

THEORETICAL BASES OF CHEMICAL TECHNOLOGY

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

ISSN 2410-6593 (Print), ISSN 2686-7575 (Online)

<https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-5-379-389>



УДК 66.011

НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Алгоритм и программный комплекс оптимального технологического проектирования простых ректификационных колонн

Н.Н. Зиятдинов[@], И.И. Емельянов, А.А. Рыжова, П.С. Чернаков

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, 420111 Россия

[@]Автор для переписки, e-mail: nnziat@yandex.ru

Аннотация

Цели. Формализованная задача оптимального проектирования систем ректификационных колонн относится к классу задач дискретно-непрерывного нелинейного программирования. Дискретными поисковыми переменными являются число тарелок в укрепляющей и исчерпывающей частях колонн, а непрерывными – режимы работы колонн. Цель работы – разработать алгоритм и программный комплекс оптимального технологического проектирования системы простых тарельчатых ректификационных колонн по критерию суммарных приведенных капитальных и энергетических затрат на основе строгих математических моделей ректификации.

Методы. Решение поставленной задачи базируется на методе ветвей и границ. Компьютерная модель системы ректификационных колонн построена в среде программного комплекса Aspen Hysys. В качестве модели ректификации использован модуль Inside-Out. Разработанный алгоритм реализован в программной среде математического пакета Matlab. Для решения задачи условной оптимизации использован модуль, основанный на методе последовательного квадратичного программирования. Взаимодействие программной надстройки, построенной в Matlab, с Aspen Hysys реализовано с помощью СОМ-интерфейса.

Результаты. Разработаны подходы к получению нижних и верхних границ критерия оптимальности и способ ветвления при реализации метода ветвей и границ. Разработан алгоритм оптимального проектирования ректификационной колонны заданной топологии на основе метода ветвей и границ. В математическом пакете Matlab создан программный комплекс, реализующий предложенный алгоритм и интегрированный с универсальной моделирующей программой AspenHysys.

Выводы. Разработан алгоритм и реализован программный комплекс, позволяющий автоматизировать процесс проектирования систем ректификационных колонн и интеграцию с передовыми пакетами математического программирования. Работоспособность алгоритма и программного комплекса апробирована на примере оптимального проектирования колонны дебутанизации.

Ключевые слова: ректификация, метод ветвей и границ, оптимизация, проектирование, Matlab, AspenHysys

Для цитирования: Зиятдинов Н.Н., Емельянов И.И., Рыжова А.А., Чернаков П.С. Алгоритм и программный комплекс оптимального технологического проектирования простых ректификационных колонн. *Тонкие химические технологии.* 2021;16(5):379–389. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-5-379-389>

RESEARCH ARTICLE

Algorithm and software for the optimal technological design of a system of simple distillation columns

Nadir N. Ziyatdinov[@], Ilia I. Emelyanov, Alina A. Ryzhova, Petr S. Chernakov

Kazan National Research Technological University, Kazan, 420111 Russia

[@]Corresponding author, e-mail: nnziat@yandex.ru

Abstract

Objectives. The formalized problem of the optimal design of distillation column systems belongs to the class of mixed integer nonlinear program problems. Discrete search variables are the number of trays in the rectifying and stripping sections of columns, whereas the continuous ones are the operating modes of columns. This study aimed to develop an algorithm and a software package for the optimal technological design of a system of simple distillation columns based on the criterion of total reduced capital and energy costs using rigorous mathematical distillation models.

Methods. The solution to this problem is based on the branch and bound method. A computer model of the distillation column system was developed in the environment of the Aspen Hysys software package. The Inside–Out module was used as the distillation model. The developed algorithm is implemented in the software environment of the Matlab mathematical package. To solve the conditional optimization problem, a sequential quadratic programming method-based model was used. The interaction between software add-ins in Matlab and Aspen Hysys is implemented using a Component Object Model interface.

Results. Approaches to obtain the lower and upper bounds of the optimality criterion and the branching method for the implementation of the branch and bound method have been developed. In addition, an algorithm for the optimal design of a distillation column of a given topology based on the branch and bound method has been developed. Furthermore, using Matlab, a software package that implements the developed algorithm and is integrated with the universal modeling software AspenHysys has been created.

Conclusions. An algorithm and a software package have been developed and implemented that allows automating the design process of distillation column systems and integration with advanced mathematical programming packages, respectively. The performance of the algorithm and software package has been evaluated using the optimal design of the debutanization column as an example.

Keywords: distillation, branch and bound method, optimization, design, Matlab, AspenHysys

For citation: Ziyatdinov N.N., Emelyanov I.I., Ryzhova A.A., Chernakov P.S. Algorithm and software for optimal technological design of a system of simple distillation columns. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2021;16(5):379–389 (Russ., Eng.). <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-5-379-389>

ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных процессов химической, нефтехимической и нефтегазоперерабатывающей промышленности является ректификация. Данный процесс характеризуется высокими энергопотреблением и металлоемкостью [1–5]. Поэтому на стадии проектирования ректификационных колонн и систем необходимо принимать решения, направленные на минимизацию этих затрат при выполнении проектных требований [6–12]. В настоящее время для решения задач проектирования применяются упрощенные методы [1, 5], термодинамические методы [4, 13], методы, основанные на строгих математических моделях [9, 10, 14–16]. Суть упрощенного подхода, реализуемого, в частности, в методах Джиллиленда и Фенске–Андервуда, Львова, заключается в определении минимального флегмового числа, по которому рассчитываются оптимальное число тарелок колонны и номер тарелки питания, при которых обеспечивается заданное качество выходного продукта. Точность упрощенных методов невелика. Термодинамические методы направлены на минимизацию энергетических затрат и не в полной мере учитывают капитальные затраты. Вследствие этого, важной является задача разработки эффективных методов проектирования систем ректификационных колонн (СРК), оптимальных по технико-экономическому критерию. Последнее, в свою очередь, требует использования строгих математических моделей и методов оптимизации. В этом при заданном качестве получаемых продуктов случае задача оптимального проектирования заключается в поиске компромисса между капитальными и эксплуатационными затратами, сумма которых определяет критерий оптимальности [16]. Эффективным инструментом для компьютерного моделирования и оптимизации в химической технологии являются универсальные моделирующие программы (УМП), построенные на строгих математических моделях процессов ректификации, в основе которых заложены законы сохранения энергии, массы и импульса, так называемые MESH-модели (Mass, Equilibrium, Summation, Heat). Эти модели содержатся в библиотеках всех ведущих УМП, таких как Aspen Plus [17], AspenHysys [18], Unisim [19], ChemCad [20, 22], позволяющих исследовать, проектировать и управлять технологическими процессами на всех стадиях их жизненного цикла [21]. Также УМП содержат эффективные методы нелинейного программирования, к которым относятся методы последовательного квадратичного программирования (SQP) и модифицированной функции Лагранжа. Но, к сожалению, данные

методы оптимизации позволяют решать задачи только непрерывного нелинейного программирования, при заданных значениях конструктивных и режимных технологических параметров имеющих дискретную природу. Задача оптимального проектирования СРК решается в пространстве как непрерывных, так и дискретных поисковых переменных, и поэтому разработка методов проектирования СРК остается актуальной.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ СРК

Сформулированная выше задача оптимального проектирования принадлежит к классу задач дискретно-непрерывного нелинейного программирования (ДННП) [6, 16], где в качестве дискретных поисковых переменных выступают числа тарелок в укрепляющих и исчерпывающих частях проектируемых колонн, а непрерывных – параметры, определяющие режимы работы колонн. Представим эту задачу в формализованном виде:

$$f = \min_{x^j, u^j, m_s^j} \sum_{j=1}^N f^j(x^j, u^j, m_s^j), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \Phi_k^j(x^j, u^j, m_s^j) = 0, s = 1, 2, j = 1, \dots, N, 1 \leq m_s^j \leq m_s^{j, \max}, \\ k = 1, \dots, m_s^{j, \max}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\Psi^j(x^j, u^j) \leq 0, j = 1, \dots, N, \quad (3)$$

$$F^{jg} - D^g = 0, F^{rg} - W^g = 0, j, g, r, g = 1, \dots, N, \quad (4)$$

$$\Phi_k^j(x^j, u^j, m_s^j) = \begin{cases} \Phi_{s_0}^j(x^j, u_0^j), s = 1 \\ \Phi_{s_1}^j(x^j, F^j), s = 2 \\ \Phi_{s_k}^j(x^j), 1 \leq k \leq m_s^j \\ \Phi_{m_s^j+1}^j(x^j, u_{m_s^j+1}^j), s = 2 \end{cases}, \quad (5)$$

где $f^j(x^j, u^j, m_s^j)$ в уравнении (1) – целевая функция, включающая суммарные приведенные капитальные и эксплуатационные затраты j -ой колонны; уравнение (2) – математическая модель j -ой колонны; x^j, u^j – переменные состояния и управляющие переменные j -ой ректификационной колонны; N – число колонн

в системе; j – порядковый номер ректификационной колонны; s – индекс секции колонны ($s = 1$ – укрепляющая секция, $s = 2$ – исчерпывающая секция); m_s^j – число тарелок в каждой секции j -ой ректификационной колонны, принимающее значения от 1 до $m_s^{j,\max}$; $m_s^{j,\max}$ – максимальное число тарелок; $\varphi_0^j(x^j, u_0^j)$, $\varphi_{s_k}^j(x^j)$, $\varphi_{2_1}^j(x^j, F^j)$, $\varphi_{m_{2_1}^j+1}^j(x^j, u_{m_{2_1}^j+1}^j)$ в уравнениях (5) – математическая модель дефлегматора, k -ой тарелки, тарелки питания, кипятильника j -ой колонны, соответственно; неравенства (3) – проектные ограничения; уравнения (4) – соотношения, характеризующие структуру СРК, которые означают, что при $F^{jg} - D^g = 0$ потоком питания j_g -ой колонны является дистиллят g -ой колонны; при $F^{rg} - W^g = 0$ потоком питания r_g -ой колонны является кубовый продукт g -ой колонны; $j_g, r_g = 1, \dots, N$, $j, g = 1, \dots, N$ – номера колонн. Далее, для простоты изложения рассматриваемого алгоритма, уравнения (4) и (5) будут опущены.

Существуют различные методы решения задач ДННП, среди которых одним из наиболее эффективных является метод ветвей и границ [16]. Однако данный метод не является полностью формализованным, поскольку для его использования при решении конкретной задачи требуется разработка процедуры ветвления на дереве-графе, формализации задач нахождения верхней и нижней оценок критерия оптимальности. В полной мере это относится и к рассматриваемой задаче проектирования, в которой основная трудность заключается в разработке подхода к расчету нижней оценки критерия оптимальности. Для этого необходимо, чтобы все поисковые переменные, включая число тарелок, могли принимать непрерывные значения. Тогда задача поиска нижней оценки критерия будет сведена к задаче нелинейного программирования. Ясно, что решение задачи минимизации с непрерывными поисковыми переменными даст лучшее решение, чем с дискретными переменными, то есть нижнюю оценку. Последнее неосуществимо, поскольку дискретная поисковая переменная – число тарелок в колоннах, не может быть дробной. Нами в работе [16] предложен прием, позволяющий перейти в рассматриваемой задаче от дискретных к непрерывным переменным.

Для получения нижней оценки для каждой тарелки колонны в уравнение связи равновесной и рабочей концентраций i -го компонента k -ой тарелки предложено вводить дополнительный фиктивный структурный параметр α_{sk}^j :

$$y_{is}^{jk} = y_{is}^{j,k+1} + \alpha_{sk}^j E_{is}^j (y_{is}^{*jk} - y_{is}^{j,k+1}). \quad (6)$$

Данный параметр принимает значения 0 или 1. Если $\alpha_{sk}^j = 0$, то тарелка отсутствует, если $\alpha_{sk}^j = 1$ – тарелка присутствует.

С учетом введенной модификации, уравнения (1)–(3) примут вид (7)–(9):

$$f = \min_{x^j, u^j, \alpha_s^j} \sum_{j=1}^N f^j(x^j, u^j, \alpha_s^j), \quad (7)$$

$$\varphi^j(x^j, u^j, \alpha_s^j) = 0, \quad (8)$$

$$\psi^j(x^j, u^j) \leq 0, j = 1, \dots, N, \quad (9)$$

$$\alpha_s^j = [0, 1],$$

где α_s^j – вектор, компонентами которого являются $\alpha_{sk}^j, k = 1, \dots, m_s^{j,\max}$.

Таким образом, задача оптимального проектирования СРК сводится к определению оптимальных значений структурных параметров и управляющих переменных. Непрерывность значений структурных параметров α_{sk}^j позволяет рассчитывать нижние оценки критерия оптимальности.

Для решения задачи (7) методом ветвей и границ вводятся множества M_s^{jl} номеров тарелок в исчерпывающей и укрепляющей частях j -ой колонны ($s = 1, 2$), при которых структурный параметр α_{sk}^j принимает значения 0 либо 1. Номера тарелок определяются на предыдущих шагах метода ветвей и границ. Рассмотрим постановку задачи на l -ом шаге:

$$f^l = \min_{x^j, u^j, \alpha_s^j} \sum_{j=1}^N f^j(x^j, u^j, \alpha_s^j), k \notin M_s^{jl}, \quad (10)$$

$$\varphi^j(x^j, u^j, \alpha_s^j) = 0,$$

$$\psi^j(x^j, u^j) \leq 0, j = 1, \dots, N, s = 1, 2,$$

где набор $\alpha_{sk}^j = [0, 1]$ при $k \in M_s^{jl}$, найденный на предыдущих итерациях, является постоянным, в то же время α_{sk}^j при $k \notin M_s^{jl}$ являются двоичными поисковыми переменными.

Для получения нижней оценки (10) решим задачу:

$$\mu^l = \min_{x^j, u^j, \alpha_s^j} \sum_{j=1}^N f^j(x^j, u^j, \alpha_s^j), k \notin M_s^{jl}, \quad (11)$$

$$\varphi^j(x^j, u^j, \alpha_{sk}^j) = 0, \quad j = 1, \dots, N,$$

$$\psi^j(x^j, u^j) \leq 0, \quad j = 1, \dots, N,$$

$$0 \leq \alpha_{sk}^j \leq 1, \quad \text{для всех } k \notin M_s^{jl}.$$

Значение верхней оценки критерия оптимальности определяется по значениям параметров α_{sk}^{*j} , которые находятся из решения задачи (11) при значении $\bar{\alpha}_{sk}^j$, полученном на предыдущих итерациях. Для этого, при условии, что для $k = 1, \dots, p_s^j$ $\bar{\alpha}_{sk}^j = 1$, где $p_s^j = \left[\sum_{k \notin M_s^{jl}} \alpha_{sk}^{*j} \right] + \sum_{k \in M_s^{jl}} \bar{\alpha}_{sk}^j$ – это совокупность ближайшего целого суммы структурных параметров, а для оставшихся k $\bar{\alpha}_{sk}^j = 0$ решается задача:

$$\eta^l = \min_{x^j, u^j} \sum_{j=1}^N f^j(x^j, u^j, \bar{\alpha}_{sk}^j), \quad (12)$$

$$\varphi^j(x^j, u^j, \bar{\alpha}_{sk}^j) = 0, \quad j = 1, \dots, N, \quad k = 1, \dots, m_s^{j, \max},$$

$$\psi^j(x^j, u^j) \leq 0, \quad j = 1, \dots, N.$$

Правило ветвления заключается в следующем. Число тарелок каждой секции ($s = 1, 2$) каждой колонны ($j = 1, \dots, N$) разбивается на два подмножества. В первом подмножестве параметры α_{sk}^j , у которых k лежит в интервале $\left(\left[\frac{m_s^{jl}}{2} \right] + 1, m_s^{jl} \right)$, варьируются, а параметры α_{sk}^j , у которых k принадлежит интервалу $\left(1, \left[\frac{m_s^{jl}}{2} \right] \right)$, равны 1, где m_s^{jl} – число тарелок, для которых $k \notin M_s^{jl}$. Во втором подмножестве значения параметров α_{sk}^j , у которых k лежит в интервале $\left(1, \left[\frac{m_s^{jl}}{2} \right] \right)$, варьируются, а для k , изменяющихся в интервале $\left(\left[\frac{m_s^{jl}}{2} \right] + 1, m_s^{jl} \right)$, α_{sk}^j равны 0.

На каждой итерации с целью определения нижней и верхней оценок критерия оптимальности решаются задачи (11) и (12). Найденные значения целевой функции сравниваются. Если на l -ом шаге разность верхней и нижней оценок меньше заданной точности ϵ , найденное решение принимается оптимальным. Иначе, для дальнейшего ветвления, из всех вершин выбирается вершина с наименьшей нижней оценкой.

Для решения задачи оптимального проектирования СРК с заданной топологией была выбрана УМП Aspen Hysys, так как она обладает возможностями интеграции с передовыми пакетами математического программирования и моделирования сложных нефтехимических процессов, включая системы ректификационных колонн; содержит в библиотеке множество строгих моделей технологического оборудования с расширенными алгоритмами расчета и встроенным модулем оптимизации; имеет дружественный интерфейс, обеспечивает простое и лаконичное представление технологической схемы. Однако программная закрытость модуля оптимизации и ограниченный набор настроечных параметров методов оптимизации в УМП Aspen Hysys не позволяют создать программу предлагаемого алгоритма в самой УМП.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС И АЛГОРИТМ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ОПТИМАЛЬНОЙ СРК

С целью автоматизации процесса проектирования оптимальной системы ректификационных колонн программная реализация алгоритма осуществлена в математическом пакете Matlab. Он характеризуется встроенным языком программирования, наличием передовых методов оптимизации, является удобным и относительно простым пакетом для управления процессом расчета в УМП Aspen Hysys, а также позволяет разработать интерфейс, связывающий эти программные средства с помощью технологии COM/ActiveX. В среде Aspen Hysys осуществляется предварительная сборка проектируемой СРК и ее расчет по значениям поисковых переменных, генерируемых в алгоритме, реализованном в Matlab.

На рис. 1 представлена структура разработанного программного комплекса проектирования оптимальной системы ректификационных колонн.

Опишем укрупненный алгоритм реализации разработанного программного комплекса.

Шаг 0. Ввод исходных данных: начальное количество тарелок и спецификаций, которые используются в качестве поисковых переменных; границы изменения значений спецификаций и структурных параметров тарелок; начальные приближения значений спецификаций и структурных параметров тарелок; стоимостные коэффициенты; точность расчета математической модели ректификационной колонны и метода оптимизации; температуры хладагента и пара.

Шаг 1. Формирование массива поисковых переменных: нижней и верхней оценки критерия в нулевой вершине, путем решения задач (11), (12).

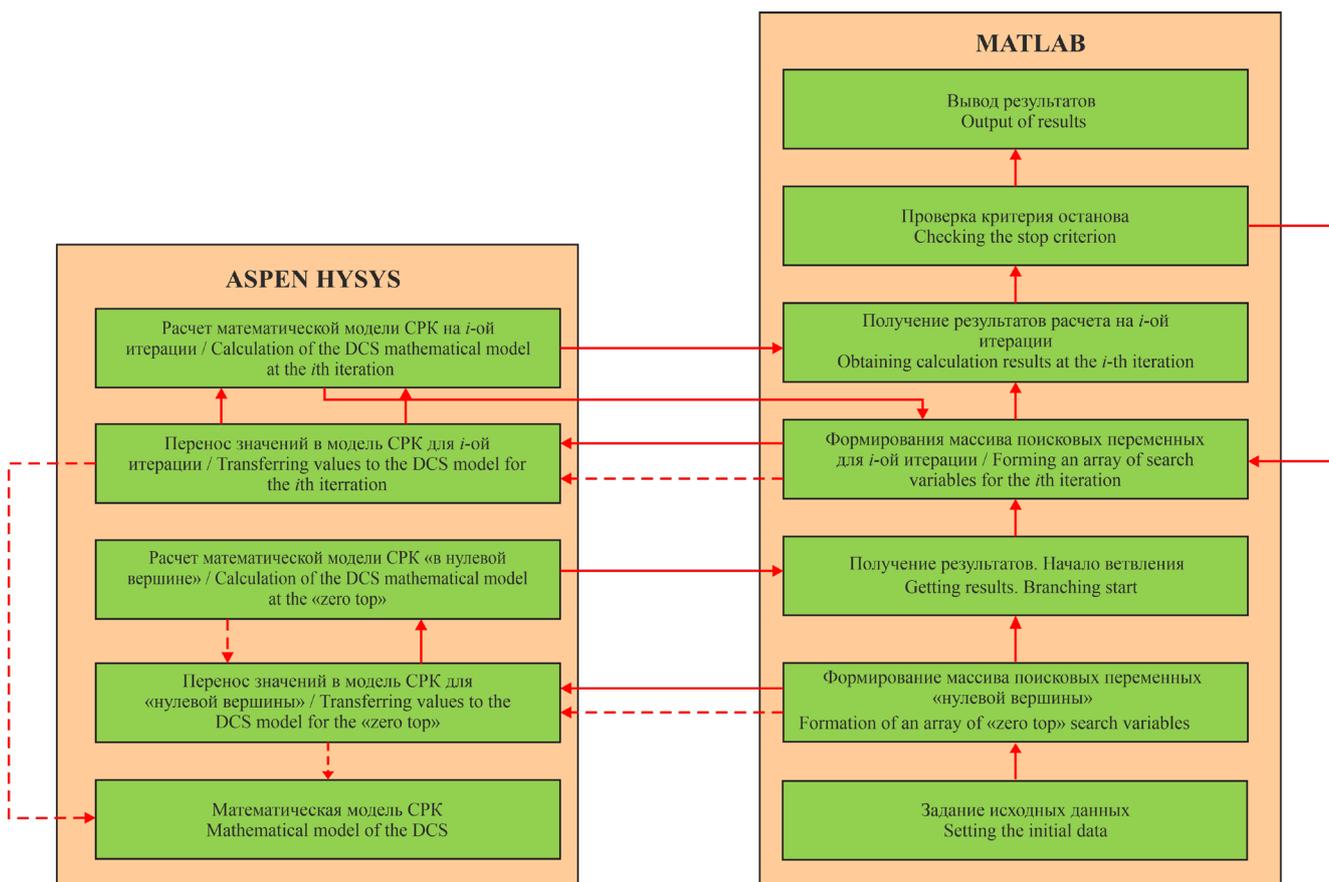


Рис. 1. Структура программного комплекса.
Fig. 1. The structure of the software package.

Шаг 2. Дробление перспективной вершины, путем выбора наименьшей верхней оценки $\bar{\eta} = \min\{\bar{\eta}, \eta_l^d\}$, $l = 1, 2$, где d – индекс итерации; l – индекс потомка вершины дерева ветвлений на итерации d . Решение задач (11), (12).

Шаг 3. Исключение неперспективных вершин $\mu_l^t > \bar{\eta}$, $l = 1, 2, t = 1, d$.

Шаг 4. Поиск перспективной вершины $\{l^*, t^*\}$ среди оставшихся $\mu_{l^*}^{t^*} = \min_{\mu_l^t \in M} \mu_l^t$.

Шаг 5. Проверка окончания решения. В случае выполнения условия окончания:

$$\eta_{l^*}^{t^*} = \bar{\eta} \text{ и } \left| \mu_{l^*}^{t^*} - \eta_{l^*}^{t^*} \right| / \mu_{l^*}^{t^*} \leq \varepsilon,$$

где ε – точность решения, завершение работы алгоритма и вывод результатов. В противном случае, переход к шагу 2.

Эффективность разработанного алгоритма и программного комплекса была апробирована на примере проектирования оптимальной ректификационной колонны дебутанизации (рис. 2). Для решения задачи в среде УМП Aspen Hysys была выбрана MESH-модель ректификационной колонны,

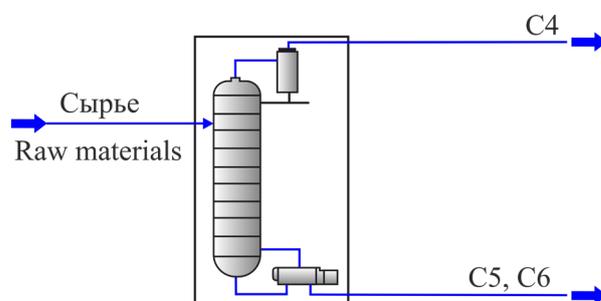


Рис. 2. Схема колонны дебутанизации.
Fig. 2. Diagram of the debutanizing column.

включающая метод Inside-Out, являющийся эффективным методом по времени и точности получаемого решения.

Постановка задачи: при заданных параметрах исходного сырья (табл. 1) требуется найти такие значения поисковых переменных (число тарелок в исчерпывающей и укрепляющей секциях колонны, значение флегмового числа, температуру в кубе колонны), при которых критерий суммарных приведенных капитальных и эксплуатационных затрат принимает минимальное значение, и выполняются ограничения на качество разделяемых

Таблица 1. Параметры потока сырья
Table 1. Raw material flow parameters

| Параметр | Значение |
|---|----------|
| Давление, бар / Pressure, bar | 5 |
| Температура, °C / Temperature, °C | 80 |
| Массовый расход, кг/ч / Mass flow, kg/h | 10000 |
| Масс. доля <i>n</i> -бутана / Mass fraction of <i>n</i> -butane | 0.35 |
| Масс. доля <i>n</i> -пентана / Mass fraction of <i>n</i> -pentane | 0.30 |
| Масс. доля <i>n</i> -гексана / Mass fraction of <i>n</i> -hexane | 0.35 |

продуктов: содержание *n*-бутана в дистилляте более 0.99 мас. доли, а в кубе колонны менее 0.01. Давление верха колонны было принято равным – 4 бар с учетом возможности конденсации верхних продуктов заоложенной водой. Эффективность тарелок для ректификационной колонны была принята равной 1, начальное приближение фиктивного структурного параметра – 0.7, заданная точность решения ϵ равна 0.05, начальное приближение числа тарелок в колонне – 30.

Ход решения задачи приведены в табл. 2 и на рис. 3. Оптимум соответствует вершине 41. В табл. 3 и 4 приведены данные материального баланса и параметры спроектированной колонны, соответственно.

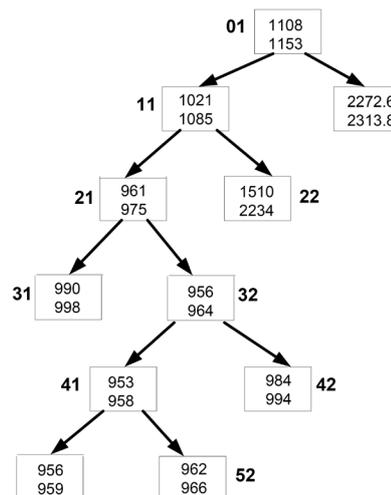


Рис. 3. Дерево-граф решения задачи (в вершинах графа приведены нижняя и верхняя оценки критерия оптимальности).

Fig. 3. Tree graph of the solution of the problem (at the vertices of the graph, the lower and upper estimates of the optimality criterion are given).

Таблица 2. Ход решения задачи
Table 2. Progress in solving the problem

| № вершины Vertex No. | Нижняя оценка, у.е./ч Lower estimate, с.у./h | Верхняя оценка / Upper estimate | | | | Точность Accuracy |
|-------------------------|---|---|---|------------------------------------|--|----------------------|
| | | Число тарелок Number of trays | | Флегмовое число Reflux ratio | Критерий, у.е./ч Criterion с.у./h | |
| | | Укрепляющая секция Strengthening section | Исчерпывающая секция Comprehensive section | | | |
| 01 | 1107.9 | 8 | 7 | 2.31 | 1153.3 | 0.039 |
| 11 | 1021.1 | 11 | 7 | 2.12 | 1085.0 | 0.054 |
| 12 | 2272.6 | 4 | 7 | 5.02 | 2313.7 | 0.017 |
| 21 | 960.9 | 10 | 10 | 1.81 | 974.7 | 0.014 |
| 22 | 1509.6 | 11 | 4 | 4.74 | 2233.8 | 0.320 |
| 31 | 990.3 | 12 | 10 | 1.82 | 997.7 | 0.007 |
| 32 | 956.0 | 9 | 11 | 1.83 | 963.6 | 0.0078 |
| 41 | 952.6 | 9 | 13 | 1.81 | 957.9 | 0.005 |
| 42 | 983.9 | 9 | 9 | 1.93 | 993.9 | 0.010 |
| 51 | 955.8 | 9 | 12 | 1.82 | 958.9 | 0.003 |
| 52 | 962.3 | 8 | 13 | 1.86 | 966.3 | 0.004 |

Таблица 3. Параметры питания и получаемых продуктов
Table 3. Parameters of fed and obtained products

| Параметры потока Raw materials flow parameters | № потока / Flow No. | | |
|--|-------------------------|------|--------|
| | Сырье Raw materials | C4 | C5, C6 |
| Давление, бар Pressure, bar | 5 | 4 | 4.5 |
| Температура, °C Temperature, °C | 80 | 42.6 | 102 |
| Массовый расход, кг/ч Mass flow rate, kg/h | 10000 | 3444 | 6556 |
| Состав / Composition | Мас. доли / Mass fract. | | |
| Бутан / Butane | 0.35 | 0.99 | 0.01 |
| Пентан / Pentane | 0.30 | 0.01 | 0.45 |
| Гексан / Hexane | 0.35 | 0 | 0.53 |

Таблица 4. Параметры и технико-экономические показатели колонны
Table 4. Parameters and technical and economic indicators of the column

| Показатели Indicators | Укрепляющая секция Strengthening section | Исчерпывающая секция Comprehensive section |
|--|---|---|
| Число тарелок Number of trays in section | 9 | 13 |
| Флегмовое число Reflux ratio | 1.8 | – |
| Температура куба, °C Cube temperature, °C | 42.6 | 102 |
| Диаметр, м Section diameter, m | 1.1 | 0.9 |
| Высота, м Section height, m | 5.4 | 7.8 |
| Расстояние между тарелками, м Interdisciplinary distance, m | 0.6 | 0.6 |
| Тепловая нагрузка, ккал/час Heat duty, kcal/h | –516280 | 658352 |
| Капитальные затраты, у.е./ч Capital costs, c.u./h | 112.4 | |
| Эксплуатационные затраты, у.е./ч Operating costs, c.u./h | 845.6 | |
| Критерий оптимальности, у.е./ч Optimality criterion, c.u./h | 958 | |

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлен алгоритм оптимального проектирования ректификационной колонны заданной топологии, на основе метода ветвей и границ. Реализован программный комплекс на базе пакета математического программирования Matlab, позволяющий автоматизировать процесс проектирования и интеграцию с УМП Aspen Hysys. Эффективность разработанного

алгоритма и программного комплекса была апробирована на примере ректификационной колонны дебутанизации.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-00315-20-01 «Энергосберегающие процессы разделения жидких смесей для выделения промышленных растворителей».

Acknowledgments

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, grant No. 075-00315-20-01 "Energy-saving processes for the separation of liquid mixtures for the isolation of industrial solvents."

Вклад авторов

Н.Н. Зиятдинов – формулирование целей и задач исследования, разработка метода и алгоритма, общее руководство процессом исследования;

И.И. Емельянов – разработка программного комплекса, проведение экспериментальных исследований, обработка полученных экспериментальных данных;

А.А. Рыжова – обработка полученных экспериментальных данных, подготовка материалов к публикации;

П.С. Чернаков – подготовка материалов к публикации.

Authors' contribution

N.N. Ziyatdinov – formulation of research goals and objectives, development of a method and algorithm, general management of the research process.

I.I. Emelyanov – development of a software package, experimental research, processing of the obtained experimental data.

A.A. Ryzhova – processing of the obtained experimental data, preparation of materials for publication.

P.S. Chernakov – preparation of materials for publication.

Авторы статьи заявляют об отсутствии любых потенциальных или фактических конфликтов интересов.

The authors declare no potential or actual conflicts of interest.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Комиссаров Ю.А., Дам Куанг Шанг. *Химическая технология: Многокомпонентная ректификация*: учебное пособие для вузов. М.: Юрайт; 2019. 255 с. ISBN 978-5-534-05626-6
2. Клаузнер П.С., Рудаков Д.Г., Анохина Е.А., Тимошенко А.В. Энергосбережение в экстрактивной ректификации смеси изобутиловый спирт-изобутилацетат с бутилпропионатом. *Тонкие химические технологии*. 2020,15(4):14–29. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2020-15-4-14-29>
3. Серафимов Л.А., Фролкива А.К., Бушина Д.И. Ректификация азеотропных бинарных смесей с экстрактивным агентом. *Теор. основы хим. технологий*. 2008;42(5):521–530.
4. Цирлин А.М., Балунув А.И., Сукин И.А. Оценки затрат энергии и выбор оптимальной последовательности разделения многокомпонентных смесей. *Теор. основы хим. технологий*. 2016;50(3):258–268. <https://doi.org/10.7868/S0040357116030131>
5. Комиссаров Ю.А., Гордеев Л.С., Вент Д.П. *Химическая технология: Научные основы процессов ректификации*: учебное пособие для вузов. В 2 ч. Ч. 2. М.: Юрайт; 2019. 416 с. ISBN 978-5-534-10977-1
6. Островский Г.М., Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В., Рыжов Д.А. Выбор оптимальных тарелок питания в замкнутой системе ректификационных колонн. *Теор. основы хим. технологий*. 2008;42(4):401–412.
7. Kister H.Z. *Distillation design*. McGraw-Hill Professional; 1992. 710 p.
8. Тимошенко А.В., Моргунов А.В., Анохина Е.А. Синтез схем экстрактивной ректификации азеотропных смесей в комплексах колонн с частично связанными тепловыми потоками. *Теор. основы хим. технологий*. 2007;41(6):649–654.
9. Caballero J.A., Grossman I.E. Design of distillation sequences: from conventional to fully thermally coupled distillation systems. *Comp. Chem. Eng.* 2004,28(11):2307–2329. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2004.04.010>
10. Grossman I.E., Aquirre P.A., Bartfeld M. Alternative representations and formulations for the economic optimization of multicomponent distillation columns. *Comp. Chem. Eng.* 2003;27(3):363–383. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(02\)00213-2](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(02)00213-2)

REFERENCES

1. Komissarov Yu.A., Dam Kuang Shang. *Khimicheskaya tekhnologiya: Mnogokomponentnaya rektifikatsiya (Chemical Technology: Multicomponent Rectification)*. Moscow: Yurait; 2019. 255 p. (in Russ.). ISBN 978-5-534-05626-6
2. Klauzner P.S., Rudakov D.G., Anokhina E.A., Timoshenko A.V. Energy saving in the extractive distillation of isobutyl alcohol–isobutyl acetate with n-butyl propionate. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2020;15(4):14–29 (in Russ.). <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2020-15-4-14-29>
3. Serafimov L.A., Frolkova A.K., Bushina D.I. Extractive distillation of binary azeotropic mixtures. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2008;42(5):507–516. <https://doi.org/10.1134/S0040579508050059>
[Original Russian Text: Serafimov L.A., Frolkova A.K., Bushina D.I. Extractive distillation of binary azeotropic mixtures. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2008;42(5):521–530 (in Russ.).]
4. Tsirlin A.M., Sukin I.A., Balunov A.I. Estimates of energy consumption and selection of optimal distillation sequence for multicomponent distillation. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2016;50(3):250–259. <https://doi.org/10.1134/S0040579516030131>
[Original Russian Text: Tsirlin A.M., Sukin I.A., Balunov A.I. Estimates of energy consumption and selection of optimal distillation sequence for multicomponent distillation. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2016;50(3):258–267 (in Russ.). <https://doi.org/10.7868/S0040357116030131>]
5. Komissarov Yu.A., Gordeev L.S., Vent D.P. *Khimicheskaya tekhnologiya: Nauchnye osnovy protsessov rektifikatsii (Chemical technology: Scientific foundations of rectification processes)*. In 2 v. V. 2. Moscow: Yurait; 2019. 416 p. (in Russ.). ISBN 978-5-534-10977-1
6. Ostrovskii G.M., Ziyatdinov N.N., Lapteva T.V., Ryjov D.A. Selection of optimal feed trays in a closed-loop system of distillation columns. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2008;42(4):386–397. <https://doi.org/10.1134/S0040579508040064>
[Original Russian Text: Ostrovskii G.M., Ziyatdinov N.N., Lapteva T.V., Ryjov D.A. Selection of optimal feed trays in a closed-loop system of distillation columns. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2008;42(4):401–412 (in Russ.).]

11. Клаузнер П.С., Рудаков Д.Г., Анохина Е.А., Тимошенко А.В. Оптимальные режимы бокового отбора в системах экстрактивной ректификации с тепловым насосом при разделении смеси аллиловый спирт–аллилацетат с бутилпропионатом. *Тонкие химические технологии*. 2021;16(3):213–224. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-3-213-224>
12. Лаптев А.Г., Карпеев С.В., Лаптева Е.А. Моделирование и модернизация тарельчатых колонн при проведении реакционно-массообменных процессов. *Теор. основы хим. технологии*. 201;52(1):3–12. <https://doi.org/10.7868/S0040357118010013>
13. Цирлин А.М. Алгоритм выбора последовательности разделения идеальных смесей в многостадийных системах. *Теор. основы хим. технологии*. 2012,46(2):162–168.
14. Lang Y-D, Biegler L.T. Distributed Stream method for Tray Optimization. *AIChE J.* 2002;48(3):582–595. <https://doi.org/10.1002/aic.690480315>
15. Huss R.S., Westerberg A.W. Collocation Methods for Distillation Design. 1. Model Description and Testing. *Ind. Egn. Chem. Res.* 1996;35(5):1603–1610. <https://doi.org/10.1021/ie9503499>
16. Островский Г.М., Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В., Богугла Н.Ю. Оптимальное проектирование системы ректификационных колонн с заданной топологией. *Теор. основы хим. технологии*. 2011;45(1):88–97.
17. Холоднов В.А., Викторов В.К., Краснобородько Д.А., Хайдаров В.К., Кулишенко Р.Ю., Фонарь В.В. *Моделирование и оптимизация химико-технологических систем с помощью интерактивной информационно-моделирующей программы Aspen Plus*: учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ); 2013. 214 с.
18. Лисицын Н.В., Викторов В.К., Кузичкин Н.В. *Химико-технологические системы: Оптимизация и ресурсосбережение*. СПб.: Менделеев; 2007. 312 с. ISBN 5-94922-024-2
19. Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В., Емельянов И.И., Логинова И.В. *Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических процессов и систем с использованием универсальной моделирующей программы Unisim*: учебное пособие. Казань: Изд-во РАР; 2019. 106 с.
20. Гартман Т.Н., Советин Ф.С. Применение пакетов программ ChemCad для моделирования процессов многокомпонентной ректификации в тарельчатых колоннах при получении синтетического жидкого топлива. *Химическая техника*. 2010;(2):36–38.
21. Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В., Рыжов Д.А. *Математическое моделирование химико-технологических систем с использованием программы ChemCad*: учебно-методическое пособие. Казань: Издательство Казан. гос. технол. ун-та; 2008. 160 с. ISBN 978-5-7882-0583-0
22. Кузнецов А.С., Корнюшко В.Ф. Интеллектуальная система управления химико-технологическими процессами структурирования многокомпонентных эластомерных композитов на основе производственной модели. *Тонкие химические технологии*. 2017;12(5):88–96. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2017-12-5-88-96>
7. Kister H.Z. *Distillation design*. McGraw-Hill Professional; 1992. 710 p.
8. 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;41(6):845–850. <https://doi.org/10.1134/S0040579507060097>
[Original Russian Text: Timoshenko A.V., Morgunov A.V., Anokhina E.A. Flowsheet synthesis for the extractive distillation of azeotropic. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2007;41(6):649–655 (in Russ.).]
9. Caballero J.A., Grossman I.E. Design of distillation sequences: from conventional to fully thermally coupled distillation systems. *Comp. Chem. Eng.* 2004,28(11):2307–2329. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2004.04.010>
10. Grossman I.E., Aquirre P.A., Bartfeld M. Alternative representations and formulations for the economic optimization of multicomponent distillation columns. *Comp. Chem. Eng.* 2003;27(3):363–383. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(02\)00213-2](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(02)00213-2)
11. Клаузнер П.С., Рудаков Д.Г., Анохина Е.А., Тимошенко А.В. Optimal modes of side-section flow in heat-pump-assisted extractive distillation systems for separating allyl alcohol–allyl acetate mixtures with butyl propionate. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2021;16(3):213–224 (in Russ.). <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-3-213-224>
12. Laptev A.G., Karpeev S.V., Lapteva E.A. Modeling and Modernization of Tray Towers for Reactive Distillation Processes. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2018,52(1):1–10. <https://doi.org/10.1134/S0040579518010098>
[Original Russian Text: Laptev A.G., Karpeev S.V., Lapteva E.A. Modeling and Modernization of Tray Towers for Reactive Distillation Processes. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2018;52(1):3–12 (in Russ.).] <https://doi.org/10.1134/S0040579518010098>
13. Tsirlin A.M. Separation of ideal mixtures in multistage systems: An algorithm for selecting a separation sequence. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2012,46(2):128–134. <https://doi.org/10.1134/S0040579512010150>
[Original Russian Text: Tsirlin A.M. Separation of ideal mixtures in multistage systems: An algorithm for selecting a separation sequence. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2012;46(2):162–168 (in Russ.).]
14. Lang Y-D, Biegler L.T. Distributed Stream method for Tray Optimization. *AIChE J.* 2002;48(3):582–595. <https://doi.org/10.1002/aic.690480315>
15. Huss R.S., Westerberg A.W. Collocation Methods for Distillation Design. 1. Model Description and Testing. *Ind. Egn. Chem. Res.* 1996;35(5):1603–1610. <https://doi.org/10.1021/ie9503499>
16. Ostrovskii G.M., Ziyatdinov N.N., Lapteva T.V., Bogula N.K. Optimal design of a distillation column system of a given topology. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2011;45(1):89–98. <https://doi.org/10.1134/S004057951006103X>
[Original Russian Text: Ostrovskii G.M., Ziyatdinov N.N., Lapteva T.V., Bogula N.K. Optimal design of a distillation column system of a given topology. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2011;45(1):42–43 (in Russ.).]
17. Kholodnov V.A., Viktorov V.K., Krasnoborod'ko D.A., Khaidarov V.K., Kulishenko R.Yu., Fonar' V.V. *Modelirovanie i optimizatsiya khimiko-tekhnologicheskikh sistem s pomoshch'yu interaktivnoi informatsionno-modeliruyushchei programmy Aspen Plus*: Uchebnoe posobie (Modeling and optimization of chemical engineering systems using the interactive information and modeling program Aspen Plus). St. Petersburg: SPBGTI (TU); 2013. 214 p. (in Russ.).

18. Lisitsyn N.V., Viktorov V.K., Kuzichkin N.V. *Khimiko-tekhnologicheskie sistemy: Optimizatsiya i resursoberezhenie (Chemical-technological systems: Optimization and resource conservation)*. St. Peterburg: Mendeleev; 2007. 312 p. (in Russ.). ISBN 5-94922-024-2

19. Ziyatdinov N.N., Lapteva T.V., Emel'yanov I.I., Loginova I.V. *Komp'yuternoe modelirovanie i optimizatsiya khimiko-tekhnologicheskikh protsessov i sistem s ispol'zovaniem universal'noi modeliruyushchei programmy Unisim: Uchebnoe posobie (Computer modeling and optimization of chemical-technological processes and systems using the universal modeling program Unisim)*. Kazan: RAR Publishing House; 2019. p. 106. (in Russ.).

20. Gartman T.N., Sovetin F.S. Application of ChemCad software packages to simulate multicomponent rectification processes in tray columns for synthetic liquid fuel production. *Khimicheskaya tekhnika*. 2010;(2):36–38 (in Russ.).

21. Ziyatdinov N.N., Lapteva T. V., Ryzhov D. A. *Matematicheskoe modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh sistem s ispol'zovaniem programmy ChemCad: Uchebno-metodicheskoe posobie (Mathematical modeling of chemical technological systems using the ChemCad program)*. Kazan: KGTU; 2008. 160 p. ISBN 978-5-7882-0583-0

22. Kuznetsov A.S., Kornushko V.F. Intelligent control system of chemical-technological processes of structuring of multicomponent elastomer composites based on the production model. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2017;12(5):88–96 (in Russ.). <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2017-12-5-88-96>

Об авторах:

Зиятдинов Надир Низамович, д.т.н., профессор, зав. кафедрой системотехники, ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, Россия, Республика Татарстан, Казань, ул. К. Маркса, д. 68). E-mail: nnziat@yandex.ru. <https://orcid.org/0000-0002-2314-8935>

Емельянов Илья Игоревич, к.т.н., доцент, доцент кафедры системотехники, ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, Россия, Республика Татарстан, Казань, ул. К. Маркса, д. 68). E-mail: ilyaemelyan@gmail.com. <https://orcid.org/0000-0003-0257-0739>

Рыжова Алина Альбертовна, аспирант, кафедра системотехники, ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», (420015, Россия, Республика Татарстан, Казань, ул. К. Маркса, д. 68). E-mail: alinagainullina0@yandex.ru. <https://orcid.org/0000-0001-5918-8296>

Чернаков Петр Станиславович, студент, кафедра системотехники, ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, Россия, Республика Татарстан, Казань, ул. К. Маркса, д. 68). E-mail: systech2@yandex.ru

About the authors:

Nadir N. Ziyatdinov, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Head of the Department of Process System Engineering, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Republic of Tatarstan, Russia). E-mail: nnziat@yandex.ru. <https://orcid.org/0000-0002-2314-8935>

Ilya I. Emelianov, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Department of Process System Engineering, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Republic of Tatarstan, Russia). E-mail: ilyaemelyan@gmail.com. <https://orcid.org/0000-0003-0257-0739>

Alina A. Ryzhova, Postgraduate Student, Department of Process System Engineering, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Republic of Tatarstan, Russia). E-mail: alinagainullina0@yandex.ru. <https://orcid.org/0000-0001-5918-8296>

Petr S. Chernakov, Student, Department of Process System Engineering, Kazan National Research Technological University (68, Karl Marx ul., Kazan, 420015, Republic of Tatarstan, Russia). E-mail: systech2@yandex.ru

Поступила: 26.08.2021; получена после доработки: 20.09.2021; принята к опубликованию: 25.10.2021.
The article was submitted: August 26, 2021; approved after reviewing: September 20, 2021; accepted for publication: October 25, 2021.