Вычислительная математика

Computational mathematics

УДК 303.732.4+514.84+515.1+530.1

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ИОНОВ СОЛИ В ТРЕХМЕРНОМ КАНАЛЕ ОБЕССОЛИВАНИЯ ЭЛЕКТРОДИАЛИЗНОГО АППАРАТА

*А. В. КОВАЛЕНКО*¹⁾, *А. В. ОВСЯННИКОВА*²⁾

¹⁾Кубанский государственный университет, ул. Ставропольская, 149, 350040, г. Краснодар, Россия ²⁾Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, пр. Ленинградский, 49/2, 125167, г. Москва, Россия

Представлена и исследована новая 3D-модель переноса ионов соли 1:1 в канале обессоливания электродиализного аппарата. Впервые предложена трехмерная математическая модель переноса ионов соли в канале обессоливания с учетом электроконвекции на основе системы уравнений Нернста – Планка, Пуассона и Навье – Стокса с электрической силой и естественными краевыми условиями. Для решения краевой задачи использован метод конечных элементов в среде кросс-платформенного программного обеспечения для численного анализа *COMSOL Multiphysics* в сочетании с методом последовательных приближений, когда на текущем слое поочередно методом Ньютона решаются электрохимическая и гидродинамическая части задачи. В результате численного анализа впервые установлены фундаментальные закономерности переноса ионов соли в трехмерные спиралевидные новения и развития электроконвективных вихрей, в том числе обнаружены их новые трехмерные спиралевидные формы. Показано, что электроконвективные вихри существуют в виде кластеров, внутри которых могут происходить бифуркации вихрей. Таким образом, уточнено и развито современное упрощенное представление о строении электроконвективных вихрей.

Образец цитирования:

Коваленко АВ, Овсянникова АВ. Математическое моделирование переноса ионов соли в трехмерном канале обессоливания электродиализного аппарата. *Журнал Белорусского государственного университета. Математика. Информатика.* 2022;2:70–81.

https://doi.org/10.33581/2520-6508-2022-2-70-81

Авторы:

Анна Владимировна Коваленко – доктор технических наук, доцент; заведующий кафедрой анализа данных и искусственного интеллекта факультета компьютерных технологий и прикладной математики.

Анна Вячеславовна Овсянникова – кандидат педагогических наук, доцент; доцент Департамента математики.

For citation:

Kovalenko AV, Ovsyannikova AV. Mathematical modelling of salt ion transfer in the three-dimensional desalting channel of an electrodialysis apparatus. *Journal of the Belarusian State University. Mathematics and Informatics.* 2022;2:70–81. Russian. https://doi.org/10.33581/2520-6508-2022-2-70-81

Authors:

Anna V. Kovalenko, doctor of science (engineering), docent; head of the department of data analysis and artificial intelligence, faculty of computer technology and applied mathematics. savanna-05@mail.ru http://orcid.org/0000-0002-3991-3953 Anna V. Ovsyannikova, PhD (pedagogy), docent; associate professor at the Department of Mathematics. anna_ovsyannikov@bk.ru http://orcid.org/0000-0002-1716-3100 *Ключевые слова:* 3D-математическая модель переноса; 3D-модель; трехмерная модель; мембранные системы; ионообменная мембрана; математическое моделирование; электроконвективные вихри; прямое численное моделирование.

Благодарность. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта 20-58-12018 ННИО_а «Исследование влияния электроконвекции, диссоциации воды и геометрии спейсеров на электродиализное обессоливание в интенсивных токовых режимах».

MATHEMATICAL MODELLING OF SALT ION TRANSFER IN THE THREE-DIMENSIONAL DESALTING CHANNEL OF AN ELECTRODIALYSIS APPARATUS

A. V. KOVALENKO^a, A. V. OVSYANNIKOVA^b

^aKuban State University, 149 Stavropol'skaya Street, Krasnodar 350040, Russia ^bFinancial University under the Government of the Russian Federation, 49/2 Leningradskii Avenue, Moscow 125167, Russia Corresponding author: A. V. Kovalenko (savanna-05@mail.ru)

A new 3D model of 1:1 salt ion transfer in the desalting channel of an electrodialysis apparatus is presented and investigated in this paper. For the first time a three-dimensional mathematical model of salt ion transfer in the desalting channel taking into account the electroconvection based on the system of Nernst – Planck, Poisson and Navier – Stokes equations with the electric force and the natural boundary conditions is proposed. To solve the boundary value problem, the finite element method is used in the cross-platform numerical analysis software *COMSOL Multiphysics* in combination with the method of successive approximations, when the electrochemical and hydrodynamic parts of the problem are solved one by one on the current layer. In turn, the electrochemical and hydrodynamic parts of the problem are solved by Newton's method. As a result of numerical analysis, the fundamental regularities of salt ion transfer in a three-dimensional channel, the emergence and development of electroconvective vortices, including the discovery of new three-dimensional spiral forms of salt ions, are established for the first time. It is shown that electroconvective vortices exist in the form of clusters, within which vortex bifurcations can occur. Thus, the currently existing simplified view of the structure of electroconvective vortices is clarified and developed.

Keywords: 3D mathematical model of transport; 3D model; three-dimensional model; membrane systems; ion exchange membrane; mathematical modelling; electroconvective vortices; direct numerical simulation.

Acknowledgements. The research was performed with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research within the framework of scientific project 20-58-12018 NNIO_a «Study of influence of electroconvection, water dissociation and spacer geometry on electrodialysis desalination in intensive current regimes».

Введение

Пресная вода составляет только 3 % от общего объема воды на Земле, и если она будет постоянно загрязняться, то в ближайшем будущем водный кризис превратится в серьезную проблему.

Первостепенное значение приобретают вопросы водоочистки и водоподготовки, а также охраны водных ресурсов от загрязнения сточными водами. Из-за большого разнообразия сточных вод существуют различные способы их очистки: ультрафильтрационный, реагентный, электродиализный, флотационный, обратноосмотический и др. Одним из самых эффективных методов очистки является электродиализ – процесс изменения концентрации электролита в растворе под действием электрического тока. К дополнительным преимуществам электродиализа относятся низкое энергопотребление и экологическая безопасность процесса.

Используемые при электродиализе мембранные технологии позволяют производить эффективную, экологичную и малозатратную водоочистку, обогащение, разделение, обессоливание и концентрирование газовых и жидких смесей [1]. Данные технологии широко применяются при переработке пищевых продуктов (соки, вина, молочные продукты) и в других сферах промышленной деятельности человека, включая химическое, фармацевтическое и пищевое производство [2], а также в микрофлюидных насосах, биомедицинских лабораторных устройствах на чипе и аналитических датчиках. Все эти устройства используют внешние электрические поля для управления процессом переноса ионов в растворах водных электролитов. На практике в электромембранных системах применяется режим работы, при котором токи превышают предельный диффузионный ток. Это приводит к сопряженным эффектам концентрационной поляризации, например к появлению и развитию электроконвекции, что, в свою очередь, влияет на структуру диффузионного слоя мембраны и, как следствие, на эффективность работы электромембранных систем.

В статье [3] описано первое лабораторное исследование трехмерной электроконвекции у селективной поверхности. Авторами предложены три способа классификации 3D-электроконвекции в зависимости от чисел Рейнольдса, Рэлея и Шмидта: полигональные, поперечные и продольные 3D-вихри. Экспериментально установлено, что если число Рейнольдса увеличивается или число Рэлея уменьшается, то имеют место только продольные 3D-вихри. Поперечные 3D-вихри формируются между продольными 3D-вихрями, затем эти вихри трансформируются в полигональные 3D-вихри при более высоких значениях числа Рэлея или более низких значениях числа Рейнольдса. При этом число Шмидта определяет критическое электрическое число Рэлея для каждого вихря.

В работе [4] впервые проведено и проанализировано прямое численное моделирование трехмерной электрокинетической неустойчивости вблизи селективной поверхности – мембраны, электрода либо системы микро- или наноканалов. Для дискретизации авторами использован специальный метод конечных разностей, а для интегрирования по времени – полунеявная схема Рунге – Кутты. Продолжением и обобщением этой работы является статья [5], в которой обобщены численные результаты анализа линейной устойчивости, уточнены механизмы неустойчивости, проведен всесторонний нелинейный анализ на основе численного моделирования в двумерном и трехмерном случаях, исследованы двумерные и трехмерные структуры, возникающие в режиме термоэлектроконвекции, и изучено влияние этих структур на вольт-амперную характеристику.

Однако полноценной трехмерной математической модели переноса ионов соли 1:1 в канале обессоливания электродиализного аппарата, основанной только на самых общих фундаментальных законах сохранения материи, заряда и количества движения без всяких подгоночных параметров, до настоящего времени не было. В данной статье впервые предложена такая модель, приведено ее описание, представлены результаты численного анализа и сопоставления разработанной модели с двумерной моделью [6; 7].

Математическая модель

Трехмерная математическая модель переноса ионов соли 1:1 в канале обессоливания электродиализного аппарата была построена на основании самых общих фундаментальных законов сохранения материи, заряда и количества движения без химических реакций и любых других подгоночных параметров. Схема трехмерного канала обессоливания электродиализного аппарата с электродами (катодом и анодом) представлена на рис. 1.

Схема канала обессоливания. На рис. 1 при x = 0 расположена анионообменная мембрана, при x = H – катионообменная мембрана, при z = 0 находится вход в канал, при z = L – выход из канала. Таким образом, x – переменная по ширине канала, z – переменная по длине канала (раньше было y), тогда как y = 0 – это условный низ канала, на котором он лежит, а y = 2,5H – высота канала. Поэтому ионообменные мембраны канала расположены перпендикулярно плоскости стола, на котором стоит электродиализный аппарат. Исследуемый канал обессоливания обозначим через

$$\Omega = \{ (x, y, z) : 0 \le x \le 0, 4; 0 \le y \le 1; 0 \le z \le 2 \}.$$

Система уравнений. Приведенная ниже система уравнений для бинарного электролита (1)–(7) является полносвязной системой дифференциальных уравнений в частных производных с учетом пространственной силы, описывающей массоперенос с учетом электроконвекции в электромембранных системах [6–11]:

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

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

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

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

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

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

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

где j_i – поток ионов натрия и хлора; F – число Фарадея; R – универсальная газовая постоянная; $\vec{E} = -\nabla \phi$ – напряженность электрического поля; D_i – коэффициент диффузии натрия и хлора; C_i – концентрация ионов натрия и хлора; ϕ – потенциал; \vec{V} – скорость течения раствора в канале обессоливания электродиализного аппарата; ε_r – диэлектрическая проницаемость раствора электролита; \vec{I} – плотность тока, определяемая потоком ионов; ρ_0 – плотность раствора; ν – кинематическая вязкость; \vec{f} – электрическая сила; $\rho = F(z_1C_1 + z_2C_2)$ – плотность распределения пространственного заряда.



Puc. 1. Схема трехмерного канала обессоливания электродиализного аппарата (AOM – анионообменная мембрана; KOM – катионообменная мембрана)
 Fig. 1. Schematic diagram of the three-dimensional desalting channel of the electrodialysis unit (AOM – anion-exchange membrane; KOM – cation-exchange membrane)

Уравнение Нернста – Планка (1) и уравнение материального баланса (2) описывают поток ионов натрия ($i = 1 \leftrightarrow \text{Na}^+$) и хлора ($i = 2 \leftrightarrow \text{Cl}^-$), обусловленный электрическим полем, диффузией и конвекцией (зарядовое число катионов $z_1 = 1$, зарядовое число анионов $z_2 = -1$), уравнения (3), (4) – электрический потенциал и ток в электролите, а система уравнений Навье – Стокса (5), (6) для течения несжимаемой жидкости – поле скоростей, формируемое под воздействием электрических сил.

Краевые условия для системы (1)–(7) с учетом результатов исследований [6–11] будут сформулированы ниже.

Краевые условия. Как правило, электродиализные аппараты используют в двух разных режимах работы – потенциодинамическом (задается падение потенциала в цепи) и гальванодинамическом (задается плотность тока в цепи). Далее изучается потенциодинамический режим, причем поверхности ионообменных мембран считаются эквипотенциальными, т. е. предполагается выполнение условия

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

где α – скорость развертки скачка потенциала.

Наряду с условием (8) будем использовать следующие краевые условия. *Условие на анионообменной мембране (x = 0)*. Полагаем

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

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

$$\phi(t, 0, y, z) = \alpha t,$$

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

for area (x = H) Homorov

Условие на катионообменной мембране (x = H). Полагаем

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

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

$$\varphi(t, H, y, z) = 0,$$

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

Условие на входе в канал (z = 0). Считаем заданными концентрации ионов, так чтобы на входе выполнялось условие электронейтральности, т. е.

$$C_{i}(t, x, y, 0) = C_{i,0}, i = 1, 2,$$
$$-n\nabla\varphi(t, x, y, 0) = 0,$$
$$\vec{V}(0, x, y, z) = \left(0, 0, 6V_{0}\frac{x}{H}\left(1 - \frac{x}{H}\right)\right)$$

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:

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

Для скачка потенциала ставится условие

$$-n\nabla\varphi(t, x, y, L) = 0.$$

Начальные условия. Начальные условия возьмем согласованными с граничными условиями:

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

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

$$\vec{V}(0, x, y, z) = \left(0, 0, 6V_{0}\frac{x}{H}\left(1 - \frac{x}{H}\right)\right)$$

Результаты численного исследования

Параметры задачи. Численное решение получено методом конечных элементов. Был разработан специальный метод распараллеливания (расщепления), при котором на каждом слое по времени сначала решалась электрохимическая часть задачи, а затем гидродинамическая. Ниже приведены расчеты только для следующих значений параметров: 2,5H = 1 мм, L = 2 мм, $V_0 = 0,1$ мм/с, $C_0 = 0,01$ моль/м³, $\alpha = 0,005$ В/с. В результате прямого численного моделирования удалось получить трехмерную модель и сравнить результаты моделирования с двумерной моделью.

Рассмотрим образование и развитие электроконвективных вихрей в трехмерной модели в разные моменты времени (рис. 2). На рис. 2, *a*, где представлены линии тока жидкости в сечениях y = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9 мм для трехмерной модели в момент времени 108 с, спиралевидная вихревая структура четко прослеживается во всех сечениях в правом нижнем углу канала у катионообменной мембраны (x = 0,4 мм). Причем заметно, как эта спираль сворачивается в сечениях y = 0,3; 0,6; 0,9 мм и разворачивается в сечениях y = 0,4; 0,7 мм.



Рис. 2. Линии тока жидкости в сечениях *y* = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9 мм для трехмерной модели в момент времени 108 с (*a*), 108,25 с (*б*), 108,5 с (*в*) *Fig.* 2. Fluid current lines in the cross-sections *y* = 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5; 0.6; 0.7; 0.8; 0.9 mm for three-dimensional model at time 108 s (*a*), 108.25 s (*b*), 108.5 s (*c*)

Аналогичная ситуация со спиралевидными формами электроконвективных вихрей отмечена и у анионообменной мембраны (x = 0 мм) (см. рис. 2, a), однако здесь можно наблюдать еще одно интересное явление – образование слоистых электроконвективных вихревых конструкций, которые невозможно обнаружить в двумерных моделях (рис. 3). То есть образованный и хорошо развитый у анионообменной мембраны слой спиралевидных электроконвективных вихрей начинает отодвигаться в глубь канала новым «молодым» слоем маленьких спиралевидных электроконвективных вихрей. Причем между ними осуществляется довольно длительное взаимодействие, которое можно назвать борьбой (см. рис. 2, a - 6): малые спиралевидные электроконвективные вихри пытаются развиться, а уже существующий хорошо развитый слой спиралевидных электроконвективных вихрей пытается их подавить. Однако со временем он все же оттесняется в глубь канала и начинает взаимодействовать со спиралевидными электроконвективными вихрями, образованными у катионообменной мембраны (см. рис. 2, e).



Puc. 3. Линии тока жидкости для двумерной модели в момент времени 108; 120; 140; 160; 180; 200 с *Fig. 3.* Fluid current lines for two-dimensional model

at time 108; 120; 140; 160; 180; 200 s

На рис. 4 представлены трехмерные поверхности концентрации катионов C_1 в сечении y = 0,5 мм для трехмерной модели в разные моменты времени. Отметим явное сходство поведения концентраций для двумерного (рис. 5) и трехмерного (см. рис. 4) случаев.

На рис. 6 представлены вольт-амперные кривые для трехмерной и двумерной моделей, а также проведены касательные к вольт-амперным кривым для трехмерной модели.

Формула для расчета вольт-амперных характеристик

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

выведена и подробно описана в работе [12]. Для обезразмеривания плотности тока мы использовали предельный диффузионный ток по Левеку

$$I_{\rm lim}(t) \approx \frac{FDC_c}{H(T_1 - t_1)} \left[1,47 \left(\frac{H^2 V_0}{LD} \right)^{1/3} - 0,2 \right],$$

где *D* – коэффициент диффузии электролита; *T*₁ и *t*₁ – числа переноса ионов соли в мембране и в растворе [13; 14].



Рис. 4. Поверхности концентрации катионов C₁ в сечении y = 0,5 мм для трехмерной модели в момент времени 20 с (a), 40 с (б), 60 с (в), 80 с (г), 90 с (д), 100 с (е), 106,5 с (ж), 107,5 с (з), 108,5 с (и) *Fig.* 4. Surfaces of C₁ cation concentration in the cross-section y = 0.5 mm for three-dimensional model at time 20 s (a), 40 s (b), 60 s (c), 80 s (d), 90 s (e), 100 s (f), 106.5 s (g), 107.5 s (h), 108.5 s (i)





Puc. 5. Поверхности концентрации катионов *C*₁ для двумерной модели в момент времени 40 с (*a*), 108 с (*б*), 130 с (*в*), 140 с (*г*), 160 с (*∂*), 170 с (*e*), 180 с (*ж*), 190 с (*з*), 200 с (*u*) *Fig.* 5. Surfaces of *C*₁ cation concentration for two-dimensional model at time 40 s (*a*), 108 s (*b*), 130 s (*c*), 140 s (*d*), 160 s (*e*), 170 s (*f*), 180 s (*g*), 190 s (*h*), 200 s (*i*)



Puc. 6. Вольт-амперные кривые для трехмерной и двумерной моделей *Fig. 6.* Current-voltage curves for three-dimensional and two-dimensional models

Отметим, что плато вольт-амперных кривых трехмерных моделей является наклонным и полностью соответствует вольт-амперным характеристикам реальных электродиализных аппаратов [15]. Кроме того, необходимо отметить, что образование и развитие электроконвективных вихрей в трехмерных моделях происходит намного раньше, чем в двумерных. Это объясняется трехмерными спиралевидными формами электроконвективных вихрей (рис. 7) [16], которые невозможно обнаружить в двумерных моделях [6; 7; 15; 17; 18], поскольку в них мы наблюдаем исключительно срез, или сечение, или проекцию на одну плоскость трехмерных электроконвективных вихрей (см. рис. 3).



Puc. 7. Трехмерные спиралевидные формы электроконвективных вихрей и линии тока жидкости в сечении y = 0,2 мм, полученные с помощью трехмерной модели в момент времени 108,5 с *Fig.* 7. Three-dimensional spiral shapes of electroconvective vortices and fluid current lines in the cross-section y = 0.2 mm, obtained with three-dimensional model at time 108.5 s

Еще одной причиной, обусловливающей более быстрое начало электроконвекции, является взаимодействие расположенных рядом друг с другом вдоль мембран электроконвективных вихрей.

Ранее предполагалось, что за счет градиента концентрации электроконвективные вихри появляются ниже по течению и развиваются вверх против течения. Причем сначала они возникают у катионообменной, затем у анионообменной мембраны, а после начинают взаимодействовать, что непосредственно отражается на вольт-амперной характеристике для двумерных моделей (см. рис. 6).

Заключение

В работе предложена и численно проанализирована новая трехмерная математическая модель переноса ионов соли в канале обессоливания с учетом электроконвекции на основе системы уравнений Нернста – Планка, Пуассона и Навье – Стокса с электрической силой и естественными краевыми условиями.

Результаты численных экспериментов показывают, что возникновение и развитие электроконвективных вихрей в трехмерном канале обессоливания происходит намного раньше, чем в двумерном, причем они имеют форму комплексов, содержащих внутри спиралевидные вихри. Взаимодействие этих вихрей, образовавшихся у катионообменной и анионообменной мембран, в трехмерном случае начинается раньше, чем в двумерном, что приводит к более быстрому развитию других электроконвективных структур (см. рис. 7).

Библиографические ссылки

 Carolin CF, Kumar PS, Saravanan A, Joshiba GJ, Naushad M. Efficient techniques for the removal of toxic heavy metals from aquatic environment: a review. *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 2017;5(3):2782–2799. DOI: 10.1016/j.jece.2017.05.029.
 Druzgalski C, Mani A. Statistical analysis of electroconvection near an ion-selective membrane in the highly chaotic regime.

Physical Review Fluids. 2016;1(7):073601. DOI: 10.1103/PhysRevFluids.1.073601.
3. Kang S, Kwak R. Pattern formation of three-dimensional electroconvection on a charge selective surface. Physical Review

3. Kang S, Kwak R. Pattern formation of three-dimensional electroconvection on a charge selective surface. *Physical Review Letters*. 2020;124(15):154502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.154502.

4. Demekhin EA, Nikitin NV, Shelistov VS. Three-dimensional coherent structures of electrokinetic instability. *Physical Review E*. 2014;90(1):013031. DOI: 10.1103/PhysRevE.90.013031.

5. Kalaydin EN, Ganchenko NYu, Ganchenko GS, Nikitin NV, Demekhin EA. Thermoelectrokinetic instability and salt superconcentration near permselective electric membranes. *Physical Review Fluids*. 2017;2(11):114201. DOI: 10.1103/PhysRevFluids.2.114201.

6. Nikonenko VV, Kovalenko AV, Urtenov MKh, Pismenskaya ND, Han J, Sistat Ph, et al. Desalination at overlimiting currents: state-of-the-art and perspectives. *Desalination*. 2014;342:85–106. DOI: 10.1016/j.desal.2014.01.008.

7. Urtenov MKh, Uzdenova AM, Kovalenko AV, Nikonenko VV, Pismenskaya ND, Vasil'eva VI, et al. Basic mathematical model of overlimiting transfer enhanced by electroconvection in flow-through electrodialysis membrane cells. *Journal of Membrane Science*. 2013;447:190–202. DOI: 10.1016/j.memsci.2013.07.033.

8. Узденова АМ, Коваленко АВ, Уртенов МХ. *Математические модели электроконвекции в электромембранных системах.* Карачаевск: Издательство Карачаево-Черкесского государственного университета; 2011. 156 с.

9. Pismensky AV, Urtenov MKh, Nikonenko VV, Sistat Ph, Pismenskaya ND, Kovalenko AV. Model and experimental studies of gravitational convection in an electromembrane cell. *Russian Journal of Electrochemistry*. 2012;48(7):756–766. DOI: 10.1134/S1023193512070075.

10. Коваленко AB, Уртенов МХ, Чубырь HO, Узденова AM, Гудза BA. Математическое моделирование влияния основных температурных эффектов на стационарный перенос ионов соли в диффузионном слое. Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2018;15(3):78–86. DOI: 10.31429/vestnik-15-3-78-86.

11. Чубырь НО, Коваленко АВ, Уртенов МХ. Двумерные математические модели переноса бинарного электролита в мембранных системах (численный и асимптотический анализ). Краснодар: Кубанский государственный технологический университет; 2012. 131 с.

12. Коваленко АВ, Гудза ИВ, Чубырь НО, Уртенов МХ, Хромых АА. Формула для расчета теоретической вольт-амперной характеристики 3D-канала обессоливания ЭДА. *Моделирование, оптимизация и информационные технологии.* 2021;9(4):1–19. DOI: 10.26102/2310-6018/2021.35.4.026.

13. Коваленко АВ, Гудза ИВ, Письменский АВ, Чубырь НО, Уртенов МХ. Теоретический анализ вольт-амперной характеристики нестационарного переноса 1:1 электролита в мембранных системах с учетом электроконвекции и реакции диссоциации/рекомбинации воды. *Моделирование, оптимизация и информационные технологии.* 2021;9(3):1–16. DOI: 10.26102/2310-6018/2021.34.3.011.

14. Urtenov MKh, Kovalenko AV, Sukhinov AI, Chubyr NO, Gudza VA. Model and numerical experiment for calculating the theoretical current-voltage characteristic in electromembrane systems. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2019; 680:012030. DOI: 10.1088/1757-899X/680/1/012030.

15. Никоненко ВВ, Мареев СА, Письменская НД, Узденова АМ, Коваленко АВ, Уртенов МХ и др. Эффект электроконвекции и его использование для интенсификации массопереноса в электродиализе (обзор). Электрохимия. 2017;53(10):1266–1289. DOI: 10.7868/S0424857017100061.

16. Коваленко АВ, Узденова АМ, Уртенов МХ, Никоненко ВВ. Математическое моделирование физико-химических процессов в среде COMSOL Multiphysics 5.2. Санкт-Петербург: Лань; 2022. 228 с.

17. Казаковцева ЕВ, Коваленко АВ, Евдоченко ЕН. 3D-математическая модель переноса ионов 1:1 соли. В: Кубанский государственный технологический университет. *Research. Engineering. Extreme. 2021. Материалы Международной научно-практической конференции; 3 июня 2021 г.; Краснодар, Россия.* Краснодар: Издательский дом – Юг; 2021. с. 70–78.

18. Kovalenko AV, Wessling M, Nikonenko VV, Mareev SA, Moroz IA, Evdochenko E, et al. Space-charge breakdown phenomenon and spatio-temporal ion concentration and fluid flow patterns in overlimiting current electrodialysis. *Journal of Membrane Science*. 2021;636:119583. DOI: 10.1016/j.memsci.2021.119583.

References

 Carolin CF, Kumar PS, Saravanan A, Joshiba GJ, Naushad M. Efficient techniques for the removal of toxic heavy metals from aquatic environment: a review. *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 2017;5(3):2782–2799. DOI: 10.1016/j.jece.2017.05.029.
 Druzgalski C, Mani A. Statistical analysis of electroconvection near an ion-selective membrane in the highly chaotic regime.

Physical Review Fluids. 2016;1(7):073601. DOI: 10.1103/PhysRevFluids.1.073601.

3. Kang S, Kwak R. Pattern formation of three-dimensional electroconvection on a charge selective surface. *Physical Review Letters*. 2020;124(15):154502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.154502.

4. Demekhin EA, Nikitin NV, Shelistov VS. Three-dimensional coherent structures of electrokinetic instability. *Physical Review E*. 2014;90(1):013031. DOI: 10.1103/PhysRevE.90.013031.

5. Kalaydin EN, Ganchenko NYu, Ganchenko GS, Nikitin NV, Demekhin EA. Thermoelectrokinetic instability and salt superconcentration near permselective electric membranes. *Physical Review Fluids*. 2017;2(11):114201. DOI: 10.1103/PhysRevFluids.2.114201.

6. Nikonenko VV, Kovalenko AV, Urtenov MKh, Pismenskaya ND, Han J, Sistat Ph, et al. Desalination at overlimiting currents: state-of-the-art and perspectives. *Desalination*. 2014;342:85–106. DOI: 10.1016/j.desal.2014.01.008.

7. Urtenov MKh, Uzdenova AM, Kovalenko AV, Nikonenko VV, Pismenskaya ND, Vasil'eva VI, et al. Basic mathematical model of overlimiting transfer enhanced by electroconvection in flow-through electrodialysis membrane cells. *Journal of Membrane Science*. 2013;447:190–202. DOI: 10.1016/j.memsci.2013.07.033.

8. Uzdenova AM, Kovalenko AV, Urtenov MKh. *Matematicheskie modeli elektrokonvektsii v elektromembrannykh sistemakh* [Mathematical models of electroconvection in electromembrane systems]. Karachaevsk: Publishing House of the Karachay-Cherkess State University; 2011. 156 p. Russian.

9. Pismensky AV, Urtenov MKh, Nikonenko VV, Sistat Ph, Pismenskaya ND, Kovalenko AV. Model and experimental studies of gravitational convection in an electromembrane cell. *Russian Journal of Electrochemistry*. 2012;48(7):756–766. DOI: 10.1134/S1023193512070075.

10. Kovalenko AV, Urtenov MKh, Chubyr NO, Uzdenova AM, Gudza VA. Mathematical modeling of the influence of the main temperature effects in stationary transport of ions of salt in the diffusion. *Ecological Bulletin of Research Centers of the Black Sea Economic Cooperation*. 2018;15(3):78–86. Russian. DOI: 10.31429/vestnik-15-3-78-86.

11. Chubyr NO, Kovalenko AV, Urtenov MKh. Dvumernye matematicheskie modeli perenosa binarnogo elektrolita v membrannykh sistemakh (chislennyi i asimptoticheskii analiz) [Two-dimensional mathematical models of binary electrolyte transfer in membrane systems (numerical and asymptotic analysis)]. Krasnodar: Kuban State Technological University; 2012. 131 p. Russian.

12. Kovalenko AV, Gudza IV, Chubyr NO, Urtenov MKh, Khromykh AA. Formula for calculating the theoretical current-voltage characteristic of the 3D desalination channel EDA. *Modeling, Optimization and Information Technology.* 2021;9(4):1–19. Russian. DOI: 10.26102/2310-6018/2021.35.4.026.

13. Kovalenko AV, Gudza IV, Pismenskiy AV, Chubyr NO, Urtenov MKh. Theoretical analysis of the current-voltage characteristic of the unsteady 1:1 electrolyte transfer in membrane systems in terms of electroconvection and the dissociation/recombination reaction of water. *Modeling, Optimization and Information Technology*. 2021;9(3):1–16. Russian. DOI: 10.26102/2310-6018/2021.34.3.011.

14. Urtenov MKh, Kovalenko AV, Sukhinov AI, Chubyr NO, Gudza VA. Model and numerical experiment for calculating the theoretical current-voltage characteristic in electromembrane systems. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2019; 680:012030. DOI: 10.1088/1757-899X/680/1/012030.

15. Nikonenko VV, Mareev SA, Pismenskaya ND, Uzdenova AM, Kovalenko AV, Urtenov MKh, et al. [Effect of electroconvection and its use for the intensification of mass transfer in electrodialysis (review)]. *Elektrokhimiya*. 2017;53(10):1266–1289. Russian. DOI: 10.7868/S0424857017100061.

16. Kovalenko AV, Uzdenova AM, Urtenov MKh, Nikonenko VV. *Matematicheskoe modelirovanie fiziko-khimicheskikh protsessov* v srede COMSOL Multiphysics 5.2 [Mathematical modelling of physical and chemical processes in the COMSOL Multiphysics 5.2 environment]. Saint Petersburg: Lan'; 2022. 228 p. Russian.

17. Kazakovtseva EV, Kovalenko AV, Evdochenko EN. [3D mathematical model of 1:1 salt ion transfer]. In: Kuban State Technological University. *Research. Engineering. Extreme. 2021. Materialy Mezhdunarodnoi nauchno-prakticheskoi konferentsii; 3 iyunya* 2021 g.; Krasnodar, Rossiya [Research. Engineering. Extreme. 2021. Proceedings of the International scientific and practical conference; 2021 June 3; Krasnodar, Russia]. Krasnodar: Publishing House – South; 2021. p. 70–78. Russian.

18. Kovalenko AV, Wessling M, Nikonenko VV, Mareev SA, Moroz IA, Evdochenko E, et al. Space-charge breakdown phenomenon and spatio-temporal ion concentration and fluid flow patterns in overlimiting current electrodialysis. *Journal of Membrane Science*. 2021;636:119583. DOI: 10.1016/j.memsci.2021.119583.

> Получена 24.01.2022 / исправлена 15.06.2022 / принята 15.06.2022. Received 24.01.2022 / revised 15.06.2022 / accepted 15.06.2022.