАХ. Количественное различие может быть объяснено тем, что в математической модели не учитывается реакция диссоциации / рекомбинации воды, гравитационная конвекция и другие механизмы переноса ионов соли в мембранных системах. Таким образом, формулу:

$$I_{av}(t) \approx \frac{1}{HLM} \int_{0}^{H} \int_{0}^{LM} \int_{0}^{H} I_x(t, x, y, z) dz dy dx$$

можно использовать в теоретических исследованиях переноса ионов соли в электромембранных системах для расчета ВАХ.

# СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- 1. Будников Е.Ю. Анализ флуктуационных явлений в области запредельных токов в электромембранной системе. Дисс. канд. физ.-мат. н. М.; 2000;115.
- Будников Е.Ю., Кукоев И.Ю., Максимычев А.В., Мирошникова И.Н., Тимашев С.Ф., Гуляев А.М. Вейвлет и Фурье-анализ электрических флуктуаций в полупроводниковых и электрохимических системах. Измерительная Техника. 1999;11:40–44.
- Mani A., Bazant M.Z. Deionization shocks in microstructures. *Physical Review E*. 2011;84:061504.Доступно по: <u>https://www.researchgate.net/publication/221804743\_Deionization\_shocks\_in\_microstru</u> ctures. DOI:10.1103/PhysRevE.84.061504. (дата обращения: 22.11.2021).
- 4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука; 1982:621.
- 5. Уртенов К.М., Коваленко А.В., Чубырь Н.О., Хромых А.А. Краевая задача для плотности тока в области пространственного заряда. Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2010;7(1):70–73. Доступно по: <u>https://elibrary.ru/item.asp?id=14435210</u>. (дата обращения: 22.11.2021).
- 6. Simons R. Nature, Land. 1979;280:41.
- Nikonenko V., Kovalenko, A., Urtenov, M., Pismenskaya, N., Han, J., Sistat, P., Pourcelly, G. Desalination at overlimiting currents: State-of-the-art and perspectives. *Desalination*. 2014;342:85–106. Доступно по: <a href="https://www.researchgate.net/publication/261563484\_Desalination\_at\_overlimiting\_currents\_State-of-the-art\_and\_perspectives">https://www.researchgate.net/publication/261563484\_Desalination\_at\_overlimiting\_currents\_State-of-the-art\_and\_perspectives</a>. DOI:10.1016/j.desal.2014.01.008. (дата обращения: 22.11.2021).
- Rubinstein I., Zaltzman B. Equilibrium electro-osmotic instability in concentration polarization at a perfectly charge-selective interface. *Physical Review Fluids*. 2017;2(9). Доступно
   <u>https://www.researchgate.net/publication/320070217\_Equilibrium\_electro-</u>

<u>osmotic instability in concentration polarization at a perfectly charge-</u> <u>selective\_interface</u>. DOI: 10.1103/PhysRevFluids.2.093702. (дата обращения: 22.11.2021).

- 9. Urtenov M.K., Chubyr N.O., Gudza V.A. Reasons for the formation and properties of soliton-like charge waves in membrane systems when using overlimiting current modes. *Membranes*. 2020;10(8):189. Доступно по: <u>https://www.researchgate.net/publication/343693372\_Reasons\_for\_the\_Formation\_and\_Properties\_of\_Soliton-Like\_Charge\_Waves\_in\_Membrane\_Systems\_When\_Using\_Overlimiting\_Current\_Mod es. DOI:10.3390/membranes10080189. (дата обращения: 22.11.2021).
  </u>
- 10. Greben V.P., Pivovarov, N.Y., Kovarskii, N.Y., Nefedova, G.V. Influence of ion-<br/>exchange resin nature on physic-chemical properties of bipolar membranes. Sov. J. Phys.<br/>Chem. 1978;52:2641–2645.Доступнопо:

https://www.researchgate.net/publication/284830531\_Influence\_of\_ionexchange\_resin\_nature\_on\_physic-chemical\_properties\_of\_bipolar\_membranes. (дата обращения: 22.11.2021).

- 11. Rubinstein I., Zaltzman B. Electro-osmotic slip and electroconvective instability. J. Fluid<br/>Mech.2007;579:173–226.Доступноhttps://www.researchgate.net/publication/231948195\_Electro-<br/>osmotic\_slip\_and\_electroconvective\_instability.DOI:10.1017/S0022112007004880.(дата обращения: 22.11.2021).Соращения: 22.11.2021).
- Uzdenova A.M., Kovalenko A.V., Urtenov M.K., Nikonenko V.V Effect of electroconvection during pulsed electric field electrodialysis. Numerical experiments. *Electrochemistry Communications*. 2015;51:1–5. Доступно по: <u>https://www.researchgate.net/publication/272395440\_Effect\_of\_electroconvection\_durin</u> <u>g\_pulsed\_electric\_field\_electrodialysis\_Numerical\_experiments</u>. DOI:10.1016/j.elecom.2014.11.021. (дата обращения:22.11.2021).
- 13. Urtenov M.A.Kh., Gudza V.A., Chubyr N.O., Shkorkina I.V. Theoretical Analysis of the Stationary Transport of 1:1 Salt Ions in a Cross-Section of a Desalination Channel, Taking into Account the Non-Catalytic Dissociation/Recombination Reaction of Water Molecules / Membranes. 2020;10(11):342. Доступно по: https://www.researchgate.net/publication/346881766\_Theoretical\_Analysis\_of\_the\_Stationary\_Transport\_of\_11\_Salt\_Ions\_in\_a\_Cross-Section\_of\_a\_Desalination\_Channel\_Taking\_into\_Account\_the\_Non-Catalytic\_DissociationRecombination\_Reaction\_of\_Water\_Molecule. DOI:10.3390/membranes10110342. (дата обращения: 22.11.2021).
- Никоненко В.В., Мареев С.А., Письменская Н.Д., Узденова А.М., Коваленко А.В., Уртенов М.Х., Пурсели Ж. Эффект электроконвекции и его использование для интенсификации массопереноса в электродиализе (Обзор). Электрохимия. 2017;53(10):1266–1289. Доступно по: <u>https://elibrary.ru/item.asp?id=30297556</u>. DOI: 10.7868/S0424857017100061. (дата обращения:22.11.2021).
- 15. Urtenov M.Kh., Kovalenko A.V., Sukhinov A.I., Chubyr N.O., Gudza V.A. Model and numerical experiment for calculating the theoretical current-voltage characteristic in electro-membrane systems. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. Collection of materials of the XV International Scientific - Technical Don State Technical University. 2019;012030. Доступно по: Conference. https://www.researchgate.net/publication/337743733 Model and numerical experiment for calculating the theoretical current-voltage characteristic in electromembrane\_systems. DOI: 10.1088/1757-899X/680/1/012030. (дата обрашения: 22.11.2021).
- 16. Шкоркина И.В., Чубырь Н.О., Гудза В.А., Уртенов М.А.Х. Вольтамперная характеристика нестационарного переноса ионов 1:1 соли в сечении канала обессоливания. Моделирование, оптимизация и информационные технологии. 2020;8(3). Доступно по: <u>https://moit.vivt.ru/wp-content/uploads/2020/08/ShkorkinaSoavtors\_3\_20\_1.pdf</u>. DOI: 10.26102/2310-6018/2020.30.3.020. (дата обращения: 22.11.2021).

# REFERENCES

- 1. Budnikov E. Y. Analysis of fluctuation phenomena in the field of extreme currents in an electromembrane system. Dissertation for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences. Moscow. 2000;115. (In Russ.)
- Budnikov E. Yu., Kukoev I. Yu., Maksimychev A.V., Miroshnikova I. N., Timashev S. F., Gulyaev A.M.. Wavelet and Fourier analysis of electrical fluctuations in polyconducting and electrochemical systems. *Izmeritel'naya Tekhnika = Measuring Equipment*. 1999;11:40–44. (In Russ.)
- Mani A., Bazant M.Z. Deionization shocks in microstructures. *Physical Review E*. 2011;84:061504. Available at: <u>https://www.researchgate.net/publication/221804743 Deionization shocks in microstru ctures</u>. DOI:10.1103/PhysRevE.84.061504. (accessed 22.11.2021).
- 4. Landau L.D., Lifshits E.M. *Electrodynamics of continuous media*. M.: Science; 1982:621. (In Russ.)
- Urtenov K.M., Kovalenko A.V., Chubyr N.O., Khromykh A.A. Boundary value problem for current density in the space charge region. *Ekologicheskiy vestnik nauchnykh tsentrov Chernomorskogo ekonomicheskogo sotrudnichestva = Ecological Bulletin of the Scientific Centers of the Black Sea Economic Cooperation*. 2010;7(1):70–73. Available at: <u>https://elibrary.ru/item.asp?id=14435210</u>. (accessed 22.11.2021). (In Russ.)
- 6. Simons R. Nature, Land. 1979;280:41.
- Nikonenko V., Kovalenko, A., Urtenov, M., Pismenskaya, N., Han, J., Sistat, P., Pourcelly, G. Desalination at overlimiting currents: State-of-the-art and perspectives. *Desalination*. 2014;342:85–106. Available at: <a href="https://www.researchgate.net/publication/261563484">https://www.researchgate.net/publication/261563484</a> Desalination at overlimiting curr ents State-of-the-art and perspectives. DOI:10.1016/j.desal.2014.01.008. (accessed 22.11.2021).
- Rubinstein I., Zaltzman B. Equilibrium electro-osmotic instability in concentration polarization at a perfectly charge-selective interface. *Physical Review Fluids*. 2017;2(9). Available at: <u>https://www.researchgate.net/publication/320070217 Equilibrium electroosmotic instability in concentration polarization at a perfectly chargeselective\_interface</u>. DOI: 10.1103/PhysRevFluids.2.093702. (accessed 22.11.2021).
- 9. Urtenov M.K., Chubyr N.O., Gudza V.A. Reasons for the formation and properties of soliton-like charge waves in membrane systems when using overlimiting current modes. *Membranes*. 2020;10(8):189. Available at: <u>https://www.researchgate.net/publication/343693372\_Reasons\_for\_the\_Formation\_and\_Properties\_of\_Soliton-Like\_Charge\_Waves\_in\_Membrane\_Systems\_When\_Using\_Overlimiting\_Current\_Mod es. DOI:10.3390/membranes10080189. (accessed 22.11.2021).</u>
- 10. Greben V.P., Pivovarov, N.Y., Kovarskii, N.Y., Nefedova, G.V. Influence of ion-exchange resin nature on physic-chemical properties of bipolar membranes. *Sov. J. Phys. Chem.* 1978;52:2641–2645. Available at: <a href="https://www.researchgate.net/publication/284830531\_Influence\_of\_ion-">https://www.researchgate.net/publication/284830531\_Influence\_of\_ion-</a>

exchange resin nature on physic-chemical properties of bipolar membranes. (accessed 22.11.2021).

- Rubinstein I., Zaltzman B. Electro-osmotic slip and electroconvective instability. J. Fluid Mech. 2007;579:173–226. Available at: <u>https://www.researchgate.net/publication/231948195\_Electro-osmotic\_slip\_and\_electroconvective\_instability</u>. DOI:10.1017/S0022112007004880. (accessed 22.11.2021).
- Uzdenova A.M., Kovalenko A.V., Urtenov M.K., Nikonenko V.V Effect of electroconvection during pulsed electric field electrodialysis. Numerical experiments. *Electrochemistry Communications*. 2015;51:1–5. Available at: https://www.researchgate.net/publication/272395440 Effect of electroconvection durin g\_pulsed\_electric\_field\_electrodialysis\_Numerical\_experiments. DOI:10.1016/j.elecom.2014.11.021. (accessed 22.11.2021).
- 13. Urtenov M.A.Kh., Gudza V.A., Chubyr N.O., Shkorkina I.V. Theoretical Analysis of the Stationary Transport of 1:1 Salt Ions in a Cross-Section of a Desalination Channel, Taking into Account the Non-Catalytic Dissociation/Recombination Reaction of Water Molecules / Membranes. 2020;10(11):342. Available at: https://www.researchgate.net/publication/346881766\_Theoretical\_Analysis\_of\_the\_Stationary\_Transport of 11\_Salt\_Ions\_in\_a\_Cross-Section\_of\_a\_Desalination\_Channel\_Taking\_into\_Account\_the\_Non-Catalytic\_DissociationRecombination\_Reaction\_of\_Water\_Molecule. DOI:10.3390/membranes10110342. (accessed 22.11.2021).
- Nikonenko V.V., Mareev S.A., Pismenskaya N.D., Uzdenova A.M., Kovalenko A.V., Urtenov M.H., Purseli J. The effect of electroconvection and its use for the intensification of mass transfer in electrodialysis (Review). *Elektrokhimiya = Electrochemistry*. 2017;53(10):1266–1289. Available at: <u>https://elibrary.ru/item.asp?id=30297556</u>. DOI: 10.7868/S0424857017100061. (accessed 22.11.2021). (In Russ.)
- 15. Urtenov M.Kh., Kovalenko A.V., Sukhinov A.I., Chubyr N.O., Gudza V.A. Model and numerical experiment for calculating the theoretical current-voltage characteristic in electro-membrane systems. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. Collection of materials of the XV International Scientific - Technical Conference. Don State Technical University.* 2019;012030. Available at: https://www.researchgate.net/publication/337743733\_Model\_and\_numerical\_experiment for calculating the theoretical current-voltage characteristic in electromembrane systems. DOI: 10.1088/1757-899X/680/1/012030. (accessed 22.11.2021).
- 16. Shkorkina I.V., Chubyr N.O., Gudza V.A., Urtenov M.A. Kh. Current-voltage characteristic of unsteady 1:1 salt ion transfer in the cross-section of the desalination channel. *Modelirovaniye, optimizatsiya i informatsionnyye tekhnologii = Modeling, optimization and information technology*. 2020;8(3). Available at: <a href="https://moit.vivt.ru/wp-content/uploads/2020/08/ShkorkinaSoavtors\_3\_20\_1.pdf">https://moit.vivt.ru/wp-content/uploads/2020/08/ShkorkinaSoavtors\_3\_20\_1.pdf</a>. DOI: 10.26102/2310-6018/2020.30.3.020. (accessed 22.11.2021). (In Russ.)

# ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ / INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Коваленко Анна Владимировна, д-р. техн. Anna Vladimirovna Kovalenko, Dr. Sci., наук, доцент, кафедра прикладной математики, associate professor, Applied Mathematics ФГБОУ BO «Кубанский государственный Department, университет», Краснодар, Федерация. e-mail: <u>savanna-05@mai</u>l.ru ORCID: 0000-0002-3991-0361

Гудза Инна Владимировна, аспирант, кафедра прикладной математики, ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет», Краснодар, Российская Федерация. e-mail: shkorkina inna@mail.ru

Чубырь Наталья Олеговна, канд. физ-мат. Natalia Olegovna Chubyr, Cand.Sci. (Phys.наук, доцент, кафедра прикладной математики, Math.), ФГБОУ BO «Кубанский государственный Mathematics технологический университет», Российская Федерация.

e-mail: <u>chubyr-natalja@mail.ru</u> ORCID: 0000-0003-3535-0361

Уртенов Махамет Хусеевич, д-р. физ-мат. наук, профессор, кафедра прикладной математики, ФГБОУ BO «Кубанский государственный университет», Краснодар, Российская Федерация.

e-mail: urtenovmax@mail.ru ORCID: 0000-0002-0252-6247

Хромых Анна Алексеевна, канд. физ-мат. наук, кафедра информатики и математики ФГКОУВО «Краснодарский университет Министерства внутренних дел Российской Федерации», Краснодар, Российская Федерация. e-mail: AnnXA@mail.ru

Federal State **Budgetary** Российская Educational Institution of Higher Education «Kuban State University», Krasnodar, Russian Federation

> Inna Vladimirovna Gudza, aspirant, Applied Mathematics Department, Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «Kuban State University», Krasnodar, Russian Federation

associate professor, Applied Department, Federal State Краснодар, Budgetary Educational Institution of Higher Education «Kuban State Technological University», Krasnodar, Russian Federation

> Makhamet Khuseevich. Urtenov, Dr. Sci. Professor, (Phys.–Math.), Applied Mathematics Department, Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «Kuban State University», Krasnodar, Russian Federation

> Anna Alekseyevna Khromykh, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Department of Informatics and Mathematics, Federal State Treasury Educational Institution of Higher Education «Krasnodar University of the Ministry of the Internal of Russia», Krasnodar, Russian Federation

Статья поступила в редакцию 29.11.2021; одобрена после рецензирования 19.12.2021; принята к публикации 29.12.2021.

The article was submitted 29.11.2021; approved after reviewing 19.12.2021; accepted for publication 29.12.2021.