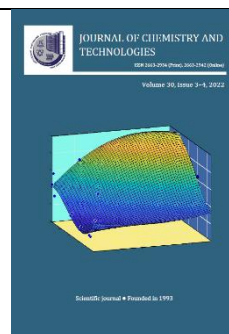




## Journal of Chemistry and Technologies

pISSN 2663-2934 (Print), ISSN 2663-2942 (Online).

journal homepage: <http://chemistry.dnu.dp.ua>



UDC 66.011

### MODELING OF THE ADSORPTIVE WATER REMOVAL FROM DICHLOROMETHANE USING THE ASPEN ADSORPTION PROGRAM: ADSORPTION STAGE

Michael A. Podzharsky

*Oles Honchar Dnipro National University, 72, Gagarin Ave., Dnipro, 49010, Ukraine  
Received 6 September 2022; accepted 4 October 2022; available online 31 October 2022*

#### Abstract

The author proposed a method for calculating the adsorber for water removal from dichloromethane, which involves modeling the process in the Aspen Adsorption program, which is a powerful mathematical modeling tool. In his method, the author used experimental breakthrough curves, conditions of adsorption equilibrium, kinetics, heat exchange, and mass exchange. The developed method makes it possible to determine the breakthrough time and liquid temperature for different values of adsorber productivity, its dimensions, and the initial water content in dichloromethane. The author discovered that as a result of heat release in the adsorber, a "hot spot" appears, and the temperature of the liquid in it can differ significantly from the initial one. This factor is important for the selection of the size of the apparatus and the organization of its operation – since the temperature in the "hot spot" can rise to the boiling point of dichloromethane if the design is incorrect.

*Keywords:* solvent technology; dehydration process; adsorption; dichloromethane; zeolites; breakthrough curves, modeling; Aspen Adsorption, heat exchange; mass transfer.

### МОДЕЛЮВАННЯ АДСОРБЦІЙНОГО ВИДАЛЕННЯ ВОДИ З ДИХЛОРЕТАНУ З ВИКОРИСТАННЯМ ПРОГРАМИ ASPEN ADSORPTION: СТАДІЯ АДСОРБЦІЇ

Михайло А. Поджарський

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, просп. Гагаріна, 72, Дніпро, 49010, Україна*

#### Анотація

Запропоновано методику розрахунку адсорбера для видалення води з дихлорметану, яка передбачає моделювання процесу у програмі Aspen Adsorption. Використані експериментальні криві проскоку, враховані умови адсорбційної рівноваги, кінетики, особливості тепло- та масообміну. Розроблена методика дозволяє визначати час проскоку та температуру рідини для різних значень продуктивності адсорбера, його розмірів, початкового вмісту води в дихлорметані. Встановлено, що в результаті виділення тепла в адсорбері виникає гаряча точка, температура рідини в якій може значно відрізнятись від початкової, і цей фактор є суттєвим для вибору розмірів апарату.

*Ключові слова:* технологія розчинників; процес зневоднення; адсорбція; дихлорметан; цеоліти; криві проскоку, моделювання; Aspen Adsorption, теплообмін; масообмін

\*Corresponding author: e-mail address: podzharsky@ua.fm

© 2022 Oles Honchar Dnipro National University;

doi: 10.15421/jchemtech.v30i3.264054

## Вступ

Виробництво багатьох органічних речовин потребує застосування розчинників з низьким вмістом води, близьким до абсолютного стану [1]. Серед них, наприклад, похідні фероцену [2] або деякі фармацевтичні препарати [3]. Отримання цих продуктів у товарних кількостях в умовах промислового виробництва пов'язано з деякими технологічними проблемами. Так, застосування звичайної ректифікації лімітовано тим, що багато розчинників утворюють з водою азеотропні суміші. Методи азеотропної та екстракційної ректифікації спроможні подолати це обмеження, але мають низьку термодинамічну ефективність, потребують великих матеріальних та енергетичних витрат [4–6]. Новий багатообіцяючий метод розділення азеотропних сумішей – первапорація [7; 8] – і ще новіший – мета-сепарація [9; 10] – поки що знаходяться на стадії лабораторних досліджень, і до широкого промислового застосування їм далеко. З урахуванням всього цього найбільш перспективним методом осушення органічних розчинників наразі слід вважати адсорбцію води твердими поглиначами, у першу чергу, силікагелем і цеолітами [3; 11–14]. Цеоліти є найбільш перспективними та, певною мірою, унікальними осушувачами органічних рідин [15]. Відповідні технології вже вийшли за стіни лабораторій – провідні світові компанії випускають на ринок промислове обладнання [16]. У зв'язку з цим актуальною задачею є розробка сучасних методик розрахунку цеолітових адсорберів, необхідних для адекватного вибору апаратів, що вже є на ринку, або конструювання нових під конкретні технологічні цілі.

Переважає більшість адсорберів, що використовуються, – це з апарати нерухомим шаром зернистого адсорбенту – вертикальні колони, заповнені твердими гранулами. Їх розрахунок полягає у тому, щоб визначити

тривалість стадії адсорбції, тобто час до початку проскоку адсорбату, за певних значень діаметру та висоти колони, якщо відомі склад і кількість вихідної суміші. Або навпаки – розрахувати розміри колони, які забезпечать задану тривалість адсорбції.

Теорія адсорбції розвинута дуже добре, має надійний математичний апарат [17]. Відомі традиційні способи розрахунку адсорберів «вручну» [18; 19]. Але сучасні підходи до створення хіміко-технологічного обладнання пов'язані з використанням засобів автоматизованого проектування. Наприклад, добре зарекомендував себе програмний комплекс CHEMCAD [20–22]. На жаль, в ньому не передбачене моделювання адсорбційних процесів. Наразі існує інша програма, яка є вельми потужним інструментом моделювання саме процесів адсорбції – це Aspen Adsorption [23; 24].

Мета цієї роботи – розробка методики розрахунку адсорбера для видалення води з дихлорметану за допомогою цеоліту 3А з використанням програми Aspen Adsorption. Вихідними даними служили результати експериментів, викладені в літературі.

Технологічний процес адсорбції складається мінімум з двох послідовних стадій: власне адсорбції адсорбату на поверхні адсорбенту і його десорбції з метою відновлення поглинача. В даній роботі розглянуто стадію адсорбції.

## Методика дослідження

Використана програма Aspen Adsorption V10 програмного пакета aspenONE. Застосована найпростіша схема рідинної адсорбції у динамічному режимі на основі одношарового адсорбера. Об'єкт моделювання – колона з боросилікатного скла з товщиною стінки 3 мм, заповнена цеолітом 3А. Прийняте, що на цеоліті адсорбується тільки вода, дихлорметан ніяк з ним не взаємодіє. Базові параметри моделі та вихідні дані для розрахунків наведені у табл. 1 і 2.

Basic parameters of the model

Table 1

Таблиця 1

### Базові параметри моделі

Physical Property Method	Peng-Robinson
General	
Discretization Method	UDS-1
Number Of Nodes	40
Material / Momentum Balance	
Material Balance Assumption	Convection with Constant Dispersion
Pressure Drop Assumption	Carman-Kozeny

Velocity Assumption	Constant
Kinetic Model	
Film Model Assumption	Solid
Kinetic Model Assumption	Linear Lumped Resistance
Form Of Mass Transfer Coefficient	Constant
Isotherm	
Isotherm Assumed For Layer	Langmuir-Freundlich 1
Energy Balance	
Energy Balance Assumption	Non-Isothermal with Fluid & Solid Phase Conduction
Consider Heat Of Adsorbed Phase	Yes
Heat Of Adsorption Assumption	Constant
Form Of Heat Transfer Coefficient	Constant
Form Of Fluid Thermal Conductivity	Constant
Heat Transfer To Environment	Rigorous

Table 2

## The initial data and notation

Таблиця 2

## Вихідні дані та позначення

1	Value	Units	Description	The source
1	2	3	4	5
Physical Properties				
$\mu$	$4.37 \cdot 10^{-4}$	Pa s	Viscosity	[3]
$\rho_l$	1325	kg/m <sup>3</sup>	Liquid density	[3]
$C_l$	1156	J/(kg K)	Liquid-specific heat capacity	[3]
$\lambda_l$	0.1392	W/(m K)	Constant Liquid thermal conductivity	[3]
$\rho_p$	1199.3	kg/m <sup>3</sup>	Particle density	[13]
$\varepsilon_p$	0.37	-	Particle porosity	[13]
$\varepsilon_i$	0.36	-	Inter-particle voidage	[13]
$C_s$	0.925	kJ/(kg K)	Adsorbent-specific heat capacity	[3]
$d_p$	2	mm	Adsorbent particle diameter	[13]
$S_{Fac}$	1	-	Adsorbent shape factor	
$\lambda_s$	0.355	W/(m K)	Solid thermal conductivity	[3]
Langmuir-Freundlich isotherm				
$IP_1(H_2O)$	0.0214	n/a	Isotherm parameter	(1)
$IP_2(H_2O)$	2.1	n/a	Isotherm parameter	(1)
$IP_3(H_2O)$	0.2238	n/a	Isotherm parameter	(1)
Bed specification				
$H_b$	0.8	m	Height of the adsorbent layer	
$D_{wi}$		m	The internal diameter of the adsorbent layer	
$D_{wo}$	$D_{wi}+0.006$	m	External diameter of the adsorbent layer	
$D_{ax}(H_2O)$		m <sup>2</sup> /s	Constant Dispersion Coefficient	(2)-(4)
$V_f$		m <sup>3</sup> /s	Feed flowrate	
$u_f$		m/s	Superficial fluid velocity	
$Re$		-	Reynolds number	(4)
$Sc$		-	Schmidt number	(3)
Mass transfer				
$MTC(H_2O)$		1/s	Constant mass transfer coefficients	
$D_m \approx D_s$		m <sup>2</sup> /s	Surface diffusion coefficient	[3]
$\tau_{bh}$		hr	Breakthrough time	
$\Delta t_{max}^{out}$		°C	The maximum difference in liquid temperature at the exit from the column and at the entrance to it	
$\Delta t_{max}$		°C	The maximum change in temperature of the liquid in the column	
Heat transfer				
$\Delta H(H_2O)$	-45.5	kJ/mol	Constant Heat of adsorption	[13]
$HTC$		W/(m <sup>2</sup> K)	Constant liquid to adsorbent heat transfer coefficient	(7)-(9)
$H_w$		W/(m <sup>2</sup> K)	Heat transfer coefficient between liquid and wall	(7), (8), (10)
$\rho_w$	2230	kg/m <sup>3</sup>	Wall density	[25]

$C_{pw}$	830	J/(kg K)	Wall-specific heat capacity	[25]
$K_w$	1.2	W/(m K)	Wall thermal conductivity	[25]
$T_{amb}$		K	Ambient temperature	
$H_{amb}$	9.74	W/(m <sup>2</sup> K)	Heat transfer coefficient between wall and ambient	(11)

**Розрахункові формули.** Для характеристики рівноважного стану застосоване рівняння ізотерми Ленгмюра-Фрейндліха [1], коефіцієнти якого були отримані шляхом апроксимації експериментальних даних, представлених в [3, Fig. 3 a]:

$$w_i = \frac{IP_{1i}IP_{2i}C_i^{IP_{3i}}}{1 + IP_{2i}C_i^{IP_{3i}}} \quad (1)$$

Коефіцієнт осевої дисперсії розраховувався за допомогою кореляції Вакао [3]:

$$\frac{D_{ax}}{u_f d_p} = \frac{20}{ScRe} + \frac{1}{2}. \quad (2)$$

Число Шмідта [3]:

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_m}. \quad (3)$$

Число Рейнольдса для зернистого шару [16]:

$$Re = \frac{2 S_{Fac} \rho_l d_p u_f}{3(1 - \varepsilon_i) \mu}. \quad (4)$$

$$u_f = \frac{V_f}{0,785 D_b}. \quad (5)$$

Коефіцієнти теплопередачі від рідини до адсорбенту та від рідини до стінки колони розраховувалися за такими рівняннями [3]:

$$Nu_{is} = 0.2 + 1.1 Pr^{1/3} Re^{0.6}, \quad (6)$$

$$Nu_{lw} = 0.2 Pr^{1/3} Re^{0.8}, \quad (7)$$

$$Pr = \frac{C_l \mu}{\lambda_l}, \quad (8)$$

$$HTC = \frac{Nu_{lw} \lambda_l}{d_p}. \quad (9)$$

$$H_w = \frac{Nu_{is} \lambda_l}{d_p}. \quad (10)$$

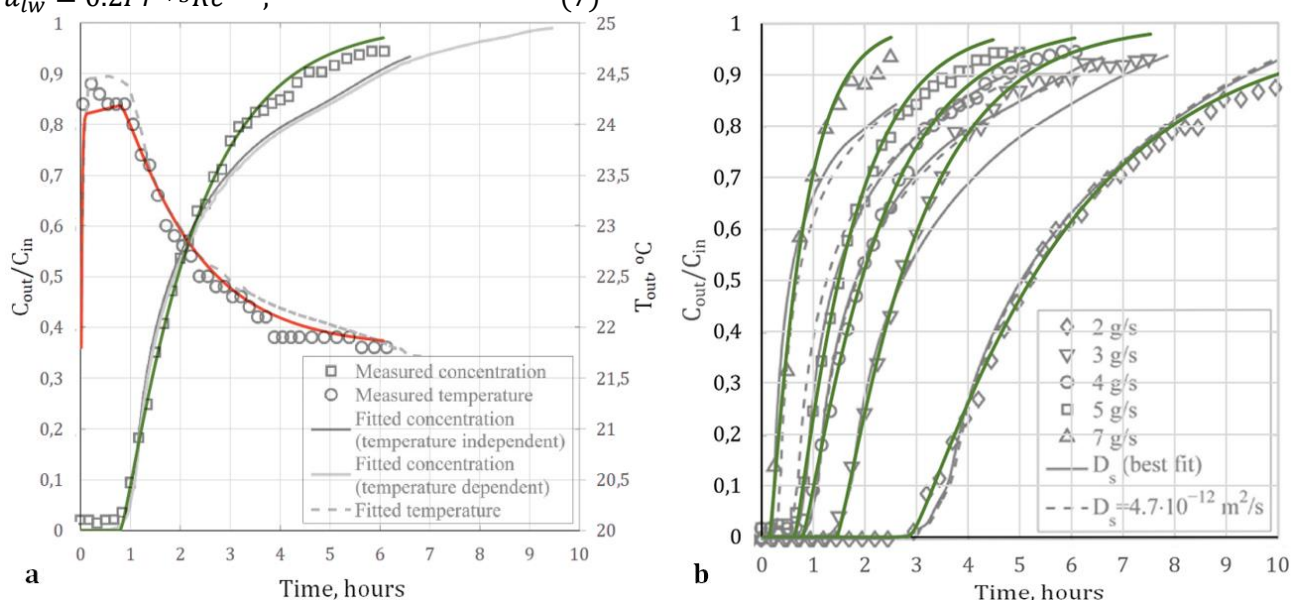
Коефіцієнт тепловіддачі від зовнішньої поверхні стінки колони в оточуюче середовище розрахований по емпіричному рівнянню [17]:

$$H_{amb} = 9.74 + 0.07 \Delta t, \quad (11)$$

де  $\Delta t$  – різниця між величинами температури зовнішньої поверхні стінки колони та оточуючого середовища. Прийнято, що  $\Delta t = 0$ .

### Результати та їх обговорення

У процесі відпрацюванні моделі ставилася задача відтворити експериментальні криві проскоку, наведені у статті [3], в якій викладені результати дослідження адсорбційного видалення води з дихлорметану за допомогою молекулярних сит 3А. На рис. 1 наведені отримані результати. Розрахункові криві (кольорові) показані накладеними на експериментальні [3, рис. 4 і 5]. Їх збіг є ознакою адекватності створеної моделі.



**Fig. 1.** The breakthrough curves calculated using Aspen Adsorption compared to experimental data [3] for a column with a diameter of 31 mm: a – mass flow rate 4 g/s; b – various mass flow rates

**Рис. 1.** Розраховані за допомогою Aspen Adsorption криві проскоку в порівнянні з експериментальними даними [3] для колони діаметром 31 мм: а – масова витрата потоку of 4 г/с; б – різні значення масової витрати

У табл. 3 наведені результати розрахунків кривих проскоку, показаних на рис. 1. Коефіцієнти дисперсії та теплопередачі визначені відповідно до чисел Рейнольдса для кожного значення об'ємної витрати рідини. Коефіцієнти масопередачі підбирали таким чином, щоб добитися збігу розрахованих кривих з експериментальними. Слід зазначити, що використані значення

коефіцієнта рівняння ізотерми Ленгмюра Фрейндліха  $IP1$  відрізняються від тих, що отримані апроксимацією експериментальних даних (див. табл. 1).

У табл. 3 також наведено час проскоку і максимальна різниця величин температури рідини на виході з колони й на вході в неї, яка відповідає моменту проскоку (див. рис. 1, а).

Table 3

The results of calculations of the breakthrough curves for a column with a diameter of 31 mm

Таблиця 3

Результати розрахунків кривих проскоку для колони діаметром 31 мм

$V_f, \text{m}^3/\text{s}$	$1.52 \cdot 10^{-6}$	$2.27 \cdot 10^{-6}$	$3.03 \cdot 10^{-6}$	$3.79 \cdot 10^{-6}$	$5.30 \cdot 10^{-6}$
$u_f, \text{m/s}$	$2.01 \cdot 10^{-3}$	$3.01 \cdot 10^{-3}$	$4.02 \cdot 10^{-3}$	$5.02 \cdot 10^{-3}$	$7.03 \cdot 10^{-3}$
$Re$	12.67	18.91	25.25	31.58	44.16
$C_{in}, \text{ppm}$	1550	1680	1640	1700	1750
$D_{ax}(\text{H}_2\text{O}), \text{m}^2/\text{s}$	$2.01 \cdot 10^{-6}$	$3.01 \cdot 10^{-6}$	$4.02 \cdot 10^{-6}$	$5.02 \cdot 10^{-6}$	$7.03 \cdot 10^{-6}$
$D_m, \text{m}^2/\text{s}$	$4.5 \cdot 10^{-12}$	$4.8 \cdot 10^{-12}$	$4.9 \cdot 10^{-12}$	$7.1 \cdot 10^{-12}$	$2.2 \cdot 10^{-12}$
$MTC(\text{H}_2\text{O}), \text{s}^{-1}$	$1.05 \cdot 10^{-4}$	$2.00 \cdot 10^{-4}$	$2.10 \cdot 10^{-4}$	$2.80 \cdot 10^{-4}$	$4.70 \cdot 10^{-4}$
$IP1$	0.017	0.0137	0.0135	0.0135	0.0089
$HTC, \text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$	678.92	825.76	955.64	1072.98	1281.09
$Hw, \text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$	163.05	224.74	283.14	338.66	442.87
$\tau_{bh}, \text{hr}$	2.87	1.45	0.79	0.63	0.14
$\Delta t_{\text{max}}^{\text{out}}, \text{ }^\circ\text{C}$	2.07	2.37	2.35	2.50	2.62

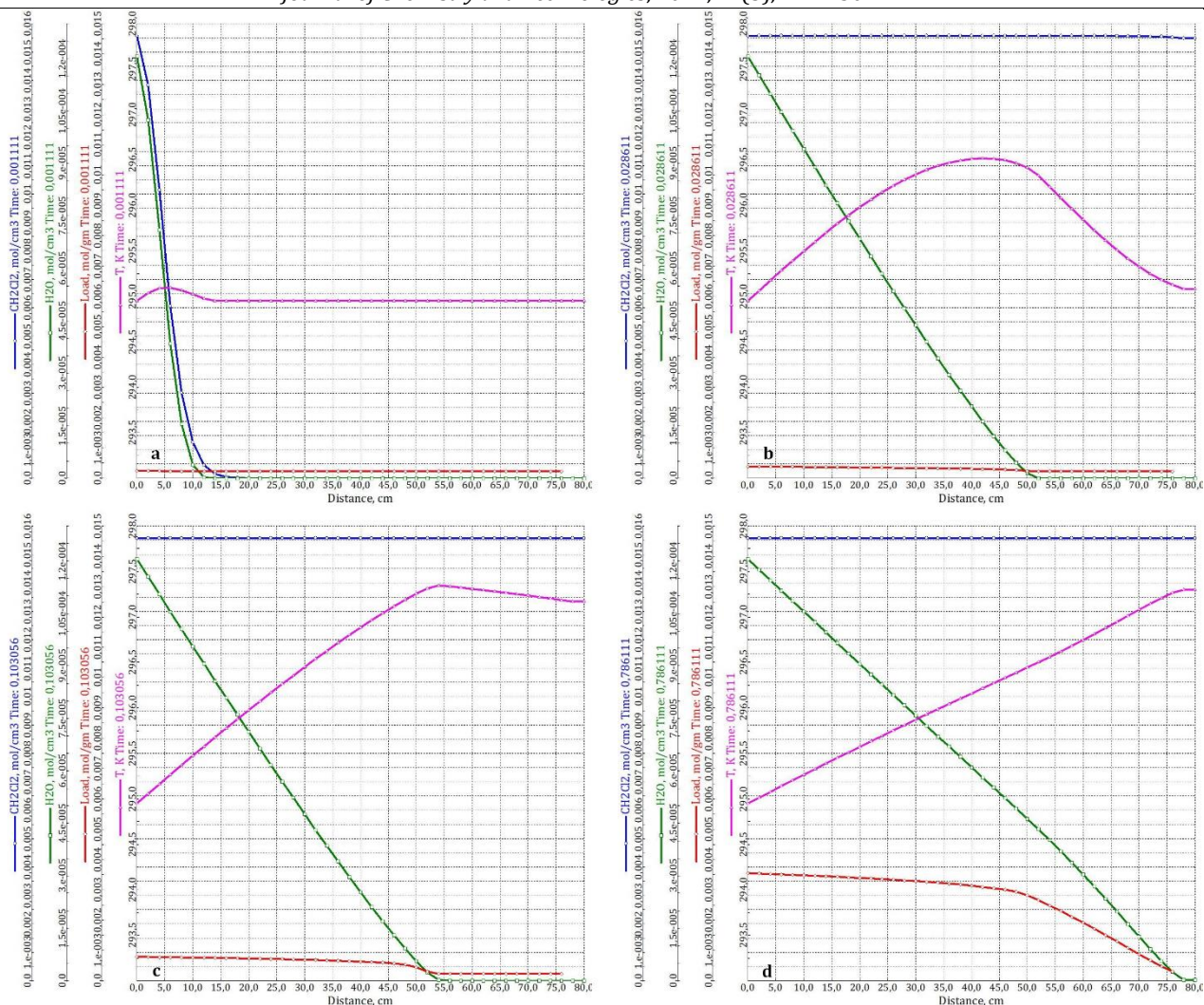
На рис. 2 показана динаміка концентрації дихлорметана і води, а також температури рідини в колоні від початку її заповнення до проскоку. Адсорбція відбувається не у всій колоні, а у деякому шарі адсорбенту, який називають працюючим. Його передня межа визначається початком підйому температури (дивлячись з правого боку наліво) через виділення теплоти адсорбції, задня – початком зростання концентрації води внаслідок насичення адсорбенту. З часом працюючий шар переміщується по колоні до виходу з неї.

Внаслідок виділення тепла адсорбції температура рідини зростає. Відповідна крива має екстремальну форму. Її максимум – «гаряча точка» – знаходиться близько задньої межі працюючого шару. Праворуч неї рідина нагрілася, і там, де вона вийшла з працюючого шару (тобто адсорбція завершилася), її температура знижується внаслідок втрати теплоти в оточуюче середовище через стінки колони. Ліворуч – тепловиділення зменшується внаслідок припинення адсорбції

в тій частині шару адсорбенту, яка вже наситилася водою. «Гаряча точка» переміщується по колоні разом із працюючим шаром. Її температура до певної межі зростає, потім або знижується (за діаметру колони до 100 мм), або тримається постійною, а на виході з колони знов збільшується (за великих значень діаметра – 200 мм і більше).

Наявність «гарячої точки», тобто обмеженої області, в якій температура більша, ніж у решті колони, може негативно сказатися на процесі адсорбції внаслідок виникнення небажаних градієнтів властивостей його учасників. У випадку зневоднення дихлорметана це винятково важливо, оскільки цей розчинник має низьку температуру кипіння – всього  $39.6 \text{ }^\circ\text{C}$  – і за помилкової організації процесу може закипіти прямо у колоні. Тому фактори, що впливають на температуру «гарячої точки» повинні бути досліджені. В першу чергу це розміри колони та кількість води у рідині, що у неї надходить.





**Fig. 2. Dynamics of temperature and concentrations of dichloromethane and water in the liquid and water in the zeolite in a column with a diameter of 31 mm, the mass flow rate of 4 g/s: a - the beginning of column filling; b - the end of column filling; c - the moment of maximum temperature; d - the beginning of a breakthrough**

**Рис. 2. Динаміка температури, а також концентрації дихлорметана і води у рідині та води у цеоліті у колоні діаметром 31 мм при масовій витраті потоку 4 г/с: а - початок заповнення колони; б - кінець заповнення колони; с - момент максимуму температури; д - початок пророску**

Промислові адсорбери мають більші розміри, ніж лабораторні колони, та дещо відмінні від них умови теплового балансу. За збільшення діаметру колони й, відповідно, маси речовин, що її заповнюють, повинна зростати кількість акумульованої ними теплоти, отже і температури "гарячої точки". Цей ефект досліджувався таким чином: прораховувалась модель з різними значеннями діаметра колони, але за сталого значення фіктивної швидкості потоку рідини. Останнє забезпечило незмінність коефіцієнтів

тепло- і масопередачі, а також часу пророску. Як видно з рис. 3, збільшення діаметра колони дійсно призводить до підвищення максимального приросту температури "гарячої точки" та рідини на виході з колони порівняно з початковим значенням. Але за збільшення діаметра до величин, відповідних промисловим адсорберам (500 мм і більше), цей показник на температуру практично не впливає. Значення мають тільки концентрація води та швидкість потоку.

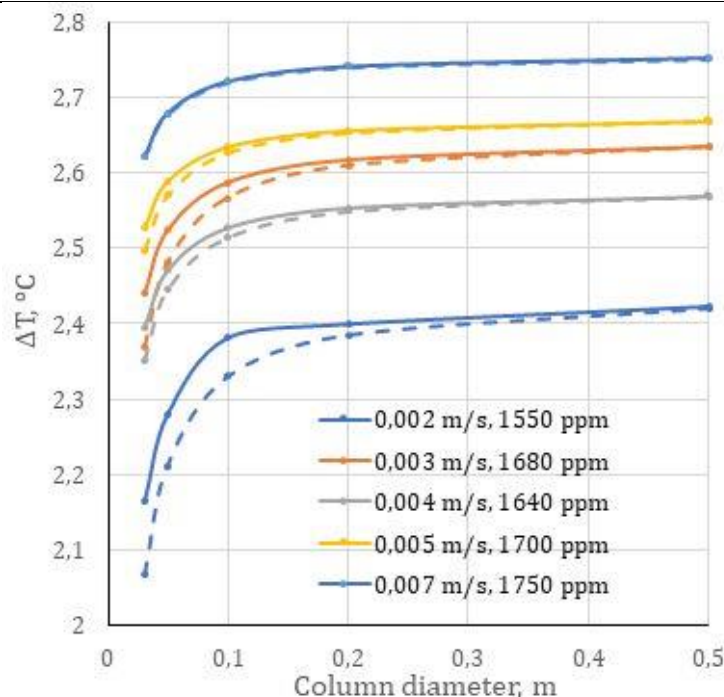


Fig. 3. Dependence of the maximum liquid temperature rise in the hot spot (solid lines) and at the exit from the column (dashed lines) on the column diameter and fictitious flow rate

Рис. 3. Залежність максимального приросту температури рідини у гарячій точці (суцільні лінії) і на виході з колони (пунктирні лінії) від діаметра колони та фіктивної швидкості потоку

На рис. 4 показана залежність часу проскоку і максимального приросту температури від величини початкової концентрації води в дихлорметані для колони діаметром 31 мм. Зрозуміло, що збільшення кількості води в дихлорметані викликає скорочення часу проскоку і зростання температури. Причому за дуже малих і дуже великих значень концентрації води температури «гарячої точки» і виходу з колони збігаються. За малих

концентрацій води рідина не в змозі суттєво нагрітися через мале тепловиділення, а за великих – теплоти так багато, що вона не встигає перейти в оточуюче середовище. Слід зазначити, що в таких випадках при організації технологічного процесу для контролю за ним можна використовувати температуру рідини на виході адсорбера, не ускладнюючи його конструкцію вбудованими контрольними пристроями.

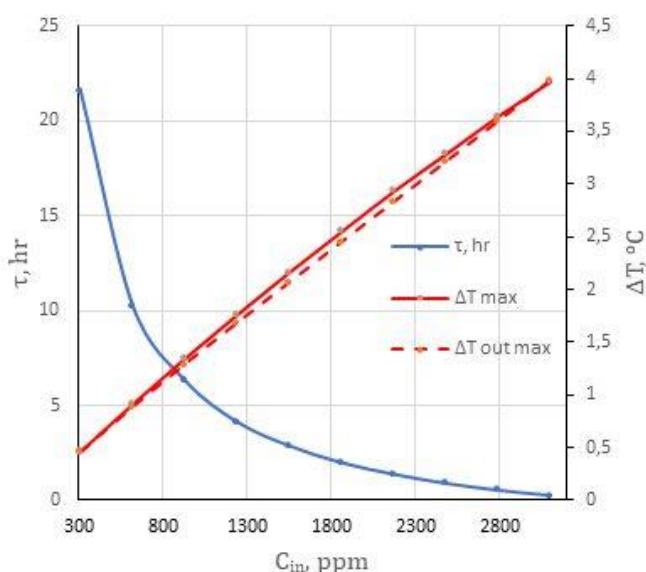


Fig. 4. Breakthrough time and maximum temperature rise (hot spot and column outlet) for different initial water concentrations; column diameter 31 mm, the mass flow rate of 2 g/s

Рис. 4. Час проскоку та максимальний приріст температури (гарячої точки та на виході з колони) для різних величин початкової концентрації води; діаметр колони 31 мм, масова витрата потоку 2 г/с

Досліджено комплексний вплив різних факторів на величину часу проскоку і температури «гарячої точки». Проведені розрахунки з тими значеннями об'ємної витрати дихлорметану та концентрації води в ньому, що наведені у табл. 1, але з різними величинами діаметра колони.

У разі сталої величини об'ємної витрати за зміни діаметра колони змінюється фіктивна швидкість рідини та, відповідно, число

$$MTC(H_2O) = 6,1136 u_f^2 + 0,0134 u_f + 6,9449 \cdot 10^{-5}. \quad (12)$$

Результати розрахунків наведені на рис. 5. Аргументами функцій там є внутрішній діаметр колони  $D_{wi}$  та масовий потік води  $\dot{m}$ , який надходить в колону з дихлорметаном, величина якого отримана множенням об'ємної витрати останнього на масову концентрацію води, що в ньому міститься.

Очевидно, що збільшення діаметру колони приводить до значного зростання часу

Рейнольдса, від якого залежить величина коефіцієнтів дисперсії, масо- і теплопередачі. Тому для кожного значення діаметра коефіцієнти дисперсії та теплопередачі вираховувалися окремо за рівняннями (2)–(10). Залежність коефіцієнта масопередачі від фіктивної швидкості була визначена шляхом апроксимації даних табл. 1 наступним рівнянням:

проскоку, але температура «гарячої точки» за цих умов змінюється не так різко.

Дані рис. 5 апроксимовані системами рівнянь (13) і (14), які можуть бути використані в ході розрахунків адсорберів у досліджених в цій роботі межах об'ємної витрати дихлорметану та вмісту води в ньому. Погрішність розрахунку для промислово значущих діаметрів колони (200–500 мм) не перевищує 0.3 %.

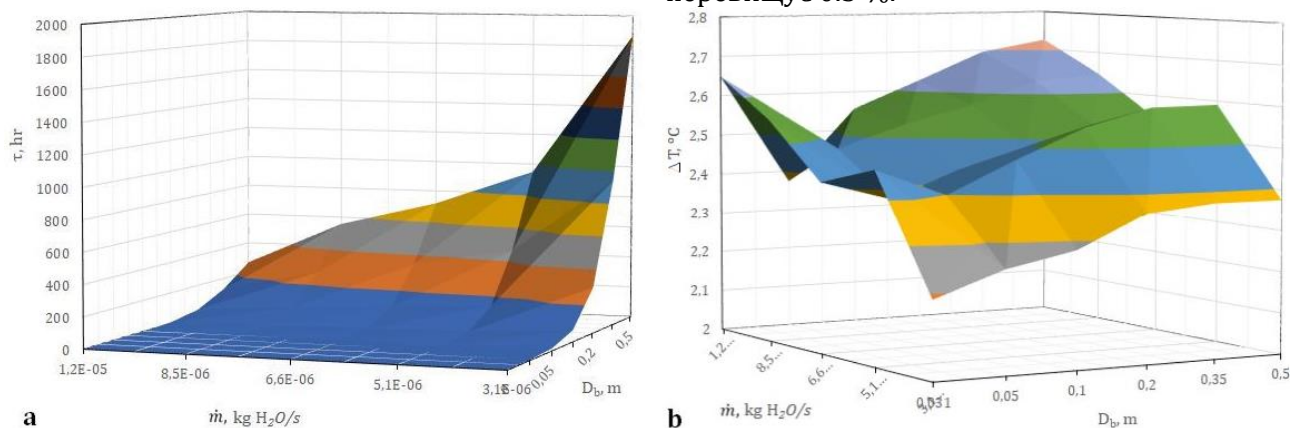


Fig. 5. Breakthrough time (a) and maximum temperature rise hot spot (b) for different values of water mass flow and column diameter (adsorbent layer height 1 m)

Рис. 5. Час проскоку (a) та максимальний приріст температури гарячої точки (b) для різних величин масового потоку води та діаметру колони (висота шару адсорбенту 1 м)

$$\tau = a_1 D_{wi}^3 + b_1 D_{wi}^2 + c_1 D_{wi} + d_1$$

$$a_1 = 1.08662359 \cdot 10^{30} \cdot \dot{m}^5 - 4.59166701 \cdot 10^{25} \cdot \dot{m}^4 + 7.59051939 \cdot 10^{20} \cdot \dot{m}^3 - 6.12780297 \cdot 10^{15} \cdot \dot{m}^2 + 2.41311136 \cdot 10^{10} \cdot \dot{m} - 37255.8808$$

$$b_1 = -1.03270252 \cdot 10^{30} \cdot \dot{m}^5 + 4.57838971 \cdot 10^{30} \cdot \dot{m}^4 - 8.02056419 \cdot 10^{20} \cdot \dot{m}^3 + 6.94516014 \cdot 10^{15} \cdot \dot{m}^2 - 3.0088954 \cdot 10^{10} \cdot \dot{m} + 55788.3061$$

$$c_1 = 1.01127753 \cdot 10^{29} \cdot \dot{m}^5 - 4.25633333 \cdot 10^{24} \cdot \dot{m}^4 + 6.9991449 \cdot 10^{19} \cdot \dot{m}^3 - 5.61023522 \cdot 10^{14} \cdot \dot{m}^2 + 2.1866806 \cdot 10^9 \cdot \dot{m} - 3364.92921$$

$$d_1 = -1.47805181 \cdot 10^{27} \cdot \dot{m}^5 + 6.28259393E \cdot 10^{22} \cdot \dot{m}^4 - 1.04462366 \cdot 10^{18} \cdot \dot{m}^3 + 8.47485799 \cdot 10^{12} \cdot \dot{m}^2 - 3.33748511 \cdot 10^7 \cdot \dot{m} + 50.549$$

$$\Delta T = a_2 D_{wi}^3 + b_2 D_{wi}^2 + c_2 D_{wi} + d_2$$

$$a_2 = -9.88759764 \cdot 10^{21} \cdot \dot{m}^4 + 3.27964334 \cdot 10^{17} \cdot \dot{m}^3 - 3.83815652 \cdot 10^{12} \cdot \dot{m}^2 + 1.81828416 \cdot 10^7 \cdot \dot{m} - 25.8034748$$

$$b_2 = 1.20497171 \cdot 10^{22} \cdot \dot{m}^4 - 3.94743027 \cdot 10^{17} \cdot \dot{m}^3 + 4.55887427 \cdot 10^{12} \cdot \dot{m}^2 - 2.13545205 \cdot 10^7 \cdot \dot{m} + 29.7045071$$

$$c_2 = -4.56611013 \cdot 10^{21} \cdot \dot{m}^4 + 1.48253858 \cdot 10^{17} \cdot \dot{m}^3 - 1.69499799 \cdot 10^{12} \cdot \dot{m}^2 + 7.89483662 \cdot 10^7 \cdot \dot{m} - 10.7606828$$



$$d_2 = -1.26715367 \cdot 10^{21} \cdot \dot{m}^4 + 3.70206541 \cdot 10^{16} \cdot \dot{m}^3 - 3.79967586 \cdot 10^{11} \cdot \dot{m}^2 + 1.65175794 \cdot 10^6 \cdot \dot{m} - 0.28087532$$

Таким чином, запропонована методика розрахунку адсорбера передбачає наступні кроки:

- отримання експериментальних кривих проскоку у певному діапазоні значень витрати дихлорметана і вмісту у ньому води;
- розрахунок коефіцієнтів дисперсії та теплопередачі;
- створення у програмі Aspen Adsorption моделі, яка ураховує фізичні властивості рідкої і твердої фаз, параметри ізотерми адсорбції, геометрію колони, параметри масо- та теплопереносу;
- відтворення у моделі Aspen Adsorption експериментальних кривих проскоку і визначення коефіцієнтів масопередачі;
- розрахунок у моделі Aspen Adsorption часу проскоку і температури «гарячої точки» для заданих значень розмірів колони.

## References

- [1] Becker, H. (1973). *Organicum: Practical Handbook of Organic Chemistry*. Oxford, United Kingdom: Pergamon Press. <https://doi.org/10.1016/C2013-0-03912-6>
- [2] Rosenblum, M., Woodward, R. B. (1958). The Structure and Chemistry of Ferrocene. III. Evidence Pertaining to the Ring Rotational Barrier. *J. Am. Chem. Soc.*, 80(20), 5443-5449.
- [3] Jović, S., Laxminarayan, Ya., Keurentjes, J., Schouten, J., van der Schaaf, J. (2017). Adsorptive Water Removal from Dichloromethane and Vapor-Phase Regeneration of a Molecular Sieve 3A Packed Bed. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 56(17), 5042-5054. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.7b00433>
- [4] Guo, Y., Wang, L. Research Progress on Azeotropic Distillation Technology (2019). *Scientific Research Publishing*, 9, 333-342. <https://doi.org/10.4236/aces.2019.94024>
- [5] Gerbaud, V., Rodriguez-Donis, L., Hegely, L., Lang, P., Denes, F. (2019). Review of extractive distillation. Process design, operation, optimization and control. *Chemical Engineering Research and Design*, 141, 229-271. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.09.020>
- [6] Waltermann, T., Skiborowski, M., Efficient optimization-based design of energy-integrated distillation processes. *Computers and Chemical Engineering*, 129. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.106520>
- [7] Galiano, F., Casto-Munoz, R., Figoli, A. (2021). Pervaporation, Vapour Permeation and Membrane Distillation: From Membrane Fabrication to Application. *Membranes*, 11(3), 162. <https://doi.org/10.3390/membranes11030162>
- [8] Hasegawa, Y.; Abe, C.; Ikeda, A. (2021). Pervaporative Dehydration of Organic Solvents Using High-Silica CHA-Type Zeolite Membrane. *Membranes*, 11, 229-242. <https://doi.org/10.3390/membranes11030229>
- [9] Choi, K. H., Hwang, D. Y., Suh, D. H. Meta-separation: complete separation of organic-water mixtures by structural property of metamaterial // *Advanced Materials & Chemical Engineering Building* – 2021. – Vol. 311 – P. 222
- [10] Choi, H., So Jeong Kim, M. E., Hack Suh, D. (2021). Meta-separation: Improvement of Properties by Molecular Design of Metamaterials for Organophosphorous Flame Retardants. *ChemistrySelect*, 6, 8011-8015. <https://doi.org/10.1002/slct.202101915>
- [11] Mekala, M., Neerudi, B., Are, P. R., Surakasi, R., Manikandan, G., Kakara, V. R., Abhaykumar, Dhupal, A. A. (2022) Water Removal from an Ethanol-Water Mixture at Azeotropic Condition by Adsorption Technique. *Adsorption Science & Technology, Volume 2022, Article ID 8374471*, 10 pages/ <https://doi.org/10.1155/2022/8374471>
- [12] Karimi, S., Yarak, M., Karri, R. (2019). A comprehensive review of the adsorption mechanisms and factors influencing the adsorption process from the perspective of bioethanol dehydration. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 107, 535-553. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.03.025>
- [13] van Kampen, J., Boon, J. & van Sint Annaland, M. (2021)/ Steam adsorption on molecular sieve 3A for sorption enhanced reaction processes. *Adsorption*, 27, 577-589. <https://doi.org/10.1007/s10450-020-00283-8>
- [14] Andronikashvili, T.G., Kordzakhia, T.N., Eprikashvili, L. G. (2015). Zeolites – The Unique Desiccating Agents of Organic Liquids. <https://www.researchgate.net/publication/305999669>
- [15] Drying by adsorption. [www.silica.de](http://www.silica.de)
- [16] Ruthven, D. M. (1984). *Principles of adsorption and adsorption processes*. New York, USA: John Wiley & Sons.

- [17] Planovsky, A. N., Ramm, V. M., Kagan, S. E. (1962). [*Processes and apparatuses of chemical technology*]. Moskow, USSR: Goskhimizdat (in Russian).
- [18] Pavlov, K. P., Romankov, P. G., Noskov, A. A. (1981) [*Examples and tasks for the course of processes and apparatuses of chemical technology*]. Leningrad, USSR: Khimiya (in Russian).
- [19] Tian, Y., Demirel, S. E., Hasan, M. M. F., Pistikopoulos, E. N. (2018). An Overview of Process Systems Engineering Approaches for Process Intensification: State of the Art. *Chem. Engineering and Processing - Process Intensification*, 133, 160 – 210. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2018.07.014>
- [20] Towler, G., Sinnott, R. (2012). *Chemical engineering design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*, Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/C2009-0-61216-2>.
- [21] Podzharsky, M. A., Nesterov, A. M. (2021). Modeling of the technological process of sulfur dioxide oxidation using the CHEMCAD program. *Journal of Chemistry and Technologies*, 29(4), 576–585. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v29i4.244347>
- [22] Wood, K. R., Liu, Y. A., Yu, Y. (2018). *Design, Simulation, and Optimization of Adsorptive and Chromatographic Separations: A Hands-On Approach*, First Edition. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- [23] *ES288 Introduction to Aspen Adsorption. AspenTech Customer Education. Training Manual Course Number ES288.071.07.* (2009). Aspen Technology, Inc.
- [24] Borosilicate glass [https://en.wikipedia.org/wiki/Borosilicate\\_glass#:~:text=Borosilicate%20glass%20is%20less%20dense,roughly%20one%20fifth%20of%20water%27s.](https://en.wikipedia.org/wiki/Borosilicate_glass#:~:text=Borosilicate%20glass%20is%20less%20dense,roughly%20one%20fifth%20of%20water%27s.)