

УДК 621.1

 10.25209/2079-3316-2026-17-1-85-103

## Алгоритм и программное обеспечение для расчета термических циклов разделения газовых смесей с применением термодинамических критериев

Александр Андреевич **Мазиков**

ГПОУ ЯО Переславский колледж им. А. Невского

**Аннотация.** Методология оптимизационной термодинамики использована для решения задачи о предельных возможностях термических циклов разделения и разработки алгоритма расчета и программного обеспечения. Существующие программы и алгоритмы для расчета термических циклов не применяли термодинамические критерии. Получены выражения для предельного КПД цикла и его максимальной производительности в зависимости от состава разделяемой смеси, величины и температуры греющего потока. Построена и параметризована граница области реализуемых режимов цикла в плоскости производительность – расход теплоты. Полученные алгоритмы использованы при разработке программного обеспечения для расчета термических циклов.

**Ключевые слова и фразы:** термодиффузия, предельная емкость, уравнение термодинамического баланса, максимальный КПД, фактор необратимости

**Благодарности:** Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 25-29-00965

**Для цитирования:** Мазиков А. А. *Алгоритм и программное обеспечение для расчета термических циклов разделения газовых смесей с применением термодинамических критериев* // Программные системы: теория и приложения. 2026. Т. 17. № 1(70). С. 85–103. [https://psta.psir.ru/read/psta2026\\_1\\_85-103.pdf](https://psta.psir.ru/read/psta2026_1_85-103.pdf)

## Введение

### Термическое разделение газовых смесей

Оптимизационная термодинамика (термодинамика при конечном времени) рассматривает предельные возможности термодинамических процессов при таких ограничениях ([1]–[4] и др.) как заданная продолжительность процесса или заданная интенсивность одного из потоков, ограниченная величина коэффициентов тепло- и массообмена, косвенно характеризующих размеры аппарата [5]. Подобного рода ограничения приводят к необходимости решения экстремальной задачи в классе необратимых процессов. Показателем необратимости является прирост или производство энтропии. Оптимальному решению соответствует как правило процесс с минимальной необратимостью.

Методология оптимизационной термодинамики такова:

- (1) Для рассматриваемого процесса записывают уравнения термодинамических балансов (по веществу, энергии и энтропии). В последнее из этих уравнений входит производство энтропии.
- (2) Решают задачу о минимальном производстве энтропии при тех или иных ограничениях. Решение этой задачи позволяет получить минимальное производство энтропии  $\sigma^*$  как функцию потоков и коэффициентов кинетики.
- (3) Подстановка  $\sigma^*$  в уравнения термодинамических балансов определяет область реализуемых режимов процесса. Эта область может быть неограниченной (производительность растет монотонно с ростом затрат энергии) или ограничена сверху (начиная с некоторой интенсивности затрат энергии полезный поток уменьшается из за роста необратимости). В последнем случае представляет интерес предельная величина полезного потока.
- (4) Область реализуемости позволяет оценить возможность построения процесса с теми или иными показателями, оценить степень совершенства действующего процесса, наконец, решать задачи, сама постановка которых в рамках обратимой термодинамики не имела смысла.

Производство энтропии в термодинамической системе можно найти двумя способами. В действующей системе производство энтропии можно определить из уравнения энтропийного баланса, зная расходы и удельную энтропию входных и выходных потоков системы. В проектируемой системе производство энтропии может быть рассчитано как произведение

внутренних потоков на движущие силы. При этом между потоком и движущей силой существует зависимость, определяющаяся видом кинетики. В простейшем случае поток пропорционален движущей силе с некоторым коэффициентом (тепло- или массообмена) [3]. Оценка производства энтропии, будучи использована в уравнениях термодинамических балансов, позволяет построить зависимость производительности процесса от затрат энергии в классе необратимых процессов.

В первой части работы рассмотрен термический цикл разделения, в котором процессы тепло- и массопереноса от источников к рабочему телу происходят раздельно, во второй – цикл абсорбционно-десорбционный, в котором тепло- и массоперенос происходят одновременно от каждого из источников к рабочему телу.

## 1. Термодинамический анализ термического цикла

В целом ряде технологических процессов происходит затрата высокопотенциального тепла с температурой  $T_+$  с целью получения работы разделения [6]. При этом тепловой поток покидает систему с меньшей температурой [7]. Энтропия смеси снижается за счет ее разделения, но повышается при увеличении температуры. Суммарное производство энтропии положительно [8].

В термическом цикле разделения рисунок 1 жидкое рабочее тело (абсорбент) контактирует с газовой смесью и поглощает один из компонентов, после чего смесь абсорбента с извлекаемым компонентом подается в систему, состоящую из кипятыльника и конденсатора, в которых она последовательно испаряется, а затем конденсируется, причем при конденсации извлекаемый компонент остается в газовой фазе и выводится из системы, а конденсат возвращается в абсорбер при температуре близкой к температуре  $T_b$  кипения абсорбента [9].

### 1.1. Оценка КПД термического цикла разделения

Сделаем следующие допущения:

- (1) Температура кипения  $T_b$  и мольная теплота парообразования  $r$  смеси абсорбента с извлекаемым компонентом не зависят от концентрации  $x$  абсорбируемого компонента газовой смеси;
- (2) Гидродинамика в абсорбере близка к идеальному смешению, а в кипятыльнике и конденсаторе температуры горячего и холодного источников  $T_+$ ,  $T_-$  постоянны;

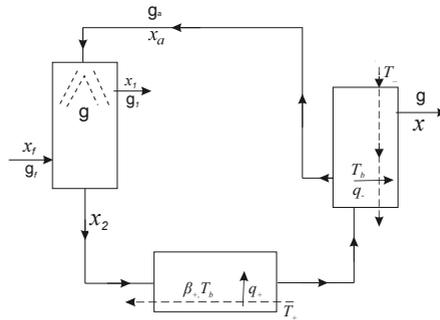


Рисунок 1. Общая структура термического абсорбционного цикла разделения

- (3) Потери тепла в окружающую среду и затраты энергии на перекачку абсорбента пренебрежимо малы;
- (4) Газовая смесь бинарная, и её состав определяется концентрацией абсорбируемого компонента. Состав газовой смеси  $x_f$  на входе в систему задан, а температуры потоков на входе и на выходе из системы близки друг к другу;
- (5) Циркулирующий поток на входе в абсорбер не содержит поглощаемого им компонента, а концентрация этого компонента  $x^0$  в целевом потоке равна единице;
- (6) Коэффициент массопереноса  $K$  в абсорбере не зависит от расхода абсорбента  $g_a$ ;
- (7) Температура абсорбента близка к температуре кипения  $T_b$ , а температуры газа на входе и на выходе системы одинаковы;
- (8) Поток теплообмена пропорционален разности температур, а поток массообмена пропорционален разности термодинамических потенциалов, так что

$$(1) \quad q_{12} = \beta(T_1 - T_2), \quad g_{12} = K \left( \frac{\mu_1}{T_1} - \frac{\mu_2}{T_2} \right).$$

При этих допущениях запишем уравнения термодинамических балансов и найдем зависимость производительности цикла от затрат теплоты с учетом необратимости протекающих процессов [10].

Если считать смесь идеальным раствором, то химический потенциал абсорбируемого компонента имеет форму

$$(2) \quad \mu = \mu_0(T, P) + RT \ln x,$$

где  $\mu_0(T, P)$  – стандартный химический потенциал чистого компонента,  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $P$  – давление насыщенного пара чистого компонента,  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Движущая сила процесса изотермического массопереноса между подсистемами с концентрациями компонента  $x_+$  и  $x_-$  равна  $\frac{\mu_+ - \mu_-}{T}$ . Так как стандартные потенциалы одинаковы, то движущая сила

$$(3) \quad u = R \ln \frac{x_+}{x_-}.$$

Поток направлен от подсистемы с большей к подсистеме с меньшей концентрацией.

При сделанных допущениях запишем уравнения термодинамических балансов для отдельных аппаратов и системы в целом.

Материальный баланс абсорбера при сделанных допущениях приводит к соотношениям для расходов и концентраций потоков на выходе из абсорбера:

$$(4) \quad g_1 = g_f - g, \quad g_2 = g_a + g, \quad x_1 = \frac{x_f g_f - g}{g_f - g}, \quad x_2 = \frac{g}{g_a + g}.$$

Движущая сила массопереноса в соответствии с (3), (4)

$$(5) \quad u_a = R \ln \frac{x_1}{x_2} = R \ln \frac{(x_f g_f - g)g}{r(g_f - g)g}, \quad g = K u_a.$$

Из неравенства  $x_1 > x_2$  с учетом (4) следует ограничение для расхода циркулирующего потока

$$(6) \quad g_a > g \frac{g_f(1 - x_f)}{g_f x_f - g}.$$

Так как температура рабочего тела (абсорбента) не изменяется за цикл, то из энергетического баланса следует, что

$$(7) \quad q_+ = q_- = q = (g_a + g)r = \beta_+(T_+ - T_b) = \beta_-(T_b - T_-).$$

Из последнего равенства вытекает, что коэффициенты теплопроводности, а значит поверхности контактов в испарителе и в конденсаторе нельзя выбирать независимо

$$(8) \quad \frac{\beta_+}{\beta_-} = \frac{T_b - T_-}{T_+ - T_b}.$$

Согласно условию энтропийного баланса производство энтропии в системе равно разности между энтропией выходящих из системы и

входящих в нее потоков [11]. Так что

$$(9) \quad \frac{q}{T_-} + (g_f - g)s(x_1) - \frac{q}{T_+} - g_f s(x_f) = \sigma.$$

Здесь

$$s(x) = -R \left[ x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x) \right]$$

это молярная энтропия потока.

Производство энтропии равно произведению потоков  $g, q$  на движущие силы, причем знаки потоков и движущих сил совпадают. Движущие силы можно исключить через потоки, в этом случае с учетом (8) получим:

$$(10) \quad \sigma = \frac{g^2}{K} + \frac{q^2}{\beta_+ T_+ T_b} + \frac{q^2}{\beta_- T_b T_-} = \frac{g^2}{K} + \frac{q^2 (T_+ - T_-)}{\beta_+ T_+ T_- (T_+ - T_b)}.$$

### 1.2. Приближенная оценка КПД термического абсорбционного цикла в обратимом процессе

Для получения приближенной оценки обратимого КПД цикла учтем, что производство энтропии и поток  $g$  массопереноса в десорбере стремятся к нулю [12]. Нетрудно показать, что при этом отношение  $g/g_f$  стремится к  $x_f$ , значение  $x_1$  стремится к нулю, а отношение  $g/q$  стремится к значению:

$$(11) \quad \eta^0 = \frac{g}{q} = x_f \frac{1/T_- - 1/T_+}{s(x_f)},$$

где  $s$  – молярная энтропия потока.

### 1.3. Связь производительности и расхода теплоты в необратимом процессе

К условию (9) следует добавить уравнение кинетики массообмена (5) и уравнение теплового баланса испарителя

$$(12) \quad g = KR \ln \frac{x_1}{x_2} = KR \ln \frac{(x_f g_f - g)q}{r(g_f - g)g}, \quad g_a + g = \frac{q}{r}.$$

После замены из последнего условия  $g_a$  через  $q, g$  в неравенстве (6) получим неравенство для потока затрачиваемой теплоты

$$(13) \quad q > rg \frac{g_f - g}{g_f x_f - g}.$$

Из условия (12) получим связь между потоком сырья  $g_f$ , потоком массопереноса (продукта)  $g$  и расходом теплоты  $q$

$$(14) \quad \frac{(x_f g_f - g)q}{r(g_f - g)g} = \exp\left(\frac{g}{RK}\right).$$

Условие (14) можно разрешить относительно  $g_f$ . Получим

$$(15) \quad g_f(q, g) = \frac{g(q - rg \exp(g/RK))}{qx_f - rg \exp(g/RK)}.$$

Перепишем условие энтропийного баланса (9) с учетом (10) в форме:

$$(16) \quad g_f s(x_f) - (g_f - g)s(x_1) + \frac{g^2}{K} = q \left( \frac{1}{T_-} - \frac{1}{T_+} \right) - \frac{q^2}{T_b} \left( \frac{1}{\beta_- T_-} + \frac{1}{\beta_+ T_+} \right).$$

Так как  $x_1$  зависит от потоков в соответствии с равенством (4), второе слагаемое в левой части равенства (16) примет вид:

$$(17) \quad \begin{aligned} (g_f - g) s(x_1) = & -R[(g_f x_f - g) \ln(g_f x_f - g) \\ & + g_f(1 - x_f) \ln(g_f(1 - x_f)) \\ & - (g_f - g) \ln(g_f - g)]. \end{aligned}$$

Уравнение (16) с учетом (17) после исключения  $g_f$  из (15) связывает переменные  $g$  и  $q$  и позволяет найти зависимость  $g(q)$ , а также проследить влияние на нее коэффициентов переноса, состава разделяемой смеси, подсчитать для каждой производительности расход сырья и расход абсорбента.

Правая часть  $B(q)$  равенства (16) зависит только от  $q$ , причем достигает максимума при

$$(18) \quad q = q^0 = \frac{T_b \left( 1/T_- - 1/T_+ \right)}{2 \left( 1/\beta_- T_- - 1/\beta_+ T_+ \right)}.$$

Дальнейшее увеличение теплового потока только ухудшает возможности процесса.

Построить зависимость  $g(q)$  можно с помощью следующего алгоритма:

- (1) Находим  $q^0$  и задаем  $0 < q_i < q^0$ .
- (2) Подставляем  $q_i$  в равенство (15) и получаем  $g_{fi}(g) = g_f(q_i, g)$ .
- (3) Решаем относительно  $g$  уравнение энтропийного баланса (16), в котором правая часть равна  $B(q_i) = B_i$ , а левая часть  $g_f = g_{fi}(g)$ . Найденное значение  $g_i$  представляет собой производительность цикла, соответствующую затратам теплоты  $q_i$ .

На рисунке 2 (а) показана программная реализация<sup>1</sup> расчета термического цикла разделения, а далее приводится пример расчёта со скриншотом результата.

<sup>1</sup>Ссылка на программу <https://gitflic.ru/project/a-mazikov98mailru/adc>

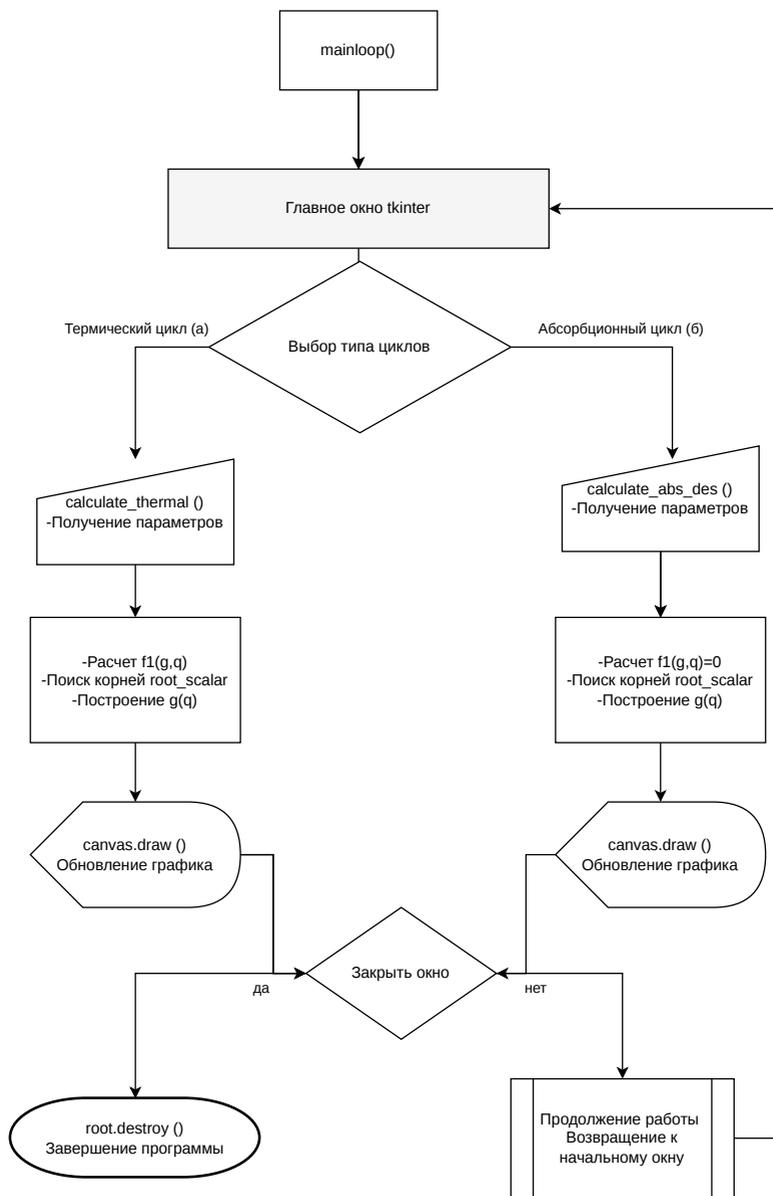


Рисунок 2. Блок-схема программы расчета термического (а) и абсорбционного (б) циклов разделения

**Пример 1. Построение зависимости производительности от затраченного тепла в термическом цикле разделения**

Зададим следующие значения параметров потоков

$$\begin{aligned}
 R &= 8,31 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К}; & T_+ &= 353 \text{ К}; & T_- &= 293 \text{ К}; \\
 T_b &= 320 \text{ К}; & \beta_+ &= 33 \text{ Вт/К}; & \beta_- &= 37 \text{ Вт/К}; \\
 r &= 70\,000 \text{ Дж/моль}; & K &= 1,7 \text{ К}\cdot\text{моль}^2/\text{сек}\cdot\text{Дж}; & x_f &= 0,3 \text{ моль/моль};
 \end{aligned}$$

и построим зависимость производительности от затрат теплоты (рисунок 3).

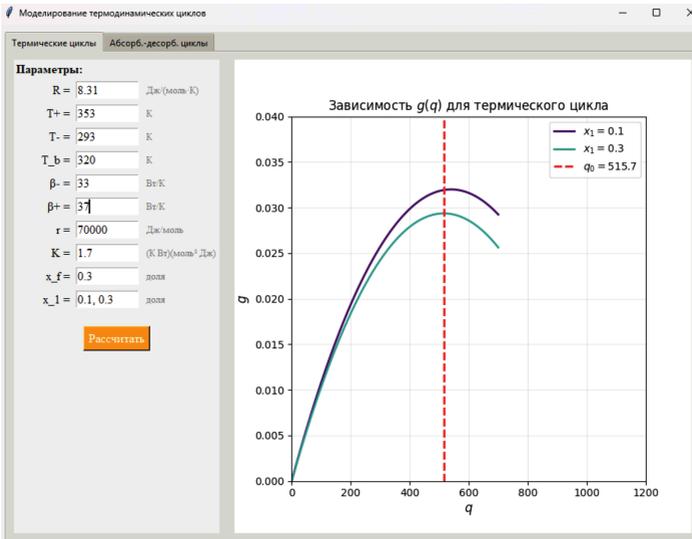


Рисунок 3. Граница реализуемости в плоскости производительность по сырью – затраты теплоты

Построение существенно облегчается, если считать  $x_1$  константой, большей  $x_f$ . Эта константа слабо влияет на зависимость  $g(q)$ .

С использованием полученных соотношений составлена программа расчета множества реализуемых режимов термического цикла разделения.

**2. Абсорбционно - десорбционный цикл (АДЦ)**

Расчетная схема процесса однокомпонентной абсорбции-десорбции приведена на рисунке 4.

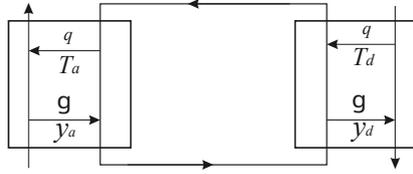


Рисунок 4. Схема абсорбционно-десорбционного цикла

Раствор абсорбента циркулирует по замкнутому контуру, контактируя в абсорбере с очищаемым газом и насыщаясь при этом абсорбтивом. Затем он регенерирует в десорбере (отдавая поглощенный газ в парогазовую смесь (ПГС)) [13]. Далее ПГС подается в конденсатор, где пары воды конденсируются, а в газовой фазе остается почти чистый отделяемый компонент. Тепло для процесса подводится в десорбере с парогазовой смесью и передается раствору [14]. Очищаемый газ в абсорбере и ПГС в десорбере являются *источниками*, с которыми рабочее тело обменивается теплотой и веществом.

Примем следующие допущения:

- (1) В абсорбере и десорбере поля температур и концентраций однородны (идеальное смешение);
- (2) Концентрация отделяемого компонента в потоке, выходящем из конденсатора, равна единице, а в потоке абсорбента на входе в абсорбер близка к нулю;
- (3) Температуры газа, поступающего в абсорбер и выходящего из конденсатора, близки друг к другу.
- (4) Разделение в абсорбере и десорбере четкое, так что концентрация абсорбтива в потоке массообмена  $g$  и в целевом потоке  $g_0$  равна единице. Следовательно,

$$(19) \quad g_f = g/x_f, \quad g_1 = g_f(1 - x_f), \quad g_0 = g,$$

а молярная энтропия выходящих потоков

$$s_i = -R(x_i \ln x_i + (1 - x_i) \ln(1 - x_i)), \quad i = 1, 2$$

равна нулю.

В силу цикличности изменения состояния рабочего тела потоки тепла  $q$  и вещества  $g$  в абсорбере и в десорбере одинаковы.

Уравнения кинетики тепло-массообмена имеют форму уравнений

Онсагера:

$$(20) \quad \begin{aligned} q &= \lambda_a \left( \frac{1}{T_-} - \frac{1}{T_a} \right) - \alpha_a \left( \frac{\mu_-}{T_-} - \frac{\mu_a}{T_a} \right) \\ &= \lambda_d \left( \frac{1}{T_d} - \frac{1}{T_+} \right) - \alpha_d \left( \frac{\mu_d}{T_d} - \frac{\mu_+}{T_+} \right) \end{aligned}$$

$$(21) \quad \begin{aligned} g &= -\alpha_a \left( \frac{1}{T_-} - \frac{1}{T_a} \right) + k_a \left( \frac{\mu_-}{T_-} - \frac{\mu_a}{T_a} \right) \\ &= -\alpha_d \left( \frac{1}{T_d} - \frac{1}{T_+} \right) + k_d \left( \frac{\mu_d}{T_d} - \frac{\mu_+}{T_+} \right) \end{aligned}$$

Здесь индекс  $a$  соответствует абсорберу, а индекс  $d$  – десорберу, потоки, направленные к рабочему телу (циркулирующему раствору), положительны.

Введем обозначения для движущих сил процессов тепло- и массопереноса в абсорбере и десорбере:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_-} - \frac{1}{T_a} &= u_{aq}, & \frac{1}{T_d} - \frac{1}{T_+} &= u_{dq}, \\ \frac{\mu_-}{T_-} - \frac{\mu_a}{T_a} &= u_{ag}, & \frac{\mu_d}{T_d} - \frac{\mu_+}{T_+} &= u_{dg}. \end{aligned}$$

Потоки связаны с движущими силами и коэффициентами Онсагера как

$$(22) \quad \begin{aligned} q &= \lambda_a u_{aq} - \alpha_a u_{ag} = \lambda_d u_{dq} - \alpha_d u_{dg}, \\ g &= -\alpha_a u_{aq} + k_a u_{ag} = -\alpha_d u_{dq} + k_d u_{dg}. \end{aligned}$$

Из этой системы уравнений можно выразить движущие силы через потоки:

$$(23) \quad \begin{aligned} u_{ag} &= \frac{\lambda_a g + \alpha_a q}{\lambda_a k_a - \alpha_a^2}, & u_{aq} &= \frac{k_a q + \alpha_a g}{k_a \lambda_a - \alpha_a^2}, \\ u_{dg} &= \frac{\lambda_d g + \alpha_d q}{\lambda_d k_d - \alpha_d^2}, & u_{dq} &= \frac{k_d q + \alpha_d g}{k_d \lambda_d - \alpha_d^2}. \end{aligned}$$

Производство энтропии

$$(24) \quad \sigma = g(u_{ag} + u_{dg}) + q(u_{aq} + u_{dq}).$$

Условие энтропийного баланса (разность между потоком энтропии, покидающим систему вместе с потоками теплоты и вещества, и потоком энтропии, поступающим в систему, равна производству энтропии в ней) определяет границу реализуемых режимов в необратимом процессе.

С учетом допущения о четком разделении уравнение энтропийного баланса можно записать через молярную энтропию потока сырья

$$s_f = -R(x_f \ln x_f + (1 - x_f) \ln(1 - x_f))$$

как

$$(25) \quad q \left( \frac{1}{T_-} - \frac{1}{T_+} \right) + \frac{g}{x_f} s_f(x_f) = \sigma = g(u_{ag} + u_{dg}) + q(u_{aq} + u_{dq}).$$

Здесь зависимость движущих сил от потоков и коэффициентов тепло-массообмена соответствует выражениям (23).

В обратимом процессе производство энтропии равно нулю, и обратимый КПД цикла равен:

$$(26) \quad \eta^0 = g/q = \frac{(1/T_- - 1/T_+)x_f}{s_f(x_f)}.$$

После ввода обозначений

$$z_a = \frac{1}{\lambda_a k_a - \alpha_a^2}, \quad z_d = \frac{1}{\lambda_d k_d - \alpha_d^2},$$

$$A = z_a k_a + z_d k_d, \quad B = z_a \lambda_a + z_d \lambda_d, \quad C = 2(z_a \alpha_a + z_d \alpha_d)$$

связь между производительностью цикла и расходом теплоты примет форму:

$$(27) \quad Dg^2 + \frac{g}{x_f} s_f(x_f) + Cgq = (1/T_- - 1/T_+)q - Aq^2,$$

где коэффициенты определяются только кинетикой тепло и массопереноса.

Из этого условия следует, что вследствие роста необратимости с ростом теплового потока производительность равна нулю не только при  $q = 0$  но и при  $q_{\max} = 1/T_- - 1/T_+/A$ . Между этими значениями производительность цикла достигает максимума.

## Пример 2. Построение зависимости производительности от затраченного тепла в АДЦ

Зададим начальные значения для потоков:

$$\begin{aligned} R &= 8,31 \text{ Дж/моль}\cdot\text{К}; & T_+ &= 353 \text{ К}; & T_- &= 293 \text{ К}; \\ T_b &= 320 \text{ К}; & \beta_+ &= 33 \text{ Вт/К}; & \beta_- &= 37 \text{ Вт/К}; \\ r &= 70\,000 \text{ Дж/моль}; & K &= 1,7 \text{ К}\cdot\text{моль}^2/\text{сек}\cdot\text{Дж}; & x_f &= 0,3 \text{ моль/моль}; \\ \alpha &= 40\,000 \text{ моль}\cdot\text{К/сек}; & k &= 2 \times 10^5 \text{ моль}^2\cdot\text{К/сек}\cdot\text{Дж}; & \lambda &= 2 \times 10^7 \text{ Вт}\cdot\text{К}. \end{aligned}$$

построим зависимость производительности от затрат теплоты в АДЦ по уравнению (27)

$$(28) \quad Dg^2 + \frac{g}{x_f} s_f(x_f) + Cgq = (1/T_- - 1/T_+)q - Aq^2,$$

С использованием полученных соотношений составлена программа расчета множества реализуемых режимов абсорбционно десорбционного цикла разделения, интерфейс которой показан на рисунке 2 (б). Результаты расчетов по ней приведены на рисунке 5.

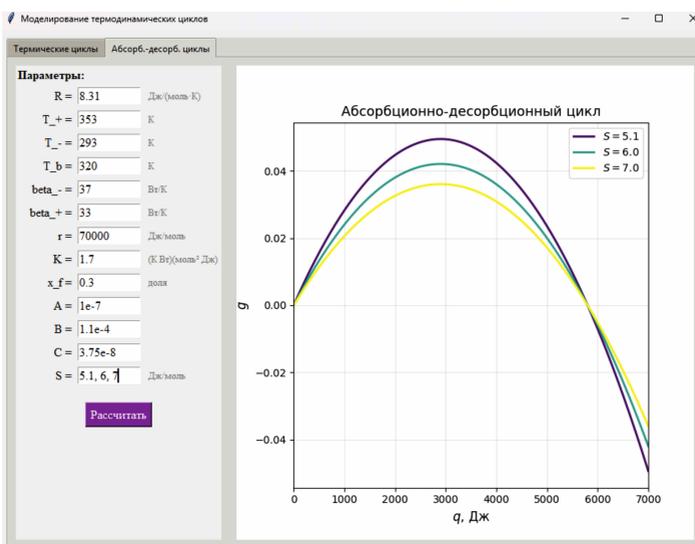


РИСУНОК 5. Зависимость производительности от затрат теплоты в АДЦ

## Заключение

Проведен термодинамический анализ необратимых процессов в термических системах разделения, в которых поток тепла используют для разделения потока газа, с абсорбцией одного из веществ, содержащихся в нем. На основе условий энергетического, материального и энтропийного балансов, построены зависимости производительности циклов от расхода теплоты. Показано, что эти зависимости ограничены сверху и имеют

максимум. Получены обратимые оценки КПД подобных процессов. На основании полученных алгоритмов разработано программное обеспечение для проведения расчетов и построения множества достижимых режимов.

### Обозначения

- $T_+$  – температура горячего источника тепла, К;  
 $T_-$  – температура холодного источника тепла, К;  
 $T_b$  – температура кипения абсорбента, К;  
 $x_f$  – концентрация абсорбируемого компонента в смеси, поступающей на разделение, моль/моль;  
 $x_a, x_2$  – концентрация абсорбируемого компонента в абсорбенте на входе и на выходе из абсорбера, моль/моль;  
 $g$  – поток массопереноса в абсорбере, моль/с;  
 $g_f, g_1$  – потоки газовой смеси на входе и на выходе абсорбера, моль/с;  
 $g_0$  – поток газа на выходе десорбера, моль/с;  
 $g_a$  – поток абсорбента на входе в абсорбер, моль/с;  
 $\mu$  – химический потенциал, Дж/моль;  
 $R$  – универсальная газовая постоянная, 8,31 Дж/(моль·К);  
 $\beta_+$  – коэффициент теплопроводности, Вт/К;  
 $\beta_-$  – коэффициент теплопроводности, Вт/К;  
 $r$  – теплота парообразования, Дж/моль;  
 $K$  – коэффициент теплопередачи, К моль<sup>2</sup>/сек Дж;  
 $\alpha$  – коэффициент, (моль·К)/сек;  
 $\lambda$  – коэффициент, (Вт К);  
 $k$  – коэффициент теплопередачи, К моль<sup>2</sup>/сек Дж;

### Список использованных источников

- [1] Berry R. S., Salamon P., Andresen B. (eds) *Finite-Time Thermodynamics*. – Basel–Beijing–Wuhan–Barcelona–Belgrade–Manchester–Tokyo–Cluj–Tianjin: Mdpi AG. – 2022. – ISBN 978-3036549491. – 368 pp.  [↑86](#)
- [2] Berry R. S., Kasakov V. A., Sieniutycz S., Szwasz Z., Tsirlin A. M. *Thermodynamic Optimization of Finite Time Processes*. – Chichester: John Wiley and Sons. – 2000. – ISBN 978-0471967521. – 450 pp. [↑](#)

- [3] Tsirlin A. M., Grigorevskii I. N. *Irreversible estimation possibilities of an absorption refrigeration cycle* // *Refrigeration Systems, Design Technologies and Developments*.– AbeBooks.– 2013.– Pp. 167–182. ↑<sup>87</sup>
- [4] Цирлин А.М. *Необратимые оценки предельных возможностей термодинамических и микроэкономических систем*.– М.–Берлин: Наука.– 2015.– ISBN 978-5-4475-5985-4.– 349 с. ↑<sup>86</sup>
- [5] Рыжова А. А., Емельянов И. И., Зиядинов Н. Н. *Синтез оптимальной системы теплообмена процессов разделения многокомпонентных смесей* // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии.– 2021.– № 2.– С. 41–55. ↑<sup>86</sup>
- [6] Емельянов И. И., Зиядинов Н. Н., Сильвестрова А. С. *Алгоритм задачи оптимального проектирования систем теплообмена сложной структуры с рекуперацией тепла* // Математические методы в технологиях и технике.– 2025.– № 7.– С. 27–31. ↑<sup>87</sup>
- [7] Малыгин А. В., Емельянов И. И., Семин Р. В., Зиядинов Н. Н., Клинов А. В. *Разработка расчетного модуля мембранного процесса разделения для универсальных моделирующих программ химико-технологических процессов* // Математические методы в технологиях и технике.– 2023.– № 9.– С. 13–16. ↑<sup>87</sup>
- [8] Mazikov A. A., Sukin I. A., Tsirlin A. M. *Use of entropy-balance equations for estimating the limiting capacity of thermodiffusion cycles* // *J. Phys. Chem. B*.– 2023.– Vol. **96**.– No. 4.– Pp. 849–857. ↑<sup>87</sup>
- [9] Tsirlin A. M., Kazakov V. A. *Irreversible work of separation and heat-driven separation* // *J. Phys. Chem. B*.– 2004.– Vol. **108**.– No. 19.– Pp. 6035–6042. ↑<sup>87</sup>
- [10] Мазииков А. А. *Использование уравнений энтропийного баланса для оценки предельных возможностей термических циклов разделения* // Математические методы в технологиях и технике.– 2025.– № 12-1.– С. 17–21. ↑<sup>88</sup>
- [11] Малыгин А. В., Емельянов И. И., Семин Р. В., Фазлыев А. Р., Зиядинов Н. Н., Клинов А. В. *Моделирование процесса мембранного разделения жидкой смеси в среде Aspen Hysys* // Тонкие химические технологии.– 2025.– Т. **25**.– № 1.– С. 75–88. ↑<sup>90</sup>
- [12] Цирлин А. М. *Методы усреднённой оптимизации и их приложения*.– М.: Физматлит.– 1997.– ISBN 5-02-015091-6.– 302 с. ↑<sup>90</sup>
- [13] Березкин В. И. *Введение в физическую адсорбцию и технологию углеродных адсорбентов*.– СПб.: Виктория плюс.– 2013.– ISBN 978-5-91673-128-6.– 409 с. ↑<sup>94</sup>
- [14] Александров И. А. *Ректификационные и абсорбционные аппараты*.– М.: Химия.– 1978.– ISBN 978-5-00106-250-9.– 280 с. ↑<sup>94</sup>
- [15] Полторацк О. М. *Термодинамика в физической химии*.– М.: Высшая школа.– 1991.– ISBN 5-06-002041-X.– 319 с. ↑

- [16] Tsirlin A. M., Mironova V. A., Amelkin S. A., Kazakov V. A. *Finite-time thermodynamics: conditions of minimal dissipation for thermodynamic process with given rate* // Phys. Rev. E.– 1998.– Vol. **58**.– No. 1.– Pp. 215–223.  ↑
- [17] Бошнякович Ф. *Техническая термодинамика*.– Т. 2.– М.–Л.: Госэнергоиздат.– 1956.– 255 с. ↑
- [18] Плановский А. Н., Николаев П. И. *Процессы и аппараты химической и нефтехимической технологии*, Учебник для вузов.– М.: Химия.– 1987.– 495 с. ↑
- [19] Павлов К. Ф., Романков П. Г., Носков А. А. *Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии*.– М.: Альянс.– 1976.– ISBN 5-98535-020-7.– 575 с.  ↑
- [20] Naka Y., Terashita M., Hayashiguchi S., Takamatsu T. *An intermediate heating and cooling method for a distillation column* // J. Chem. Eng. Jpn.– 1980.– Vol. **13**.– No. 2.– Pp. 123–129.   ↑
- [21] Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Петров В. Л. *Математические основы автоматизированного проектирования химических производств*.– М.: Химия.– 1979.– ISBN 5-7245-0405-7.– 320 с. ↑

Поступила в редакцию	18.01.2026;
одобрена после рецензирования	26.02.2026;
принята к публикации	01.03.2026;
опубликована онлайн	04.03.2026.

Рекомендовал к публикации

*д.т.н. А. М. Цирлин*

## Информация об авторе:



Александр Андреевич Мазиков

Преподаватель колледжа им. А. Невского, выпускник аспирантуры ИПС РАН им. А.К. Айламазяна по направлению 2.3.1 - Системный анализ, управление и обработка информации, статистика. Специалист в области информационных систем, программно-аппаратных комплексов, системного анализа систем теплообмена и разделения газовых смесей, специалист в области катализа и каталитических реакций. Автор и соавтор 8 статей



0009-0001-8534-8633

e-mail: [a-mazikov98@mail.ru](mailto:a-mazikov98@mail.ru)

Декларация об отсутствии личной заинтересованности: *благополучие автора не зависит от результатов исследования.*

UDC 621.1

 10.25209/2079-3316-2026-17-1-85-103

# Algorithm and software for calculating thermal cycles for the separation of gas mixtures using thermodynamic criteria

Alexandr Andreevich **Mazikov**

Aylamazyan PSI RAS

**Abstract.** The methodology of optimization thermodynamics has been employed to address the problem of the ultimate capabilities of thermodiffusion separation cycles and to develop a corresponding calculation algorithm and software. Existing programs and algorithms for simulating thermodiffusion cycles did not incorporate thermodynamic criteria. Expressions have been derived for the cycle's limiting efficiency and its maximum productivity as functions of the composition of the feed mixture, the magnitude, and the temperature of the heating stream. The boundary of the feasible operating region in the productivity–heat consumption plane has been constructed and parameterized. The developed algorithms have been implemented in dedicated software for calculating thermodiffusion cycles. (*in Russian*). (*In Russian*).

**Key words and phrases:** thermodiffusion, limiting capacity, thermodynamic-balance equation, maximum efficiency, irreversibility factor

2020 *Mathematics Subject Classification:* 80M35; 80-10, 80-05

**Acknowledgments:** This work was supported by the Russian Science Foundation, project no. 25-29-00965

**For citation:** Alexandr A. Mazikov. *Algorithm and software for calculating thermal cycles for the separation of gas mixtures using thermodynamic criteria*. Program Systems: Theory and Applications, 2026, **17**:1(70), pp. 85–103. (*In Russ.*). [https://psta.psiras.ru/read/psta2026\\_1\\_85-103.pdf](https://psta.psiras.ru/read/psta2026_1_85-103.pdf)

## References

- [1] R. S. Berry, P. Salamon, B. (eds) Andresen. *Finite-Time Thermodynamics*, Mdpi AG, Basel–Beijing–Wuhan–Barcelona–Belgrade–Manchester–Tokyo–Cluj–Tianjin, 2022, ISBN 978-3036549491, 368 pp. 
- [2] R. S. Berry, V. A. Kasakov, S. Sieniutycz, Z. Szwast, A. M. Tsirlin. *Thermodynamic Optimization of Finite Time Processes*, John Wiley and Sons, Chichester, 2000, ISBN 978-0471967521, 450 pp.
- [3] A. M. Tsirlin, I. N. Grigorevskii. “Irreversible estimation possibilities of an absorption refrigeration cycle”, *Refrigeration Systems, Design Technologies and Developments*, AbeBooks, 2013, pp. 167–182. 
- [4] A. M. Cirlin. *Irreversible Estimates of the Limiting Capabilities of Thermodynamic and Microeconomic Systems*, Nauka, M.–Berlin, 2015, ISBN 978-5-4475-5985-4, 349 pp. (in Russian).
- [5] A. A. Ryzhova, I. I. Emel’yanov, N. N. Ziyadinov. “Synthesising an optimal heat exchange system for the separation of multicomponent mixtures”, *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universitety. Seriya: Sistemnyj analiz i informacionnye tekhnologii*, 2021, no. 2, pp. 41–55 (in Russian). 
- [6] I. I. Emel’yanov, N. N. Ziyadinov, A. S. Sil’vestrova. “An algorithm for the optimal design of heat exchange systems of complex structure with heat recuperation”, *Matematicheskie metody v tekhnologiyax i tekhnike*, 2025, no. 7, pp. 27–31 (in Russian).
- [7] A. V. Malygin, I. I. Emel’yanov, R. V. Semin, N. N. Ziyatdinov, A. V. Klinov. “Development of the computational module of the membrane separation process for universal modeling programs of chemical and technological processes”, *Matematicheskie metody v tekhnologiyax i tekhnike*, 2023, no. 9, pp. 13–16 (in Russian). 
- [8] A. A. Mazikov, I. A. Sukin, A. M. Tsirlin. “Use of entropy-balance equations for estimating the limiting capacity of thermodiffusion cycles”, *J. Phys. Chem. B*, **96**:4 (2023), pp. 849–857. 
- [9] A. M. Tsirlin, V. A. Kazakov. “Irreversible work of separation and heat-driven separation”, *J. Phys. Chem. B*, **108**:19 (2004), pp. 6035–6042. 
- [10] A. A. Mazikov. “Use of entropy-balance equations for estimating the limiting capacity of thermodiffusion cycles”, *Matematicheskie metody v tekhnologiyax i tekhnike*, 2025, no. 12-1, pp. 17–21 (in Russian).
- [11] A. V. Malygin, I. I. Emel’yanov, R. V. Semin, A. R. Fazlyev, N. N. Ziyadinov, A. V. Klinov. “Modeling of membrane separation of liquid mixture in Aspen Hysys”, *Tonkie khimicheskie tekhnologii*, **25**:1 (2025), pp. 75–88 (in Russian). 
- [12] A. M. Cirlin. *Averaged Optimization Methods and Their Application*, Fizmatlit, M., 1997, ISBN 5-02-015091-6, 302 pp. (in Russian).
- [13] V. I. Berezkin. *Introduction to Physical Adsorption and Carbon Adsorbent Technology*, Viktoriya plus, SPb., 2013, ISBN 978-5-91673-128-6, 409 pp. (in Russian).

- [14] I. A. Aleksandrov. *Rektifikacionnye i absorbcionnye apparaty*, Ximiya, M., 1978, ISBN 978-5-00106-250-9, 280 pp. (in Russian).
- [15] O. M. Poltorak. *Thermodynamics in Physical Chemistry*, Vysshaya shkola, M., 1991, ISBN 5-06-002041-X, 319 pp. (in Russian).
- [16] A. M. Tsirlin, V. A. Mironova, S. A. Amelkin, V. A. Kazakov. “Finite-time thermodynamics: conditions of minimal dissipation for thermodynamic process with given rate”, *Phys. Rev. E*, **58**:1 (1998), pp. 215–223. 
- [17] F. Boshnyakovich. *Technical Thermodynamics*. V. 2, Gosenergoizdat, M.–L., 1956, 255 pp. (in Russian).
- [18] A. N. Planovskij, P. I. Nikolaev. *Processes and Apparatuses of Chemical and Petrochemical Technology*, Uchebnik dlya vuzov, Ximiya, M., 1987, 495 pp. (in Russian).
- [19] K. F. Pavlov, P. G. Romankov, A. A. Noskov. *Examples and Assignments for the Course on Processes and Equipment in Chemical Engineering*, Al’yanS, M., 1976, ISBN 5-98535-020-7, 575 pp. (in Russian).
- [20] Y. Naka, M. Terashita, S. Hayashiguchi, T. Takamatsu. “An intermediate heating and cooling method for a distillation column”, *J. Chem. Eng. Jpn.*, **13**:2 (1980), pp. 123–129.  
- [21] V. V. Kafarov, V. P. Meshalkin, V. L. Petrov. *Mathematical Foundations of Automated Design of Chemical Plants*, Ximiya, M., 1979, ISBN 5-7245-0405-7, 320 pp. (in Russian).