

## ОБЛАСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ОПТИМАЛЬНОСТИ СХЕМ ЭКСТРАКТИВНОЙ РЕКТИФИКАЦИИ СМЕСИ МЕТАНОЛ – n-ПРОПИЛАЦЕТАТ – ТОЛУОЛ С АНИЛИНОМ

Б.Б. Долматов, аспирант, А.В. Тимошенко, профессор, А.Г. Волков, студент,  
Е.А. Анохина, ассистент

кафедра Химии и технологии основного органического синтеза

МИТХТ им. М.В. Ломоносова

e-mail: borisdolm@yandex.ru

**Н**астоящая работа посвящена исследованию расположения изокритериальных многообразий и областей энергетической оптимальности комплексов экстрактивной ректификации смеси метанол–n-пропилацетат–толуол в симплексе исходных составов питания. Разделяемая смесь содержит один бинарный азеотроп с минимумом температуры кипения (в бинарной паре метанол–толуол) и один тангенциальный азеотроп вблизи чистого n-пропилацетата (в паре метанол – n-пропилацетат).

**Ключевые слова:** ректификация, энергосбережение, азеотропия, экстрактивная ректификация, области оптимальности.

Синтез оптимальной технологической схемы является одной из главных и одной из самых трудных задач химической технологии. В полной мере это относится и к подсистеме разделения, которая в большинстве производств органического синтеза использует ректификацию в качестве основного способа разделения и, соответственно, образует последовательность ректификационных колонн, связанных прямыми и обратными тепловыми и материальными потоками. Необходимость процедуры оптимизации этой подсистемы определяется термодинамически необратимым характером процесса ректификации, что приводит к зависимости затрат энергии и производства энтропии от пути его протекания. Очевидно, что наиболее полно путь процесса отображает его траектория.

Известно, что графы траекторий ректификации просто преобразуются в графы технологических схем путем добавления ориентированных ребер, отображающих материальные потоки между отдельными аппаратами схемы [1]. Следовательно, множество технологических схем ректификации можно рассматривать как отображение множества траекторий ректификации на множество аппаратов разделения и связей между ними. Это позволяет рассматривать схему как путь процесса.

В связи с этим важной и интересной задачей является синтез всего множества технологических схем разделения. Эта, казалось бы, простая комбинаторная задача была решена даже для самых простых последовательностей двухсекционных колонн относительно недавно [2]. Для азеотропных смесей решение этой задачи осложняется

наличием термодинамико-топологических ограничений на составы продуктовых потоков. Это приводит к тому, что в общем случае заранее неизвестен набор разделительных элементов и комплексов, обеспечивающих получение заданного продукта. Поэтому на первом этапе должна быть решена задача поиска возможных схем [3].

Основой для преодоления термодинамико-топологических ограничений служит принцип перераспределения полей концентраций между областями разделения [4, 5], например, за счет использования экстрактивной ректификации. При экстрактивной ректификации снимаются ограничения на составы продуктовых потоков, что позволяет использовать для процедуры синтеза в качестве прообразов схемы разделения зеотропных смесей [6].

Известно, что для зеотропных смесей все множество составов питания распадается на ряд подмножеств, для каждого из которых имеется единственная, оптимальная по заданному критерию, технологическая схема ректификации. Эти подмножества также называются областями оптимальности (в данном случае – областями энергетической оптимальности). Границами между областями оптимальности выступают изокритериальные многообразия, являющиеся множествами составов питания, для которых значения критерия оптимизации равны для двух или нескольких технологических схем. Впервые такое разбиение концентрационного пространства было выявлено авторами [7] и для широкого класса трех- и четырехкомпонентных смесей исследовано в работах [8–11]. В случае, если рассматривается разде-

ление только в простых колоннах [8–9], число областей оказывается равным числу возможных схем. В трехкомпонентных системах выявлено две, а в четырехкомпонентных – пять областей оптимальности.

Однако исследования областей оптимальности при экстрактивной ректификации начались только недавно.

Для каждого фазового портрета парожидкостного равновесия имеется некоторое конечное счетное количество схем экстрактивной ректификации [6, 12]. Поскольку схемы могут состоять не только из простых двухотборных колонн, но и включать в себя комплексы с частично связанными тепловыми и материальными потоками, то даже для экстрактивной ректификации бинарной азеотропной смеси имеются, по крайней мере, два варианта разделения (рис. 1).

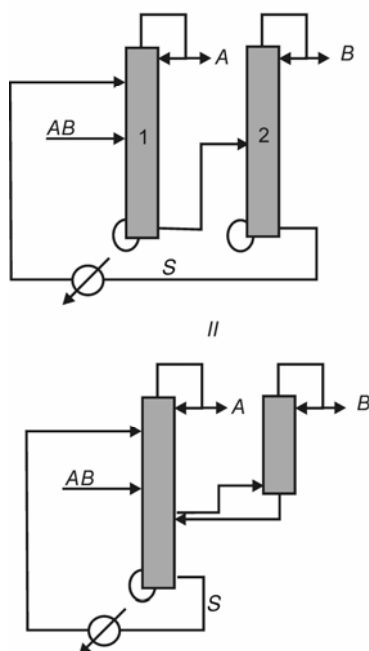


Рис. 1. Схемы экстрактивной ректификации бинарной азеотропной смеси: I – традиционный вариант; II – вариант с частично связанными тепловыми и материальными потоками. *A* и *B* – компоненты исходной смеси; *S* – экстрактивный агент; 1 – колонна экстрактивной ректификации, 2 – колонна регенерации экстрактивного агента.

Эффективность применения теплоинтеграции при экстрактивной ректификации была продемонстрирована авторами [13–15]. Например, при разделении азеотропной смеси ацетон–хлороформ с диметилформамидом (ДМФА) разница в энергопотреблении между различными вариантами разделения составляет от 25.9 до 32.2 мол. % в зависимости от состава питания.

Однако, для бинарной смеси говорить о наличии областей оптимальности, и, соответственно, об изокритериальных многообразиях

в концентрационном симплексе исходных составов следует достаточно осторожно, поскольку схемы с теплоинтеграцией потоков за счет исключения некоторых зон необратимого смешения в большинстве случаев оказываются лучше по энергопотреблению во всем симплексе составов питания.

Для разделения многих трехкомпонентных азеотропных смесей даже при использовании только двухотборных колонн существуют более одной технологической схемы экстрактивной ректификации [6]. Еще больше возможностей для проведения анализа эффективности схемы при варьировании состава питания открывает применение теплоинтеграции, поскольку это приводит к резкому увеличению числа вариантов [15].

Ранее [16] нами были получены данные о расположении областей оптимальности и изокритериальных многообразий, их разделяющих, при экстрактивной ректификации (ЭР) смеси метанол–*n*-пропилацетат–толуол в схемах разделения, содержащих только двухотборные колонны (рис. 2).

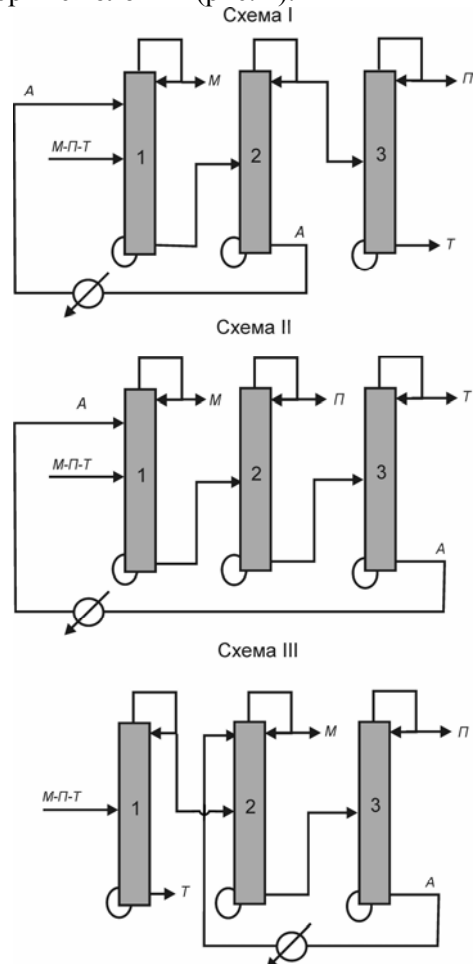


Рис. 2. Технологические схемы ЭР смеси метанол – *n*-пропилацетат – толуол: I – схема I; II – схема II; III – схема III. *A* – анилин; *M* – метанол; *П* – *n*-пропилацетат; *T* – толуол; 1, 2, 3 – ректификационные колонны.

В схеме I практически чистый метанол выделяется в качестве дистиллята первой колонны, практически чистый анилин – в качестве кубового продукта второй колонны, а пара *n*-пропилацетат – толуол делится в третьей колонне. Во второй схеме реализуется вариант первого заданного разделения, т.е. в первой колонне выделяется метанол, во второй – *n*-пропилацетат, а в третьей колонне происходит регенерация экстрактивного агента. Третий вариант представляет собой трехколонную схему, в которой на первом этапе отделяют зеотропную составляющую, т.е. толуол выделяется как кубовый продукт первой колонны, во второй колонне экстрактивной ректификацией разделяется пара метанол – *n*-пропилацетат, а в третьей колонне происходит регенерация экстрактивного агента.

Исходная трехкомпонентная смесь имеет один бинарный азеотроп метанол–толуол с глобальным минимумом температуры кипения и тангенциальный азеотроп в системе *n*-пропилацетат–толуол вблизи чистого *n*-пропилацетата. В качестве экстрактивного агента использовался анилин. Для расчета парожидкостного равновесия использовали модель UNIFAC. Средняя погрешность описания по отношению к имеющимся экспериментальным данным составляет 3.6 %.

В симплексе исходной трехкомпонентной смеси реализуется один пучок дистилляционных траекторий.

Для получения информации о геометрии распределения концентрационных областей оптимальности и изокритериальных многообразий этих технологических схем разделения нами был выбран набор составов питания, представленный в табл. 1, так чтобы

точки лежали в разных областях симплекса и обеспечивали получение сечений, которые позволяют интерполировать данные, полученные для конкретных точек.

Таким образом, внутри исходного концентрационного симплекса была выделена область питания, внешние границы которой параллельны границам симплекса  $X_i = 0.2$  мол. д.

В каждой выбранной точке были определены суммарные затраты тепла в кубах колонн каждой схемы. При этом поддерживали постоянную кратность орошения анилином по отношению к количеству исходной трехкомпонентной смеси, подаваемой на разделение, равную единице.

Таблица 1. Исходные составы питания

| n | $X_M-X_P-X_T$ ,<br>мол. % | n | $X_M-X_P-X_T$ ,<br>мол. % |
|---|---------------------------|---|---------------------------|
| 1 | 80-10-10                  | 5 | 33-33-33                  |
| 2 | 33-57-10                  | 6 | 33-10-57                  |
| 3 | 10-80-10                  | 7 | 10-57-33                  |
| 4 | 57-10-33                  | 8 | 10-10-80                  |

На рис. 3 представлено расположение альфа-многообразий, определяющих влияние экстрактивного агента на относительную летучесть азеотропообразующей пары компонентов смеси (метанол–толуол). Единичное альфа-многообразие делит концентрационный симплекс на две части: область, где относительная летучесть меньше единицы прилегает к вершине метанола и занимает относительно небольшую область симплекса. Видно, что при увеличении количества экстрактивного агента относительная летучесть пары компонентов смеси увеличивается, но не очень сильно.

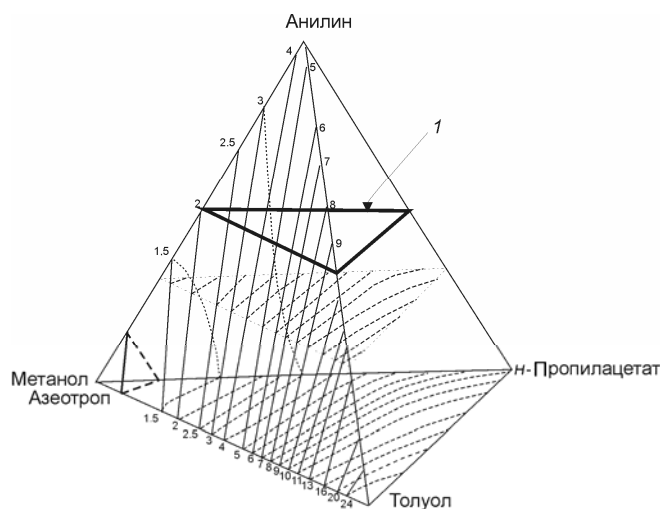


Рис. 3. Альфа-многообразия смеси метанол–толуол. 1 – сечение симплекса при соотношении анилин : исходная трехкомпонентная смесь 1 : 1.

Данное исследование проводилось нами для одинакового брутто-состава исходной смеси, подаваемой на разделение, вместе с анилином, т.е. диапазон поиска областей оптимальности и изокритериальных многообразий сводился к одному сечению симплекса, включающего исходную смесь и

анилин. Это сечение представлено на рис. 3 (сечение *I*). В результате были получены данные о расположении областей оптимальности и изоэнергетических многообразий. Показано, что над множеством составов питания разворачиваются три скалярных функции критерия оптимизации (рис. 4 и 5).

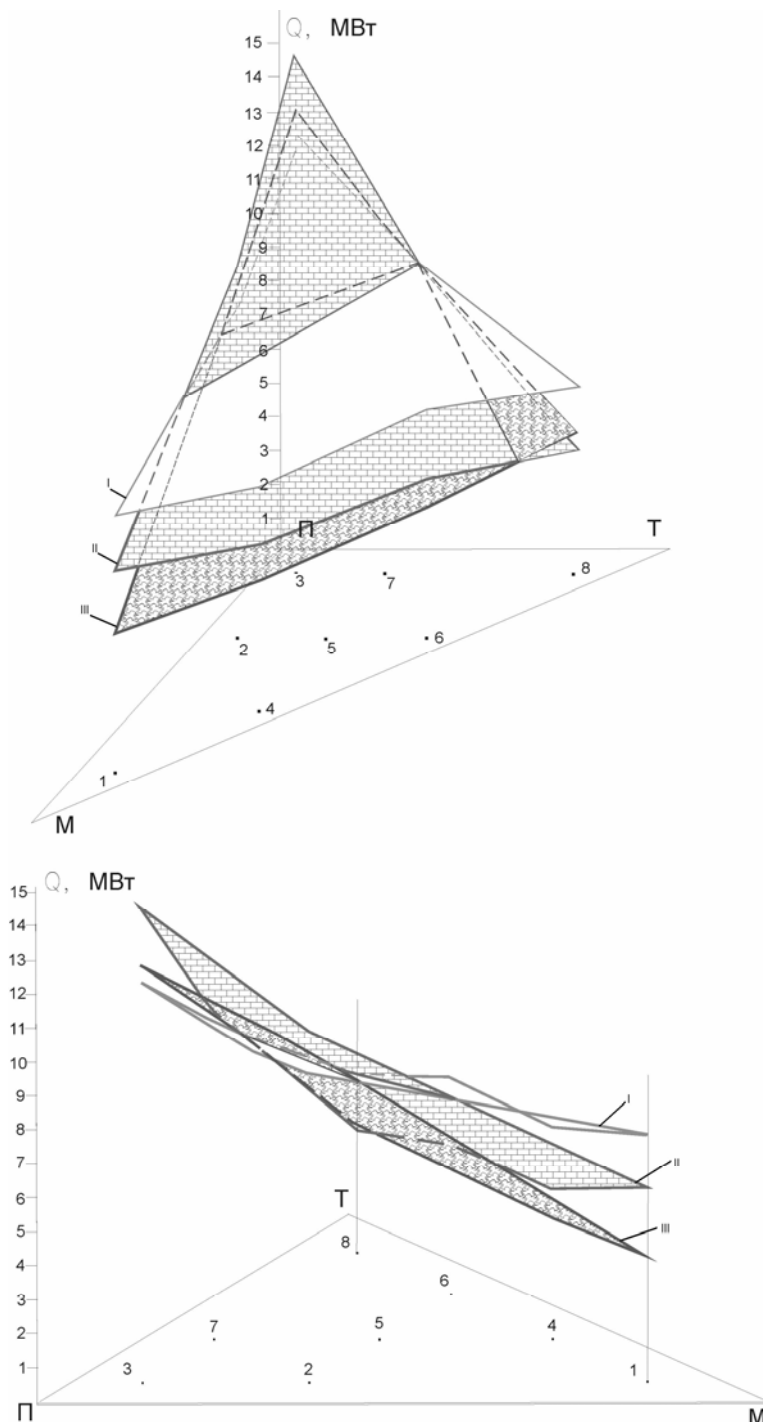


Рис. 4. Изокритериальные многообразия смеси метанол–*n*-пропилацетат–толуол при одинаковом брутто-составе. (а), (б) – различные проекции изокритериальных многообразий. *I* – область оптимальности схемы *I*; *II* – область оптимальности схемы *II*; *III* – область оптимальности схемы *III*. 1–8 – номера точек, соответствующих различным составам питания.

В настоящей работе поставлена цель изучения расположения областей оптимальности и разделяющих их изокритериальных

многообразий в концентрационном симплексе, отвечающем брутто-составам питания, которые соответствуют оптимальному (с

точки зрения критерия оптимизации) расходу экстрактивного агента.

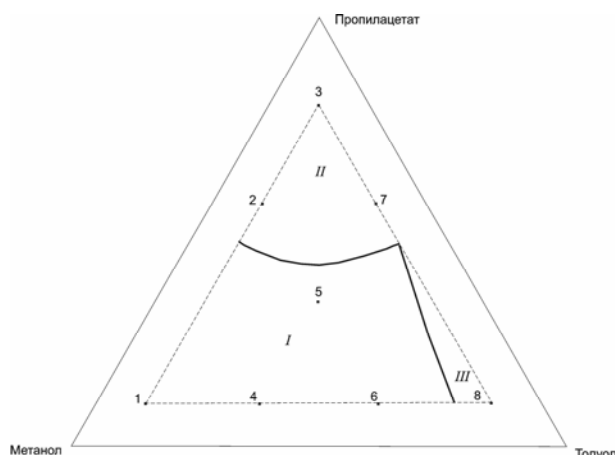


Рис. 5. Проекция изокритериальных многообразий смеси метанол-*n*-пропилацетат-толуол в симплексе исходных составов питания при одинаковом брутто-составе. *I* – область оптимальности схемы *I*; *II* – область оптимальности схемы *II*; *III* – область оптимальности схемы *III*. 1–8 – номера точек, соответствующих различным составам питания.

В качестве критерия оптимизации нами были выбраны суммарные энергетические затраты в кипятильниках колонн.

Сопоставление схем проводили при оптимальных для каждой из них рабочих

параметрах: температуре и расходе анилина и положении тарелок ввода питания и экстрагента в колоннах схем.

Оптимизацию проводили с использованием программного комплекса HYSYS. Как и в предыдущей работе расчеты выполняли в проектно-проверочном варианте на 100 кмоль/ч исходной смеси, поступающей на разделение при температуре кипения. Все аппараты схемы работают при давлении 0.1 МПа. Качество продуктовых фракций задавали равным для метанола – 99.5 мол. %, для *n*-пропилацетата и толуола – 98.5 мол. % и для анилина – 99.9 мол. %. Суммарное число теоретических ступеней разделения в схемах было равным и составляло 200 теоретических тарелок.

Погрешность определения значения критерия оптимизации составляла 0.1%.

Процедура оптимизации каждой из схем включала в себя определение оптимального расхода анилина, положения тарелок питания в колонне экстрактивной ректификации, температуры экстрактивного агента, а также оптимального уровня подачи питания в остальные колонны схемы. В табл. 2 приведены оптимальные параметры работы схемы разделения *I*.

Таблица 2. Оптимальные параметры работы схемы *I* для разных заданных составов питания.

| <i>n</i> | $F_{ЭА}$ ,<br>кмоль/ч | $T_{ЭА}$ ,<br>°C | $N_{ЭА}/N_F$ | Колонна 1 |                     |                    |       | Колонна 2 |                     |                    |       | Колонна 3 |                     |                    |       | $Q$ ,<br>МВт |
|----------|-----------------------|------------------|--------------|-----------|---------------------|--------------------|-------|-----------|---------------------|--------------------|-------|-----------|---------------------|--------------------|-------|--------------|
|          |                       |                  |              | <i>R</i>  | $Q_{конд}$ ,<br>МВт | $Q_{кип}$ ,<br>МВт | $N_F$ | <i>R</i>  | $Q_{конд}$ ,<br>МВт | $Q_{кип}$ ,<br>МВт | $N_F$ | <i>R</i>  | $Q_{конд}$ ,<br>МВт | $Q_{кип}$ ,<br>МВт | $N_F$ |              |
| 1        | 92                    | 60               | 5/33         | 0.51      | -1.19               | 1.70               | 24    | 0.83      | -0.34               | 0.48               | 106   | 14.93     | -1.51               | 1.51               | 3.69  |              |
| 2        | 30                    | 60               | 5/33         | 0.61      | -0.52               | 0.75               | 30    | 0.18      | -0.75               | 0.83               | 96    | 13.96     | -8.19               | 8.20               | 9.74  |              |
| 3        | 10                    | 60               | 4/24         | 1.10      | -0.21               | 0.33               | 33    | 0.11      | -0.95               | 0.97               | 92    | 13.76     | -11.36              | 11.05              | 12.3  |              |
| 4        | 38                    | 60               | 4/35         | 0.55      | -0.87               | 1.25               | 31    | 0.39      | -0.56               | 0.72               | 106   | 15.69     | -1.53               | 1.53               | 3.50  |              |
| 5        | 38                    | 60               | 4/34         | 0.59      | -0.51               | 0.79               | 30    | 0.23      | -0.78               | 0.87               | 106   | 14.41     | -4.83               | 4.83               | 6.49  |              |
| 6        | 40                    | 60               | 4/35         | 0.56      | -0.51               | 0.81               | 34    | 0.28      | -0.80               | 0.91               | 100   | 17.18     | -1.60               | 1.61               | 3.33  |              |
| 7        | 12                    | 60               | 4/29         | 0.84      | -0.18               | 0.33               | 33    | 0.13      | -0.96               | 1.00               | 99    | 14.17     | -8.27               | 8.02               | 9.35  |              |
| 8        | 12                    | 60               | 4/35         | 0.62      | -0.16               | 0.36               | 35    | 0.27      | -1.07               | 1.10               | 93    | 20.34     | -1.81               | 1.84               | 2.65  |              |

Таблица 3. Оптимальные параметры работы схемы *II* для разных составов питания.

| <i>n</i> | $F_{ЭА}$ ,<br>кмоль/ч | $T_{ЭА}$ ,<br>°C | $N_{ЭА}/N_F$ | Колонна 1 |                     |                    |       | Колонна 2 |                     |                    |       | Колонна 3 |                     |                    |       | $Q$ ,<br>МВт |
|----------|-----------------------|------------------|--------------|-----------|---------------------|--------------------|-------|-----------|---------------------|--------------------|-------|-----------|---------------------|--------------------|-------|--------------|
|          |                       |                  |              | <i>R</i>  | $Q_{конд}$ ,<br>МВт | $Q_{кип}$ ,<br>МВт | $N_F$ | <i>R</i>  | $Q_{конд}$ ,<br>МВт | $Q_{кип}$ ,<br>МВт | $N_F$ | <i>R</i>  | $Q_{конд}$ ,<br>МВт | $Q_{кип}$ ,<br>МВт | $N_F$ |              |
| 1        | 92                    | 60               | 5/33         | 0.51      | -1.19               | 1.70               | 74    | 30.35     | -2.99               | 3.03               | 27    | 1.39      | -0.21               | 0.32               | 5.05  |              |
| 2        | 30                    | 60               | 5/33         | 0.61      | -0.52               | 0.75               | 92    | 14.17     | -8.32               | 8.34               | 30    | 0.61      | -0.14               | 0.20               | 9.29  |              |
| 3        | 10                    | 60               | 4/24         | 1.10      | -0.21               | 0.33               | 91    | 13.67     | -11.29              | 11.30              | 33    | 0.34      | -0.11               | 0.14               | 11.77 |              |
| 4        | 68                    | 60               | 4/35         | 0.55      | -0.87               | 1.25               | 78    | 29.04     | -2.78               | 2.79               | 25    | 0.44      | -0.44               | 0.60               | 4.64  |              |
| 5        | 38                    | 60               | 4/34         | 0.59      | -0.51               | 0.79               | 102   | 15.30     | -5.12               | 5.13               | 28    | 0.33      | -0.42               | 0.52               | 6.44  |              |
| 6        | 40                    | 60               | 4/35         | 0.56      | -0.51               | 0.81               | 81    | 26.82     | -2.48               | 2.48               | 33    | 0.29      | -0.69               | 0.80               | 4.09  |              |
| 7        | 12                    | 60               | 4/29         | 0.84      | -0.18               | 0.33               | 102   | 14.27     | -8.32               | 8.33               | 34    | 0.27      | -0.39               | 0.42               | 9.08  |              |
| 8        | 12                    | 60               | 4/35         | 0.62      | -0.16               | 0.36               | 87    | 23.75     | -2.10               | 2.10               | 35    | 0.32      | -1.00               | 1.03               | 3.49  |              |

Из табл. 2 видно, что энергозатраты в кипятильнике первой колонны растут с увеличением содержания метанола в исходной смеси и одновременно с ростом отбора верхнего продукта уменьшается флегмовое число.

Аналогичным образом ведут себя и показатели работы второй и третьей колонн – при увеличении потока дистиллята (в случае второй колонны это суммарный поток *n*-пропилацетата и толуола, а в третьей колонне – практически чистый *n*-пропилацетат), возрастают нагрузки на кипятильники.

При этом суммарные энергетические затраты в кипятильниках колонн существенно зависят от состава подаваемой на разделение смеси, и максимальное энергопотребление превышает минимальное в 3.8 раза.

Данные по параметрам работы схемы II представлены в табл. 3.

Отметим, что колонны 1 в первых двух схемах идентичны, соответственно, все параметры их работы остаются неизменными в обоих случаях.

Энергозатраты в колоннах 2 и 3 схемы II также увеличиваются с ростом отбора дис-

тиллята, как и в схеме I.

В целом для схемы II наблюдается сходная со схемой I картина изменения энергозатрат при варьировании исходного состава питания. Это можно объяснить тем, что первые колонны схем совпадают друг с другом. Разница между минимальными и максимальными энергозатратами здесь составляет 380%, также как в первом варианте.

В схеме III реализуется вариант второго заданного разделения. Параметры работы колонн схемы представлены в таблице 4. В первой колонне наблюдается ситуация, аналогичная первым двум вариантам – при увеличении количества толуола в питании увеличиваются энергетические затраты в кипятильнике колонны. Также энергозатраты сильно зависят от состава питания и, в частности, от концентрации *n*-пропилацетата в питании колонны. В колонне экстрактивной ректификации происходит выделение метанола, и энергозатраты в кубе этой колонны являются функцией его количества в исходном питании – при увеличении его концентрации они увеличиваются.

Таблица 4. Оптимальные параметры работы схемы III для разных составов питания.

| $n$ | $F_{ЭА},$<br>кмоль/ч | $T_{ЭА},$<br>°C | $N_F$ | Колонна 1 |                    |                   |                    | Колонна 2 |                    |                   |       | Колонна 3 |                    |                   |       | $Q,$<br>МВт |
|-----|----------------------|-----------------|-------|-----------|--------------------|-------------------|--------------------|-----------|--------------------|-------------------|-------|-----------|--------------------|-------------------|-------|-------------|
|     |                      |                 |       | $R$       | $Q_{конд},$<br>МВт | $Q_{кип},$<br>МВт | $N_{ЭА}/$<br>$N_F$ | $R$       | $Q_{конд},$<br>МВт | $Q_{кип},$<br>МВт | $N_F$ | $R$       | $Q_{конд},$<br>МВт | $Q_{кип},$<br>МВт |       |             |
| 1   | 38                   | 60              | 104   | 2.44      | -3.05              | 3.07              | 4/29               | 0.41      | -1.11              | 1.34              | 25    | 0.78      | -0.16              | 0.23              | 4.64  |             |
| 2   | 14                   | 60              | 94    | 9.08      | -9.52              | 9.54              | 4/33               | 0.57      | -0.51              | 0.66              | 29    | 0.13      | -0.62              | 0.66              | 10.86 |             |
| 3   | 4                    | 60              | 87    | 12.13     | -12.33             | 12.34             | 4/26               | 1.21      | -0.21              | 0.31              | 28    | 0.07      | -0.83              | 0.84              | 13.49 |             |
| 4   | 26                   | 60              | 108   | 3.70      | -3.08              | 3.16              | 4/33               | 0.43      | -0.80              | 0.94              | 27    | 0.55      | -0.14              | 0.19              | 4.29  |             |
| 5   | 14                   | 60              | 106   | 7.28      | -5.60              | 5.67              | 4/33               | 0.53      | -0.50              | 0.61              | 30    | 0.17      | -0.37              | 0.40              | 6.68  |             |
| 6   | 14                   | 60              | 106   | 4.29      | -2.21              | 2.34              | 4/33               | 0.48      | -0.48              | 0.56              | 29    | 0.37      | -0.12              | 0.15              | 3.05  |             |
| 7   | 4                    | 60              | 102   | 11.11     | -8.50              | 8.55              | 4/27               | 0.96      | -0.19              | 0.28              | 31    | 0.09      | -0.59              | 0.60              | 9.43  |             |
| 8   | 4                    | 60              | 97    | 8.48      | -1.83              | 1.97              | 4/34               | 0.54      | -0.15              | 0.18              | 30    | 0.18      | -0.10              | 0.11              | 2.26  |             |

Рассчитав энергопотребление каждой из схем для всех выбранных составов питания, с помощью метода сечений определяли зависимость значения критерия оптимизации от концентрации одного из компонентов в потоке питания, а затем выявляли изокритериальные многообразия путем отображения пересечений функций значений критерия оптимизации для различных схем в симплексе исходных составов питания. Исходя из выбранных составов питания, в концентрационном симплексе было построено шесть одномерных сечений (табл. 5). Пример изменения энергозатрат схем I – III на разделение вдоль сечения  $X_M = \text{мол. } 10\%$  представлен на рис. 6.

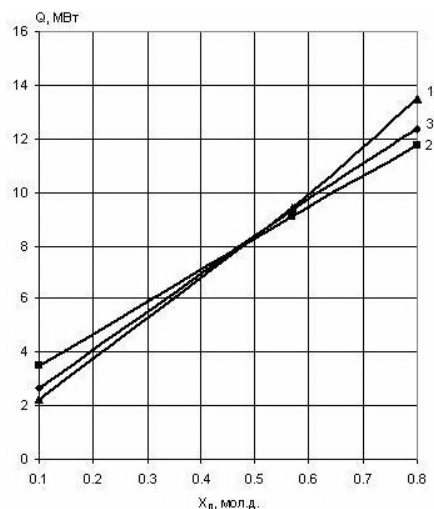


Рис. 6. Изменение энергозатрат при постоянной концентрации метанола в питании  $X_M = 10\%$ . 1 – энергозатраты схемы I; 2 – энергозатраты схемы II; 3 – энергозатраты схемы III.

Таблица 5. Энергозатраты на разделение в одномерных сечениях концентрационного симплекса.

|          |     | $Q$ , МВт                  |          |           |
|----------|-----|----------------------------|----------|-----------|
| мол. %   | $n$ | Схема I                    | Схема II | Схема III |
| <hr/>    |     |                            |          |           |
| $X_{II}$ |     | Сечение $X_T=10$ мол. %    |          |           |
| 10       | 1   | 3.69                       | 5.05     | 4.64      |
| 57       | 2   | 9.74                       | 9.29     | 10.86     |
| 80       | 3   | 12.35                      | 11.77    | 13.49     |
| $X_{II}$ |     | Сечение $X_M=33.34$ мол. % |          |           |
| 10       | 2   | 9.74                       | 9.29     | 10.86     |
| 33       | 5   | 6.49                       | 6.44     | 6.68      |
| 57       | 6   | 3.33                       | 4.09     | 3.05      |
| $X_{II}$ |     | Сечение $X_T=33.34$ мол. % |          |           |
| 10       | 4   | 3.50                       | 4.64     | 4.29      |
| 33       | 5   | 6.49                       | 6.44     | 6.68      |
| 57       | 7   | 9.35                       | 9.08     | 9.43      |
| $X_T$    |     | Сечение $X_M=10$ мол. %    |          |           |
| 10       | 3   | 12.35                      | 11.77    | 13.49     |
| 33       | 7   | 9.35                       | 9.08     | 9.43      |
| 80       | 8   | 2.65                       | 3.49     | 2.26      |
| $X_T$    |     | Сечение $X_{II}=10$ мол. % |          |           |
| 10       | 1   | 3.69                       | 5.05     | 4.64      |
| 33       | 4   | 3.50                       | 4.64     | 4.29      |
| 57       | 6   | 3.33                       | 4.09     | 3.05      |
| 80       | 8   | 2.65                       | 3.49     | 2.26      |
| $X_T$    |     | Сечение $X_{II}=57$ мол. % |          |           |
| 10       | 2   | 9.74                       | 9.29     | 10.86     |
| 33       | 7   | 9.60                       | 9.08     | 9.43      |

В целом над множеством составов питания разворачиваются три скалярных функции критерия оптимизации (рис. 7).

Видно, что энергозатраты существенно зависят от состава исходного питания. Функции критерия оптимизации для всех схем имеют достаточно гладкий вид, практически монотонно возрастают и не имеют экстремумов. Так при увеличении концентрации *n*-пропилацетата потребление энергии постепенно возрастает для всех схем, причем предельные оптимальные варианты (малая и высокая концентрации *n*-пропилацетата) различаются по затратам тепла втрое. При малом его содержании в питании оптимальной является первая схема. Если постепенно увеличить содержание среднекипящего компонента до уровня более 50%, более выгодной становится вторая схема разделения.

Соотношение концентраций метанола и толуола в исходном питании в меньшей мере влияет как на энергозатраты всех схем, так и на структуру оптимального варианта разделения. При высоких концентрациях толуола

появляется область оптимальности третьей схемы разделения.

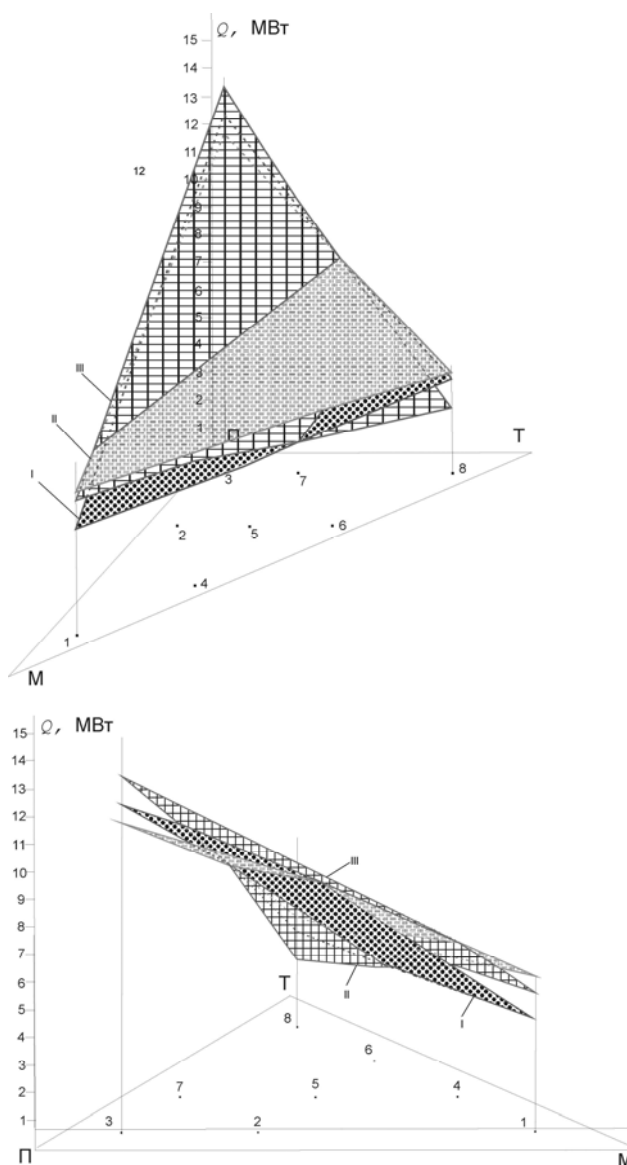


Рис. 7. Изокритериальные многообразия смеси метанол–*n*-пропилацетат–толуол при оптимальном расходе анилина. (а), (б) – изокритериальные многообразия с разных углов зрения. I – область оптимальности схемы I; II – область оптимальности схемы II; III – область оптимальности схемы III. 1–8 – номера точек, соответствующих различным составам питания

Максимальная разница в энергозатратах между схемами во всем исследованном диапазоне концентраций составляет 37%, что говорит о значительном влиянии структуры схемы разделения на эффективность работы разделительного комплекса.

Если для каждого исходного состава питания выбрать минимальное для всех схем значение энергетических затрат, а затем отобразить полученную кусочную поверхность в симплекс составов питания, то он распадется на три связанные области опти-

мальности, отвечающие каждой из схем. Границы областей – изоэнергетические многообразия. Их размерности в данном случае равны единице (линия) и нулю (точка). Области оптимальности расположены так, что каждая из них граничит с двумя остальными. Также существует изокритериальная точка в симплексе, где значение критерия оптимизации всех схем равны (рис. 8).

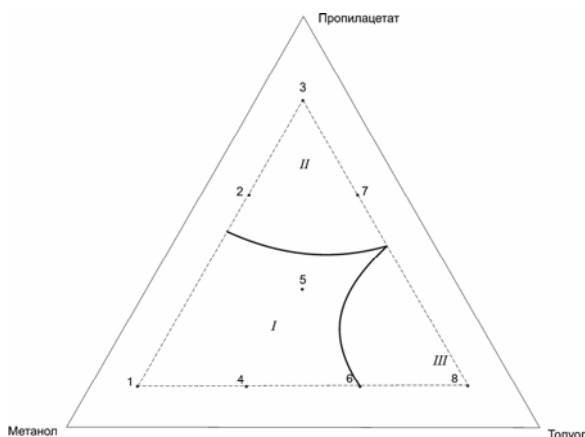


Рис. 8. Проекция изокритериальных многообразий смеси метанол–*n*-пропилацетат–толуол в симплексе исходных составов питания при оптимальном расходе экстрактивного агента. *I* – область оптимальности схемы I; *II* – область оптимальности схемы II; *III* – область оптимальности схемы III. 1–8 – номера точек, соответствующих различным составам питания.

Если сравнить ранее полученные нами результаты (рис. 4 и 5) для случая постоян-

ного брутто-состава смеси, т.е. одинакового для всех составов соотношения исходная смесь: анилин, с вновь полученными данными, когда энергозатраты определяются при оптимальном расходе экстрактивного агента (рис. 7 и 8), то очевидно, что топология расположения областей оптимальности и изокритериальных многообразий для обоих случаев одинакова.

Отличием является существенное увеличение при оптимальном соотношении питания и экстрактивного агента области оптимальности третьей схемы (отвечающей второму заданному разделению). Это происходит за счет уменьшения области, занимаемой первой схемой, поскольку в ряде случаев требуется очень небольшое количество экстрактивного агента, в то время как при постоянном брутто-составе его расход существенно завышен. Поэтому наблюдается сужение области оптимальности третьей схемы, т.к. первая схема является оптимальной как раз при больших расходах анилина.

В целом, в ходе работы выявлен характер зависимости функции критерия оптимизации от состава питания для каждой из трех схем разделения. Показано, что критериальные зависимости имеют малую кривизну. Установлен вид распределения областей оптимальности схем в симплексе составов питания.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 08-08-00318а).*

#### ОБОЗНАЧЕНИЯ:

$A$ ,  $B$  – компоненты исходной смеси;  $F_{ЭА}$  – расход экстрактивного агента, кмоль/ч;  $S$  – экстрактивный агент;  $n$  – номер точки, соответствующей определенному составу питания;  $N_{ЭА}$  – тарелка подачи экстрактивного агента;  $N_F$  – тарелка подачи исходной смеси;  $R$  – безразмерное флегмовое число;  $T_{ЭА}$  – температура экстрактивного агента, °С;  $Q_{кон}$  – тепловая нагрузка на конденсатор колонны, МВт;  $Q_{кип}$  – тепловая нагрузка на кипятильник колонны, МВт;  $Q$  – суммарная тепловая нагрузка на кипятильники колонн схемы, МВт;  $X_i$  – концентрация  $i$ -го компонента;  $A$  – анилин;  $M$  – метанол;  $P$  – *n*-пропилацетат;  $T$  – толуол.

#### ИНДЕКСЫ:

$F$  – исходное питание;  $i$  – компонент; ЭА – экстрактивный агент; кип – кипятильник; кон – конденсатор

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Тимошенко, А. В. Применение графов траекторий ректификации для синтеза технологических схем разделения / А. В. Тимошенко, Е. А. Анохина, Д. Л. Був // Теор. основы хим. технологии. – 2004. – Т. 38, № 2. – С. 172–176.
2. Серафимов, Л. А. Определение числа вариантов технологических схем ректификации  $n$ -компонентных смесей / Л. А. Серафимов, А. С. Можухин, Л. Б. Науменкова // Теор. основы хим. технологии. – 1993. – Т. 27, № 3. – С. 292–299.
3. Петлюк, Ф. Б. Многокомпонентная ректификация, теория и расчет / Ф. Б. Петлюк, Л. А. Серафимов. – М.: Химия, 1983. – 304 с.

4. Жаров, В. Т. Физико-химические основы дистилляции и ректификации / В. Т. Жаров, Л. А. Серафимов. – М.: Химия, 1975. – 240 с.
5. Серафимов, Л. А. Фундаментальный принцип перераспределения полей концентраций между областями ректификации как основа создания технологических комплексов / Л. А. Серафимов, А. К. Фролова // Теор. основы хим. технологии. – 1997. – Т. 31, № 2. – С. 184–190.
6. Иванова, Л. В. Синтез схем экстрактивной ректификации азеотропных смесей / Л. В. Иванова, А. В. Тимошенко, В. С. Тимофеев // Теор. основы хим. технологии. – 2005. – Т. 39, № 1. С. – 19–23.
7. Tedder, D. W. Parametric Studies in Industrial Distillation, Part I. Design Comparisons / D. W. Tedder, D. F. Rudd // AIChE J. – 1978. – Vol. 24, № 2. – P. 303–307.
8. Береговых, В. В. Выбор оптимальной технологической схемы ректификации тройных азеотропных смесей / В. В. Береговых, М. М. Корабельников, Л. А. Серафимов // Хим. фарм. журнал. – 1984. – № 3. – С. 350–354.
9. Береговых, В. В. Стратегия синтеза и анализа технологических схем ректификации / В. В. Береговых, М. М. Корабельников, Л. А. Серафимов // Хим. фарм. журнал. – 1985. – № 3. – С. 202–206.
10. Особенности ректификации четырехкомпонентной системы бензол–толуол–изопропилбензол– $\alpha$ -метилстирол / В. В. Береговых [и др.] // Научно-техн. реф. сб. ЦНИИТЭНефтехим «Промышленность СК». – 1977. – № 11. – С. 1–6.
11. Особенности ректификации четырехкомпонентной системы бензол–толуол–этилбензол– $\alpha$ -метилстирол / В. В. Береговых [и др.] // Научно-техн. реф. сб. ЦНИИТЭНефтехим «Промышленность СК». – 1977. – № 5. – С. 4–10.
12. Тимошенко, А. В. Синтез схем экстрактивной ректификации азеотропных смесей в комплексах колонн с частично связанными тепловыми и материальными потоками / А. В. Тимошенко, А. В. Моргунов, Е. А. Анохина // Теор. основы хим. технологии. – 2007. – Т. 41, № 6. – С. 649–653.
13. Тимошенко, А. В. Комплексы экстрактивной ректификации, включающие сложные колонны с частично связанными тепловыми и материальными потоками / А. В. Тимошенко, Е. А. Анохина, Л. В. Иванова // Теор. основы хим. технологии. – 2005. – Т. 39, № 5. – С. 491–496.
14. Энергосберегающие технологии экстрактивной ректификации смеси ацетон–хлороформ–н-бутанол–диметилформамид / Л. В. Иванова [и др.] // Теор. основы хим. технологии. – 2006. – Т. 40, № 6. – С. 621–624.
15. Анохина, Е. А. Энергетическая эффективность экстрактивной ректификации смеси ацетон–хлороформ в сложной колонне с боковой секцией / Е. А. Анохина, Б. Б. Долматов, А. В. Тимошенко // Хим. технология. – 2008, № 8. – С. 402–406
16. Долматов, Б. Б. Изокритериальные многообразия при экстрактивной ректификации смеси метанол–н-пропилацетат–толуол с анилином / Б. Б. Долматов, Е. А. Анохина, А. В. Тимошенко // Теор. основы хим. технологии. – 2009. – Т. 43, № 2. – С. 155–159.