Математические методы и информационные системы в химической технологии

Mathematical methods and information systems in chemical technology

УДК 66.081.6:66.011 https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-1-75-88 EDN WUFZOJ



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

# Моделирование процесса мембранного разделения жидкой смеси в среде Aspen HYSYS

# А.В. Малыгин<sup>,</sup>, И.И. Емельянов, Р.В. Семин, А.Р. Фазлыев, Н.Н. Зиятдинов, А.В. Клинов

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, 420015 Россия <sup>⊠</sup>Автор для переписки, e-mail: MalyginAV@corp.knrtu.ru

#### Аннотация

Цели. Разработка и последующая верификация на основе экспериментальных данных расчетного блока процесса массопереноса в первапорационном мембранном модуле на основе керамической мембраны HybSi<sup>®</sup>.

**Методы.** Задача решалась при помощи математического моделирования в прикладном пакете Aspen HYSYS, предназначеном для моделирования химико-технологических процессов. Дифференциальные уравнения математической модели были представлены в виде системы разностных уравнений, которая решалась численным способом с адаптивным шагом по площади. Мембранный первапорационный модуль площадью S в ходе его моделирования разбивается на n интервалов, исходя из обеспечения внутри i-го интервала условия, чтобы изменение температуры  $\Delta T$  было меньше 1°С. Работоспособность программного модуля проверялась на основе сравнения результатов расчета с имеющимися экспериментальными данными по обезвоживанию этанола и изопропанола. Моделирование работы разработанного мембранного модуля проводилось в изотермических и адиабатических режимах.

Результаты. Используемая в разработанном расчетном первапорационном мембранном модуле математическая модель процесса первапорации учитывает изменение концентрации и температуры потока сырья вдоль поверхности мембраны HybSi<sup>®</sup>. Показано хорошее согласование для трех изотерм (60, 70 и 80°C) и двух вариантов давления со стороны пермеата (5 и 20 мм рт. ст.). Моделирование мембранного модуля площадью 1 м<sup>2</sup> в адиабатическом режиме работы показало, что процессы обезвоживания спиртов на мембранах HybSi<sup>®</sup> сопровождаются значительными тепловыми эффектами, связанными с расходом тепла на испарение через мембрану ввиду больших трансмембранных потоков для данной мембраны.

**Выводы.** Сравнительный анализ результатов моделирования мембранного модуля HybSi<sup>®</sup> в изотермическом и адиабатическом режимах работы показал, что расчет мембранного модуля без учета тепловых эффектов приводит к существенным ошибкам: в определении расхода пермеата — до 50%, в определении концентрации воды в ретанте до 1.3–1.8 раз. Поэтому выполнение проектных расчетов без учета тепловых эффектов будет приводить к существенному занижению требуемой поверхности мембранного модуля.

Ключевые слова	Поступила:	26.08.2024
моделирование, первапорация, мембрана HybSi <sup>®</sup> , Aspen HYSYS,	Доработана:	06.11.2024
обезвоживание спирта	Принята в печать:	25.12.2024

#### **Для цитирования**

Малыгин А.В., Емельянов И.И., Семин Р.В., Фазлыев А.Р., Зиятдинов Н.Н., Клинов А.В. Моделирование процесса мембранного разделения жидкой смеси в среде Aspen HYSYS. *Тонкие химические технологии*. 2025;20(1):75–88. https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-1-75-88

#### **RESEARCH ARTICLE**

# Modeling of membrane separation of liquid mixture in Aspen HYSYS

# Alexander V. Malygin<sup>⊠</sup>, Ilya I. Emel'yanov, Roman V. Semin, Azat R. Fazlyev, Nadir N. Ziyatdinov, Alexander V. Klinov

Kazan National Research Technological University, Kazan, 420015 Russia Corresponding author, e-mail: MalyginAV@corp.knrtu.ru

#### Abstract

**Objectives.** To develop and subsequently verify the calculation block of the mass transfer process in the pervaporation membrane module based on a HybSi<sup>®</sup> ceramic membrane using experimental data as a basis for the verification process.

**Methods.** The task was implemented using a mathematical simulation within the Aspen HYSYS application package, which is designed for modeling chemical engineering processes. The differential equations of the mathematical model were represented as a system of difference equations, which were then solved numerically with an adaptive area step. The membrane pervaporation module of area S during its modeling is divided into *n* intervals, based on ensuring within the *i*th interval the condition that the temperature change  $\Delta T$  is less than 1°C. A model was constructed to simulate the performance of the membrane module under isothermal and adiabatic operating conditions.

**Results.** The mathematical model of the pervaporation process employed in the developed computational membrane pervaporation module considers variations in the concentration and temperature of the feedstock flux along the surface of the HybSi<sup>®</sup> membrane. The performance of the software module was evaluated by comparing the calculated results with the available experimental data for the dehydration of ethanol and isopropanol. The results demonstrated a high degree of agreement for three isotherms (60, 70, and 80°C) and two variations of pressure on the permeate side (5 and 20 mm Hg). Modeling of the operation of the membrane module with the area of  $1 \text{ m}^2$  in adiabatic mode showed that the processes of alcohol dehydration on HybSi<sup>®</sup> membranes are accompanied by significant thermal effects associated with heat consumption to provide evaporation through the membrane due to large transmembrane fluxes.

**Conclusions.** The comparative analysis of the results of modeling the HybSi<sup>®</sup> membrane module in isothermal and adiabatic modes of operation demonstrated that the calculation of the membrane module without consideration of thermal effects results in significant errors. These include an overestimation of the permeate flow rate by up to 50% and an underestimation of the water concentration in the retentate by up to 1.3-1.8 times. It can be reasonably deduced that the omission of thermal effects in design calculations will result in a considerable underestimation of the requisite membrane module surface area.

Konwerde	Submitted:	26.08.2024
	<b>Revised:</b>	06.11.2024
modeling, pervaporation, Hybsi <sup>®</sup> membrane, Aspen HYSYS, alconol denydration	Accepted:	25.12.2024

#### **For citation**

Malygin A.V., Emel'yanov I.I., Semin R.V., Fazlyev A.R., Ziyatdinov N.N., Klinov A.V. Modeling of membrane separation of liquid mixture in Aspen HYSYS. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2025;20(1):75–88. https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-1-75-88

#### ВВЕДЕНИЕ

Неотъемлемой частью химической технологии являются процессы разделения многокомпонентных жидких смесей. Наиболее энергоемкими из них являются процессы разделения азеотропных смесей, к числу которых относятся экстрактивная и азеотропная ректификация, экстракция и пр. [1]. В рамках повышения эффективности разделения жидких смесей исследуются различные мероприятия как по теплоинтеграции потоков технологических схем процессов, так и по изменению рабочих агентов, участвующих в процессе разделения [2, 3]. В этом случае альтернативой данным процессам может выступать разделение жидких смесей методом первапорации, которое относится к перспективному направлению развития мембранных технологий. Изначально первапорация рассматривалась как технология для обезвоживания спиртов. Первая промышленная установка первапорации была предназначена для обезвоживания этанола на целлюлозно-бумажной фабрике в Германии [4]. В настоящее время, в зависимости от применяемой мембраны, первапорация может быть успешной альтернативой для решения сложных процессов разделения: дегидратации органических растворителей [5–7], извлечения органических соединений из водных растворов [8], разделения органических смесей [9, 10], удаления сернистых компонентов [11], опреснения воды [12]. В процессах первапорации используются мембраны из органических (полимерных), неорганических (керамических, цеолитных) и гибридных (комбинированных органических и неорганических) материалов [13].

Вопросу разработки, проектирования и внедрения мембранных технологий в производство уделяется в последнее время все большее внимание. Одним из основных инструментов для исследования, проектирования и оптимизации промышленных процессов является математическое моделирование. На практике для решения этих задач используются универсальные моделирующие программы (УМП) математического моделирования химико-технологических процессов и систем. Для моделирования мембранных процессов разделения наиболее широко используются продукты компаний Aspen Technologies, Chemstations, Invensys Systems [14]. К сожалению, в библиотеках расчетных модулей УМП, в том числе и в Aspen HYSYS (Aspen Technologies, США), который использовался в данной работе, отсутствует модуль для моделирования процесса первапорации. Преимуществом Aspen HYSYS является открытая архитектура, которая дает возможность создавать пользовательские термодинамические и кинетические модели, а также модели единиц оборудования с помощью встроенного языка программирования. Такая возможность позволила разработать в Aspen HYSYS расчетный модуль процесса первапорации. Включение расчетного модуля первапорации в УМП дает возможность пользователям проектировать как сами отдельные мембранные установки, так и технологические системы, включающие в свой состав данные установки.

При моделировании процессов разделения жидких смесей методом первапорации с использованием УМП в основном рассматриваются вопросы обезвоживания растворителей: этанола при подаче исходной смеси в жидком виде [15–17] (на промышленной мембране PERVAP 2210 и мембране на основе диоксида кремния) и при подаче исходной смеси в парофазном состоянии [18] (мембрана с селективном слоем из поливинилтриметилсилана); изопропанола (на промышленной мембране PERVAP 2210) [19]; изобутанола (на промышленных мембранах PERVAP 4060 и 1510) [17, 20]; уксусной кислоты (на мембране на основе диоксида кремния) [16].

В исследованиях больше всего представлены полимерные композиционные мембраны PERVAP, поскольку они были одними из первых доступными для коммерческого применения. При описании процесса первапорации на полимерных мембранах используется модель «растворения-диффузии», предложенная изначально Р. Райтенбахом [21]. В дальнейшем она была улучшена [22], т.к. имела проблемы при описании процесса первапорации водно-спиртовых смесей с высоким содержанием воды в исходной смеси. Данная модель хорошо зарекомендовала себя при расчете органофильных и гидрофильных процессов первапорации на полимерных композиционных мембранах [20, 23]. Разделительные свойства полимерных мембран сильно зависят от их конструкционных материалов и применяемых методов изготовления, также существенное влияние оказывают толщина мембраны и условия эксплуатации, такие как перепады температуры и парциального давления над мембраной. Это приводит к тому, что параметры модели трансмембранного потока для каждой мембраны должны определяться по экспериментальным данным [24].

В настоящей работе рассматривалась керамическая первапорационная мембрана HybSi<sup>®</sup> [25–27], которая тоже является коммерчески доступной и предназначена для решения задач обезвоживания спиртов. Мембрана HybSi<sup>®</sup> является трехслойной композиционной мембраной, в которой селективный слой из органо-неорганического гибридного материала с неорганической основой из диоксида кремния нанесен на поддерживающий слой из аморфного диоксида кремния, расположенный в свою очередь на внутренней поверхности керамических пористых трубок из α-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

# Математическая модель мембранного первапорационного модуля

Для создания модели мембранного модуля за основу была взята трехпараметрическая математическая модель стационарного процесса первапорационного разделения водно-спиртовой бинарной смеси на мембране HybSi<sup>®</sup> [27]:

$$\beta \left( x_A^F - x_A^B \right) + j x_A^B = P_A^m \frac{\left( p_A^B - p_A^P \right)}{\delta_{\rm m}} \varepsilon_{\rm a}, \tag{1}$$

$$\beta \left( x_A^B - x_A^F \right) + j \left( 1 - x_A^B \right) = P_B^m \frac{\left( p_B^B - p_B^P \right)}{\delta_{\rm m}} \varepsilon_{\rm a}, \tag{2}$$

$$x_A^P = \frac{\beta \left( x_A^F - x_A^B \right) + j x_A^B}{j},\tag{3}$$

где j — общий мольный поток двух компонентов через мембрану, моль/(м<sup>2</sup>·c);  $x_A$ ,  $x_B$  — мольная доля компонента A (вода) и B (спирт); верхние индексы F, B, P соответствуют концентрациям компонентов в исходной смеси, на границе с мембранной и

в пермеате соответственно;  $\delta_{\rm m}$  — толщина селективного слоя материала HybSi<sup>®</sup>,  $\delta_{\rm m} = 200$  нм;  $\beta$  — коэффициент массоотдачи, моль/(м<sup>2</sup>·c);  $p_A^B$  и  $p_A^P$  — парциальное давление компонента A на границе с мембраной в растворе и в пермеате соответственно, Па;  $P_A^m$  и  $P_B^m$  — коэффициент проницания для компонента A и B соответственно, моль/(м·с·Па);  $\varepsilon_{\rm a}$  — доля активных пор селективного слоя мембраны:

$$\varepsilon_{a} = \frac{1}{1 + Cx_{B}k_{B}},\tag{4}$$

где С — мольная плотность смеси, моль/м<sup>3</sup>;  $k_B$  — безразмерный коэффициент:

$$k_B = 8.078 \cdot 10^{-9} \exp\left(-\frac{5446.374}{T}\right).$$

Коэффициенты проницания  $P_A^m$  и  $P_B^m$  для компонентов определялись по следующему выражению:

$$P^{m} = \frac{\left(C_{1}T + C_{2}\right)\delta_{m}}{M\left(p^{V} - p\right)},\tag{5}$$

где T — температура, °С, M — молекулярная масса компонента;  $p^{\rm V}$  — давление насыщенных паров компонента, Па; p — давление со стороны пермеата, Па;  $C_1$  и  $C_2$  — коэффициенты линейной аппроксимации потока чистого компонента через мембрану (см. таблицу).

Таблица. Коэффициенты линейной аппроксимации для потока вещества [27]

Table. Linear approximation coefficients for the f	low
of matter [27]	

Вещество Substance	<i>C</i> <sub>1</sub>	<i>C</i> <sub>2</sub>
Вода Water	0.2775	-10.2183
Этанол Ethanol	0.004	-0.16
Изопропанол Isopropanol	0.000915	-0.05315

Парциальное давление компонента со стороны исходной смеси определялось по формуле  $p_A^B = p_A^V \gamma_A^B x_A^B$ , где  $p_A^V$  — давление насыщенных паров компонента A,  $\gamma_A^B$  — коэффициент активности компонента A в жидкой фазе. В расчетах использовалась модель Non-Random Two Liquid. Парциальное давление в пермеате определялось по формуле  $p_A^P = p \cdot x_A^P$ .

Особенностью процесса первапорации является наличие фазового перехода компонентов из жидкого

состояния в парообразное, для осуществления которого необходима энергия — теплота парообразования. В работе [27] в ходе экспериментов обеспечивался изотермический режим первапорации для определения характеристик мембраны при постоянной движущей силе процесса. На практике же, внутри мембранного модуля процесс идет в адиабатических условиях, и энергия для образования пермеата отбирается из сырьевого потока, следовательно во время этого процесса температура ретанта будет понижаться. Согласно модели «растворениядиффузии» [28], падение температуры может влиять на скорость сорбции пермеата на мембране, диффузионную способность пермеата внутри мембраны и движущую силу первапорации. Следовательно, общая селективность и поток пермеата будут значительно изменяться с падением температуры, что может не наблюдаться в других мембранных процессах, протекающих без фазового перехода. Поэтому применяемая площадь мембраны в модуле должна быть ограничена размером, обеспечивающим приемлемый перепад температуры. Если температура опускается ниже 50°С, процесс первапорации обычно прекращают [17].

В большинстве случаев в ходе процесса первапорации тепло испарения подводится только от исходной смеси, поэтому градиент температуры развивается в основном в направлении потока исходной смеси. В этом случае тепловой баланс для мембранного модуля запишется следующим образом [29]:

$$FC_p^F \Delta T = -P\Delta H,\tag{6}$$

где F и P — мольный расход исходной смеси и пермеата;  $C_p^F$  — теплоемкость исходной смеси;  $\Delta H$  — теплота парообразования пермеата;  $\Delta T$  — падение температуры между входным и выходным потоками модуля. Из уравнения (6) можно определить падение температуры в мембранном модуле:

$$\Delta T = -\frac{P\Delta H}{FC_p^F}.$$
(7)

Для описания структуры потоков внутри мембранного модуля HybSi<sup>®</sup>, состоящего из цилиндрических трубок, внутри которых сырьевой поток должен двигаться с линейной скоростью не менее 2 м/с [26, 27], в работе использовалась модель идеального вытеснения:

$$\frac{dF}{dz} = -\frac{j(T)dS}{dz},\tag{8}$$

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{j(T)\Delta H}{FC_p^F} \frac{dS}{dz}.$$
(9)

Система уравнений (8) и (9), с учетом модели переноса вещества через мембрану (1)–(3), позволяет провести расчет процесса первапорации в мембранном модуле площадью S.

В HYSYS отсутствуют встроенные математические функции, поэтому система дифференциальных уравнений (8) и (9) была представлена в виде системы разностных уравнений, которая решалась численным способом с адаптивным шагом по площади. Условия протекания процесса должны быть близки к изотермическим  $\Delta T \leq 1^{\circ}$ С, поэтому на каждом шаге проверялась величина изменения температуры. В случае невыполнения данного условия, шаг по площади уменьшался до тех пор, пока процесс не становился изотермичным. В задаче было принято допущение о постоянстве состава и температуры сырья на каждом шаге. Таким образом, мембранный первапорационный модуль площадью *S* разбивался на *n* интервалов. На рис. 1 представлена схема моделирования мембранного модуля.

Количество пермеата, прошедшего через мембрану на *i*-м шаге, определялось следующим образом:

$$P_i = \left(\sum_{l=1}^k J_l\right) \Delta S_i,\tag{10}$$

где  $\Delta S_i$  — шаг по площади,  $J_l$  — поток *l*-го компонента, k — количество компонентов, проходящих через мембрану. Сырьевой поток  $F_n$ , определенный на последнем шаге, будет являться ретантом R, выходящим из мембранного модуля.

## Создание пользовательского мембранного первапорационного модуля в Aspen HYSYS

Уравнения математической модели (8) и (9) и соответствующие им методы решения для процесса первапорации были доработаны для непосредственного использования в HYSYS без необходимости внешнего специального программирования. Программный код мембранного модуля реализуется с использованием встроенного редактора «MacroLanguageEditor» и включает три основные подпрограммы:

- 1) Initialize(), определяющую вид окна технологического объекта;
- Ехесиte(), включающую уравнения математической модели и вызов методов расчета свойств смеси компонентов;
- 3) StatusQuery(), формирующую сообщения о статусе исполнения программного кода.

Разработанный модуль процесса первапорации универсален к входной смеси компонентов. Выбор ключевых компонентов пермеата и ретанта осуществляется пользователем на основе их ID в списке компонентов смеси. Расчет парожидкостного равновесия, физикохимических и термодинамических свойств смесей веществ производится в режиме реального времени на основе выбранного пользователем пакета свойств в HYSYS. Модуль первапорации имеет в HYSYS уникальный идентификатор, позволяющий обращаться к нему из сторонних приложений. Укрупненный алгоритм расчета первапорационного модуля, объекты и их основные свойства представлены на рис. 2.

Контейнер .Feeds1 определяет объект входного потока модуля (.Item(1)), его свойства и методы доступа. Контейнер .Products1 содержит совокупность выходных потоков пермеата и ретанта (.Item(0), .Item(1)). Исходные данные процесса определяются в виде пользовательских переменных посредством графического интерфейса, текущие значения внутренних переменных отображаются в виде электронной таблицы .SpreadsheetOp с использованием объекта .Operations.

Обращение к параметрам компонентов, составляющих смесь, выполняется по имени компонента «CompName» в виде:

ActiveCase.Flowsheet.FluidPackage.Components. Item(«CompName»).





**Рис. 2.** Укрупненный алгоритм расчета мембранного модуля **Fig. 2.** Enlarged algorithm for calculating the membrane module

Обращение к параметрам выбранного термодинамического пакета производится через свойство .PropertyPackage объекта FluidPackage:

ActiveCase.Flowsheet.FluidPackage.PropertyPackage.

Добавляемый пользователем в проекте мембранный модуль настраивается на условия проведения процесса первапорации и осуществляется расчет. В результате решения из разработанного модуля в среду HYSYS передаются потоки пермеата и ретанта в требуемом формате пакета HYSYS, которые могут быть направлены дальше по схеме процесса разделения.

## Сравнение результатов расчета в Aspen HYSYS с экспериментальными данными

Проверку адекватности созданного модуля проводили для бинарных водно-спиртовых смесей. На рис. 3 и 4 приведено сравнение результатов расчета процесса первапорации для смесей этанол-вода и изопропанол-вода при давлении со стороны пермеата 5 и 20 мм рт. ст. с экспериментальными данными, представленными в работе [27]. Как видно из представленных результатов моделирования работы мембранного модуля в изотермическом режиме, полученные данные хорошо согласуются с экспериментальными данными для 3-х изотерм при разных давлениях со стороны пермеата, что является проверкой работоспособности модуля и правильности использования в нем структуры данных HYSYS.



**Рис. 3.** Суммарный поток пермеата *J* через мембрану HybSi<sup>®</sup> в зависимости от концентрации воды в исходной смеси  $x_w^f$ : (а) этанол–вода, 5 мм рт. ст.; (b) этанол–вода, 20 мм рт. ст.; (c) изопропанол–вода, 20 мм рт. ст. Геометрические фигуры — экспериментальные данные [27]

**Fig. 3.** Total permeate flow *J* through the HybSi<sup>®</sup> membrane depending on the concentration of water in the feed  $x_w^f$ : (a) ethanol–water, 5 mm Hg; (b) ethanol–water, 20 mm Hg; (c) isopropanol–water, 20 mm Hg. Geometric shapes are experimental data [27]



**Рис. 4.** Поток индивидуальных компонентов через мембрану HybSi<sup>®</sup> в зависимости от концентрации воды в исходной смеси  $x_w^f$ . На левых графиках представлен поток воды  $J_w$ , на правых поток спирта  $J_a$ : (a) этанол–вода, 5 мм рт. ст.; (b) этанол–вода, 20 мм рт. ст.; (c) изопропанол–вода, 20 мм рт. ст. Геометрические фигуры — экспериментальные данные [27]

**Fig. 4.** Flow of individual components through the HybSi<sup>®</sup> membrane depending on the concentration of water in the feed  $x_w^f$ . The left graphs show the flow of water  $J_w$ , the right graphs show the flow of alcohol  $J_a$ : (a) ethanol–water, 5 mm Hg; (b) ethanol–water, 20 mm Hg; (c) isopropanol–water, 20 mm Hg. Geometric shapes are experimental data [27]

## РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Следующим этапом исследований было проведение расчетов мембранного модуля в адиабатическом режиме работы. На рис. 5 приведен сравнительный анализ процесса дегидратациии этанола и изопропанола. В первом случае (рис. 5а) представлены результаты моделирования в зависимости от содержания воды в исходной смеси на мембранном модуле площадью 1 м<sup>2</sup>. Во втором случае (рис. 5b), представлены результаты моделирования разделения смеси спиртов с начальным содержанием воды 15 мас. % в зависимости от площади мембранного модуля. В обоих случаях моделирование проводилось при давлении на стороне пермеата 20 мм рт. ст. и производительностью по исходной смеси 100 кг/ч.

Если принять величину перепада температуры между входом и выходом из мембранного модуля равным 5°С, то можно считать, что сохраняется примерно близкий к изотермическому режим работы. Тогда, как видно из рис. 5а, при обезвоживании изопропанола на модуле равной площади область изотермического режима работы по концентрации воды в исходной смеси будет меньше. При температуре потока на входе 60°С это будут смеси изопропанола и этанола с начальным содержанием воды не более 4.75 и 10.4 мас. % соответственно. Аналогично,

содержание воды в этих смесях при 70°С составит 2.95 и 5.23 мас. %, при 80°С — 2.1 и 3.3 мас. %. Кроме того, для изопропанола изменение температуры на выходе из модуля характеризуется более резким падением по сравнению с этанолом. Данное поведение полностью коррелирует с величинами общих потоков для этих спиртов (см. рис. 3): для смеси изопропанола суммарный поток, при прочих равных условиях, оказывается больше, чем для смеси этанола.

Как видно из рис. 5b, при обезвоживании изопропанола с содержанием 15 мас. % воды в исходном сырье, размеры модуля, в котором сохраняются условия, близкие к изотермическому режиму, будут меньше по сравнению с этанолом. Для этанола при 80°С требуется в ~1.6 раза большая площадь мембраны, чем для изопропанола. При понижении температуры для 60°С разница площадей увеличивается до ~1.8 раза. С этой точки зрения, при моделировании работы первапорационного модуля на мембране HybSi<sup>®</sup> целесообразно руководствоваться не однотипными размерами мембранных модулей, а постоянной температурой ретанта на выходе из модуля, что, как было показано на примере коммерческих полимерных мембран, является более выгодным [30]. В этом случае после каждого модуля необходимо к потоку ретанта подводить дополнительное количество тепла для повышения движущей силы процесса.



Рис. 5. Температура ретанта *T* на выходе из мембранного модуля HybSi<sup>®</sup> для смеси этанол–вода (Et–W) и изопропанол–вода (Ip–W) в зависимости от состава  $x_w^f$  и площади *S*: (a)  $S = 1 \text{ м}^2$ ; (b) смесь с содержанием воды 15 мас. % Fig. 5. Retentate temperature *T* at the outlet of the HybSi<sup>®</sup> membrane module for a mixture of ethanol–water (Et–W) and isopropanol–water (Ip–W) depending on the composition  $x_w^f$  and area *S*: (a)  $S = 1 \text{ m}^2$ ; (b) mixture with a water content of 15 wt %

На рис. 6 представлены результаты моделирования процесса первапорационного обезвоживания этанола и изопропанола при начальном содержании воды в исходной смеси 15 мас. % на мембранных модулях с различной площадью поверхности. Моделирование работы мембранного модуля проводилось в адиабатическом режиме и без учета тепловых эффектов (в изотермическом режиме), при давлении на стороне пермеата 20 мм рт. ст. На рис. 6 показаны значения суммарного потока пермеата и концентрации воды в ретанте на выходе из единичного мембранного модуля в зависимости от его поверхности.

Как видно из рис. 6, расхождение суммарного потока пермеата для этанола в изотермическом и адиабатическом режимах работы, для модуля площадью 1 м<sup>2</sup>, составит 20.9% при 60°С и 30.1% при 80°С. Для модулей большей площади (2 м<sup>2</sup>) расхождение уже составит при 34.7 и 44.3% для 60 и 80°С соответственно. Для изопропанола при площади модуля 1 м<sup>2</sup>



**Рис. 6.** Суммарный поток пермеата *J* и концентрация воды в ретанте  $x_w^r$  в изотермическом и адиабатическом режимах работы: (а) этанол—вода (содержание воды 15 мас. %); (b) изопропанол—вода (содержание воды 15 мас. %)

**Fig. 6.** Total permeate flow *J* and water concentration in the retentate  $x_w^r$  in isothermal and adiabatic modes of operation: (a) ethanol–water, the water content is 15 wt %; (b) isopropanol–water, the water content is 15 wt % расхождение суммарного потока составит 30.6% при 60°С и 38.0% при 80°С, а при площади модуля 2 м<sup>2</sup> расхождение уже составит 46.8 и 51.8% при 60 и 80°С соответственно. Аналогичная картина наблюдается и для концентрации воды в ретанте: в изотермическом режиме она существенно снижается, расхождение между концентрациями, по сравнению с адиабатическим режимом, может достигать 1.3–1.8 раза.

Как видно из представленных результатов (рис. 5 и 6), процессы обезвоживания спиртов на мембранах HybSi<sup>®</sup> сопровождаются значительными тепловыми эффектами. Данные эффекты необходимо учитывать при разработке и проектировании мембранных модулей, чтобы избежать ошибок в определении требуемой поверхности мембранных модулей. Причем ошибка в определении требуемой поверхности мембранного модуля не является постоянной, она увеличивается с повышением температуры подаваемого сырья.

Если проводить сравнение показателей потока через мембраны HybSi<sup>®</sup> с полимерными коммерческими мембранами PERVAP 2210 [31], то поток пермеата при содержании воды 5 мас. % в исходной смеси в разы больше для керамических мембран при равных условиях процесса. Это говорит о том, что для проведения процесса обезвоживания спиртов потребуется меньшая суммарная поверхность мембранных модулей HybSi<sup>®</sup>.

# ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе разработан алгоритм и создан программный модуль в УМП Aspen HYSYS для расчета процесса первапорации на керамической мембране HybSi<sup>®</sup>. За основу при разработке модуля была взята трехпараметрическая математическая модель первапорационного разделения (1)–(3). Данная модель была дополнена уравнением теплового баланса (6) для определения изменения температуры сырьевого потока (7), проходящего через модуль. Проведенное сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными для обезвоживания этанола и изопропанола при разных температурах сырьевого потока и давлениях со стороны пермеата подтвердило достоверность разработанного мембранного модуля первапорации (рис. 3 и 4).

Результаты исследований показали, что процессы обезвоживания спиртов на мембранах HybSi<sup>®</sup> сопровождаются значительными тепловыми эффектами (рис. 5) ввиду больших трансмембранных потоков (рис. 3). Расчет модуля в изотермическом режиме без учета тепловых эффектов может приводить к существенным ошибкам: в определении расхода пермеата — до 50%, в определении концентрации воды в ретанте до 1.3–1.8 раза, причем эти ошибки увеличиваются с повышением температуры подаваемого

сырья (рис. 6). При выполнении проектных расчетов это будет приводить к существенному занижению требуемой поверхности мембранного модуля.

Разработанный в работе расчетный модуль процесса первапорации можно использовать в УМП Aspen HYSYS при моделировании процессов обезвоживания спиртов как в виде отдельного модуля, так и, например, при моделировании различных схем процессов обезвоживания.

#### Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-01261-22-00 «Энергоресурсосберегающие процессы разделения жидких смесей для выделения промышленных растворителей».

#### Acknowledgements

The work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, grant No. 075-01261-22-00 "Energy-saving processes of separation of liquid mixtures for the separation of industrial solvents."

#### Вклад авторов

**А.В. Малыгин** — разработка идеи и алгоритма создания расчетного модуля процесса первапорации, анализ и интерпретация полученных результатов, написание статьи.

**И.И. Емельянов** — разработка алгоритмов численных методов для расчетного модуля процесса первапорации в Aspen HYSYS, анализ и интерпретация полученных результатов.

**Р.В. Семин** — написание программного кода мембранного модуля, его отладка и тестирование.

**А.Р.** Фазлыев — графическая подготовка экспериментальных данных, консультирование.

**Н.Н. Зиятдинов** — руководство и научное консультирование, анализ материалов исследований.

**А.В. Клинов** — руководство и научное консультирование, анализ материалов исследований.

#### Authors' contributions

**A.V. Malygin** — development of the idea and algorithm for creating a calculation module of the pervaporation process, analysis and interpretation of the results obtained, and writing the text of the article.

**I.I. Emel'yanov** — development of algorithms of numerical methods for the calculation module of the pervaporation process at Aspen HYSYS, analysis and interpretation of the results obtained.

**R.V. Semin** — writing the program code of the membrane module, debugging and testing it.

A.R. Fazlyev — graphical preparation of experimental data, consulting.

**N.N. Ziyatdinov** — management and scientific consulting, analysis of research materials.

**A.V. Klinov** — management and scientific consulting, analysis of research materials.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов. The authors declare no conflicts of interest.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Тимошенко А.В., Анохина Е.А., Рудаков Д.Г., Тимофеев В.С., Тациевская Г.И., Матюшенкова Ю.В. Энергосбережение в ректификации с использованием комплексов со связанными потоками. Вестник МИТХТ им. М.В. Ломоносова (Тонкие химические технологии). 2011;6(4):28–39.
- Анохина Е.А., Шлейникова Е.Л., Тимошенко А.В. Энергоэффективность комплексов с частично связанными тепловыми и материальными потоками в экстрактивной ректификации смеси метилацетат – хлороформ. Вестник МИТХТ им. М.В. Ломоносова (Тонкие химические технологии). 2013;8(2):18–25.
- Раева В.М., Себякин А.Ю., Сазонова А.Ю., Фролкова А.К. Выбор потенциальных разделяющих агентов для экстрактивной ректификации смеси циклогексан – бензол. Вестник МИТХТ им. М.В. Ломоносова (Тонкие химические технологии). 2011;6(1):43–53.
- 4. Sander U., Soukup P. Design and operation of a pervaporation plant for ethanol dehydration. *J. Membr. Sci.* 1988;36: 463–475. https://doi.org/10.1016/0376-7388(88)80036-X
- Jyothi M.S., Reddy K.R., Soontarapa K., *et al.* Membranes for dehydration of alcohols via pervaporation. *J. Environ. Manage.* 2019;242:415–429.https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2019.04.043
- Raza W., Wang J., Yang J., Tsuru T. Progress in pervaporation membranes for dehydration of acetic acid. *Sep. Purif. Technol.* 2021;262:11833. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.118338
- Акберов Р.Р., Фазлыев А.Р., Клинов А.В., Малыгин А.В., Фарахов М.И., Маряхина В.А., Кириченко С.М. Обезвоживание диэтиленгликоля методом первапорации с помощью керамических мембран Hybsi. *Теоретические основы химической технологии*. 2014;48(5):594–600. https://doi.org/10.7868/S0040357114030014
- Zheng P., Li C., Wang N., Li J., An Q. The potential of pervaporation for biofuel recovery from fermentation: An energy consumption point of view. *Chinese J. Chem. Eng.* 2019;27(6):1296–1306. https://doi.org/10.1016/j.cjche.2018.09.025
- Liu H.-X., Wang N., Zhao C., Ji S., Li J.-R. Membrane materials in the pervaporation separation of aromatic/aliphatic hydrocarbon mixtures. *Chinese J. Chem. Eng.* 2018;26(1): 1–16. https://doi.org/10.1016/j.cjche.2017.03.006
- 10. Юшкин А.А., Голубев Г.С., Подтынников И.А., Борисов И.Л., Волков В.В., Волков А.В. Разделение смесей полярных и неполярных органических жидкостей методами первапорации и нанофильтрации. *Нефтехимия*. 2020;60(6):863–874. https://doi.org/10.31857/ S0028242120060209
- Mortaheb H., Ghaemmaghami F., Mokhtarani B. A review on removal of sulfur components from gasoline by pervaporation. *Chem. Eng. Res. Des.* 2012;90(3):409–432. https://doi. org/10.1016/j.cherd.2011.07.019
- Mukherjee M., Roy S., Bhowmick K., et al. Development of high performance pervaporation desalination membranes. Process Safety and Environmental Protection. 2022;159: 1092–1104. https://doi.org/10.1016/j.psep.2022.01.076
- Vane L. Review of pervaporation and vapor permeation process factors affecting the removal of water from industrial solvents. J. Chem. Technol. Biotechnol. 2020;95(3):495–512. https://doi.org/10.1002/jctb.6264
- Kancherla R., Nazia S., Kalyani S., Sridhar S. Modeling and simulation for design and analysis of membrane-based separation processes. *Computer: & Chem. Eng.* 2021;148:107258. https:// doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107258
- Koczka K., Mizsey P., Fonyo Z. Rigorous modelling and optimization of hybrid separation processes based on pervaporation. *Central European Journal of Chemistry*. 2007;5(4): 1124–1147. https://doi.org/10.2478/s11532-007-0050-8

#### **REFERENCES**

- Timoshenko A.V., Anokhina E.A., Rudakov D.G., Tatsievskaya G.I., Matyushenkova Yu.V. Power saving in distillation using complexes with coupled flows. *Vestnik MITHT (Fine Chem. Technol.)*. 2011;6(4):28–39 (in Russ.).
- 2. Anokhina E.A., Shleynikova E.L., Timoshenko A.V. Energy efficiency of complexes with partially coupled thermal and material flows for extractive distillation of methyl acetate chloroform mixture. *Vestnik MITHT (Fine Chem. Technol.).* 2013;8(2):18–25 (in Russ.).
- 3. Raeva V.M., Sebyakin A.Y., Sazonova A.Y., Frolkova A.K. The choice of possible entrainers for the extractive distillation of binary mixture benzene – cyclohexane. *Vestnik MITHT* (*Fine Chem. Technol.*). 2011;6(1):43–53 (in Russ.).
- 4. Sander U., Soukup P. Design and operation of a pervaporation plant for ethanol dehydration. *J. Membr. Sci.* 1988;36: 463–475. https://doi.org/10.1016/0376-7388(88)80036-X
- Jyothi M.S., Reddy K.R., Soontarapa K., *et al.* Membranes for dehydration of alcohols via pervaporation. *J. Environ. Manage*. 2019;242:415–429. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2019.04.043
- Raza W., Wang J., Yang J., Tsuru T. Progress in pervaporation membranes for dehydration of acetic acid. *Sep. Purif. Technol.* 2021;262:11833. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.118338
- Akberov R.R., Farakhov M.I., Klinov A.V., *et al.* Dehydration of diethylene glycol by pervaporation using HybSi ceramic membranes. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2014;48(5):650–655. https://doi.org/10.1134/S0040579514030014
   [Original Russian Text: Akberov R.R., Farakhov M.I., Maryakhina V.A., Kirichenko S.M., Fazlyev A.R., Klinov A.V., Malygin A.V. Dehydration of diethylene glycol by pervaporation using HybSi ceramic membranes. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii.* 2014;48(5):594–600 (in Russ.). https://doi.org/10.7868/S0040357114030014 ]
- Zheng P., Li C., Wang N., Li J., An Q. The potential of pervaporation for biofuel recovery from fermentation: An energy consumption point of view. *Chinese J. Chem. Eng.* 2019;27(6):1296–1306. https://doi.org/10.1016/j. cjche.2018.09.025
- Liu H.-X., Wang N., Zhao C., Ji S., Li J.-R. Membrane materials in the pervaporation separation of aromatic/aliphatic hydrocarbon mixtures. *Chinese J. Chem. Eng.* 2018;26(1): 1–16. https://doi.org/10.1016/j.cjche.2017.03.006
- Yushkin A.A., Golubev G.S., Podtynnikov I.A., *et al.* Separation of mixtures of polar and nonpolar organic liquids by pervaporation and nanofiltration (review). *Pet. Chem.* 2020;60(11):1317–1327. https://doi.org/10.1134/S0965544120110201
   [Original Russian Text: Yushkin A.A., Golubev G.S., Podtynnikov I.A., Borisov I.L., Volkov V.V., Volkov A.V. Separation of mixtures of polar and nonpolar organic liquids by pervaporation

and nanofiltration (review). *Neftekhimiya*. 2020;60(6): 863–874 (in Russ.). https://doi.org/10.31857/S0028242120060209]

- Mortaheb H., Ghaemmaghami F., Mokhtarani B. A review on removal of sulfur components from gasoline by pervaporation. *Chem. Eng. Res. Des.* 2012;90(3):409–432. https://doi. org/10.1016/j.cherd.2011.07.019
- Mukherjee M., Roy S., Bhowmick K., et al. Development of high performance pervaporation desalination membranes. Process Safety and Environmental Protection. 2022;159: 1092–1104. https://doi.org/10.1016/j.psep.2022.01.076
- Vane L. Review of pervaporation and vapor permeation process factors affecting the removal of water from industrial solvents. J. Chem. Technol. Biotechnol. 2020;95(3):495–512. https://doi.org/10.1002/jctb.6264
- Kancherla R., Nazia S., Kalyani S., Sridhar S. Modeling and simulation for design and analysis of membrane-based separation processes. *Computer: & Chem. Eng.* 2021;148:107258. https:// doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107258

- Verhoef A., Degreve J., Huybrechs B., et al. Simulation of a hybrid pervaporation-distillation process. Computer: & Chem. Eng. 2008;32(6):1135–1146. https://doi.org/10.1016/j. compchemeng.2007.04.014
- 17. Valentínyi N., Mizsey P. Comparison of pervaporation models with simulation of hybrid separation processes. *Periodica Polytechnica: Chemical Engineering.* 2014;58(1):7–14. https://doi.org/10.3311/PPch.7120
- 18. Козлова А.А., Трубянов М.М., Атласкин А.А., Янбиков Н.Р., Шалыгин М.Г. Моделирование процесса мембранного разделения газов и паров в среде Aspen Plus. Мембраны и мембранные технологии. 2019;9(1):3–8. https://doi.org/10.1134/S2218117219010048
- Csefalvay E., Szitkai Z., Mizsey P., Fonyo Z. Experimental data based modelling and simulation of isopropanol dehydration by pervaporation. *Desalination*. 2008;29(1–3):4–108. https:// doi.org/10.1016/j.desal.2007.07.029
- Toth A.J., Andre A., Haaz E., Mizsey P. New horizon for the membrane separation: Combination of organophilic and hydrophilic pervaporations. *Sep. Purif. Technol.* 2015;156(2): 432–443. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2015.10.032
- Rautenbach R., Herion C., Meyer-Blumenroth U. Engineering aspects of pervaporation: Calculation of transport resistances, module optimization and plant design. In: Huang R.Y.M. (Ed.). *Pervaporation Membrane Separation Processes*. Amsterdam: Elsevier; 1991. Chap. 3. P. 181–191.
- Valentínyi N., Cséfalvay E., Mizsey P. Modelling of pervaporation: Parameter estimation and model development. *Chem. Eng. Res. Des.* 2013;91(1):174–183. https://doi. org/10.1016/j.cherd.2012.07.001
- Tóth A.J., Mizsey P. Methanol removal from aqueous mixture with organophilic pervaporation: Experiments and modeling. *Chem. Eng. Res. Des.* 2015;98:123–135. https:// doi.org/10.1016/j.cherd.2015.04.031
- 24. Koch K., Gorak A. Pervaporation of binary and ternary mixtures of acetone, isopropyl alcohol and water using polymeric membranes: Experimental characterisation and modeling. *Chem. Eng. Sci.* 2014;115:95–114. https://doi. org/10.1016/j.ces.2014.02.009
- Castricum H.L., Kreiter R., van Veen H.M., *et al.* Highperformance hybrid pervaporation membranes with superior hydrothermal and acid stability. *J. Membrane Sci.* 2008;324(1–2):111–118. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2008. 07.014
- 26. Van Veen H.M., Rietkerk M.D.A., Shanahan D.P., et al. Pushing membrane stability boundaries with HybSi<sup>®</sup> pervaporation membranes. J. Membrane Sci. 2011;380(1–2): 124–131. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2011.06.040
- 27. Klinov A.V., Akberov R.R., Fazlyev A.R., Farakhov M.I. Experimental investigation and modeling through using the solution-diffusion concept of pervaporation dehydration of ethanol and isopropanol by ceramic membranes HybSi. J. Membrane Sci. 2017;524:321–333. https://doi. org/10.1016/j.memsci.2016.11.057
- Wijmans J.G., Baker R.W. The solution-diffusion model: a review. J. Membrane Sci. 1995;107(1–2):1–21. https://doi. org/10.1016/0376-7388(95)00102-I
- 29. Song K.M., Hong Y.K., Yu J., *et al.* Influence of Temperature Drop by Phase Transition on Pervaporation Processes in Vapor Phase Feed. *Korean J. Chem. Eng.* 2002;19(2):290–295. http://doi.org/10.1007/BF02698416
- 30. Vatankhah F., Moheb A., Mehrabani-Zeinabad A. A study on the effects of feed temperature and concentration on design of a multi-stage pervaporation system for isopropanol-water separation using commercial available modules with interstage heating. *J. Membrane Sci.* 2021;618:118717. https://doi. org/10.1016/j.memsci.2020.118717

- Koczka K., Mizsey P., Fonyo Z. Rigorous modelling and optimization of hybrid separation processes based on pervaporation. *Central European Journal of Chemistry*. 2007;5(4): 1124–1147. https://doi.org/10.2478/s11532-007-0050-8
- Verhoef A., Degreve J., Huybrechs B., *et al.* Simulation of a hybrid pervaporation-distillation process. *Computer: & Chem. Eng.* 2008;32(6):1135–1146. https://doi.org/10.1016/j. compchemeng.2007.04.014
- 17. Valentínyi N., Mizsey P. Comparison of pervaporation models with simulation of hybrid separation processes. *Periodica Polytechnica: Chemical Engineering*. 2014;58(1):7–14. https://doi.org/10.3311/PPch.7120
- Kozlova A.A., Trubyanov M.M., Atlaskin A.A., et al. Modeling membrane gas and vapor separation in the aspen plus environment. *Membranes and Membrane Technologies*. 2019;1(1):1–5. https://doi.org/10.1134/S2517751619010049 [Original Russian Text: Kozlova A.A., Trubyanov M.M., Atlaskin A.A., Yanbikov N.R., Shalygin M.G. Modeling membrane gas and vapor separation in the aspen plus environment. *Membrany i membrannye tekhnologii*. 2019;9(1):3–8 (in Russ.). https://doi.org/10.1134/S2218117219010048 ]
- Csefalvay E., Szitkai Z., Mizsey P., Fonyo Z. Experimental data based modelling and simulation of isopropanol dehydration by pervaporation. *Desalination*. 2008;29(1–3):4–108. https:// doi.org/10.1016/j.desal.2007.07.029
- Toth A.J., Andre A., Haaz E., Mizsey P. New horizon for the membrane separation: Combination of organophilic and hydrophilic pervaporations. *Sep. Purif. Technol.* 2015;156(2): 432–443. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2015.10.032
- Rautenbach R., Herion C., Meyer-Blumenroth U. Engineering aspects of pervaporation: Calculation of transport resistances, module optimization and plant design. In: Huang R.Y.M. (Ed.). *Pervaporation Membrane Separation Processes*. Amsterdam: Elsevier; 1991. Chap. 3. P. 181–191.
- Valentínyi N., Cséfalvay E., Mizsey P. Modelling of pervaporation: Parameter estimation and model development. *Chem. Eng. Res. Des.* 2013;91(1):174–183. https://doi. org/10.1016/j.cherd.2012.07.001
- Tóth A.J., Mizsey P. Methanol removal from aqueous mixture with organophilic pervaporation: Experiments and modeling. *Chem. Eng. Res. Des.* 2015;98:123–135. https:// doi.org/10.1016/j.cherd.2015.04.031
- Koch K., Gorak A. Pervaporation of binary and ternary mixtures of acetone, isopropyl alcohol and water using polymeric membranes: Experimental characterisation and modeling. *Chem. Eng. Sci.* 2014;115:95–114. https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.02.009
- Castricum H.L., Kreiter R., van Veen H.M., *et al.* Highperformance hybrid pervaporation membranes with superior hydrothermal and acid stability. *J. Membrane Sci.* 2008; 324(1–2):111–118. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2008.07.014
- 26. Van Veen H.M., Rietkerk M.D.A., Shanahan D.P., *et al.* Pushing membrane stability boundaries with HybSi<sup>®</sup> pervaporation membranes. *J. Membrane Sci.* 2011;380(1–2): 124–131. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2011.06.040
- Klinov A.V., Akberov R.R., Fazlyev A.R., Farakhov M.I. Experimental investigation and modeling through using the solution-diffusion concept of pervaporation dehydration of ethanol and isopropanol by ceramic membranes HybSi. J. Membrane Sci. 2017;524:321–333. https://doi. org/10.1016/j.memsci.2016.11.057
- Wijmans J.G., Baker R.W. The solution-diffusion model: a review. J. Membrane Sci. 1995;107(1-2):1-21. https://doi. org/10.1016/0376-7388(95)00102-I
- 29. Song K.M., Hong Y.K., Yu J., *et al.* Influence of Temperature Drop by Phase Transition on Pervaporation Processes in Vapor Phase Feed. *Korean J. Chem. Eng.* 2002;19(2):290–295. http://doi.org/10.1007/BF02698416

- Kubaczka A., Kamiński W., Marszałek J. Predicting mass fluxes in the pervaporation process using Maxwell-Stefan diffusion coefficients. *J. Membrane Sci.* 2018;546:111–119. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2017.08.074
- 30. Vatankhah F., Moheb A., Mehrabani-Zeinabad A. A study on the effects of feed temperature and concentration on design of a multi-stage pervaporation system for isopropanolwater separation using commercial available modules with inter-stage heating. J. Membrane Sci. 2021;618:118717. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2020.118717
- Kubaczka A., Kamiński W., Marszałek J. Predicting mass fluxes in the pervaporation process using Maxwell-Stefan diffusion coefficients. *J. Membrane Sci.* 2018;546:111–119. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2017.08.074

#### Об авторах

**Малыгин Александр Владимирович,** к.т.н., и.о. заведующего кафедрой «Системотехника», ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, Россия, Казань, ул. Карла Маркса, д. 68). E-mail: mav@kstu.ru. Scopus Author ID 57189716825, ResearcherID J-8948-2017, SPIN-код РИНЦ 7953-7259, https://orcid.org/0000-0002-0674-6773

**Емельянов Илья Игоревич**, к.т.н., доцент, кафедра «Системотехника», ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, Россия, Казань, ул. Карла Маркса, д. 68). E-mail: EmelyanovII@corp.knrtu.ru. Scopus Author ID 56609966600, ResearcherID AAH-7924-2019, SPIN-код РИНЦ 1838-4010, https://orcid.org/0000-0003-0257-0739

Семин Роман Вадимович, магистрант, ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, Россия, Казань, ул. Карла Маркса, д. 68). E-mail: prodigy19913@mail.ru. https://orcid.org/0009-0004-0439-6185

Фазлыев Азат Равилевич, к.т.н., доцент, кафедра «Процессы и аппараты химической технологии», ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, Россия, Казань, ул. Карла Маркса, д. 68). E-mail: FazlyevAR@corp.knrtu.ru. Scopus Author ID 56413092300, ResearcherID F-5385-2016, SPIN-код РИНЦ 5951-6042, https://orcid. org/0000-0002-2956-3558

Зиятдинов Надир Низамович, д.т.н., профессор, кафедра «Системотехника», ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, Россия, Казань, ул. Карла Маркса, д. 68). E-mail: nnziat@yandex.ru. Scopus Author ID 8157424700, ResearcherID AAH-7789-2019, SPIN-код РИНЦ 9966-4183, https://orcid.org/0000-0002-2314-8935

Клинов Александр Вячеславович, д.т.н., заведующий кафедрой «Процессы и аппараты химической технологии», ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, Россия, Казань, ул. Карла Маркса, д. 68). E-mail: alklin@kstu.ru. Scopus Author ID 36907475500, ResearcherID K-8270-2017, SPIN-код РИНЦ 2116-4141, https://orcid. org/0000-0002-7833-8330

#### About the authors

Alexander V. Malygin, Cand. Sci. (Eng.), Acting Head of the Department of Systems Engineering, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Russia). E-mail: mav@kstu.ru. Scopus Author ID 57189716825, ResearcherID J-8948-2017, RSCI SPIN-code 7953-7259, https://orcid.org/0000-0002-0674-6773

Ilya I. Emel'yanov, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Department of Systems Engineering, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Russia). E-mail: EmelyanovII@corp.knrtu.ru. Scopus Author ID 56609966600, ResearcherID AAH-7924-2019, RSCI SPIN-code 1838-4010, https://orcid.org/0000-0003-0257-0739

Roman V. Semin, Master Student, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Russia). E-mail: prodigy19913@mail.ru. https://orcid.org/0009-0004-0439-6185

Azat R. Fazlyev, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Department of Processes and Apparatuses of Chemical Technology, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Russia). E-mail: FazlyevAR@corp.knrtu.ru. Scopus Author ID 56413092300, ResearcherID F-5385-2016, RSCI SPIN-code 5951-6042, https://orcid.org/0000-0002-2956-3558

Nadir N. Ziyatdinov, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Department of Systems Engineering, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Russia). E-mail: nnziat@yandex.ru. Scopus Author ID 8157424700, ResearcherID AAH-7789-2019, RSCI SPIN-code 9966-4183, https://orcid.org/0000-0002-2314-8935

Alexander V. Klinov, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Head of the Department of Processes and Apparatuses of Chemical Technology, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Russia). E-mail: alklin@kstu.ru. Scopus Author ID 36907475500, ResearcherID K-8270-2017, RSCI SPIN-code 2116-4141, https://orcid.org/0000-0002-7833-8330

Отпечатано в МИРЭА – Российском технологическом университете.

119454, РФ, Москва, пр-т Вернадского, д. 78. Подписано в печать 27.02.2025.

Формат 60×90/8. Печать цифровая. Уч.-изд. листов 11. Тираж 100 экз. Заказ № 2323.

Подписку на печатную версию журнала Тонкие химические технологии = Fine Chemical Technologies можно оформить через ООО «Агентство «Книга-Сервис», www.akc.ru. Подписной индекс: **36924**. Printed in MIREA – Russian Technological University.

78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454, Russian Federation. Signed to print on February 27, 2025.
Format 60×90/8. Digital print. C.p.l. 11.
100 copies. Odder no. 2323.

#### Subscription to the

*Tonkie Khimicheskie Tekhnologii = Fine Chemical Technologies* printed version can be made through the *Kniga-Servis* Agency, www.akc.ru. Subscription index: **36924**.