УДК 66.02, 661.715.3

РАЗДЕЛЕНИЕ СМЕСИ АЦЕТОН–ХЛОРОФОРМ–*н*-БУТАНОЛ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЭКСТРАКТИВНОЙ РЕКТИФИКАЦИИ В СХЕМАХ ИЗ ДВУХОТБОРНЫХ КОЛОНН

Е.А. Анохина[@], И.М. Грачева, А.Ю. Акишин, А.В. Тимошенко

Московский технологический университет (Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова), Москва 119571, Россия
[@]Автор для переписки, e-mail: anokhina.ea@mail.ru

Рассмотрена экстрактивная ректификация смеси ацетон–хлороформ–н-бутанол с диметилформамидом в схемах из двухотборных колонн. Определены оптимальные по критерию суммарных энергетических затрат в кипятильниках колонн параметры трех схем экстрактивной ректификации данной смеси. Расчеты проводились в проектно-поверочном варианте на 1000 кг/ч исходной смеси с концентрацией ацетона, хлороформа и н-бутанола 71.3, 14.7 и 14.0% масс., соответственно. Концентрацию диметилформамида в потоке экстрактивного агента задавали равной 99.99% масс. Концентрация основного компонента в продуктовых потоках составляла 99.9% масс. для хлороформа и 99.5% масс. для ацетона и н-бутанола. Оптимизируемыми параметрами являлись: число тарелок в колоннах, температура и расход диметилформамида, флегмовые числа, потоки дистиллята и положение тарелок питания в колоннах. Для колонны экстрактивной ректификации дополнительно находили оптимальный уровень ввода экстрактивного агента. Ограничения на оптимизацию – качество продуктов разделения. Оптимизация проводилась в Aspen Plus с применением сочетания методов Sensitivity Analysis и последовательного квадратичного программирования (SQP). Установлено, что наименее энергоемким вариантом разделения является схема П5, в первой колонне которой осуществляется отделение н-бутанола, а азеотропообразующие компоненты (ацетон и хлороформ) затем разделяются в комплексе экстрактивной ректификации. Для двух других схем (П1 и П2), в которых диметилформамид применяется в первой по ходу разделения колонне, энергозатраты существенно выше, чем для схемы П5 – на 69.1% и на 49.3%, соответственно. Полученные данные в дальнейшем будут использованы для синтеза и оптимизации схем экстрактивной ректификации данной смеси, включающих комплексы со связанными тепловыми и материальными потоками, а также для оценки энергетической эффективности применения последних для разделения смеси ацетон–хлороформ–н-бутанол и получения критерия оценки энергетической эффективности использования комплексов со связанными тепловыми и материальными потоками в технологиях экстрактивной ректификации многокомпонентных смесей.

Ключевые слова: *ректификация, тройные смеси, флегмовое число, минимальный паровой поток, внутреннее энергосбережение при ректификации.*

ACETONE–CHLOROFORM–*n*-BUTANOL MIXTURE SEPARATION BY THE EXTRACTIVE DISTILLATION IN SCHEMES OF TWO-OUTLET COLUMNS

E.A. Anokhina[@], I.M. Gracheva, A.Yu. Akishin, A.V. Timoshenko

Moscow Technological University (M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies), Moscow 119571, Russia
[@]Corresponding author e-mail: anokhina.ea@mail.ru

Extractive distillation of acetone-chloroform-n-butanol mixture with dimethylformamide in two-outlet column schemes is considered. Optimal parameters according to the total energy consumption criterion in the column boilers of the three extractive distillation schemes for this mixture separation are determined. Calculations were carried out in a design-verification version at 1000 kg/hr of the initial mixture with the concentrations of acetone, chloroform and n-butanol 71.3, 14.7 and 14.0% wt., respectively. Dimethylformamide concentration in the entrainer flow was set to 99.99 wt%. The main component concentration in the product stream was 99.9 wt% for chloroform and 99.5 wt%. for acetone and n-butanol. The parameters to be optimized were: the number of plates in the columns, the temperature and flow rate of dimethylformamide, reflux ratios, distillate flow rates and the position of the feed plates in the columns. The optimum location of the entrainer feed plate was found additionally in the extractive distillation column. Separation product concentrations served as the constraints of the optimization. The optimization was carried out in Aspen Plus with the use of a combination of Sensitivity Analysis and sequential quadratic programming (SQP). It is established that scheme P5 has the lowest energy consumption. In the first column of this scheme, n-butanol is separated, and then the azeotrope-forming components (acetone and chloroform) are separated by the extractive distillation subsystem. Energy consumptions for two other schemes (P1 and P2), in which dimethylformamide is used in the first column of the sequence, are significantly higher than for scheme P5 - by 69.1% and by 49.3%, respectively. The data obtained will be used: to synthesize and optimize the extractive distillation schemes including the subsystems with coupled thermal and material flows to separate the acetone-chloroform-n-butanol mixture; to estimate the energy efficiency of those schemes and to obtain the criterion for estimating the energy efficiency of systems with coupled thermal and material flows in the extractive distillation of multicomponent mixtures.

Keywords: *energy saving, extractive distillation, schemes of two-outlet columns, optimization.*

Введение

Экстрактивная ректификация (ЭР) применяется для разделения азеотропных смесей и смесей с относительной летучестью компонентов, близкой к единице. Данный метод разделения характеризуется достаточно высокой энергоемкостью, для снижения которой используются различные способы, такие как подбор высокоселективных разделяющих агентов, оптимизация режимов работы аппаратов технологической схемы и выбор оптимальной последовательности выделения компонентов и их фракций. Для бинарной смеси поливариантность схем ЭР определяется типом применяемого экстрактивного агента (ЭА), способом подачи ЭА и исходной смеси в колонну ЭР, а также наличием или отсутствием флегмы в экстрактивной колонне. Для многокомпонентных азеотропных смесей количество вариантов схем ЭР существенно возрастает. Здесь появляется возможность выделения из исходной смеси фракции с меньшим числом компонентов, не содержащей азеотропов. Энергетическая эффективность схем разделения многокомпонентных смесей с применением ЭР зависит от физико-химических свойств конкретной смеси и применяемого ЭА, а также от состава исходного питания.

Еще один способ снижения энергозатрат на ЭР был предложен относительно недавно нами [1] и рядом зарубежных исследователей [2, 3]. Он заключается в осуществлении ЭР в комплексах с частично связанными тепловыми и материальными потоками (ЧСТМП). К настоящему времени разработан метод синтеза схем ЭР, включающих такие комплексы [4, 5], достаточно подробно исследованы закономерности ЭР в комплексах с ЧСТМП для бинарных смесей [6–9], сформулирован критерий для оценки энергетической эффективности их применения [10]. Закономерности ЭР многокомпонентных смесей в колоннах со связанными потоками исследованы мало [11–13]. Данная работа является частью таких исследований.

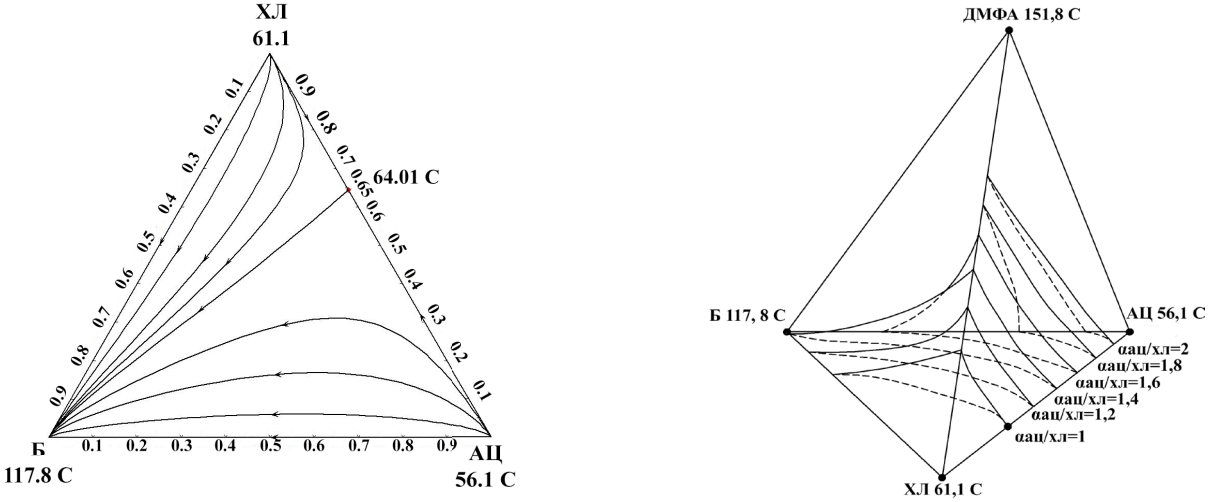
В работе рассматриваются схемы ректификации смеси растворителей ацетон (Ац)–хлороформ (Хл)–*н*-бутанол (Б), применяемых при производстве термостабилизатора стабилина-9. Данная смесь содержит азеотроп с максимальной температурой кипения (64 ºС) в бинарной составляющей ацетон–хлороформ с концентрацией ацетона 22% масс. Для разделения смеси Ац–Хл–Б автором [14] предложено использовать экстрактивную ректификацию с диметилформамидом (ДМФА).

Цель данной работы: выбор оптимальной по критерию суммарных энергетических затрат в кипятильниках колонн схемы экстрактивной ректификации смеси Ац–Хл–Б с ДМФА из множества схем, состоящих из двухотборных колонн. Полученные данные в дальнейшем будут использованы для синтеза и оптимизации схем ЭР данной смеси, включающих комплексы с ЧСТМП, оценки энергетической эффективности применения последних для разделения смеси Ац–Хл–Б, а также для получения критерия оценки энергетической эффективности использования комплексов с ЧСТМП в технологиях ЭР многокомпонентных смесей. Расчетное исследо-

вание проводили с применением программного комплекса Aspen Plus.

Моделирование парожидкостного равновесия в смеси Ац–Хл–Б–ДМФА

Фазовая диаграмма рассматриваемой смеси (рис. 1а) относится к типу 3.1.0-т2 в соответствии с классификацией Серафимова Л.А. [15]. Чистым компонентам ацетону и хлороформу соответствуют особые точки типа «неустойчивый узел», *н*-бутанолу – «устойчивый узел», отрицательному бинарному азеотропу ацетон–хлороформ – особая точка типа «седло».



а б

Рис. 1. Диаграмма парожидкостного равновесия в системе Ац–Хл–Б (а) и ход $\alpha_{Ац/Хл}$-поверхностей в системе Ац–Хл–Б–ДМФА (б).

В литературе имеются экспериментальные данные о парожидкостном равновесии (ПЖР) для всех шести бинарных составляющих. Ранее [1, 6] при определении оптимальных параметров схем ЭР смеси ацетон–хлороформ с ДМФА с применением программного комплекса PRO-II для описания ПЖР в системе Ац–Хл–ДМФА была использована модель локальных составов NRTL с параметрами автора [16]. Как будет показано ниже, комплекс ЭР смеси Ац–Хл является составной частью одной из схем разделения трехкомпонентной смеси Ац–Хл–Б. Для корректного сопоставления результатов настоящего исследования с результатами работ [1, 6] для описания ПЖР в системе Ац–Хл–Б–ДМФА мы также использовали уравнение NRTL. В базе данных Aspen Plus имеются параметры модели NRTL только для четырех бинарных составляющих: ацетон–хлороформ, ацетон–*н*-бутанол, ацетон–ДМФА, хлороформ–*н*-бутанол. Средние относительные ошибки описания экспериментальных данных о ПЖР в указанных смесях по составу паровой фазы (ΔY^*) и температуре (ΔT^*) представлены в табл. 1.

Для бинарных составляющих ацетон–хлороформ, ацетон–ДМФА и хлороформ–ДМФА нами был произведен расчет ПЖР с параметрами модели NRTL автора [16], а для смеси *н*-бутанол–ДМФА параметры были оценены в Aspen Plus по экспериментальным данным [14]. Средние относительные ошибки описания экспериментальных данных о ПЖР с указанными выше параметрами представлены в табл. 2.

Таблица 1. Средние относительные ошибки описания экспериментальных данных о ПЖР, полученные при использовании модели NRTL с параметрами из базы данных Aspen Plus

Бинарная смесь	ΔY^*, %	ΔT^*, %	Источник экспериментальных данных
Ацетон–хлороформ	2.132	0.214	[17]
Ацетон–*н*-бутанол	3.852	0.157	[18]
Ацетон–ДМФА	0.950	0.486	[19]
Хлороформ–*н*-бутанол	0.614	0.282	[20]

Таблица 2. Средние относительные ошибки описания экспериментальных данных о ПЖР, полученные при использовании модели NRTL с параметрами автора [16] (для пар Ац–Хл, Ац–ДМФА, Хл–ДМФА) и с параметрами, полученными регрессией экспериментальных данных [14] (для смеси Б–ДМФА)

Бинарная смесь	ΔY^*, %	ΔT^*, %	Источник экспериментальных данных
Ацетон–хлороформ	2.751	0.366	[17]
Ацетон–ДМФА	0.626	0.148	[19]
Хлороформ–ДМФА	2.978	4.337	[14]
н-Бутанол–ДМФА	1.842	0.259	[14]

Как следует из табл. 1 и 2, средние относительные ошибки описания экспериментальных данных о ПЖР в смесях Ац–Хл и Ац–ДМФА моделью NRTL с

параметрами из базы данных Aspen Plus и с параметрами автора [16] имеют близкие значения. Как отмечалось выше, ранее при исследовании ЭР бинарной смеси ацетон–хлороформ с ДМФА [1, 6] были использованы параметры автора [16]. Для корректного сопоставления результатов данного исследования с результатами работ [1, 6] расчет ПЖР в указанных смесях также будем проводить с параметрами модели NRTL автора [16]. Параметры модели NRTL, использованные при выполнении всех дальнейших расчетов, приведены в табл. 3. Для систем Ац–Б и Хл–Б – это параметры из базы данных Aspen Plus, для бинарных составляющих Ац–Хл, Ац–ДМФА, Хл–ДМФА – параметры автора [16], а для смеси Б–ДМФА – параметры, полученные регрессией экспериментальных данных [14]. Средние относительные погрешности по составу паровой фазы и температуре во всех случаях не превышают 5%.

Таблица 3. Параметры уравнения NRTL, использованные для моделирования ПЖР в системе Ац–Хл–Б–ДМФА при проведении оптимизации схем

Компонент I	Ац	Ац	Ац	Хл	Хл	Б
Компонент J	Хл	Б	ДМФА	Б	ДМФА	ДМФА
$\mathbf{A_{ij}}$	0.0	-8.8875	0.0	-4.4258	0.0	0.0
$\mathbf{A_{ji}}$	0.0	10.2979	0.0	0.9208	0.0	0.0
$\mathbf{B_{ij}}$	-194.17	3077.281	55.743	1899.05	-172.37	-87.935
$\mathbf{B_{ji}}$	-10.01	-3326.5381	20.7	-410.5898	-148.63	-81.5194
C	0.3	0.3	1.696	0.3	0.3	0.4838

На рис. 1б представлены полученные нами изомногообразия летучести ацетона по отношению к хлороформу в присутствии ДМФА, из вида которых следует, что ДМФА увеличивает летучесть ацетона по отношению к хлороформу, следовательно, ацетон будет выделяться в дистилляте экстрактивной колонны.

Схемы разделения смеси ацетон–хлороформ–*н*-бутанол с ДМФА, состоящие из двухотборных колонн

Множество схем ЭР, состоящих из двухотборных колонн, было обозначено в [4, 5] как П. Для смесей с фазовым портретом 3.1.0-т2 с прямой ориентацией дистилляционных линий существуют три работоспособные схемы ЭР, состоящие из двухотборных колонн [21], – это схемы П1, П2 и П5 (рис. 2). В схеме П1 экстрактивный агент применяется в первой по ходу разделения колонне, в дистилляте которой выделяется ацетон, а в кубе – трехкомпонентная смесь хлороформ–бутанол–ДМФА. Регенерация экстрактивного агента осуществляется в третьей колонне. В схеме П2 экстрактивный агент также используется в первой колонне, во второй колонне происходит регенерация ДМФА, а в третьей колонне – разделение хлороформа и *н*-бутанола. В схеме П5 в первой колонне осуществляется отделение *н*-бутанола от азеотропной фракции ацетон–хлороформ, которая затем подвергается разделению в двухколонном комплексе ЭР. Отметим, что схемы на рис. 2, являются принципиальными: чтобы не перегружать рисунок, теплообменники, насосы и другое вспомогательное оборудование на них не показаны.

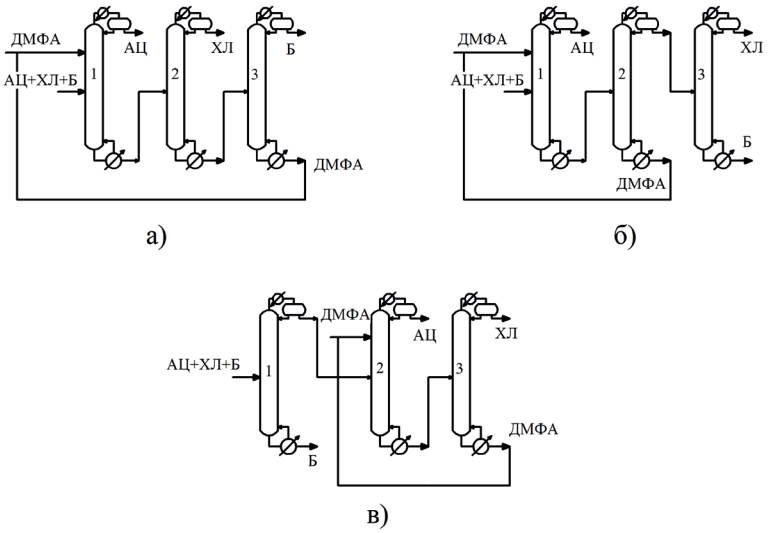


Рис. 2. Схемы экстрактивной ректификации смеси Ац–Хл–Б с применением ДМФА: а) схема П1; б) схема П2; в) схема П5; 1–3 – ректификационные колонны.

Определение оптимальных параметров схем экстрактивной ректификации смеси ацетон–хлороформ–*н*-бутанол

В качестве критерия оптимизации каждой из схем использовали суммарные энергетические затраты в кипятильниках колонн ($Q_{\Sigma кип.}$). Все расчеты проводили в проектно-поверочном варианте на 1000 кг/ч исходной смеси (F) с концентрацией ацетона, хлороформа и *н*-бутанола 71.3, 14.7 и 14.0% масс., соответственно. Концентрация ДМФА в потоке экстрактивного агента была равна 99.99% масс. Концентрация основного компонента в продуктовых потоках составляла 99.9% масс. для хлороформа и 99.5% масс. для ацетона и *н*-бутанола.

Оптимизируемыми параметрами являлись: число тарелок в колоннах ($N_{общ.}$), температура ($T_{ЭА}$) и расход ЭА, флегмовые числа (R), потоки дистиллята (D) и положение тарелок питания (N_F) в колоннах. Для колонны экстрактивной ректификации дополнительно находили оптимальный уровень ввода экстрактивного агента ($N_{ЭА}$). Ограничения на оптимизацию – качество продуктов разделения.

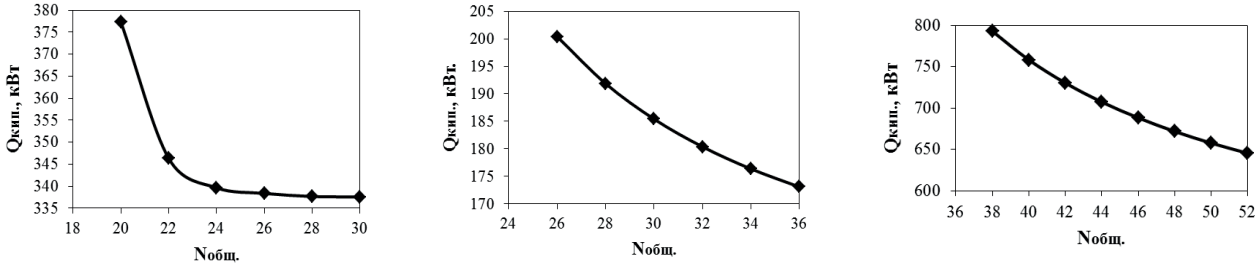
Поскольку часть параметров является целочисленными (число тарелок в колоннах, тарелки питания), а часть – непрерывными (расход и температура ЭА, флегмовые числа, потоки дистиллята), то поиск оптимума сводится к решению задачи смешанного дискретно-непрерывного нелинейного программирования и может осуществляться методами сканирования [22, 23], внешней аппроксимации [24], ветвей и границ [25], с применением двухуровневых алгоритмов, сочетающих методы поиска оптимума целочисленных и непрерывных переменных, например, метод отжига с одним из методов непрерывной оптимизации [26].

Применение алгоритмов [24, 25] сопряжено с разработкой специальных методик перехода от целочисленных переменных к непрерывным, кроме того, метод внешней аппроксимации требует корректного определения границ допустимой области варьирования переменных, так как в противном случае он не гарантирует нахождение глобального экстремума [24]. Метод сканирования области изменения переменных с заданным шагом обеспечивает нахождение глобального экстремума с точностью, определяемой величиной шага [27]. Главный недостаток этого метода связан с большим количеством вычислений. Для того, чтобы сократить время расчета, в ряде работ [28–30] метод сканирования используется в комбинации с методом последовательного квадратичного программирования (SQP) [31], который является одним из эффективных современных методов нелинейного программирования для поиска оптимальных значений непрерывных переменных и имеется в программном пакете Aspen Plus. При этом сканирование значений целочисленных переменных авторы [28–30] реализовали в Aspen Plus, используя встроенный инструмент «Sensitivity Analysis». Необходимо отметить, что авторы [28] осуществляли поиск оптимальных параметров только для колонны ЭР при фиксированной температуре ЭА. Мы применили алгоритм [28] для определения оптимальных параметров схем, состоящих из трех двухотборных колонн, а для сокращения количества вычислений сделали несколько допущений.

Первое допущение заключалось в том, что выбор числа тарелок в колоннах каждой из трех схем осуществляли при фиксированных температуре (60 °С) и расходе (3000 кг/ч) ЭА, используя графики Джиллиленда. Указанная величина расхода ДМФА была выбрана на основе анализа изомногообразий $\alpha_{Ац/Хл}$ в присутствии ЭА (рис. 1б), а также исходя из проведенных ранее исследований процесса ЭР смеси ацетон–хлороформ с ДМФА, в том числе экспериментальных [1, 6, 14], в результате которых было установлено, что получение Ац и Хл с концентрацией свыше 99% масс. возможно при соотношении F:ЭА = 1:(2.5÷4) масс. Для построения графиков Джиллиленда была применена встроенная в Aspen Plus программа NQ Curves Analysis, которая для каждого заданного $N_{общ.}$ осуществляет поиск оптимальных по критерию минимума энергозатрат в кипятильниках колонн ($Q_{кип.}$) тарелок питания в двухсекционных колоннах, а в колонне ЭР – оптимальных тарелок подачи исходной смеси и экстрактивного агента, и по значениям $Q_{кип.}$ при оптимальных для заданного $N_{общ.}$ тарелках питания генерирует графики Джиллиленда. На рис. 3–5 представлены полученные с помощью этой программы зависимости энергетических затрат в кипятильниках колонн от числа тарелок в них. Отметим, что первая колонна в схемах П1 и П2 одинаковая, поэтому на рис. 4 указанные зависимости для схемы П2 приведены только для двух колонн.

Число тарелок в колоннах было выбрано в результате анализа зависимостей $Q_{кип.}$ от $N_{общ.}$. Критерий выбора – увеличение энергетических затрат в кипятильнике при сокращении эффективности колонны на каждые 2 тарелки ($\Delta Q_{кип.}$). Рассмотрим в качестве примера выбор числа тарелок в колонне ЭР (колонна 1) схемы П1. Как видно из рис. 3а, в интервале от 30 до 22 теоретических тарелок (т.т.) $\Delta Q_{кип.}$ не превышает 3%. При дальнейшем уменьшении числа тарелок с 22 до 20 увеличение $Q_{кип.}$ становится более заметным и составляет 10.9%. Поэтому при проведении всех последующих расчетов мы приняли эффективность колонны ЭР в схеме П1 равной 22 т.т. Число тарелок в колоннах 2 и 3 схемы П1 и в колоннах схем П2 и П5 было выбрано в результате аналогичного анализа зависимостей $Q_{кип.}$ от $N_{общ.}$, представленных на рис. 3б,в и 4, 5, и составило в

колоннах 2 и 3 схемы П1 30 и 44 т.т., соответственно; в колоннах 2 и 3 схемы П2 – 44 и 20 т.т., соответственно; в колоннах 1, 2 и 3 схемы П5 – 20, 22 и 30 т.т., соответственно. Отметим, что эффективность экстрактивной колонны во всех трех схемах одинакова.

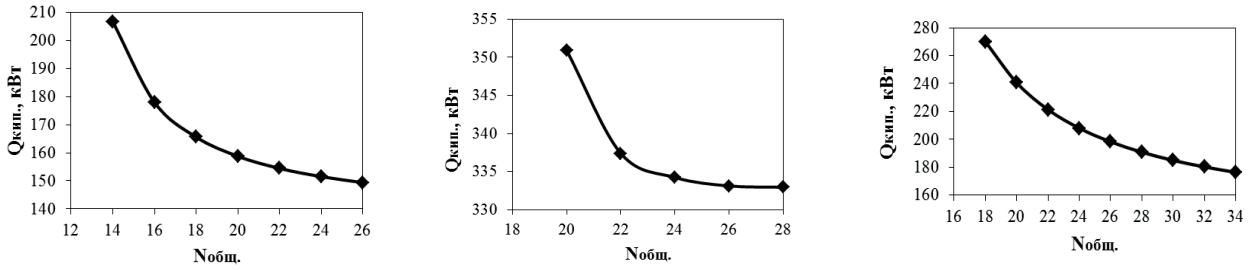


а б в

Рис. 3. Зависимость энергетических затрат в кипятильниках колонн схемы П1 от числа тарелок: а) колонна 1; б) колонна 2; в) колонна 3.

а б

Рис. 4. Зависимость энергетических затрат в кипятильниках колонн схемы П2 от числа тарелок: а) колонна 2; б) колонна 3.



а б в

Рис. 5. Зависимость энергетических затрат в кипятильниках колонн схемы П5 от числа тарелок: а) колонна 1; б) колонна 2; в) колонна 3.

Второе допущение при поиске оптимальных параметров схем состояло в том, что выбор температуры ЭА производили только на основе исследования зависимостей от этого показателя энергозатрат в кубе ($Q_{кип.}$) и тепловой нагрузки конденсатора ($Q_{конд.}$) колонны ЭР при выбранном в ней (см. выше) числе тарелок и фиксированном расходе ДМФА 3000 кг/ч. Энергозатраты на регенерацию ЭА и количество тепла, которое можно получить за счет охлаждения ДМФА, отбираемого в кубе колонны регенерации, до температуры его подачи в колонну ЭР, при этом не учитывали. Для каждого значения температуры ДМФА были найдены оптимальные тарелки подачи в экстрактивную колонну ЭА и исходной смеси. Для колонны ЭР схем П1 и П2 оптимальные значения этих показателей при всех рассмотренных температурах ДМФА – 5 и 10 т.т., для колонны ЭР схемы П5 – 6 и 11 т.т. Зависимости $Q_{кип.}$ и $|Q_{конд.}|$ от $T_{ЭА}$ представлены на рис. 6.

Видно, что в исследованном интервале изменения температуры ЭА энергопотребление в кипятильнике колонны ЭР мало зависит от этого параметра: при повышении $T_{ЭА}$ с 40 до 60 °С снижение $Q_{кип.}$ на каждые 10 °С составляет примерно 3%, при дальнейшем повышении $T_{ЭА}$ значение данного показателя становится менее 2%. При этом величина тепловой нагрузки конденсатора более чувствительна к изменению температуры ДМФА: при повышении $T_{ЭА}$ с 40

Рис. 6. Зависимость энергозатрат в кипятильнике $Q_{кип.}$ (1) и тепловой нагрузки конденсатора $|Q_{конд.}|$ (2) колонны ЭР от температуры ДМФА: а) в схемах П1 и П2; б) в схеме П5.

до 60 °С рост $Q_{конд.}$ на каждые 10 °С в экстрактивной колонне схем П1 и П2 составляет порядка 3.4–4.5%, а в экстрактивной колонне схемы П5 – 4.3–5.6 %. При дальнейшем повышении $T_{ЭА}$ $Q_{конд.}$ возрастает еще более существенно – на 7–8% в экстрактивной колонне всех схем. Поэтому при проведении дальнейших расчетов мы приняли температуру подачи ДМФА в колонну ЭР всех рассматриваемых схем равной 60 °С.

Далее были определены границы интервала варьирования расхода ЭА, которые необходимо задать при поиске его оптимального значения для схемы в целом методом SQP. С этой целью для колонны ЭР каждой из трех схем при выбранном числе тарелок в ней и температуре подачи ДМФА, равной 60 °С, для нескольких наборов $N_{ЭА}/N_F$ был найден оптимальный по критерию минимума $Q_{кип.}$ в данной колонне и минимальный расход ЭА (минимальным мы называем расход ЭА, при котором еще возможно получение продуктов заданного качества). Значение минимального расхода ДМФА в колонне ЭР использовали в качестве нижней границы интервала его варьирования при поиске оптимального расхода ЭА для схемы в целом. Верхней границей данного интервала являлась величина, несколько большая значения оптимального расхода ДМФА для отдельно взятой колонны ЭР. Минимальный расход ДМФА для колонны ЭР определяли, используя Sensitivity Analysis, а оптимальный расход, – используя метод SQP. Результаты расчетов приведены в табл. 4 и 5. Поскольку колонна ЭР в схемах П1 и П2 одинаковая, то представленные в табл. 4 данные относятся к обеим схемам. Видно, что значения минимального и оптимального расхода ДМФА зависят от положения тарелок подачи питания и ЭА в экстрактивную колонну. Следовательно, при поиске оптимального расхода ДМФА для схемы в целом для каждого набора $N_{ЭА}/N_F$ необходимо задавать свой интервал его изменения.

Таблица 4. Определение оптимального и минимального расхода ДМФА в колонне ЭР схем П1 и П2

$N_{ЭА}/N_F$	Расход ДМФА, кг/ч		$Q_{кип.}$, кВт	
	минимальный	оптимальный	при минимальном расходе	при оптимальном расходе
3/7	2665	2745	510.9	498.2
3/8	2652	2732	498.5	486.3
3/9	2696	2778	500.5	486.5
4/7	2168	2299	366.2	353.3
4/8	2160	2301	353.2	334.7
4/9	2219	2368	354.3	333.9
5/7	2278	2450	380.9	360.4
5/8	2228	2417	360.8	335.7
5/9	2269	2471	356.4	329.2
5/10	2370	2590	365.9	332.8
5/11	2527	2778	377.8	343.4

Наименьшая величина минимального расхода ДМФА в экстрактивной колонне схем П1 и П2 составляет 2160 кг/ч, а наибольшая величина оптимального расхода – 2778 кг/ч. Для колонны ЭР схемы П5 эти показатели равны 1886 и 2514 кг/ч, соответственно.

На следующем этапе при нескольких значениях расхода ЭА из интервала «наименьшая величина

Таблица 5. Определение оптимального и минимального расхода ДМФА в колонне ЭР схемы П5

$N_{ЭА}/N_F$	Расход ДМФА, кг/ч		$Q_{кип.}$, кВт	
	минимальный	оптимальный	при минимальном расходе	при оптимальном расходе
3/7	2320	2390	465.6	455.1
3/8	2306	2376	454.3	443.0
3/9	2345	2414	444.8	442.4
4/7	1899	2022	339.6	324.2
4/8	1886	2003	326.0	310.6
4/9	1934	2058	324.9	308.7
5/8	1942	2100	330.4	312.0
5/9	1973	2142	331.0	304.5
5/10	2058	2244	331.1	306.6
6/9	2065	2253	342.2	317.9
6/10	2136	2352	341.7	315.8

минимального расхода – наибольшая величина оптимального расхода» было определено оптимальное положение тарелок питания в колоннах, расположенных после колонны ЭР: в схеме П1 – это колонны 2 и 3, в схеме П2 – колонна 2, в схеме П5 – колонна 3. Расчет был произведен при помощи Sensitivity Analysis (для варьирования тарелок питания) и метода SQP (для определения оптимальных значений R и D для каждой закрепленной тарелки питания). Установлено, что в исследованных интервалах изменения расхода ДМФА оптимальное положение тарелок питания в указанных выше колоннах не изменяется. Минимум энергозатрат в кипятильниках колонн 2 и 3 схемы П1 достигается при подаче питания на 10 и 13 т.т., соответственно, в колонне 2 схемы П2 – на 13 т.т., в колонне 3 схемы П5 – на 7 т.т. В дальнейшем при поиске оптимального расхода ДМФА для схем в целом эти тарелки были зафиксированы, что позволило сократить количество расчетов. Очевидно, что оптимальное положение тарелок питания в колонне 3 схемы П2 и в колонне 1 схемы П5 не зависит от расхода ЭА. Оптимальные тарелки питания в данных колоннах были определены нами на этапе выбора числа тарелок в них. В колонне 3 схемы П2 при выбранном в ней $N_{общ.}$ = 20 т.т. минимум энергозатрат в кипятильнике (18.4 кВт) достигается при подаче питания на 14 т.т., а в колонне 1 схемы П5 ($N_{общ.}$= 20 т.т.) – при подаче питания на 16 т.т. ($Q_{кип.}$=158.8 кВт).

Таким образом, получены хорошие начальные приближения по величине расхода ДМФА и положению тарелок подачи питания и ЭА в колонну ЭР для проведения строгой оптимизации схем при ранее сделанных допущениях. Строгая оптимизация предполагает наличие математической формулировки задачи оптимизации, которая включает целевую функцию и ограничения на оптимизацию, а также применение алгоритмов, обеспечивающих нахождение оптимума. В данной работе в качестве целевой функции (Φ) использованы суммарные энергозатраты в кипятильниках колонн $Q_{\Sigma кип.}$.

Математически задача формулируется следующим образом:

Для схемы П1:
$\min\Phi = Q_{кип.1} + Q_{кип.2} + Q_{кип.3}$;
ограничения на оптимизацию:
$x_{Ац}^{D1} = 99.5\%$ масс.; $(x_{Ац}/x_{Хл})^{W1} = 0.00095$;
$x_{Хл}^{D2} = 99.9\%$ масс.; $(x_{Хл}/x_{Б})^{W2} = 0.00463$;
$x_{Б}^{D3} = 99.5\%$ масс.; $x_{ДМФА}^{W3} = 99.99\%$ масс.

Для схемы П2:
$\min\Phi = Q_{кип.1} + Q_{кип.2}$;
ограничения на оптимизацию:
$x_{Ац}^{D1} = 99.5\%$ масс.; $(x_{Ац}/x_{Хл})^{W1} = 0.00095$;
$(x_{ДМФА}/x_{Б})^{D2} = 0.00038$; $x_{ДМФА}^{W2} = 99.99\%$ масс.

Для схемы П5:
$\min\Phi = Q_{кип.2} + Q_{кип.3}$;
ограничения на оптимизацию:
$x_{Ац}^{D2} = 99.5\%$ масс.; $(x_{Ац}/x_{Хл})^{W2} = 0.00095$;
$x_{Хл}^{D3} = 99.9\%$ масс.; $x_{ДМФА}^{W3} = 99.99\%$ масс.

Критерий оптимизации был задан в Aspen Plus посредством Model Analysis/Optimization tool, а ограничения – с помощью Model Analysis/Constraint tool.

Для всех схем был определен расход ДМФА, положение тарелок подачи питания и ЭА в колонну ЭР, а также флегмовые числа (R_i) и потоки дистиллята (D_i) в колоннах, при которых достигается минимум критерия оптимизации, с применением алгоритма, представленного ниже:

1) Задаем $N_{ЭА}$ в колонне ЭР.
2) Задаем N_F в колонне ЭР.
3) Методом SQP определяем оптимальные значения непрерывных переменных (расхода ДМФА, R_i и D_i в колоннах; для схемы П1 R_i и D_i

находили для всех трех колонн, для схемы П2 – для колонн 1 и 2, для схемы П5 – для колонн 2 и 3). Возвращаемся на п. 2. Задаем новое значение N_F, выполняем п.п. 2, 3 до тех пор, пока не достигнем минимума $Q_{\Sigma кип.}$

4) Возвращаемся на п. 1. Задаем новое значение $N_{ЭА}$, выполняем п.п. 1–3 до тех пор, пока не достигнем минимума $Q_{\Sigma кип.}$

Результаты расчетов представлены в табл. 6–8 (оптимальные значения выделены).

Таблица 6. Результаты оптимизации схемы П1

$N_{ЭА}/N_F$	Расход ДМФА, кг/ч	Колонна 1		Колонна 2		Колонна 3		$Q_{\Sigma кип.}$, кВт
		$Q_{кип.}$, кВт	R	$Q_{кип.}$, кВт	R	$Q_{кип.}$, кВт	R	
3/7	2675	504.2	2.38	166.1	15.12	635.4	27.00	1305.7
3/8	2662	492.2	2.27	165.4	15.03	632.5	26.87	1290.1
3/9	2706	492.6	2.24	168.0	15.28	642.2	27.30	1302.8
4/7	2188	355.0	1.21	137.1	12.41	528.1	22.28	1020.2
4/8	2180	342.3	1.09	136.7	12.35	526.3	22.20	1005.3
4/9	2239	342.3	1.06	140.2	12.70	539.4	22.77	1021.9
5/7	2313	367.2	1.30	144.6	13.20	556.1	23.50	1067.8
5/8	2249	346.5	1.09	140.7	12.82	541.8	22.88	1029.0
5/9	2289	341.8	1.02	143.1	13.06	550.7	23.27	1035.6

Таблица 7. Результаты оптимизации колонн 1 и 2 схемы П2

$N_{ЭА}/N_F$	Расход ДМФА, кг/ч	Колонна 1		Колонна 2		$Q_{\Sigma кип.}$, кВт
		$Q_{кип.}$, кВт	R	$Q_{кип.}$, кВт	R	
3/7	2683	502.3	2.36	637.5	16.76	1139.8
3/8	2674	489.5	2.23	635.6	16.70	1125.1
3/9	2714	490.5	2.22	644.4	16.94	1134.9
4/7	2196	353.3	1.19	530.6	13.84	883.9
4/8	2186	341.0	1.07	528.5	13.77	869.5
4/9	2247	340.5	1.03	541.9	14.15	882.4
5/7	2303	369.0	1.30	554.6	14.50	923.6
5/8	2259	344.2	1.07	544.7	14.25	888.9
5/9	2303	338.4	0.98	554.4	14.52	892.8
5/10	2409	343.0	0.96	577.9	15.18	920.9

Таблица 8. Результаты оптимизации колонн 2 и 3 схемы П5

$N_{ЭА}/N_F$	Расход ДМФА, кг/ч	Колонна 2		Колонна 3		$Q_{\Sigma кип.}$, кВт
		$Q_{кип.}$, кВт	R	$Q_{кип.}$, кВт	R	
3/7	2365	455.7	2.13	148.3	13.33	604.0
3/8	2350	443.4	2.02	147.4	13.22	590.8
3/9	2390	442.9	1.99	149.8	13.44	592.7
4/7	1963	325.3	1.10	124.8	11.10	450.1
4/8	1950	311.7	0.97	124.1	11.07	435.8
4/9	1944	312.1	0.98	125.0	11.16	437.1
5/8	2020	313.7	0.95	128.2	11.50	441.9
5/9	2057	306.3	0.85	130.4	11.76	436.7
5/10	2152	308.6	0.82	135.9	12.32	444.5

Результаты и их обсуждение

Оптимальные конструктивные и рабочие параметры схем представлены в табл. 9.

Видно, что число тарелок в экстрактивной колонне всех трех схем одинаковое. Оптимальное положение тарелок подачи питания и ДМФА в колонну ЭР во всех трех схемах также совпадает. Оптимальные значения расхода ДМФА в схемах отличаются незначительно. При этом оптимальный расход ЭА для каждой схемы в целом при заданном наборе $N_{ЭА}/N_F$ ниже его оптимального значения, полученного для отдельно взятой колонны ЭР, и близок к минимальному расходу. Флегмовые числа и энергозатраты в кипятильнике экстрактивной колонны для всех трех схем имеют близкие значения. Наименьшей энергоемкостью характеризуется схема П5, где в первой колонне происходит предварительное выделение из трехкомпонентной смеси *н*-бутанола. Для схем П1 и П2 энергозатраты существенно выше, чем для схемы П5 – на 69.1 и 49.3%, соответственно. Наибольшей энергоемкостью в этих схемах характеризуется разделение *н*-бутанола и ДМФА (для схемы П1) и отделение смеси хлороформ–*н*-бутанол от ДМФА (для схемы П2). Это связано с невысокой относительной летучестью пары *н*-бутанол–ДМФА в области низких концентраций *н*-бутанола ($\alpha_{Б/ДМФА}$ = 1.2–1.6). Поэтому колонны регенерации ЭА в схемах П1 и П2 имеют достаточно большое число теоретических тарелок (44 т.т.) и высокие значения флегмовых чисел.

Таблица 9. Оптимальные конструктивные и рабочие параметры схем экстрактивной ректификации смеси ацетон–хлороформ–*н*-бутанол с ДМФА при $T_{ДМФА}$ = 60 °C

Схема	Колонна	$N_{общ.}$	$N_{ЭА}/N_F$	R	Расход ДМФА, кг/ч	$Q_{кип.}$, кВт	$Q_{Σкип.}$, кВт
П1	1	22	4/8	1.09	2180	342.3	1005.3
	2	30	–/10	12.35		136.7	
	3	44	–/13	22.20		526.3	
П2	1	22	4/8	1.07	2186	341.0	887.9
	2	44	–/13	13.77		528.5	
	3	20	–/14	0.58		18.4	
П5	1	20	–/16	0.39	1950	158.8	594.6
	2	22	4/8	0.97		311.7	
	3	30	– /7	11.07		124.1	

Отметим, что полученные в данной работе оптимальные параметры двухколонного комплекса ЭР схемы П5 (удельный расход ДМФА, $N_{ЭА}$ и N_F) практически совпадают с данными, опубликованными ранее [6]. Незначительные отличия обусловлены тем, что при проведении настоящего исследования была задана более высокая концентрация ДМФА в потоке ЭА, нежели в [6] (99.99% масс., а не 99.9% масс.), а также тем, что число тарелок в колоннах в работе [6] не подбирали, а задавали в соответствии с данными автора [14].

Выводы

Таким образом, определены оптимальные по критерию суммарных энергетических затрат в кипятильниках колонн параметры трех схем ЭР из двухотборных колонн для разделения смеси ацетон–хлороформ–*н*-бутанол с применением ДМФА. Выявлен наименее энергоемкий вариант разделения – схема с предварительным отделением *н*-бутанола от азеотропообразующих компонентов (ацетона и хлороформа). Полученные данные в дальнейшем будут использованы для синтеза и оптимизации схем ЭР данной смеси, включающих комплексы с ЧСТМП, а также для оценки энергетической эффективности применения последних для разделения смеси ацетон–хлороформ–*н*-бутанол и получения критерия оценки энергетической эффективности использования комплексов со связанными тепловыми и материальными потоками в технологиях ЭР многокомпонентных смесей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 17-03-00347.

Список литературы:

1. Тимошенко А.В., Анохина Е.А., Тимофеев В.С. Способ разделения смеси ацетон–хлороформ азеотропного состава экстрактивной ректификацией: пат. 2207896 Российская Федерация. № 2002107039; заявл. 21.03.2002; опубл.10.07.2003, Бюл. № 19. 4 с.

References:

1. Timoshenko A.V., Anokhina E.A., Timofeev V.S. A way for separation of the acetone–chloroform azeotropic composition mixture by extractive distillation: Patent 2207896 Russian Federation. № 2002107039; appl. 21.03.2002; publ.10.07.2003. (in Russ.).

2. Lei Z.G., Zhou R.Q., Duan Z.T. Process improvement on separating C4 by extractive distillation // Chem. Eng. J. 2002. V. 85. P. 379–386.

3. Hernández S. Analysis of energy-efficient complex distillation options to purify bioethanol // Chem. Eng. Technol. 2008. V.31. № 4. P. 597–603.

4. Timoshenko A.V., Anokhina E.A., Ivanova L.V. Extractive distillation systems involving complex columns with partially coupled heat and material flows // Theor. Found. Chem. Eng. 2005. V. 39. № 5. P. 463–470.

5. Timoshenko A.V., Morgunov A.V., Anokhina E.A. Flowsheet synthesis for the extractive distillation of azeotropic mixtures in systems consisting of columns with partially coupled heat and material flows // Theor. Found. Chem. Eng. 2007. V. 41. № 6. P. 845–850.

6. Анохина Е.А., Долматов Б.Б., Тимошенко А.В. Энергетическая эффективность экстрактивной ректификации смеси ацетон–хлороформ в сложной колонне с боковой секцией // Хим. технология. 2008. № 8. С. 402–407.

7. Анохина Е.А., Панкова И.А., Тимошенко А.В. Исследование эффективности применения сложных колонн с боковой укрепляющей секцией для экстрактивной ректификации смеси ацетон–метанол различного исходного состава // Хим. пром. сегодня. 2009. № 3. С. 44–49.

8. Анохина Е.А., Рудаков Д. Г. Тимошенко А.В. Энергетическая эффективность экстрактивной ректификации смеси изобутиловый спирт – изобутилацетат в зависимости от состава питания // Хим. технология. 2010. № 9. С. 549–556.

9. Анохина Е.А., Шлейникова Е.Л., Тимошенко А.В. Энергоэффективность комплексов с частично связанными тепловыми и материальными потоками в экстрактивной ректификации смеси метилацетат–хлороформ в зависимости от применяемого экстрактивного агента // Вестник МИТХТ. 2013. Т. 8. № 2. С. 18–25.

10. Anokhina E.A., Timoshenko A.V. Criterion of the energy effectiveness of extractive distillation in the partially thermally coupled columns // Chem. Eng. Res. Des. 2015. V. 99. P. 165–175.

11. Ivanova L.V., Prokhorenkova N.M., Surkova E.A., Morgunov A.V., Timoshenko A.V., Timofeev V.S. Energy-saving technologies of autoextractive distillation of an acetone – chloroform – n-butanol – dimethylformamide mixture // Theor. Found. Chem. Eng. 2006. V. 40. № 6. P. 580–586.

12. Анохина Е.А., Тимошенко А.В., Ребровская А.Е. Энергосберегающие схемы экстрактивной ректификации смеси бензол–циклогексан–толуол с N-метилпирролидоном. Часть 2. Схемы, включающие комплексы с частично связанными тепловыми и материальными потоками // Хим. пром. сегодня. 2015. № 3. С. 46–57.

2. Lei Z.G., Zhou R.Q., Duan Z.T. Process improvement on separating C4 by extractive distillation // Chem. Eng. J. 2002. V.85. P. 379–386.

3. Hernández S. Analysis of energy-efficient complex distillation options to purify bioethanol // Chem. Eng. Technol. 2008. V. 31. № 4. P. 597–603.

4. Timoshenko A.V., Anokhina E.A., Ivanova L.V. Extractive distillation systems involving complex columns with partially coupled heat and material flows // Theor. Found. Chem. Eng. 2005. V. 39. № 5. P. 463–470.

5. Timoshenko A.V., Morgunov A.V., Anokhina E.A. Flowsheet synthesis for the extractive distillation of azeotropic mixtures in systems consisting of columns with partially coupled heat and material flows // Theor. Found. Chem. Eng. 2007. V. 41. № 6. P. 845–850.

6. Anokhina E.A., Dolmatov B.B., Timoshenko A.V. The energy efficiency of the extractive distillation acetone–chloroform mixture in a complex column with a side section // Khimicheskaya technologiya (Chemical Engineering). 2008. V. 9. № 8. P. 402–407. (in Russ.).

7. Anokhina E.A., Pankova I.A., Timoshenko A.V. Study on effectiveness of complex columns with side section for extractive distillation of acetone–methanol mixtures with different composition // Khimicheskaya promyshlennost' segodnya (Chemical Industry Today). 2009. №. 3. P. 44–49. (in Russ.).

8. Anokhina E.A., Rudakov D.G., Timoshenko A.V. Energy efficiency of the extractive distillation of the isobutyl alcohol–isobutyl acetate mixture depending on the feed composition// Khimicheskaya technologiya (Chemical Engineering). 2010. V. 11. № 9. P. 549–556. (in Russ.).

9. Anokhina E.A., Shleynikova E.L., Timoshenko A.V. Energy efficiency of complexes with partially coupled thermally and material flows for extractive distillation of methyl acetate – chloroform mixture depending on entrainer // Vestnik MITHT (Fine Chemical Technologies). 2013. V. 8. № 2. P. 18–25. (in Russ.).

10. Anokhina E.A., Timoshenko A.V. Criterion of the energy effectiveness of extractive distillation in the partially thermally coupled columns // Chem. Eng. Res. Des. 2015. V. 99. P. 165–175.

11. Ivanova L.V., Prokhorenkova N.M., Surkova E.A., Morgunov A.V., Timoshenko A.V., Timofeev V.S. Energy-saving technologies of autoextractive distillation of an acetone – chloroform – n-butanol – dimethylformamide mixture // Theor. Found. Chem. Eng. 2006. V. 40. № 6. P. 580–586.

12. Anokhina E.A., Timoshenko A.V., Rebrovskaya A.E. Energy-saving schemes of benzene–cyclohexane–toluene mixture extractive distillation with N-methylpyrrolidone. Part 2. Schemes including systems with partially coupled thermal and material flows // Khimicheskaya promyshlennost' segodnya (Chemical Industry Today). 2015. № 3. P. 46–57. (in Russ.).

13. Timoshenko A.V., Anokhina E.A., Morgunov A.V., Rudakov D.G. Application of the partially thermally coupled distillation flowsheets for the extractive distillation of ternary azeotropic mixtures // Chem. Eng. Res. Des. 2015. V. 104. P. 139–155.

14. Пирог Л.А. Оценка эффективности агентов при разделении неидеальных смесей экстрактивной ректификацией: дисс. … канд. техн. наук. М.: МИТХТ, 1987. 204 с.

15. Serafimov L.A. Thermodynamic and topological analysis of heterogeneous equilibrium diagrams of multicomponent mixtures // Rus. J. Phys. Chem. 2002. V. 76. № 8. P. 1211–1224.

16. Бенюнес Х. Закономерности разделения азеотропных смесей в присутствии селективных разделяющих агентов: дисс. … канд. техн. наук. М.: МИТХТ, 2002. 185 с.

17. Segura H., Mejia A., Reich R., Wisniak J., Loras S. Isobaric vapor–liquid equilibria and densities for the binary systems oxolane + ethyl 1,1-dimethylethyl ether, oxolane + 2-propanol and propan-2-one + trichloromethane // Phys. Chem. Liq. 2003. V. 41. № 3. P. 283–301.

18. Michalski H., Michalowski S., Serwinski M., Strumillo C. Vapor–liquid equilibria for system acetone – n-butanol // Zesz. Nauk. Politechn. Lodzk., Chem. 1961. № 36. P. 73–84.

19. Мишенева И.Н., Смирнова В.В., Сараев Б.А., Павлов С.Ю. Равновесие жидкость–пар в системах кетоны–диметилформамид // Пром. синт. каучука. 1980. № 11. С. 2–3.

20. Subba Rao V.B., Venkata Rao C. Isopiestic binary vapor–liquid equilibria system chloroform (1)–*n*-butanol (2) // Chem. Eng. Sci. 1962. V.17. №7. P. 574–576.

21. Ivanova L.V., Timoshenko A.V., Timofeev V.S. Synthesis of flowsheets for extractive distillation of azeotropic mixtures // Theor. Found. Chem. Eng. 2005. V. 3. № 1. P. 16–23.

22. Arifin S., Chein I.-L. Design and control of an isopropyl alcohol dehydration process via extractive distillation using dimethtyl sulfoxide as an entrainer // Ind. Eng. Chem. Res. 2008. V. 47. №. 3. P. 790–803.

23. Wang S.-J., Huang H.-P., Yu Ch.-Ch. Plantwide design of transesterification reactive disstillation to co-generate ethyl acetate and n-butanol // Ind. Eng. Chem. Res. 2010. V. 49. P. 750–760.

24. Emhamed A.M., Czuczai B., Rev E., Lelkes Z. Analysis of extractive distillation with mathematical programming // Ind. Eng. Chem. Res. 2008. V. 47. P. 9983–9995.

25. Kossack S., Kraemer K., Gani R., Marquardt W. A systematic synthesis framework for extractive distillation processes // Chem. Eng. Res. Des. 2008. V. 86. P. 781–792.

13. Timoshenko A.V., Anokhina E.A., Morgunov A.V., Rudakov D.G. Application of the partially thermally coupled distillation flowsheets for the extractive distillation of ternary azeotropic mixtures // Chem. Eng. Res. Des. 2015. V. 104. P. 139–155.

14. Pirog L.A. Evaluation of the entrainer effectiveness in the separation of non-ideal mixtures by extractive distillation: diss. … Ph.D. (Engineering). Moscow, 1987. 204 p. (in Russ.).

15. Serafimov L.A. Thermodynamic and topological analysis of heterogeneous equilibrium diagrams of multicomponent mixtures // Rus. J. Phys. Chem. 2002. V. 76. № 8. P. 1211–1224.

16. Benyounes H. Regularities of azeotropic mixtures separation in the presence of selective entrainers: diss. …Ph.D. (Engineering). Moscow, 2002. 185 p. (in Russ.).

17. Segura H., Mejia A., Reich R., Wisniak J., Loras S. Isobaric vapor–liquid equilibria and densities for the binary systems oxolane + ethyl 1,1-dimethylethyl ether, oxolane + 2-propanol and propan-2-one + trichloromethane // Phys. Chem. Liq. 2003. V. 41. № 3. P. 283–301.

18. Michalski H., Michalowski S., Serwinski M., Strumillo C. Vapor–liquid equilibria for system acetone – n-butanol // Zesz. Nauk. Politechn. Lodzk., Chem. 1961. № 36. P. 73–84.

19. Misheneva I.N., Smirnova V.V., Saraev B.A., Pavlov S.Yu. Vapor–liquid equilibrium in ketone–dimethylformamide systems // Promyshlennost' sinteticheskogo kauchuka (Synthetic Rubber Industry). 1980. № 11. P. 2–3. (in Russ.).

20. Subba Rao V.B., Venkata Rao C. Isopiestic binary vapor–liquid equilibria system chloroform (1)–*n*-butanol (2) // Chem. Eng. Sci. 1962. V.17. №7. P. 574–576.

21. Ivanova L.V., Timoshenko A.V., Timofeev V.S. Synthesis of flowsheets for extractive distillation of azeotropic mixtures // Theor. Found. Chem. Eng. 2005. V. 3. № 1. P. 16–23.

22. Arifin S., Chein I.-L. Design and control of an isopropyl alcohol dehydration process via extractive distillation using dimethtyl sulfoxide as an entrainer // Ind. Eng. Chem. Res. 2008. V. 47. №. 3. P. 790–803.

23. Wang S.-J., Huang H.-P., Yu Ch.-Ch. Plantwide design of transesterification reactive disstillation to co-generate ethyl acetate and n-butanol // Ind. Eng. Chem. Res. 2010. V. 49. P. 750–760.

24. Emhamed A.M., Czuczai B., Rev E., Lelkes Z. Analysis of extractive distillation with mathematical programming // Ind. Eng. Chem. Res. 2008. V. 47. P. 9983–9995.

25. Kossack S., Kraemer K., Gani R., Marquardt W. A systematic synthesis framework for extractive distillation processes // Chem. Eng. Res. Des. 2008. V. 86. P. 781–792.

26. Garcia-Herreros P., Gomez J.M., Gil I.D., Rodrigues G. Optimization of the design and operation of an extractive distillation system for the production of fuel grade ethanol using glycerol as entrainer // Ind. Eng. Chem. Res. 2011. V. 50. P. 3977–3985.

27. Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Бояринов А.И. Программирование и вычислительные методы в химии и химической технологии. М.: Наука, 1972. 488 с.

28. De Figueirêdo M.F., Guedes B.P., de Araújo J.M.M., Vasconcelos L.G.S., Romildo Pereira Brito R.P. Optimal design of extractive distillation columns – A systematic procedure using a process simulator // Chem. Eng. Res. Des. 2011. V. 89. P. 341–346.

29. Kiss A.A., Suszwalak D. J.-P.C. Enhanced bioethanol dehydration by extractive and azeotropic distillation in dividing-wall columns // Sep. Purif. Tech. 2012. V. 86. P. 70–78.

30. Kiss A.A., Ignat R.M. Innovative single step bioethanol dehydration in an extractive dividing-wall column // Sep. Purif. Tech. 2012. V. 98. P. 290–297.

31. Островский Г.М., Волин Ю.М., Зиятдинов Н.Н. Методы оптимизации химико-технологических процессов: учебное пособие. М.: КДУ, 2008. 424 с.

26. Garcia-Herreros P., Gomez J.M., Gil I.D., Rodrigues G. Optimization of the design and operation of an extractive distillation system for the production of fuel grade ethanol using glycerol as entrainer // Ind. Eng. Chem. Res. 2011. V. 50. P. 3977–3985.

27. Kafarov V.V., Vetokhin V.N., Boyarinov A.I. Programming and computational methods in chemistry and chemical technology. Moscow: Nauka Publ., 1972. 488 p. (in Russ.).

28. De Figueirêdo M.F., Guedes B.P., de Araújo J.M.M., Vasconcelos L.G.S., Romildo Pereira Brito R.P. Optimal design of extractive distillation columns – A systematic procedure using a process simulator // Chem. Eng. Res. Des. 2011. V. 89. P. 341–346.

29. Kiss A.A., Suszwalak D. J.-P.C. Enhanced bioethanol dehydration by extractive and azeotropic distillation in dividing-wall columns // Sep. Purif. Tech. 2012. V. 86. P. 70–78.

30. Kiss A.A., Ignat R.M. Innovative single step bioethanol dehydration in an extractive dividing-wall column // Sep. Purif. Tech. 2012. V. 98. P. 290–297.

31. Ostrovskij G.M., Volin Yu.M., Ziyatdinov N.N. Methods of optimization of chemical-technological processes. Moscow: KDU Publ., 2008. 424 p. (in Russ.).

Об авторах:

Анохина Елена Анатольевна, кандидат технических наук, доцент кафедры химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «Московский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 86).

Грачева Ирина Михайловна, студент кафедры химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «Московский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 86).

Акишин Александр Юрьевич, аспирант кафедры химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «Московский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 86).

Тимошенко Андрей Всеволодович, доктор технических наук, профессор кафедры химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «Московский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 86).

About authors:

Elena A. Anokhina, Ph.D. (Engineering), Associate Professor, Chair of Chemistry and Technology of General Organic Synthesis, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Moscow Technological University (86, Vernadskogo Pr., Moscow, 119571, Russia).

Irina M. Gracheva, Student, Chair of Chemistry and Technology of General Organic Synthesis, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Moscow Technological University (86, Vernadskogo Pr., Moscow, 119571, Russia).

Alexander Yu. Akishin, Postgraduate Student, Chair of Chemistry and Technology of General Organic Synthesis, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Moscow Technological University (86, Vernadskogo Pr., Moscow, 119571, Russia).

Andrey V. Timoshenko, Dr.Sc. (Engineering), Professor, Chair of Chemistry and Technology of General Organic Synthesis, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Moscow Technological University (86, Vernadskogo Pr., Moscow, 119571, Russia).