

**НОВЫЙ ПОДХОД К РАЗРАБОТКЕ МЕТОДОЛОГИИ
ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЦИКЛИЧЕСКИХ
АДСОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ И УСТАНОВОК РАЗДЕЛЕНИЯ
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ**

С. И. Дворецкий¹, Д. С. Дворецкий¹, И. А. Авцинов², Е. И. Акулинин¹

*Кафедра «Технологии и оборудование пищевых и химических производств» (1),
bio-topt@yandex.ru; ФГБОУ ВО «ТГТУ», Тамбов, Россия;
кафедра «Автоматизированные системы управления процессами
и производствами» (2), ФГБОУ ВО «Воронежский государственный
университет инженерных технологий», Воронеж, Россия*

Ключевые слова: аппаратурно-технологическое оформление; двухэтапная задача принятия проектно-конструкторских решений; задача динамики сорбции; изотерма; интегрированное проектирование; исходные данные для проектирования; кинетика; математическое моделирование; неопределенные факторы; обеспечение адекватности математической модели; программно-аппаратный комплекс; разделение многокомпонентных газовых смесей; система автоматического управления; стационарный периодический процесс; технологический процесс; тепло- и массообменные процессы; циклический адсорбционный процесс.

Аннотация: Предложен новый подход к разработке методологии интегрированного проектирования циклических адсорбционных процессов и установок для разделения многокомпонентных газовых смесей при наличии неопределенности части исходных данных для проектирования. Описан состав проблемно-ориентированного комплекса, предназначенного для проведения предпроектных научных исследований и обоснования принятия проектно-конструкторских решений при аппаратурно-технологическом оформлении циклических адсорбционных процессов и установок (для разделения многокомпонентных газовых смесей и концентрирования широко применяемых в технике и социальной сфере газов (кислорода, водорода, азота и др.)). Изложены общая постановка задачи динамики циклических процессов сорбции и методы ее решения, обобщенная процедура построения математической модели динамики сорбции в циклических адсорбционных процессах разделения газовых смесей. Приведена процедура подготовки в составе проблемно-ориентированного аппаратно-программного комплекса исходных данных для проектирования и обоснования проектно-конструкторских решений при аппаратурно-технологическом оформлении циклических процессов адсорбционного разделения многокомпонентных газовых смесей.

Обозначения

A, X – типы цеолитовых адсорбентов;

КБА – короткоцикловая безнагревная адсорбция;

ММ – математическая модель;

САУ – система автоматического управления;

ХТС – химико-технологическая система;
 $a_k(z)$ – текущая величина адсорбции, распределенная по высоте z слоя адсорбента, моль/м³;
 a_k^* – величина адсорбции k -го компонента, равновесная текущей концентрации $c_k(z)$ адсорбтива на внешней поверхности гранул адсорбента, моль/м³;
 b – вектор параметров (коэффициентов) математической модели;
 $c_k(z)$ – мольная концентрация k -го компонента адсорбтива в газовой фазе, распределенная по высоте z слоя адсорбента, моль/м³;
 c_k^* – концентрация адсорбтива на поверхности раздела фаз, равновесная текущей величине адсорбции $a_k(x)$, моль/м³;
 c_p – удельная теплоемкость, Дж/(моль·К);
 d – диаметр, м;
 D_g – эффективный коэффициент продольного перемешивания в газовой фазе, м²/с;
 e – точность достижения стационарного периодического режима в слое адсорбента;
 h_k – теплота сорбции k -го компонента адсорбтива, Дж/моль;
 i – номер цикла «адсорбция – десорбция»;
 L – высота слоя адсорбента, м;
 M – молярная масса, кг/кмоль;
 N – число экспериментальных данных;
 P – давление газовой смеси в слое адсорбента, Па;
 $P_{\text{дов}}$ – доверительная вероятность;
 R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К);
 $S_{\text{уд}}$ – удельная поверхность гранул адсорбента, м²/м³;
 $t_{\text{ст}}$ – время выхода установки на стационарный периодический режим функционирования, с;
 T – температура, К;
 v_g – скорость газовой фазы, м/с;

z – координата по высоте слоя адсорбента, м;
 x – входные переменные состояния объекта исследования;
 y – выходные переменные состояния объекта исследования;
 α_T – коэффициент теплоотдачи от поверхности гранул адсорбента к потоку газовой смеси, отнесенный к единице площади поверхности раздела фаз, Вт/(м²·К);
 β_{mt} – коэффициент внешней массоотдачи, с⁻¹;
 β_{dif} – коэффициент внутренней диффузии адсорбтива в пористой среде адсорбента, с⁻¹;
 δ – средняя квадратическая погрешность;
 ε – порозность слоя адсорбента, м³/м³;
 λ – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К);
 μ_g – коэффициент динамической вязкости газовой смеси, Па·с;
 ρ – плотность, кг/м³;
 ρ_g – мольная плотность газовой смеси, моль/м³;
 ζ – коэффициент сферичности гранул адсорбента;
 τ – время, с;

Индексы

* – оптимальное значение;
I, II – индексы наборов экспериментальных данных;
 L_2, E – пространства переменных состояний;
a – адсорбент;
гр – гранула;
ж – желаемое (значение);
мм – математическая модель;
э – эксперимент;
 k – номер компонент газовой смеси;
ads – адсорбция;
des – десорбция;
g – газовая фаза.

Введение

В настоящее время важное значение приобретают теоретические и прикладные научные исследования, связанные с повышением качества проектирования (в условиях неопределенности исходной информации) химико-технологических систем (ХТС) и, в частности, циклических адсорбционных процессов, аппаратов и установок разделения многокомпонентных газовых смесей (атмосферного воздуха, синтез-газа и др.) и концентрирования продуктовых газов (кислорода, водорода, азота и др.) по способу короткоциклового безнагревной адсорбции (КБА) с высоким уровнем автоматизации, энерго- и ресурсосбережения, экономичности и экологической чистоты [1 – 3].

Проблема повышения качества совместного (интегрированного) проектирования химико-технологических процессов, аппаратов, технологических схем и систем автоматического управления режимами их функционирования обсуждалась в научной литературе и частично решалась на протяжении многих десятилетий в работах отечественных [4 – 10] и зарубежных [11 – 16] ученых.

Анализ проблемных вопросов, представленных в данных работах, показывает, что обеспечение работоспособности и эффективности функционирования проектируемой ХТС требует новых подходов к разработке методологии интегрированного проектирования технологии, аппаратурно-технологического оформления технологического процесса и системы управления режимами его функционирования, обеспечивающих работоспособность (гибкость) и оптимальность (экономичность) функционирования проектируемой ХТС (после ввода ее в эксплуатацию) независимо от имеющейся неопределенности части исходных данных при ее проектировании.

Методология интегрированного проектирования трактуется как учение об организации совместной деятельности всех разработчиков ХТС (в частности, установок КБА нового поколения для концентрирования особо ценных газов (кислорода, водорода, азота и др.)): ученых-исследователей (на стадии выполнения предпроектных научно-исследовательских работ); инженеров-проектировщиков (собственно на стадии технического проектирования и принятия проектно-конструкторских решений): технологов, механиков, специалистов по автоматизации, экономистов и инженеров других специальностей; монтажников и специалистов-наладчиков (на стадии монтажа технологического оборудования и ввода в эксплуатацию производства) [3].

В современных условиях методология интегрированного проектирования напрямую связана с разработкой проблемно-ориентированного аппаратно-программного комплекса, предназначенного для: 1) оперативного и детального изучения свойств и режимов функционирования проектируемых адсорбционных газоразделительных систем (методами физического и математического моделирования) с целью получения большей части надежных исходных данных для проектирования циклических адсорбционных процессов, аппаратов и систем управления ими [3, 17 – 21]; 2) оптимизации технологических режимов функционирования установок КБА с учетом неопределенности части исходных данных для проектирования (как правило, оставшихся после проведения предпроектных научных исследований) [5 – 10, 22 – 25]; 3) масштабирования результатов предпроектных научных исследований и принятия проектно-конструкторских решений по аппаратурно-технологическому оформлению циклических адсорбционных процессов (при разделении многокомпонентных газовых смесей), формирующих предпосылки обеспечения высокого уровня автоматизации и управления в проектируемом производстве [17, 22, 26].

Анализ традиционных подходов к проектированию технологических аппаратов показывает, что стремление добиться максимальной эффективности их функционирования в статических режимах с точки зрения экономичности, энерго- и ресурсосбережения, как правило, приводит к значительному ухудшению их динамических характеристик. Это обстоятельство неизбежно влечет за собой усложнение, а следовательно, и удорожание проектируемых систем автоматического управления (САУ) технологическими аппаратами. В то же время для улучшения динамических свойств технологических аппаратов (в нашем примере – адсорберов установки КБА) и снижения общей стоимости проекта автоматизированного комплекса «установка КБА – САУ» часто оказывается достаточным небольших изменений в аппаратурно-технологическом оформлении технологического процесса, конструктивных параметров адсорберов с составным слоем пористых адсорбентов и режимных переменных их функционирования.

Оптимальные конструктивные параметры аппаратурно-технологического оформления циклических адсорбционных процессов и установки КБА, режимов их функционирования, структура и настроечные параметры САУ должны выбираться из условия работоспособности (гибкости) и оптимальности функционирования (экономичности) проектируемого комплекса «установка КБА – САУ» с точки зрения энерго- и ресурсосбережения и качества концентрируемых газов (кислорода, водорода, азота и др.) [3, 22, 26]. При этом особое значение приобретают вопросы масштабирования полученных экспериментальных данных на стадии предпроектных научных исследований, сокращения времени подготовки, повышения качества и надежности исходных данных на проектирование, обоснованности принятия проектно-конструкторских решений при аппаратурно-технологическом оформлении циклических адсорбционных процессов и создании промышленных образцов высокоавтоматизированных установок КБА для концентрирования особо ценных газов (кислорода, водорода, азота и др.).

Главным звеном, определяющим проблему настоящей статьи, является новый подход к разработке методологии интегрированного проектирования ХТС на примере циклических процессов и установок разделения многокомпонентных газовых смесей (атмосферного воздуха, синтез-газа) и концентрирования продуктовых газов (кислорода, водорода, азота и др.), формирующих предпосылки эффективного управления и автоматизации. При этом проектирование осуществляется в условиях неопределенности части исходных данных для проектирования (оставшейся после проведения предпроектных научных исследований) на основе создания и развития проблемно-ориентированного аппаратно-программного комплекса и современных цифровых технологий, позволяющих повысить обоснованность принимаемых проектно-конструкторских решений при интегрированном проектировании циклических процессов и установок разделения многокомпонентных газовых смесей и концентрирования особо ценных газов [26].

Общая постановка задачи динамики циклических процессов сорбции и методы ее решения

При феноменологическом подходе к постановке и решению задачи динамики циклических процессов сорбции исходят из основного допущения, что процесс динамики сорбции является непрерывным; при этом пористая среда адсорбента рассматривается как некоторая проницаемая для газа фаза, в которой непрерывно и равномерно распределена «сорбционная активность» адсорбента. Задача динамики сорбции заключается в том, чтобы, зная исходные концентрации компонентов адсорбтива в газовой смеси, характер взаимодействия между сорбентом и компонентами адсорбтива в газовой смеси, а также другие условия, влияющие на движение и распределение веществ, найти функцию пространственного распределения веществ (компонентов адсорбтива и адсорбата) в газовой фазе и сорбирующей среде для любого момента времени [27, 28].

Для отыскания искомых функций распределения веществ в газовой фазе и пористой среде адсорбента составляют систему дифференциальных уравнений, количественно описывающих динамику циклического процесса сорбции при разделении газовых смесей. Как будет видно дальше, система дифференциальных уравнений, описывающая динамику циклического процесса «адсорбция – десорбция», в самом общем виде включает дифференциальные уравнения в частных производных первого и второго порядков; для решения таких систем уравнений при заданных краевых условиях применяют методы математической физики [29].

Пусть в вертикальном слое гранулированного адсорбента в аксиальном направлении z ($0 \leq z \leq L$) движется поток газовой смеси и осуществляется циклический процесс «адсорбция – десорбция» компонентов адсорбтива атмосферного

воздуха (кислорода O_2 , азота N_2 , аргона Ar) или синтез-газа (водорода H_2 , диоксида углерода CO_2 , оксида углерода CO). При этом циклический процесс «адсорбция – десорбция» включает целый ряд совместно и одновременно протекающих физических процессов: 1) диффузию компонентов адсорбтива (O_2 , N_2 , Ar или H_2 , CO_2 , CO) в потоке газовой смеси; 2) массо- и теплообмен компонентов адсорбтива (O_2 , N_2 , Ar или H_2 , CO_2 , CO) между газовой фазой и пористой средой адсорбента; 3) адсорбцию компонентов адсорбтива (O_2 , N_2 , Ar или H_2 , CO_2 , CO) на поверхности и в микропорах гранул цеолитового адсорбента с выделением тепла (на стадии адсорбции) и десорбцию компонентов адсорбата (O_2 , N_2 , Ar или H_2 , CO_2 , CO) из микропор и с поверхности гранул адсорбента с поглощением тепла на стадии десорбции (при регенерации адсорбента).

Анализ известных изотерм адсорбции чистых компонентов и многокомпонентной газовой смеси различного состава на адсорбентах различных типов и форм (цеолитах, активных углях, углеродных молекулярных ситах и т.д.) показал, что для описания условий равновесия при разделении газовых смесей и концентрировании продуктовых газов наиболее часто используются уравнения Ленгмюра, Ленгмюра–Фрейндлиха и их модификации [1, 2, 22, 30, 31] и существенно реже – уравнения Дубинина–Астахова, Дубинина–Радушкевича и их модифицированные формы (уравнения Кароог, Yang, Shlunder) [32 – 34]. Недооценку значимости уравнения Дубинина–Астахова можно объяснить недостаточно широкой известностью разработанной академиком М. М. Дубининым теории объемного заполнения микропор для описания условий равновесия многокомпонентных систем «адсорбтив – адсорбент» с помощью уравнений, связывающих характеристическую свободную энергию адсорбции с текущими значениями температуры и равновесного давления газовой смеси.

Уравнения покомпонентного ($k = 1 - O_2$ или H_2 , $2 - N_2$ или CO_2 , $3 - Ar$ или CO) материального баланса в потоке газовой фазы по высоте z слоя адсорбента ($0 < z < L$) имеют следующий вид [1, 27]:

$$\frac{\partial c_k(z, \tau)}{\partial \tau} + \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\partial a_k(z, \tau)}{\partial z} + \frac{\partial(v_g a_k(z, \tau))}{\partial z} = - \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{g,k} \frac{\partial c_k(z, \tau)}{\partial z} \right), \quad (1)$$

где для $c_k(z)$ и $a_k(z) - 0 < z < L$; τ – время работы слоя адсорбента (на стадии адсорбции $0 \leq \tau \leq (\tau_{ads} = \tau_{ц}/2)$, на стадии десорбции $\tau_{ads} \leq \tau \leq (\tau_{des} = \tau_{ц})$, где τ_{ads} , τ_{des} , $\tau_{ц}$ – продолжительности стадий адсорбции, десорбции и цикла «адсорбция – десорбция», соответственно, с.

Кинетика циклических процессов «адсорбции – десорбции» компонентов адсорбтива, содержащихся в разделяемых многокомпонентных газовых смесях, в настоящее время изучена недостаточно полно. Для адекватного описания кинетики циклического процесса «адсорбции – десорбции» k -го компонента адсорбтива газовой смеси необходимы: а) проведение специальных кинетических экспериментов с получением экспериментальных кинетических кривых; б) обоснование области массопереноса с преобладающим сопротивлением этому процессу (внешнедиффузионной, внутридиффузионной, смешанно-диффузионной); в) определение коэффициентов массопереноса (массоотдачи и коэффициента диффузии в пористой среде адсорбента) компонентов адсорбтива в слое гранулированного адсорбента. Определение кинетических коэффициентов массопереноса – это, как правило, некорректно поставленные и достаточно сложные для решения задачи [35 – 37].

Кинетика сорбции компонентов адсорбтива (O_2 , N_2 , Ar или H_2 , CO_2 , CO) в элементарном слое адсорбента описывается кинетическими уравнениями вида [32 – 34, 38]:

$$\frac{da_k}{d\tau} = \beta_{mt,k}(c_k - c_k^*), \quad k = 1, 2, 3; \quad (2')$$

$$\frac{da_k}{d\tau} = \beta_{dif,k}(a_k^*)(a_k^* - a_k), \quad k = 1, 2, 3. \quad (2'')$$

Для расчета равновесных значений c_k^* , a_k^* при разделении атмосферного воздуха и синтез-газа (обогащения воздуха кислородом, концентрирования водорода) будем использовать уравнения изотермы сорбции Дубинина–Астахова [32, 33] и Ленгмюра–Фрейндлиха [1, 39].

Уравнение, описывающее распространение тепла в потоке газовой смеси по высоте слоя адсорбента и в слое адсорбента можно записать в следующем виде [1, 22, 39]:

$$c_{pg}\rho_g \frac{\partial T_g(z, \tau)}{\partial \tau} + c_{pg}\rho_g v_g \frac{\partial T_g(z, \tau)}{\partial z} - \frac{\alpha_T}{\varepsilon} [T_a(z, \tau) - T_g(z, \tau)] = \lambda_g \frac{\partial^2 T_g}{\partial z^2}, \quad (3)$$

где $S_{уд} = (1 - \varepsilon)(3/r_{гр})$; $r_{гр} = d_{гр}/2$ – эквивалентный радиус гранулы адсорбента, м.

$$c_{pa}\rho_a \frac{\partial T_a(z, \tau)}{\partial \tau} + \alpha_T S_{уд} [T_a(z, \tau) - T_g(z, \tau)] - \sum_k h_k \frac{\partial a_k(z, \tau)}{\partial \tau} = \lambda_a \frac{\partial^2 T_a(z, \tau)}{\partial z^2}. \quad (4)$$

Уравнения Эргуна и неразрывности потока, связывающие изменение давления и скорости газовой смеси по высоте адсорбента, записываются в следующем виде [27, 30, 40]:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = - \left(\frac{150(1 - \varepsilon)^2}{(d_{гр}\zeta)^2 \varepsilon} \mu_g v_g + 1,75 M_g \rho_g \frac{(1 - \varepsilon)}{d_{гр}\zeta \varepsilon^3} v_g^2 \right); \quad (5)$$

$$\sum_k c_k \frac{\partial v_g(z, \tau)}{\partial z} - v_g \left(\frac{\partial \sum_k c_k}{\partial z} \right) = 0, \quad (6)$$

где $P(z, \tau)$ – давление газовой смеси, вычисляемое из уравнения состояния идеального газа $P(z, \tau) = RT_g(z, \tau) \sum_k c_k(z, \tau)$.

Математическая модель (1) – (6) описывает динамику сорбции при разделении газовой смеси по способу КБА и представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений в обыкновенных и частных производных, а также алгебраических уравнений, и дополняется соответствующими (здесь не приводятся) краевыми условиями для стадий адсорбции и десорбции [22, 26]. Для численного решения уравнений модели (1) – (6) с соответствующими краевыми условиями разработан высокоэффективный и экономичный метод прямых в программной среде MATLAB с использованием ограничителя потока Ван Лиры (van Leer flux limiter) для предотвращения эффекта ложных осцилляций [31].

Решение системы дифференциальных уравнений (1) – (6) с краевыми условиями продолжается до наступления «статического режима» функционирования

установки КБА – стационарного периодического режима в слое адсорбента установки при осуществлении циклического процесса адсорбционного разделения газовой смеси. Достижение стационарного периодического режима в слое адсорбента определяется моментом времени $t_{ст}$, при котором выполняется следующее неравенство [41 – 43]:

$$|c_{1,i}(\tau_{ads}, L) - c_{1,i-1}(\tau_{ads}, L)| \leq e, \quad (7)$$

где $i_{ст} = i^* \times \tau_{ц}$, i^* – номер цикла, при котором выполняется условие (7); $\tau_{ц} = \tau_{ads} + \tau_{des}$; e – малое положительное число, определяющее точность достижения стационарного периодического режима в слое адсорбента, например, $e = 10^{-3}$; среднее расчетное время выхода установки на стационарный периодический режим составляет ~ 210 с (Win7, Intel Core i7 10700, DDRIV 16Gb).

Обобщенная процедура построения математической модели динамики сорбции в циклических адсорбционных процессах разделения газовых смесей включает следующие этапы.

1. Получение структуры математической модели, то есть структурная идентификация системы дифференциальных уравнений; в нашем примере – это вывод уравнений типа (1) – (6) с соответствующими краевыми условиями в соответствии с принятыми гипотезами и упрощающими предположениями [18].

2. Проведение исследований (экспериментальным методом или расчетным путем) свойств и режимов функционирования установок адсорбционного разделения газовых смесей и извлечения продуктовых газов с использованием аппаратно-технологической конфигурации проблемно-ориентированного комплекса [19]:

- физических свойств газовых смесей, подлежащих разделению по способу КБА [39];

- равновесных характеристик систем «многокомпонентная газовая смесь – адсорбент» и их влияние на эффективность разделения многокомпонентной газовой смеси и извлечение продуктовых газов [21];

- адсорбционных, механических и аэродинамических свойств цеолитовых адсорбентов типов A , X и других с целью их применения в промышленных установках адсорбционного разделения многокомпонентных газовых смесей с циклически изменяющимся давлением [44, 45];

- кинетики циклических процессов «адсорбция – десорбция» компонентов газовой смеси на микропористых адсорбентах в адсорбционной ячейке толщиной слоя в одно зерно; получение экспериментальных кинетических кривых при разделении исследуемых газовых смесей; в нашем примере – атмосферный воздух и синтез-газ [19, 23, 37, 46];

- динамики и статики (стационарных периодических режимов функционирования) циклических процессов «адсорбция – десорбция» при разделении газовых смесей и извлечении продуктовых газов по способу КБА [24, 25, 47 – 51];

- получение в необходимом объеме экспериментальных данных двух наборов I, II: x_I^3 , y_I^3 и x_{II}^3 , y_{II}^3 об исследуемом циклическом процессе сорбции.

Подчеркнем то важное обстоятельство, что получение в необходимом объеме экспериментальных данных требуется для проведения параметрической идентификации по данным первого набора и установление адекватности математической модели по данным второго независимого набора экспериментальных данных.

3. Параметрическая идентификация математической модели, то есть определение вектора параметров b^* математической модели по данным первого набора x_I^3 , y_I^3 экспериментальных данных; в данном случае – определение параметров

изотерм сорбции и кинетических характеристик циклического процесса сорбции; коэффициентов $\beta_{mf,k}$ и $\beta_{dif,k}(a_k)$ для компонентов адсорбтива разделяемых газовых смесей в пористой среде цеолитовых адсорбентов.

4. Анализ адекватности математической модели циклического процесса сорбции при разделении газовых смесей по данным второго независимого набора x_{II}^3 , y_{II}^3 экспериментальных данных. В рассматриваемых примерах среднеквадратическая погрешность математических моделей при обогащении атмосферного воздуха кислородом и извлечении водорода из синтез-газа не превышала 5 – 7 %, что позволило использовать эти модели для проведения технологических расчетов, оптимизации режимов функционирования и принятия проектно-конструкторских решений при интегрированном проектировании циклических адсорбционных процессов и установок КБА.

5. Обеспечение адекватности математической модели циклического процесса сорбции при разделении газовых смесей и извлечении продуктовых газов [3, 52]. Четырехэтапная процедура построения математической модели связана с принятием ряда гипотез и решений, некоторые из которых впоследствии могут оказаться ошибочными, неточными, субъективными (назовем такие необоснованные допущения или «слабые» решения дефектами модели). Тогда для устранения дефекта или ослабления его влияния на точность математической модели, оцениваемой по фактической средней квадратической ошибке на базе независимого набора x_{II}^3 , y_{II}^3 экспериментальных данных, требуется соответствующая рекомендация R_λ , содержащая те или иные действия, указания, приемы, операции и т.п. Пусть известна желаемая/допустимая $\delta_{ж}$ погрешность (средняя квадратическая погрешность) математической модели циклического процесса сорбции при разделении газовых смесей.

Математическая модель динамики считается адекватной циклическому процессу адсорбционного разделения газовой смеси, если

$$\delta_{мм} = \left\| y_{II}^3(\tau) - y(\tau, x_{II}^3, b^*) \right\|_{L_2} = \left[\sum_{i=1}^N \frac{1}{T} \int_0^T (y_{II,i}^3(\tau) - y(\tau, x_{II,i}^3, b^*))^2 d\tau / N \right]^{1/2} < \delta_{ж}. \quad (8')$$

Аналогично, математическая модель статики (стационарного периодического режима функционирования циклического процесса) считается адекватной циклическому процессу адсорбционного разделения газовой смеси, если

$$\delta_{мм}^c = \left\| y_{II}^3(\tau) - y(x_{II}^3, b^*) \right\|_E = \left[\sum_{i=1}^N (y_{II,i}^3(\tau) - y(x_{II,i}^3, b^*))^2 / N \right]^{1/2} < \delta_{ж}. \quad (8'')$$

В ряде случаев экспериментальные данные x_1^3 , y_1^3 , x_{II}^3 , y_{II}^3 являются случайными величинами, но тогда параметры $b^*(x_1^3, y_1^3)$ и численные решения $y(\tau, x_{II}^3, b^*)$ будут случайными. Поэтому сравнивать случайное значение (число) $\delta_{мм}$ с регулярным числом $\delta_{ж}$ неправомерно. Для устранения этой некорректности введем следующее условие адекватности: если

$$\text{Pr} \{ \text{того, что } \left\| y_{II}^3(\tau) - y(\tau, x_{II}^3, b^*) \right\|_{L_2} < \delta_{ж} \} \geq P_{\text{дов}} \}, \quad (8)$$

то математическая модель адекватна технологическому процессу на базе данных x_{II}^3 , y_{II}^3 с доверительной вероятностью $P_{\text{дов}}$, где Pr – вероятность события $\{ \cdot \}$;

обычно $P_{\text{дов}} \in (0,85; 0,95)$ или $P_{\text{дов}} \in (0,95; 0,98)$ для потенциально опасных производств. Условие (8) более мягкое, чем неравенства (8'), (8'') для неслучайных данных $x_1^3, y_1^3, x_{II}^3, y_{II}^3, \delta_{\text{мм}}$.

Таким образом, на каждом этапе данной процедуры требуется решать одну или несколько частных задач, используя разные методы/способы или алгоритмы решения [3, 45].

Принципиальное отличие разработанной адекватной математической модели от экспериментальной зависимости $y^3(x^3)$ заключается в том, что на ее базе возможно проведение вычислительных экспериментов по численному исследованию циклических процессов сорбции, а также решение многих других задач оптимального конструирования/проектирования технологических установок КБА, оптимизации режимов их работы, исследования чувствительности и устойчивости, автоматизации, надежности основных технологических узлов установок КБА и др.

Подготовка исходных данных для проектирования циклических процессов адсорбционного разделения многокомпонентных газовых смесей

Подготовка исходных данных для проектирования установок адсорбционного разделения многокомпонентных газовых смесей и извлечения продуктовых газов по способу КБА осуществляется на базе проблемно-ориентированного комплекса и цифровых технологий [3, 17]. Проблемно-ориентированный комплекс исследования свойств и режимов функционирования объекта проектирования и подготовки исходных данных для проектирования состоит из двух частей: аппаратно-технологической конфигурации и программно-алгоритмической. Аппаратно-технологическая конфигурация такого комплекса содержит новейшие конструкции технологических аппаратов и экспериментальные стенды с легко перестраиваемой структурой, обладающие заданными или оптимальными (в смысле задаваемого критерия оптимальности функционирования системы) статическими и динамическими характеристиками для каждой альтернативной структуры соединения аппаратов; с использованием таких аппаратов формируются гибкие технологические схемы с различными задаваемыми структурами соединения аппаратов, работающих в составе технологической линии.

Программно-алгоритмическая часть комплекса включает базы данных, содержащие физико-химические и теплофизические свойства исходных, промежуточных, побочных веществ и производимых продуктов; расходные коэффициенты сырья и вспомогательных материалов; справочные данные для расчета и выбора современных машин и аппаратов проектируемого производства; рекомендации по аналитическому контролю производства, автоматизации и управлению технологическими процессами; охране окружающей среды и безопасной эксплуатации производства. Программно-алгоритмическая часть комплекса оснащается эффективными алгоритмами имитационного моделирования статических и динамических режимов функционирования проектируемых ХТС, статической и динамической оптимизации режимов их функционирования, реализуемых в системах автоматизированного проектирования и управления и обеспечивающих при проектировании выполнение проектных и регламентных ограничений с гарантированной вероятностью, несмотря на наличие неопределенности части исходных данных для проектирования [18, 19, 53].

В рассматриваемом примере аппаратно-технологическая конфигурация проблемно-ориентированного комплекса включает лабораторные стенды для исследования изотерм адсорбции – десорбции компонентов разделяемых газовых смесей пористыми цеолитами и разномасштабные (пилотные и опытно-промышлен-

ные) автоматизированные блочно-модульные установки адсорбционного разделения газовых смесей и извлечения особо ценных газов (кислорода, водорода, азота и др.) по способу КБА, включающие от 2 до 16 адсорберов, компрессор, вакуум-насос, ресивер, регулирующие и отсечные клапаны и функционирующие в режимах напорных, вакуум-напорных или вакуумных технологических схем. Блочно-модульные установки позволяют оперативно и с высокой точностью воспроизводить аппаратно-технологическое оформление альтернативных вариантов многоадсорберных технологий разделения газовой смеси и извлечения продуктовых газов по способу КБА, обеспечить сбор требуемого количества экспериментальных данных (в соответствии с планом эксперимента), необходимых для определения параметров (коэффициентов) уравнений изотерм и кинетики циклических процессов «адсорбция – десорбция», коэффициентов массоотдачи и внутренней диффузии в пористой среде цеолитовых адсорбентов для каждого адсорбируемого (десорбируемого) компонента адсорбтива газовой смеси, проверки и обеспечения адекватности математических моделей статики и динамики процессов адсорбционного разделения газовых смесей.

Программно-алгоритмическая часть комплекса включает информационные базы данных и знаний по физико-химическим свойствам разделяемых газовых смесей; адсорбционным, аэродинамическим и механическим свойствам композиционных сорбционно-активных материалов типов NaX, CaA, CaLSX, LiLSX; изотермам адсорбции – десорбции Дубинина–Астахова, Ленгмюра–Фрейндлиха и их модификациям; уравнениям кинетики и динамики циклических процессов сорбции для разделения газовых смесей и концентрирования продуктовых газов (кислорода, водорода, азота и др.); специальному математическому и алгоритмическому обеспечению решения задач идентификации параметров моделей (кинетики и динамики) по экспериментальным данным и математического моделирования; а также систему информационной поддержки при оптимизации режимов и проектировании (в условиях неопределенности части исходных данных) адсорбционных процессов и установок с циклически изменяющимся давлением с учетом степени извлечения и себестоимости производства целевого газа, заданной чистоты концентрируемого газа, производительности адсорбционной установки, ресурсосбережения гранулированного адсорбента [3, 22, 26, 54].

В программно-алгоритмической части проблемно-ориентированного комплекса широко используется уравнение Дубинина–Астахова, поскольку именно оно позволяет исключить проведение затратных экспериментов по определению изотерм газов, входящих в разделяемые многокомпонентные газовые смеси для рабочих диапазонов температур и давлений. Достаточно одной экспериментальной изотермы стандартного (модельного) газа на используемом адсорбенте, из которой можно далее определить характеристики адсорбента – предельный адсорбционный объем и характеристическую энергию адсорбции; другие изотермы газов, входящих в газовую смесь, могут быть рассчитаны с использованием найденных характеристик адсорбента для модельного газа и коэффициента аффинности для рассматриваемого газа. Коэффициенты, входящие в уравнение изотермы, определяются из экспериментальных изотерм адсорбции – десорбции, полученных с использованием специализированного оборудования проблемно-ориентированного комплекса (например, AutoSorp, Isorb [55]), и решения регуляризованной обратной задачи (экстремальной задачи на минимум невязки между экспериментальной и расчетной (по выбранному уравнению) изотермами для рабочих диапазонов температур и давлений) [21].

Коэффициенты, входящие в уравнения кинетики, находятся опытным путем из кинетических кривых, получаемых на экспериментальном стенде аппаратно-технологической конфигурации комплекса в заданных рабочих интервалах темпе-

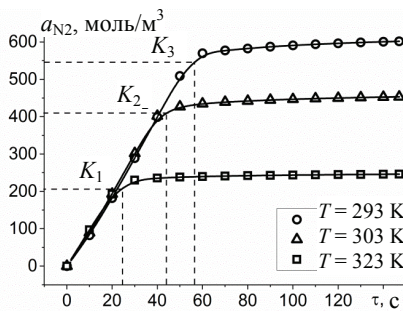
ратур 293...323 К, давлений $(2...6) \cdot 10^5$ Па и скоростей входящего в адсорбер газового потока 0,1...0,3 м/с. На рисунке 1 представлены кинетические кривые адсорбции азота на цеолитовом адсорбенте NaX, полученные в ходе проведения эксперимента при различных температурах, давлениях и скоростях газового потока.

Анализ кривых кинетики процесса адсорбции азота и кислорода в пористой среде цеолита NaX показывает, что визуально на кривой кинетики $a = \varphi(\tau)$ можно определить точки разграничения K_i , $i = 1, 2, 3$, двух периодов кинетики адсорбции компонентов газовой смеси: первого и второго периодов (рис. 1). В первом периоде (до точки K_i на кривой кинетики) процесс адсорбции лимитируется внешней диффузией, во втором (после точки K_n на кривой кинетики) – внутридиффузионное сопротивление элементарного слоя адсорбента оказывает лимитирующее влияние на кинетику процесса адсорбции.

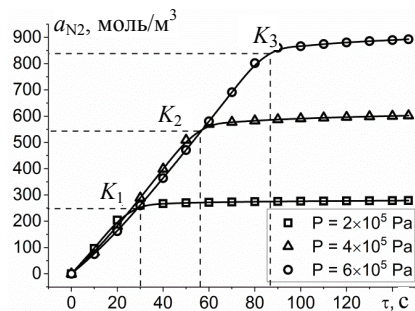
В первом периоде кинетики (до точки K_i на кривой кинетики) скорость процесса постоянна, причем у поверхности гранулы поддерживается постоянная концентрация c^* адсорбтива; при этом интенсивность внутреннего массопереноса достаточна высока, чтобы у поверхности гранулы поддерживать концентрацию насыщения во внешней фазе. В этом случае кинетическое уравнение записывают следующим образом [37, 46, 56]:

$$\frac{da_k(z)}{d\tau} = \beta_{\text{mt},k} (c_k(z) - c_k^*), \quad k = 1, 2, 3, \dots, \quad \text{где } \tau \in [0, \tau_{\text{ads}} = \tau_{\text{II}} / 2].$$

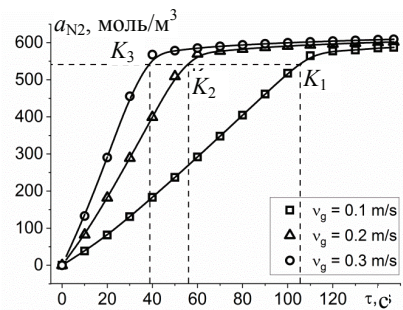
В точке разграничения K_i начинается второй период кинетики, в котором концентрация адсорбтива у поверхности гранулы становится больше c^* и при достижении времени критического массосодержания определяется функцией фазового концентрационного равновесия. В этом случае кинетическое уравнение записывают следующим образом [38, 46, 56]:



а)



б)



в)

Рис. 1. Кинетические кривые адсорбции азота на цеолитовом адсорбенте NaX:
а – при температурах газовой смеси 293, 303, 323 К; б – при давлениях газовой смеси $(2, 4, 6) \cdot 10^5$ Па; в – при скоростях газового потока 0,1; 0,2; 0,3 м/с (точки – эксперимент; линии – расчет; K_1, K_2, K_3 – точки разграничения)

$$\frac{da_k(z)}{d\tau} = \beta_{\text{dif},k}(a_k)(a_k^* - a_k(z)), \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Таким образом, для первого периода экспериментальной кинетической кривой следует определить коэффициент массоотдачи $\beta_{\text{mt},k}$, а для второго периода – зависимость коэффициента диффузии $\beta_{\text{dif},k}(a_k)$ компонентов адсорбтива от концентрации адсорбата [56].

Обобщенное кинетическое уравнение массопереноса компонентов адсорбтива из газовой фазы через границу раздела в пористую среду адсорбента можно записать с помощью гиперболического уравнения в зависимости от скорости газовой фазы в слое адсорбента [22]

$$\frac{da_k}{d\tau} = \frac{(F_k^2 - F_k^1)}{2} \operatorname{tg} h(\gamma(v_g - v_g^+) + 1) + F_k^1, \quad k = 1, 2, 3, \quad (9)$$

где F_k^1 , F_k^2 – правые части уравнения кинетики соответственно для внешне- и внутридиффузионной областей; $\operatorname{tg} h$ – гиперболический тангенс; γ – формальный параметр, позволяющий гладко регулировать размеры смешанно-диффузионной области процесса адсорбции компонентов адсорбтива элементарным слоем адсорбента; v_g^+ – граничная скорость газовой смеси, определяющая переход из внешнедиффузионной области во внутридиффузионную область, в которой лимитирующим сопротивлением является заполнение молекулами адсорбтива внутреннего пространства микропор элементарного слоя адсорбента.

Кинетические коэффициенты внешней массоотдачи $\beta_{\text{mt},k}$, внутренней диффузии $\beta_{\text{dif},k}$ и формальный коэффициент γ в уравнении (9) определяются путем решения обратных кинетических задач по экспериментальным кинетическим кривым, получаемым в аппаратно-технологической конфигурации проблемно-ориентированного комплекса, включающего специализированные экспериментальные установки для определения кинетических кривых исследуемых процессов адсорбции и десорбции компонентов газовых систем, подлежащих разделению по способу КБА.

Методика определения кинетических коэффициентов внешней массоотдачи $\beta_{\text{mt},k}$, внутренней диффузии $\beta_{\text{dif},k}$, формального коэффициента γ в уравнении (9) и концентрационной зависимости коэффициента эффективной диффузии для внутреннего массопереноса адсорбтива (кислорода, водорода и сопутствующих им газов) в пористой среде гранулированного слоя адсорбента (второй период кинетики адсорбции кислорода, водорода и сопутствующих им газов) представляет собой постановку обратной экстремальной задачи эффективной диффузии: по экспериментальным данным кривой кинетики адсорбции компонентов адсорбтива газовой смеси второго периода кинетики адсорбции определить зависимость коэффициента $\beta_{\text{dif},k}$ от концентрации адсорбата в слое гранулированного адсорбента, то есть $\beta_{\text{dif},k}(a_k)$ [56].

Производительность и качество продуктового газа, получаемого в промышленных установках, достигаются не только за счет увеличения объема адсорбента, но и за счет оптимизации временной протяженности режимов и стадий, составляющих цикл «адсорбция – десорбция». Чтобы этого добиться, нужна тщательная предварительная работа, в основе которой лежит математическое моделирование циклических адсорбционных процессов с различной длительностью режимов ад-

сорбции и десорбции (регенерации адсорбента). Математическая модель должна учитывать периоды кинетики адсорбции компонентов адсорбтива слоем гранулированного адсорбента, конечную скорость релаксации профиля давления вдоль слоя адсорбента при частой смене стадий цикла и влияние непрерывного изменения условий фильтрации газовой смеси на динамику адсорбционного газоразделения. Учет локального взаимодействия фильтрационного потока в слое адсорбента и межфазного массообмена требует использование сложных математических моделей и вычислительных методов, базирующихся на известных физико-химических принципах, сформулированных в различных областях науки: адсорбции, термодинамики, газодинамики, тепло- и массопереноса.

Анализ используемых математических моделей для расчета и численного исследования циклических процессов разделения газовых систем показывает, что в большинстве работ исходя из целевого назначения циклического процесса выбираются нужный режим его функционирования, а также те или иные свойства и значимые явления, учитываемые в физико-химической модели циклического адсорбционного процесса. В зависимости от учета значимых физико-химических явлений различают равновесные и неравновесные, а также внешне-, внутри- и смешанно-диффузионные, изотермические и неизотермические математические модели [18].

Требуют дальнейшего совершенствования методики построения математических моделей для целей оптимизации циклических адсорбционных процессов, подходы к разработке оптимальных конструктивных решений установок адсорбционного разделения газовых смесей с циклически изменяющимся давлением; алгоритмы принятия проектно-конструкторских решений при создании ресурсосберегающих циклических процессов и установок адсорбционного разделения и очистки газовых смесей в условиях неопределенности части исходных данных для проектирования, связанной с неполнотой имеющейся информации на этапе проектирования установки, грубым (неточным) описанием (моделированием) отдельных стадий создаваемой установки адсорбционного разделения газовых смесей по способу КБА, использованием упрощенных методик оценки (расчета) показателей эффективности (критериев оптимальности) функционирования установки КБА.

В программно-алгоритмической части проблемно-ориентированного комплекса выбор структуры системы автоматической стабилизации режимов осуществляется с использованием множеств регулируемых (наблюдаемых) переменных и допустимых управляющих воздействий (с учетом наблюдаемости выходных переменных процесса адсорбционного разделения многокомпонентной газовой смеси и оценки затрат на разработку необходимых приборов автоматического контроля, возможности и точности прогноза выходных переменных по косвенным показателям, управляемости установки адсорбционного разделения газовой смеси и концентрирования продуктового газа с той или иной комбинацией управляющих воздействий) [8, 57 – 59].

Исследование динамических свойств каналов управления (показателей инерционности и регулируемости насыпного слоя адсорбентов в адсорберах установки КБА) осуществляется методом имитационного моделирования с использованием математической модели динамики функционирования установки адсорбционного разделения газовой смеси и концентрирования продуктового газа.

Решение задач оптимизации (по технологическим критериям оптимальности функционирования установки КБА) режимных переменных (оптимальных заданий регуляторам САУ) состояния адсорберов установки КБА осуществляется разработанными на базе высокоэффективного поискового метода последовательного квадратичного программирования специальными методами и алгоритмами [23, 54, 57 – 59].

Решение двухэтапной задачи принятия оптимальных проектно-конструкторских решений (по критерию приведенных затрат) при аппаратурно-технологическом оформлении циклического процесса адсорбционного разделения газовой смеси и концентрирования продуктового газа осуществляется с помощью разработанного специального эвристического метода [23, 53, 57 – 59].

В программно-алгоритмической части проблемно-ориентированного комплекса реализуется новый подход к учету неопределенности в исходной информации при проектировании оптимальных циклических процессов и систем адсорбционного разделения газовых смесей, приводящий к постановке и решению двухэтапной задачи принятия проектно-конструкторских решений. Именно постановка и решение двухэтапной задачи принятия проектно-конструкторских решений при проектировании циклического процесса адсорбционного разделения многокомпонентной газовой смеси (атмосферного воздуха, синтез-газа) позволяют осуществить интегрированное проектирование формирующих предпосылки эффективного управления и автоматизации установок КБА при наличии неопределенности части исходных данных для проектирования.

Особое значение приобретают вопросы масштабирования накопленных экспериментальных данных и выдача исходных данных на проектирование промышленных технологий и образцов адсорбционных установок для разделения многокомпонентных газовых смесей (атмосферного воздуха, синтез-газа и др.), которые могут быть успешно решены с использованием проблемного аппаратно-программного комплекса и современных цифровых технологий [3, 17].

Взаимодействие аппаратно-технологической конфигурации и программно-алгоритмической частей проблемно-ориентированного комплекса позволяет в сравнительно короткие сроки провести требуемые экспериментальные исследования свойств и режимов функционирования установок адсорбционного разделения газовых смесей и извлечения продуктовых газов, подготовить исходные данные для проектирования производства высококонцентрированных газов методом КБА, повысить надежность и значительно уменьшить неопределенность большей части исходных данных для проектирования, разработать принципиальную технологическую схему и опытно-промышленный регламент производства в соответствии с требованиями технического задания по качеству продуктовых газов, технико-экономическим и экологическим показателям функционирования их производства.

Заключение

Предложен новый подход к разработке методологии интегрированного проектирования технологических процессов, аппаратурно-технологического оформления и систем автоматической стабилизации оптимальных режимов их функционирования с использованием оригинального проблемно-ориентированного комплекса, обеспечивающего исследование свойств, режимов функционирования проектируемого объекта и подготовку исходных данных для его проектирования при значительном сокращении времени подготовки, повышении качества и надежности исходных данных на проектирование промышленных образцов.

В соответствии с новым подходом проектно-конструкторские решения при интегрированном проектировании принимаются с учетом неопределенности части исходных данных для проектирования, и это обстоятельство учитывается в математической постановке задачи двухэтапной оптимизации конструктивных параметров и режимных переменных проектируемых ХТС. Оптимальные конструктивные параметры аппаратурно-технологического оформления ХТС, режимы функционирования и оптимальные задания регуляторам САУ выбираются из условия работоспособности (гибкости) и оптимальности функционирования (экономичности) проектируемого автоматизированной ХТС с точки зрения энерго- и ресурсосбережения и качества выпускаемой продукции в условиях неопреде-

ленности исходной информации (части исходных данных для проектирования). При этом особое значение приобретают вопросы масштабирования полученных экспериментальных данных на стадии предпроектных научных исследований.

Новый подход к разработке методологии интегрированного проектирования технологического процесса, его аппаратурно-технологического оформления и системы автоматического управления режимами будущего функционирования при эксплуатации производства отработан на примере циклических адсорбционных процессов для разделения многокомпонентных газовых смесей (атмосферного воздуха, синтез-газа) и извлечения продуктовых газов (кислорода, водорода и др.) и может быть рекомендован для тиражирования при проектировании сложных технических и технологических систем различного назначения.

Список литературы

1. Rutven, D. M. Pressure swing adsorption / D. M. Rutven, S. Faroog, K. S. Knaebel. – New York, 1993. – 189 p.
2. Biegler, L. T. Recent advances in simulation and optimal design of pressure swing adsorption systems / L. T. Biegler, L. Jiang, V. G. Fox // Separation & Purification Reviews. – 2004. – Vol. 33, No. 1. – P. 1 – 39. doi: 10.1081/SPM-120039562
3. Моделирование и оптимизация циклических адсорбционных процессов для разделения и очистки газовых смесей: монография / С. И. Дворецкий, Д. С. Дворецкий, Е. И. Акулинин, О. О. Голубятников. – Тамбов: Издательский центр «ТГТУ», 2021. – 212 с.
4. Островский, Г. М. Технические системы в условиях неопределенности / Г. М. Островский, Ю. М. Волин. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2008. – 319 с.
5. Островский, Г. М. Оптимизация химико-технологических процессов в условиях частичной неопределенности исходной информации / Г. М. Островский, Ю. М. Волин // Автоматика и телемеханика. – 1995. – № 12. – С. 92 – 106.
6. Дворецкий, Д. С. Новые подходы к проектированию химико-технологических процессов, аппаратов и систем в условиях интервальной неопределенности / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий, Г. М. Островский. – М.: ИД Спектр, 2012. – 344 с.
7. Островский, Г. М. Проектирование оптимальных химико-технологических систем в условиях неопределенности / Г. М. Островский, Т. В. Лаптева, Н. Н. Зиятдинов // Теоретические основы химической технологии. – 2014. – Т. 48, № 5. – С. 527 – 537. doi: 10.7868/S004035711405008X
8. Дворецкий, Д. С. Интегрированное проектирование гибких химико-технологических процессов, аппаратов и систем управления / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий // Теоретические основы химической технологии. – 2014. – Т. 48, № 5. – С. 557 – 564. doi: 10.7868/S0040357114050030
9. Optimization of chemical processes under uncertainty: the case of insuffication processes data at the operation stage / G. M. Ostrovsky, L. E. K. Achenie, I. Datskov, Yu. M. Volin // AIChE J. – 2003. Vol. 49. – P. 1216 – 1240.
10. Ostrovsky, G. M. Optimal design of chemical processes with chance constraints / G. M. Ostrovsky, N. N. Ziatdinov, T. V. Lapteva // Computers and Chemical Engineering. – 2013. – Vol. 59. – P. 74 – 88. doi: 10.1016/j.compchemeng.2013.05.029
11. Halemane, K. P. Optimal process design under uncertainty / K. P. Halemane, I. E. Grossmann // AIChE J. – 1983. – Vol. 29, No. 2. – P. 425 – 433. doi: 10.1002/aic.690290312
12. Biegler, L. T. Systematic methods of chemical process design. Upper saddle river / L. T. Biegler, I. E. Grossmann, A. W. Westerberg. – New Jersey: Prentice Hall, 1997. – 796 p.
13. Grossmann, I. E. Part II. Future perspective on optimization / I. E. Grossmann, L. T. Biegler // Computers & Chemical Engineering. – 2004. – Vol. 28, No. 8. – P. 1193 – 1218. doi: 10.1016/j.compchemeng.2003.11.006

14. Acevedo, J. Stochastic optimization based algorithms for process synthesis under uncertainty / J. Acevedo, E. N. Pistikopoulos // *Comp. Chem. Eng.* – 1998. – Vol. 22, No. 4-5. – P. 647 – 671. doi: 10.1016/S0098-1354(97)00234-2
15. Bansal, V. Flexibility analyses and design using parametric programming framework / V. Bansal, J. D. Perkins, E. N. Pistikopoulos // *AIChE J.* – 2002. – Vol. 48, No. 12 – P. 2851 – 2868. doi: 10.1002/aic.690481213
16. Rooney, W. C. Optimal process design with model parameter uncertainty and process variability / W. C. Rooney, L. T. Biegler // *AIChE J.* – 2003. – Vol. 49, No. 2. – P. 438 – 449. doi: 10.1002/aic.690490214
17. Аппаратно-программный комплекс для получения исходных данных на проектирование промышленных циклических адсорбционных установок / О. О. Голубятников, Е. И. Акулинин, Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий // *Китайско-российский конкурс инноваций и предпринимательства: сб. материалов конференции-конкурса.* – Воронеж, 2021. – С. 82 – 86.
18. Моделирование динамики сорбции в циклических адсорбционных процессах разделения газовых смесей / С. И. Дворецкий, Д. С. Дворецкий, Е. И. Акулинин [и др.] // *Вестник Тамбовского государственного технического университета.* – 2023. – Т. 29, № 3. – С. 425 – 443. doi: 10.17277/vestnik.2023.03.pp.425-443
19. Акулинин, Е. И. Экспериментальное исследование кинетики циклического адсорбционного процесса обогащения воздуха кислородом / Е. И. Акулинин, Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий // *Вестник Тамбовского государственного технического университета.* – 2021. – Т. 27, № 3. – С. 387 – 400. doi: 10.17277/vestnik.2021.03.pp.387-400
20. Рид, Р. С. Свойства газов и жидкостей / Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд ; пер. с англ. под ред. Б. И. Соколова. – 3-е изд., перераб. и доп. – Л. : Химия, 1982. – 592 с.
21. К вопросу использования уравнения Дубинина–Астахова при расчете изотерм H_2 , CO_2 , CO , CH_4 , N_2 для процесса короткоциклового адсорбции извлечения водорода на цеолите NaX и активном угле / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий, Е. И. Акулинин [и др.] // *Актуальные проблемы теории и практики гетерогенных катализаторов и адсорбентов : материалы VII Всерос. науч. конф. (г. Суздаль).* – Казань, 2023. – С. 139 – 142.
22. Моделирование и оптимизация циклических адсорбционных процессов обогащения газовых смесей водородом / А. А. Ишин, С. А. Скворцов, В. Г. Матвейкин, Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий // *Теоретические основы химической технологии.* – 2019. – Т. 53, № 5. – С. 559 – 571. doi: 10.1134/S0040357119040043
23. Расчет кинетики процесса адсорбции при разделении газовых смесей / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий, Е. И. Акулинин [и др.] // *Современные энерго-сберегающие тепловые и массообменные технологии (сушка, тепловые и массообменные процессы) – СЭТМТ-2023 : сб. науч. тр. Восьмой Междунар. науч.-практ. конф.* – М., 2023. – С. 85 – 89.
24. A numerical study of heat and mass exchange processes in swing adsorption device for oxygen-enriched air / E. I. Akulinin, O. O. Golubyatnikov, D. S. Dvoretzky, S. I. Dvoretzky // *Advanced Materials & Technologies.* – 2019. – Vol. 3, No. 15. – P. 56 – 65. doi: 10.17277/amt.2019.03.pp.056-065
25. Numerical study of the dynamics of air separation process by pressure swing adsorption / E. I. Akulinin, O. O. Golubyatnikov, D. S. Dvoretzky, S. I. Dvoretzky // *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software (Bulletin SUSU MMCS).* – 2019. – Vol. 12, No. 4. – P. 95 – 103. doi: 10.14529/mmp190407
26. Methodology for creating and studying units for adsorption separation and purification of gas mixtures / E. I. Akulinin, O. O. Golubyatnikov, D. S. Dvoretzky, S. I. Dvoretzky // *Journal of Advanced Materials and Technologies.* – 2021. – Vol. 6, No. 3. – P. 179 – 203. doi: 10.17277/jamt.2021.03.pp.179-203

27. Рачинский, В. В. Введение в общую теорию динамики сорбции и хроматографии / В. В. Рачинский. – М. : Наука, 1964. – 136 с.
28. Товбин, Ю. К. Теория физико-химических процессов на границе раздела фаз «газ-твердое тело» / Ю. К. Товбин. – М. : Наука, 1990. – 288 с.
29. Тихонов, А. Н. Уравнения математической физики : учеб. пособие / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – М. : Наука ; Гл. ред. физ.-мат. лит., 1972. – 735 с.
30. Белоглазов, И. Н. Основы расчета фильтрационных процессов / И. Н. Белоглазов, В. О. Голубев. – М. : Руда и Металлы, 2002. – 210 с.
31. Jiang, L. Simulation and optimization of pressure-swing adsorption systems for air separation / L. Jiang, L. T. Biegler, V. G. Fox // *AICHE J.* – 2003. – Vol. 49, No. 5. – P. 1140 – 1157. doi: 10.1002/AIC.690490508
32. Дубинин, М. М. Адсорбция и пористость / М. М. Дубинин. – М. : Изд-во ВАХЗ, 1972. – 127 с.
33. Радушкевич, Л. В. Основные проблемы физической адсорбции / Л. В. Радушкевич. – М. : Наука, 1970. – 270 с.
34. Хейфец, Л. И. Многофазные процессы в пористых телах / Л. И. Хейфец. – М. : Химия, 1982. – 287 с.
35. Тихонов, А. Н. Методы решения некорректных задач / А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. – М. : Наука, 1974. – 224 с.
36. Алифанов, О. М. Экстремальные методы решения некорректных задач / О. М. Алифанов, Е. А. Артюхин, С. В. Румянцев. – М. : Наука, 1988. – 288 с.
37. Методика расчета кинетического коэффициента массопереноса в пористой среде адсорбента / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий, Е. И. Акулинин [и др.] ; под ред. А. В. Афинеевского, Р. Н. Румянцева // *Актуальные проблемы теории и практики гетерогенных катализаторов и адсорбентов : материалы VII Всероссийской науч. конф. (г. Суздаль).* – Казань, 2023. – С. 142 – 144.
38. Тимофеев, Д. П. Кинетика адсорбции / Д. П. Тимофеев. – М. : Изд-во Академии наук СССР, 1962. – 252 с.
39. Mathematical modeling of hydrogen production process by pressure swing adsorption method / E. I. Akulinin, A. A. Ishin, S. A. Skvortsov, D. S. Dvoretzkiy // *Advanced Materials and Technologies.* – 2017. – No. 2. – P. 38 – 49. doi: 10.17277/amt.2017.02.pp.038-049
40. Ergun, S. Fluid flow through packed columns / S. Ergun // *Chem. Eng. Progress.* – 1952. – Vol. 48. – P. 89 – 94.
41. Simulation and optimization of small oxygen pressure swing adsorption units / J. C. Santos, A. F. Portugal, F. D. Magalhaes, A. Mendes // *Ind. Eng. Chem. Res.* – 2004. – Vol. 43, No. 26 – P. 8328 – 8338. doi: 10.1021/ie0497011
42. Optimization and analysis of the VPSA process for industrial-scale oxygen production / Z. Ding, Z. Han, Q. Fu, Y. Shen., C. Tian, D. Zhang // *Adsorption.* – 2018. – Vol. 24, No. 5. – P. 499 – 516. doi: 10.1007/s10450-018-9956-z
43. Simulation and analysis of vacuum pressure swing adsorption using the differential quadrature method / M. A. Makarem, M. Mofarahi, B. Jafarian, C.-H. Lee // *Comput. Chem. Eng.* – 2019. – Vol. 121. – P. 483 – 496. doi: 10.1016/j.compchemeng.2018.11.017
44. Способы получения блочных цеолитовых адсорбентов для осуществления процессов короткоциклового адсорбции / Е. И. Акулинин, Н. Ф. Гладышев, Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий // *Вестник Казанского технологического университета.* – 2015. – Т. 18, № 15. – С. 122 – 125.
45. Моделирование изотерм H_2 , CO_2 , CO , CH_4 , N_2 для процесса короткоциклового адсорбции извлечения водорода с использованием уравнения Дубинина-Астахова / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий, В. Б. Усачев, В. А. Беляев // *Математические методы в технике и технологиях.* – 2023. – № 7. – С. 63 – 66. doi: 10.52348/2712-8873_ММТТ_2023_7_63

46. Рудобашта, С. П. Определение коэффициентов массоотдачи и массопроводности из кривых кинетики / С. П. Рудобашта, М. К. Кошелева // *Технология текстильной промышленности*. – 2015. – Т. 6, № 360. – С. 175 – 180.
47. Численное исследование динамики процесса адсорбционного разделения газовой смеси и концентрирования водорода / Е. И. Акулинин, А. Н. Ишин, С. А. Скворцов [и др.] // *Химическая технология*. – 2018. – Т. 19, № 8. – С. 368 – 375. doi: 10.31044/1684-5811-2018-19-8-368-375
48. Численное исследование динамики циклических процессов адсорбционного разделения атмосферного воздуха / Е. И. Акулинин, О. О. Голубятников, Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий // *Вестник ВГУИТ*. – 2019. – Т. 81, № 1. – С. 310 – 317. doi: 10.20914/2310-1202-2019-1-310-317
49. Численный анализ циклического процесса адсорбционного разделения синтез-газа / Е. И. Акулинин, О. О. Голубятников, Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий // *Вестник ВГУИТ*. – 2019. – Т. 82, № 1. – С. 230 – 236. doi: 10.20914/2310-1202-2020-1-230-236
50. Modeling and analysis dynamics of pressure swing adsorption process for synthesis gas separation and hydrogen production / E. I. Akulinin, O. O. Golubyatnikov, A. N. Labutin, D. S. Dvoretzky, S. I. Dvoretzky // *Вестник Тамбовского государственного технического университета*. – 2020. – Т. 26, № 3. – С. 342 – 356. doi: 10.17277/vestnik.2020.03.pp.342-356
51. Numerical research to determine the dominant mechanism of mass and heat transfer in pressure swing adsorption processes / O. O. Golubyatnikov, E. I. Akulinin, S. I. Dvoretzky // *Bulletin of the South Ural State University Series-Mathematical Modelling Programming & Computer Software*. – 2021. – Vol. 14, No. 2. – P. 39 – 51. doi: 0.14529/mmp210204
52. Математическое моделирование технологических процессов / Под ред. проф. В. С. Балакирева. – Ярославль : ИД Н. П. Пастухова, 2018. – 352 с.
53. Задачи и алгоритмы проектирования оптимальных циклических процессов и систем адсорбционного разделения газовых смесей / С. И. Дворецкий, Д. С. Дворецкий, Е. И. Акулинин [и др.] // *Вестник Тамбовского государственного технического университета*. – 2023. – Т. 29, № 4. – С. 605 – 623. doi: 10.17277/vestnik.2023.04.pp.605-623
54. Akulinin, E. I. Pressure swing adsorption for recovery hydrogen, oxygen and nitrogen from gas mixtures: mathematical modeling, optimization and units design / E. I. Akulinin, O. O. Golubyatnikov, S. I. Dvoretzky // *ChemChemTech*. – 2021. – Vol. 64, No. 11. – P. 8 – 29. doi: 10.6060/ivkkt.20216411.6459
55. Сайт Quantochrome [Электронный ресурс]. – URL: <https://quantatec.ru/?ysclid=lub7xwlvve155924713/> (дата обращения: 28.08.2024).
56. Акулинин, Е. И. Экспериментальное исследование кинетики циклического адсорбционного процесса обогащения воздуха кислородом / Е. И. Акулинин, Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий // *Вестник Тамбовского государственного технического университета*. – 2021. – Т. 27, № 3. – С. 387 – 400. doi: 10.17277/vestnik.2021.03.pp.387-400
57. Optimization and analysis of pressure swing adsorption process for oxygen production from air under uncertainty / E. Akulinin, O. Golubyatnikov, D. Dvoretzky, S. Dvoretzky // *Chemical Industry & Chemical Engineering Quarterly*. – 2020. – Vol. 26, No. 1. – P. 89 – 104. doi: 10.2298/CICEQ190414028A
58. Дворецкий, Д. С. Проектирование автоматизированных технических систем в условиях неопределенности / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий, Н. Г. Чернышов // *Системы управления и информационные технологии*. – 2016. – Vol. 4, № 66. – С. 21 – 28.
59. Дворецкий, С. И. Постановки задач оптимизации при интегрированном проектировании технологических процессов, аппаратов и систем управления в условиях неопределенности / С. И. Дворецкий, Д. С. Дворецкий, Е. И. Акулинин // *Вестник Тамбовского государственного технического университета*. – 2024. – Т. 30, № 2. – С. 184 – 195. doi: 10.17277/vestnik.2024.02.pp.184-195

A New Approach to Developing a Methodology for Integrated Design of Cyclic Adsorption Processes and Units for Multicomponent Gas Mixture Separation

S. I. Dvoretzky¹, D. S. Dvoretzky¹, I. A. Avtsinov², E. I. Akulinin¹

Department of Technologies and Equipment for Food and Chemical Production (1), bio-topt@yandex.ru; TSTU, Tambov, Russia; Department of Automated Process and Production Control Systems (2), Voronezh State University of Engineering Technologies, Voronezh, Russia

Keywords: hardware process design; two-stage problem of making design decisions; sorption dynamics problem; isotherm; integrated design; initial data for design; kinetics; mathematical modeling; uncertain factors; ensuring the adequacy of the mathematical model; hardware and software complex; multicomponent gas mixture separation; automatic control system; stationary periodic process; technological process; heat and mass transfer processes; cyclic adsorption process.

Abstract: A new approach to the development of a methodology for the integrated design of cyclic adsorption processes and units for separating multicomponent gas mixtures in the presence of uncertainty in some of the initial design data is proposed. The paper describes a composition of a problem-oriented complex for conducting pre-design scientific research and substantiating the adoption of design solutions for the hardware and technological design of cyclic adsorption processes and units (for separating multicomponent gas mixtures and concentrating gases (oxygen, hydrogen, nitrogen, etc.) widely used in technology and the social sphere). The general formulation of the problem of the dynamics of cyclic sorption processes and methods for solving it, a generalized procedure for constructing a mathematical model of the dynamics of sorption in cyclic adsorption processes of separating gas mixtures are presented. The procedure for preparing the initial data for designing and substantiating design solutions in the hardware and technological design of cyclic processes of adsorption separation of multicomponent gas mixtures is given as part of a problem-oriented hardware and software complex.

References

1. Rutven D.M., Farooq S., Knaebel K.S. *Pressure swing adsorption*, New York: VCH Publishers Inc, 1993, 189 p.
2. Biegler L.T., Jiang L., Fox V.G. Recent advances in simulation and optimal design of pressure swing adsorption systems, *Separation and Purification Reviews*, 2004, vol. 33, no. 1, pp. 1-39. doi: 10.1081/SPM-120039562
3. Dvoretzkiy S.I., Dvoretzkiy D.S., Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O. *Modelirovanie i optimizatsiya tsiklicheskih adsorbtsionnykh protsessov dlya razdeleniya i ochistki gazovykh smesey: monografiya* [Modeling and optimization of cyclic adsorption processes for separation and purification of gas mixtures: monograph], Tambov: TSTU, 2021, 212 p. (In Russ.)
4. Ostrovskiy G.M., Volin Yu.M. *Tekhnicheskie sistemy v usloviyakh neopredelennosti* [Technical systems under uncertainty], Moscow: BINOM, Laboratoriya znaniy, 2008, 319 p. (In Russ.)
5. Ostrovskiy G.M., Volin Yu.M. [Optimizatsiya khimiko-tekhnologicheskikh protsessov v usloviyakh chastichnoy neopredelennosti iskhodnoy informatsii], *Avtomatika i telemekhanika*, 1995, no. 12, pp. 92-106. (In Russ.)
6. Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I., Ostrovskiy G.M. *Novye podkhody k proektirovaniyu khimiko-tekhnologicheskikh protsessov, apparatov i sistem v usloviyakh intervalnoy neopredelennosti* [New approaches to designing chemical engineering

processes, devices and systems under conditions of interval uncertainty], Moscow: Spektr, 2012, 344 p. (In Russ.)

7. Ostrovsky G.M., Lapteva T.V., Ziyatdinov N.N. [Optimal design of chemical processes under uncertainty], *Teoreticheskie osnovy khimicheskoy tekhnologii*, 2014, vol. 48, no 5, pp. 527-537. doi: 10.7868/S004035711405008X (In Russ., abstract in Eng.)

8. Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. [Integrated design of flexible chemical processes, devices, and control systems], *Teoreticheskiye osnovy khimicheskoy tekhnologii* [Theoretical Foundations of Chemical Engineering], 2014, vol. 48, no. 5, pp. 557-564. doi: 10.7868/S0040357114050030 (In Russ., abstract in Eng.)

9. Ostrovsky G.M., Achenie L.E.K., Datskov I., Volin Yu.M. Optimization of chemical processes under uncertainty: the case of insuffication processes data at the operation stage, *AIChE J*, 2003, vol. 49, pp. 1216-1240.

10. Ostrovsky G.M., Ziatdinov N.N., Lapteva T.V. Optimal design of chemical processes with chance constraints, *Computers and Chemical Engineering*, 2013, vol. 59, pp.74-88. doi: 10.1016/j.compchemeng.2013.05.029

11. Halemane K.P., Grossmann I.E. Optimal process design under uncertainty, *AIChE J*, 1983, vol. 29, no. 2, pp. 425-433. doi: 10.1002/aic.690290312

12. Biegler L.T., Grossmann I.E., Westerberg A.W. *Systematic methods of chemical process design*, Upper Saddle River, New Jersey: Prentice Hall, 1997, 796 p.

13. Grossmann I.E., Biegler L.T. Part II. Future perspective on optimization, *Computers and Chemical Engineering*, 2004, vol. 28, no. 8, pp. 1193-1218. doi: 10.1016/j.compchemeng.2003.11.006

14. Acevedo J., Pistikopoulos E.N. Stochastic optimization based algorithms for process synthesis under uncertainty. *Computers and Chemical Engineering*, 1998, vol. 22, no. 4-5, pp. 647-671. doi: 10.1016/S0098-1354(97)00234-2

15. Bansal V., Perkins J.D., Pistikopoulos E.N. Flexibility analyses and design using parametric programming framework, *AIChE J*, 2002, vol. 48, no. 12, pp. 2851-2868. doi: 10.1002/aic.690481213

16. Rooney W.C., Biegler L.T. Optimal process design with model parameter uncertainty and process variability, *AIChE J*, 2003, vol. 49, no. 2, pp. 438-449. doi: 10.1002/aic.690490214

17. Golubyatnikov O.O., Akulinin E.I., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. *Apparatno-programmnyy kompleks dlya polucheniya iskhodnykh dannykh na proektirovanie promyshlennykh tsiklicheskiykh adsorbtsionnykh ustanovok, Kitaysko-rossiyskiy konkurs innovatsiy i predprinimatel'stva: sbornik materialov konferentsii-konkursa* [Hardware and software complex for obtaining initial data for the design of industrial cyclic adsorption units, Chinese-Russian Innovation and Entrepreneurship Competition: collection of conference-competition materials], 15 November - 5 December, 2020, Voronezh, 2021, pp. 82-86. (In Russ.)

18. Dvoretzkiy S.I., Dvoretzkiy D.S., Akulinin E.I., Usachev V.B., Belyaev V.A. [Sorption dynamics modeling in cyclic adsorption processes of gas mixture separation], *Transactions of the Tambov State Technical University*, 2023, vol. 29, no. 3, pp. 425-443. doi: 10.17277/vestnik.2023.03.pp.425-443 (In Russ., abstract in Eng.)

19. Akulinin E.I., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. [Experimental study of the kinetics of the cyclic adsorption process of oxygen enrichment of air], *Transactions of the Tambov State Technical University*, 2021, vol. 27, no. 3, pp. 387-400, doi: 10.17277/vestnik.2021.03.pp.387-400 (In Russ., abstract in Eng.)

20. Rid R., Prausnitz Dzh., Shervud T. *Svoystva gazov i zhidkostey* [Properties of gases and liquids], Leningrad: Khimiya, 1982, 592 p. (In Russ.)

21. Dvoretzkiy S.I., Dvoretzkiy D.S., Akulinin E.I., Usachev V.B., Belyaev V.A. *K voprosu ispolzovaniya uravneniya Dubinina–Astakhova pri raschete izoterm H₂, CO₂, CO, CH₄, N₂ dlya protsessa korotkotsiklovoy adsorbtsii izvlecheniya vodoroda na tseolite NaX i aktivnom ugle. Aktual'nye problemy teorii i praktiki geterogennykh katalizatorov i adsorbentov: materialy VII Vserossiyskoy nauchnoy konferentsii g. Suzdal'* [To the issue of using the Dubinin–Astakhov equation in calculating the

isotherm H₂, CO₂, CO, CH₄, N₂ for the process of short-circuit adsorption of hydrogen extraction on NaX zeolite and activated carbon. Current problems in the theory and practice of heterogeneous catalysts and adsorbents: Proceedings of the VII Global Scientific Conference in Suzdal], 28 June – 01 July, 2023, Kazan, 2023, pp. 142-144. (In Russ.)

22. Ishin A.A., Skvortsov S.A., Matveykin V.G., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. [Modeling and optimization of cyclic adsorption processes of enrichment of gas mixtures with hydrogen], *Teoreticheskiye osnovy khimicheskoy tekhnologii* [Theoretical foundations of chemical technology], 2019, vol. 53, no. 5, pp. 559-571, doi: 10.1134/S0040357119040043 (In Russ., abstract in Eng.)

23. Dvoretzkiy S.I., Dvoretzkiy D.S., Akulinin E.I., Usachev V.B., Belyaev V.A. *Raschet kinetiki protsessy adsorbtsii pri razdelenii gazovykh smesey. Sovremennyye energosberegaiushchie teplovye i massoobmennyye tekhnologii (sushka, teplovye i massoobmennyye protsessy): sbornik nauchnykh trudov VIII Mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii* [Calculation of the kinetics of the adsorption process during the separation of gas mixtures. Modern energy-saving heat and mass-exchange technologies (drying, heat and mass-exchange processes): collection of scientific papers of the VIII International scientific and practical conference], 17-19 October, 2023, Moscow, 2023, pp. 85-89. (In Russ.)

24. Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. A numerical study of heat and mass exchange processes in swing adsorption device for oxygen-enriched air, *Advanced Materials and Technologies*, 2019, vol. 3, no. 15, pp. 56-65. doi: 10.17277/amt.2019.03.pp.056-065

25. Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. Numerical study of the dynamics of air separation process by pressure swing adsorption, *Bulletin SUSU MMCS*, 2019, vol. 12, no. 4, pp. 95-103. doi: 10.14529/mmp190407

26. Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. Methodology for creating and studying units for adsorption separation and purification of gas mixtures, *Journal of Advanced Materials and Technologies*, 2021, vol. 6, no. 3, pp. 179-203. doi: 10.17277/jamt.2021.03.pp.179-203

27. Rachinskiy V.V. *Vvedenie v obshchuyu teoriyu dinamiki sorbtsii i khromatografii* [Introduction to the general theory of sorption dynamics and chromatography], Moscow: Nauka, 1964, 136 p. (In Russ.)

28. Tovbin Yu.K. *Teoriya fiziko-khimicheskikh protsessov na granitse razdela faz «gaz-tverdoe telo»* [Theory of physical and chemical processes at the gas-solid phase boundary], Moscow: Nauka, 1990, 288 p. (In Russ.)

29. Tikhonov A.N., Samarskiy A.A. *Uravneniya matematicheskoy fiziki: ucheb. posobie* [Equations of mathematical physics: textbook], Moscow: Nauka, 1972, 735 p. (In Russ.)

30. Beloglazov I.N., Golubev V.O. *Osnovy rascheta filtratsionnykh protsessov* [Basics of calculating filtration processes], Moscow: Ruda i Metally, 2002, 210 p. (In Russ.)

31. Jiang L., Biegler L.T., Fox V.G. *Simulation and optimization of pressure-swing adsorption systems for air separation*, *AIChE J*, 2003, vol. 49, no. 5, pp. 1140-1157. doi: 10.1002/AIC.690490508

32. Dubinin M.M. *Adsorbtsiya i poristost'* [Adsorption and porosity], Moscow: VAKHZ, 1972, 127 p. (In Russ.)

33. Radushkevich L.V. *Osnovnyye problemy fizicheskoy adsorbtsii* [The main problems of physical adsorption], Moscow: Nauka, 1970, 270 p. (In Russ.)

34. Kheyfets L.I. *Mnogofaznyye protsessy v poristykh telakh* [Multiphase processes in porous bodies], Moscow: Khimiya 1982, 287 p. (In Russ.)

35. Tikhonov A.N., Arsenin V.Ya. *Metody resheniya nekorrektnykh zadach* [Methods for solving ill-posed problems], Moscow: Nauka, 1974, 224 p. (In Russ.)

36. Alifanov O.M., Artyukhin E.A., Rumyantsev S.V. *Ekstremal'nye metody resheniya nekorrektnykh zadach* [Extreme methods for solving ill-posed problems], Moscow: Nauka, 1988, 288 p. (In Russ.)
37. Dvoretzky S.I., Dvoretzky D.S., Akulinin E.I., Usachev V.B., Belyaev V.A. *Metodika rascheta kineticheskogo koeffitsienta massoperenosa v poristoy srede adsorbenta. Aktual'nye problemy teorii i praktiki geterogennykh katalizatorov i adsorbentov: materialy VII Vserossiiskoy nauchnoy konferentsii g. Suzdal'* [Method for calculating the kinetic coefficient of mass transfer in a porous medium of an adsorbent. Current problems of theory and practice of heterogeneous catalysts and adsorbents: Proceedings of the VII Global Scientific Conference in Suzdal], 28 June – 01 July, 2023, Kazan, 2023, pp. 142-144. (In Russ.)
38. Timofeev D.P. *Kinetika adsorbtsii* [Adsorption kinetics], Moscow: AN SSSR, 1962, 252 p. (In Russ.)
39. Akulinin E.I., Ishin A.A., Skvortsov S.A., Dvoretzkiy D.S. Mathematical modeling of hydrogen production process by pressure swing adsorption method, *Advanced Materials and Technologies*, 2017, no. 2, pp. 38-49. doi: 10.17277/amt.2017.02.pp.038-049
40. Ergun S. Fluid flow through packed columns, *Chem. Eng. Progress*, 1952, vol. 48, pp. 89-94.
41. Santos J.C., Portugal A.F., Magalhaes F.D., Mendes A. Simulation and optimization of small oxygen pressure swing adsorption units, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2004, vol. 43, no. 26, pp. 8328-8338. doi: 10.1021/ie0497011
42. Ding Z., Han Z., Fu Q., Shen Y., Tian C., Zhang D. Optimization and analysis of the VPSA process for industrial-scale oxygen production, *Adsorption*, 2018, vol. 24, no. 5, pp. 499-516. doi: 10.1007/s10450-018-9956-z
43. Makarem M.A., Mofarahi M., Jafarian B., Lee C.-H. Simulation and analysis of vacuum pressure swing adsorption using the differential quadrature method, *Computers and Chemical Engineering*, 2019, vol. 121, pp. 483-496. doi: 10.1016/j.compchemeng.2018.11.017
44. Akulinin E.I., Gladyshev N.F., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. [Methods of obtaining block zeolite adsorbents for implementing short-cycle adsorption processes], *Vestnik tekhnologicheskogo universiteta* [Bulletin of the Technological University], 2015, vol. 18, no. 15, pp. 122-125. (In Russ., abstract in Eng.)
45. Dvoretzky S.I., Dvoretzky D.S., Akulinin E.I., Usachev V.B., Belyaev V.A. [Modeling of H₂, CO₂, CO, CH₄, N₂ isotherms for hydrogen extraction by the pressure swing adsorption process using the Dubinin-Astakhov equation], *Matematicheskie metody v tekhnike i tekhnologiiakh* [Mathematical methods in engineering], 2023, no. 7, pp. 63-66. doi: 10.52348/2712-8873_MMTT_2023_7_63 (In Russ., abstract in Eng.)
46. Rudobashta S.P., Kosheleva M.K. [Determination of mass transfer and mass conductivity coefficients from kinetic curves], *Izvestiya vuzov. Tekhnologiya tekstil'noy promyshlennosti* [News of universities. Textile industry technology], 2015, vol. 6, no. 360, pp. 175-180. (In Russ., abstract in Eng.)
47. Akulinin Ye.I., Ishin A.A., Skvortsov S.A., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. [Numerical study of process dynamics of adsorptive fractionation of gas mixture and hydrogen concentration], *Chemical Technology*, 2018, vol. 19, no. 8, pp. 368-375. doi: 10.31044/1684-5811-2018-19-8-368-375 (In Russ., abstract in Eng.)
48. Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzky D.S., Dvoretzky S.I. [Numerical study of the dynamics and optimization of the modes of air adsorption separation and oxygen concentration], *Vestnik VGUIT* [Proceedings of the VSUET], 2019, vol. 81, no. 1, pp. 310-317. doi: 10.20914/2310-1202-2019-1-310-317 (In Russ., abstract in Eng.)
49. Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzky D.S., Dvoretzky S.I. [Numerical study of the dynamics of synthesis gas adsorption separation], *Vestnik VGUIT* [Proceedings of the VSUET], 2019, vol. 82, no. 1, pp. 230-236. doi: 10.20914/2310-1202-2020-1-230-236

50. Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Labutin A.N., Dvoretzky D.S., Dvoretzky S.I. Modeling and analysis dynamics of pressure swing adsorption process for synthesis gas separation and hydrogen production, *Transactions of the Tambov State Technical University*, 2020, vol. 26, no. 3, pp. 342-356. doi: 10.17277/vestnik.2020.03.pp.342-356
51. Golubyatnikov O.O., Akulinin E.I., Dvoretzky S.I. Numerical research to determine the dominant mechanism of mass and heat transfer in pressure swing adsorption processes, *Bulletin of the South Ural State University Series-Mathematical Modelling Programming and Computer Software*, 2021, vol. 14, no. 2, pp. 39-51. doi: 0.14529/mmp210204
52. Balakirev V.S., Dvoretzkiy S.I., Anis'kina N.N., Akishin V.N. *Matematicheskoe modelirovanie tekhnologicheskikh protsessov* [Mathematical modeling of technological processes], Yaroslavl: ID N.P. Pastuhova, 2018, 352 p. (In Russ.)
53. Dvoretzky S.I., Dvoretzky D.S., Akulinin E.I., Usachev V.B., Belyaev V.A. [Tasks and algorithms for designing optimal cyclic processes and systems for adsorption separation of gas mixtures], *Transactions of the Tambov State Technical University*, 2023, vol. 29, no. 4, pp. 605-623. doi: 10.17277/vestnik.2023.04.pp.605-623 (In Russ., abstract in Eng.)
54. Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzky S.I. Pressure swing adsorption for recovery hydrogen, oxygen and nitrogen from gas mixtures: mathematical modeling, optimization and units design, *ChemChemTech*, 2021, vol. 64, no. 11, pp. 8-29. doi: 10.6060/ivkkt.20216411.6459
55. Available at: <https://quantatec.ru/?ysclid=lub7xwlvve155924713/> (accessed 28 August 2024).
56. Akulinin E.I., Dvoretzky D.S., Dvoretzky S.I. [The Experimental study of the kinetics of the cyclic adsorption process of air enrichment with oxygen], *Transactions of the Tambov State Technical University*, 2021, vol. 27, no. 3, pp. 387-400. doi: 10.17277/vestnik.2021.03.pp.387-400 (In Russ., abstract in Eng.)
57. Akulinin E., Golubyatnikov O., Dvoretzky D., Dvoretzky S. Optimization and analysis of pressure swing adsorption process for oxygen production from air under uncertainty, *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly*, 2020, vol. 26, no. 1, pp. 89-104. doi: 10.2298/CICEQ190414028A
58. Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I., Chernyshov N.G. [Proektirovanie avtomatizirovannykh tekhnicheskikh sistem v usloviyakh neopredelennosti], *Sistemy upravleniya i informatsionnye tekhnologii* [Management systems and information technologies], 2016, vol. 4, no. 66, pp. 21-28. (In Russ.)
59. Dvoretzky S.I., Dvoretzky D.S., Akulinin E.I. [Setting optimization problems in the integrated design of technological processes, devices and control systems in conditions of uncertainty], *Transactions of the Tambov State Technical University*, 2024, vol. 30, no. 2, pp. 184-195. doi: 10.17277/vestnik.2024.02.pp.184-195

Ein neuer Ansatz zur Entwicklung einer Methodik für die integrierte Gestaltung von zyklischen Adsorptionsprozessen und Trennanlagen für Mehrkomponenten-Gasgemische

Zusammenfassung: Es ist ein neuer Ansatz für die Entwicklung der Methodik des integrierten Entwurfs von zyklischen Adsorptionsprozessen und -anlagen für die Trennung von Mehrkomponenten-Gasgemischen beim Vorhandensein von Unsicherheiten im Teil der Ausgangsdaten für den Entwurf vorgeschlagen. Beschrieben ist die Zusammensetzung des problemorientierten Komplexes, der für die Durchführung wissenschaftlicher Voruntersuchungen und die Begründung der Annahme von Konstruktions- und Ingenieursentscheidungen bei der Hardware- und Technologieplanung von zyklischen Adsorptionsprozessen und -anlagen (zur Trennung und Konzentration von Mehrkomponenten-Gasgemischen der in der Technik und im

sozialen Bereich weit verbreiteten Gasen (Sauerstoff, Wasserstoff, Stickstoff usw.)), vorgesehen ist. Es sind die allgemeine Formulierung des Problems der Dynamik der zyklischen Sorptionsprozesse und die Methoden ihrer Lösung, das verallgemeinerte Verfahren der Konstruktion des mathematischen Modells der Sorptionsdynamik in den zyklischen Adsorptionsprozessen der Trennung der Gasgemische vorgestellt. Der Vorbereitungsvorgang ist als Teil des problemorientierten Hard- und Softwarekomplexes von Ausgangsdaten zur Gestaltung und Konkretisierung konstruktiver Lösungen in der hardwaremäßigen und technologischen Gestaltung zyklischer Prozesse der Adsorptionstrennung von Mehrkomponenten-Gasgemischen angegeben.

Nouvelle approche pour l'élaboration d'une méthodologie de conception intégrée des procédés d'adsorption cyclique et des installations de séparation des mélanges gazeux à plusieurs composants

Résumé: Est proposée une nouvelle approche pour la mise au point d'une méthodologie de conception intégrée des procédés d'adsorption cyclique et des installations de séparation des mélanges gazeux à plusieurs composants, en l'absence de certitude quant à une partie des données de base pour la conception. Est décrite la composition d'un complexe destiné à la recherche scientifique préalable du projet et à la justification de la prise des décisions de conception matérielle et technologique des processus d'adsorption cycliques et des installations (pour la séparation des mélanges gazeux à plusieurs composants et la concentration de gaz largement utilisés dans la technologie et le domaine social (oxygène, hydrogène, azote, etc.)). Sont exposées la définition générale du problème de la dynamique des processus cycliques de sorption et les méthodes de sa solution, ainsi que la construction d'un modèle mathématique de la dynamique de sorption dans les processus d'adsorption cyclique de la séparation des mélanges gazeux. Est montrée la procédure de la préparation dans le cadre d'un complexe matériel-logiciel pour la conception et la justification des décisions sur les processus cycliques de la séparation par adsorption de mélanges à plusieurs composants.

Авторы: *Дворецкий Станислав Иванович* – доктор технических наук, профессор кафедры «Технологии и оборудование пищевых и химических производств»; *Дворецкий Дмитрий Станиславович* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Технологии и оборудование пищевых и химических производств»; *Акулинин Евгений Игоревич* – доктор технических наук, доцент кафедры «Технологии и оборудование пищевых и химических производств», ФГБОУ ВО «ТГТУ», Тамбов, Россия; *Авцинов Игорь Алексеевич* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой автоматизированных систем управления процессами и производствами, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий», Воронеж, Россия.