

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

THEORETICAL BASES OF CHEMICAL TECHNOLOGY

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

<https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-3-213-224>



УДК 660:51.001.57+66

НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Оптимальные режимы бокового отбора в системах экстрактивной ректификации с тепловым насосом при разделении смеси аллиловый спирт–аллилацетат с бутилпропионатом

П.С. Клаузнер[@], Д.Г. Рудаков, Е.А. Аножина, А.В. Тимошенко

МИРЭА – Российский технологический университет (Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова), Москва, 119571 Россия

[@]Автор для переписки, e-mail: klauzner@mirea.ru

Аннотация

Цели. Исследовать влияние режимов бокового отбора на энергетическую эффективность комплекса с частично связанными тепловыми и материальными потоками (ЧСТМП) с тепловым насосом (ТН) открытого типа в экстрактивной ректификации смеси аллиловый спирт–аллилацетат с н-бутилпропионатом и выявить условия, при которых совместное применение комплекса с ЧСТМП совместно с ТН наиболее эффективно.

Методы. Математическое моделирование в программном комплексе Aspen Plus V10. Для моделирования парожидкостного равновесия применяли уравнение локальных составов модель Non-Random Two Liquid, а для учета неидеальности паровой фазы – модель Редлиха-Квонга. При моделировании традиционной схемы экстрактивной ректификации и комплекса с ЧСТМП проводили параметрическую оптимизацию по критерию суммарных энергетических затрат в кипятильниках колонн. Для экономической оценки применяли инструменты Aspen Process Economic Analyzer V10.1.

Результаты. Для экстрактивной ректификации смеси 30 мас. % аллилового спирта и 70 мас. % аллилацетата с н-бутилпропионатом в качестве разделяющего агента показано, что минимум энергозатрат достигается при одинаковом уровне и количестве бокового отбора как для варианта комплекса с ЧСТМП с ТН, так и без него. Снижение энергетических затрат относительно традиционной схемы для комплекса без ТН составляет 20%, а с ТН – 38%. Была произведена экономическая оценка наилучших вариантов по сравнению с традиционной схемой экстрактивной ректификации. Показано, что применение комплекса с ЧСТМП с ТН имеет преимущество только при длительных сроках эксплуатации.

Выводы. Показано, что для экстрактивной ректификации смеси аллиловый спирт–аллилацетат оптимальные режимы бокового отбора при совместном применении комплекса с ЧСТМП с ТН открытого типа и комплекса с ЧСТМП без ТН совпадают.

Ключевые слова: экстрактивная ректификация, тепловой насос, комплекс с частично связанными тепловыми и материальными потоками, энергосбережение

Для цитирования: 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>

RESEARCH ARTICLE

Optimal modes of side-section flow in heat-pump-assisted extractive distillation systems for separating allyl alcohol–allyl acetate mixtures with butyl propionate

Pavel S. Klauzner[@], Danila G. Rudakov, Elena A. Anokhina, Andrey V. Timoshenko

MIREA – Russian Technological University (M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies), Moscow, 119571 Russia

[@]Corresponding author, e-mail: klauzner@mirea.ru

Abstract

Objectives. To investigate the influence of side-section flow modes on the energy efficiency of a partially thermally coupled distillation sequence (PTCDS) with a vapor recompression heat pump for the extractive distillation of an allyl alcohol–allyl acetate mixture with n-butyl propionate and identify modes under which the combined use of a PTCDS and heat pump are the most efficient.

Methods. Mathematical modeling in the Aspen Plus V10 software package was used as the main research method. The local composition equation of the non-random two-liquid model was used as a model for describing the vapor–liquid equilibrium, while the Redlich–Kwong model was used to consider the non-ideal vapor phase. When modeling the conventional extractive distillation scheme and PTCDS, parametric optimization was carried out according to the criterion of the total energy costs in the column reboilers. For the economical evaluation, Aspen Process Economic Analyzer V10.1 tools were used.

Results. For extractive distillation of a mixture of allyl alcohol (30 wt %) and allyl acetate (70 wt %) with n-butyl propionate as an entrainer, the minimum energy consumption was achieved at the same side-section flow mode for the variants of a PTCDS with and without a heat pump. The reduction in energy costs relative to the conventional scheme was 20% for the sequence without a heat pump and 38% for that with a heat pump. An economic assessment was made of the best options in comparison with the conventional extractive distillation scheme. The PTCDS with a heat pump had an advantage over the sequence without a heat pump only for long periods of operation.

Conclusions. For the extractive distillation of an allyl alcohol–allyl acetate mixture, the optimal modes for the combined use of a PTCDS with a vapor recompression heat pump coincide with the optimal modes for a PTCDS without a heat pump.

Keywords: extractive distillation, heat pump, partially thermally coupled distillation sequence, energy saving

For citation: Klauzner P.S., Rudakov D.G., Anokhina E.A., Timoshenko A.V. 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 (Russ., Eng.). <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-3-213-224>

ВВЕДЕНИЕ¹

Аллиловый спирт (АС) является одним из ключевых продуктов химической технологии основного органического синтеза. Он используется для синтеза глицидола, глицерина, аллиловых, глицидиловых и некоторых других эфиров, которые применяются в производстве волокон, лакокрасочных материалов, герметиков, формованных изделий, армированных стеклопластиков, полимеров, а также при получении пищевых продуктов, медикаментов, парфюмерной продукции и др. Существует ряд промышленных способов получения АС из аллилацетата (АА) – омыление, гидролиз, алкоголиз [1]. Предложен также совмещенный реакционно-ректификационный процесс получения АС [2]. Вне зависимости от способа получения в ходе предварительного разделения продуктов реакции образуется смесь АС–АА, имеющая азеотроп с минимумом температуры кипения с содержанием АС 0.63 мас. д. (0.75 мольн. д.). Для разделения этой смеси в работе [3] предлагается использовать экстрактивную ректификацию (ЭР) с этиленгликолем (ЭГ) в качестве разделяющего агента. По данным авторов [3] этот разделяющий агент отличается достаточно высокой селективностью, и в его присутствии происходит обращение относительных летучестей. В качестве альтернативного варианта нами в работе [4] в качестве разделяющего агента был предложен *n*-бутилпропионат (БП). Максимальная разница температур кипения в случае применения ЭГ составляет 100 °С, а в случае применения БП – 48 °С.

ЭР в ряде случаев характеризуется существенно меньшим энергопотреблением, чем другие специальные методы разделения. Несмотря на это, поиск способов снижения энергетических затрат на ее проведение остается актуальной задачей, так как

она применяется в многотоннажных технологиях основного органического и нефтехимического синтеза. Традиционными способами снижения энергетических затрат в ЭР являются выбор селективных разделяющих агентов, параметрическая и структурная оптимизация схемы. Как и в случае обычной ректификации, для совершенствования процесса ЭР может быть использована теплоинтеграция [5–8] и методы, основанные на приближении ректификации к термодинамически обратимой [9], например, комплексы с полностью [10] или частично связанными тепловыми и материальными потоками (ЧСТМП) [11, 12]. Схемам с ЧСТМП посвящено достаточно большое количество работ, исследовано применение таких комплексов в ЭР различных смесей [13–15], предложен эмпирический критерий для предварительной оценки энергетической эффективности ЧСТМП в ЭР [16] и алгоритм оптимизации таких комплексов [17]. Другим перспективным [18] методом совершенствования процессов ЭР является использование тепловых насосов (ТН) различных типов. В настоящее время этой теме посвящено относительно небольшое число работ [19–22]. Поскольку применение ТН и комплексов с ЧСТМП основано на различных принципах, то целесообразно рассмотреть возможность их совместного использования и оценить эффективность такого подхода.

Ранее, нами в работе [4] было рассмотрено применение ТН в ЭР смеси АС–АА азеотропного состава с разделяющим агентом БП, в том числе совместно с комплексом ЧСТМП. Снижение энергетических затрат относительно традиционной схемы комплекса ЧСТСП совместно с ТН достигало 50% по сравнению с традиционной схемой. Поскольку энергоэффективность и даже структура оптимальной технологической схемы из-за необратимого характера процесса являются функцией исходного состава питания, то в настоящей работе исследование проводили для исходного состава с содержанием АС 30 мас. %, существенно отличающимся от исследованного

¹ Введенные обозначения смотрите в списке сокращений в конце статьи / See the list of abbreviations at the end of the article for the introduced designations.

ранее. Известно, что значительное влияние на энергетическую эффективность комплексов с ЧСТМП оказывает режим бокового отбора, то есть положение тарелки бокового отбора (N_p) и количество бокового отбора (V). Целью данной работы является исследование влияния этих параметров на энергетическую эффективность комплекса с ЧСТМП с ТН открытого типа и выявление условий их совместного применения.

РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ

Все расчеты проводили в программном комплексе Aspen Plus V10. Как и в работе [4], для моделирования парожидкостного равновесия в данной работе применялось уравнение Non-Random Two Liquid, а для учета неидеальности паровой фазы, возникающей при сжатии паров, уравнение Редлиха–Квонга.

Для всех вариантов схем было рассмотрено разделение исходной смеси со скоростью подачи питания АС–АА 1000 кг/ч, температурой 97 °С, давлением 105.0 кПа [3].

Давление верха колонн было принято равным 101.3 кПа [3], рассматривались реальные тарелки с КПД 0.65 и перепадом давления 0.1013 кПа на каждой. Расчеты выполнялись в проектно-проверочном режиме с закрепленным качеством продуктовых потоков. Концентрацию АС и АА в продуктовых потоках задавали постоянной и равной 99.5 мас. %; концентрацию БП, равной 99.9 мас. %.

Критерием оптимизации являлась минимальная суммарная тепловая нагрузка на кипятильники Q_{total} . В общем виде этот критерий может быть записан как (1):

$$Q_{total} = \sum_{i=1}^K Q_{reb}^i, \quad (1)$$

где K – общее число ректификационных колонн, i – номер колонны в схеме, Q_{reb}^i – нагрузка на кипятильник i -той колонны.

Технологические схемы с ТН существенно отличаются от традиционных, поскольку в них присутствуют «горячие» компрессоры, а также дополнительное теплообменное оборудование. Привод компрессора может осуществляться с использованием как водяного пара, так и электроэнергии. Для сравнения энергетических затрат в технологических системах с разнородным оборудованием можно применить критерий расхода условного топлива или экономическую оценку эксплуатационных затрат. В случае применения ТН в процессах ректификации авторы [23] предложили простую формулу (2) для оценки энергетической эффективности через приведенные энергетические затраты (Q_{red}):

$$Q_{red} = Q_{total} + 3W_{comp}, \quad (2)$$

где Q_{total} – суммарные энергетические затраты в кипятильниках колонн, кВт, а W_{comp} – потребляемая компрессором мощность, кВт.

Для сравнения вариантов организации процесса, включающего разнородное технологическое оборудование, обычно используют критерий полных годовых затрат (TAC), выражающийся формулой (3):

$$TAC = OC + \frac{CC}{OT}, \quad (3)$$

где OT – срок эксплуатации установки в годах, CC – капитальные затраты, USD, OC – эксплуатационные затраты, USD/год.

Поскольку изменение сроков эксплуатации существенно влияет на величину TAC , то расчеты критерия проводились для 10- и 20-летнего периодов.

Для вычисления капитальных и эксплуатационных затрат были использованы средства Aspen Process Economic Analyzer V10.1. Цены на энергоносители приведены в табл. 1.

Таблица 1. Цены на энергоносители в USD
Table 1. Utility costs (USD)

Энергоноситель / Utility	Цена, USD / Cost, USD
Электричество, кВт Electricity, kW	0.0775
Оборотная вода, т Cooling water, t	0.03
Греющий пар, кг Steam, kg	0.017

Моделирование и оптимизация традиционной схемы ЭР

Традиционная схема ЭР (Схема I) представлена на рис. 1. Схема состоит из двух колонн – колонны ЭР (ЭК) и колонны регенерации разделяющего агента (РК).

Для традиционного варианта организации ЭР по алгоритму, предложенному в [17], были определены оптимальные рабочие параметры. В процессе оптимизации определяли общее число тарелок в обеих колоннах, положение тарелок подачи питания в ЭК и РК, положение тарелки подачи разделяющего агента в ЭК, количество потока разделяющего агента. Для оптимизации использовали встроенные инструменты программного комплекса Aspen Plus, реализующие последовательный перебор параметров и оптимизацию по методу последовательного квадратичного программирования (SQP).

Итоговые рабочие параметры традиционной схемы ЭР при заданном составе (30 мас. % АС) исходной смеси представлены в табл. 2.

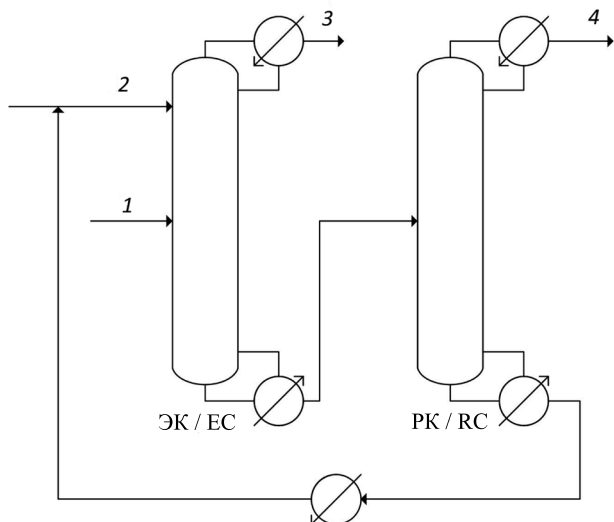


Рис. 1. Традиционная схема ЭР смеси АС–АА с разделяющим агентом БП:

ЭК – колонна ЭР; РК – колонна регенерации разделяющего агента. Здесь и далее: 1 – исходная смесь АС и АА; 2 – разделяющий агент БП; 3 – АС; 4 – АА.

Fig. 1. Conventional ED scheme of AAL–AAC mixture with BP as the entrainer. EC is ED column, RC is entrainer regeneration column. Hereinafter: (1) feed, (2) entrainer, (3) AAL, (4) AAC.

Таблица 2. Рабочие параметры традиционной схемы ЭР
Table 2. Operating parameters of conventional ED scheme

Рабочие параметры Operating parameters	Колонны / Columns	
	ЭК / EC	РК / RC
N_{total}	46	28
N_F	35	17
N_S	12	–
Q_{reb} , кВт / Q_{reb} , kW	299	375
Q_{cond} , кВт / Q_{cond} , kW	–275	–357
R	3.7	4.0
T_{cond} , °C	96.81	104.0
T_{reb} , °C	128.4	145.9
P_{cond} , кПа / P_{cond} , kPa	101.3	101.3
P_{reb} , кПа / P_{reb} , kPa	105.8	104.0
S , кг/ч / S , kg/h	2450	–
T_S , °C	120.0	–

Моделирование и оптимизация комплекса с ЧСТМП

Авторами [16] предложено эмпирическое правило, согласно которому применение комплексов с ЧСТМП нецелесообразно, когда флегмовое число в РК значительно меньше 1. В рассматриваемом случае значение $R_{PK} = 4.0$, что предполагает достижение значительного энергетического эффекта. На основе традиционной схемы ЭР было проведено моделирование схемы с ЧСТМП (Схема II), представленной на рис. 2.

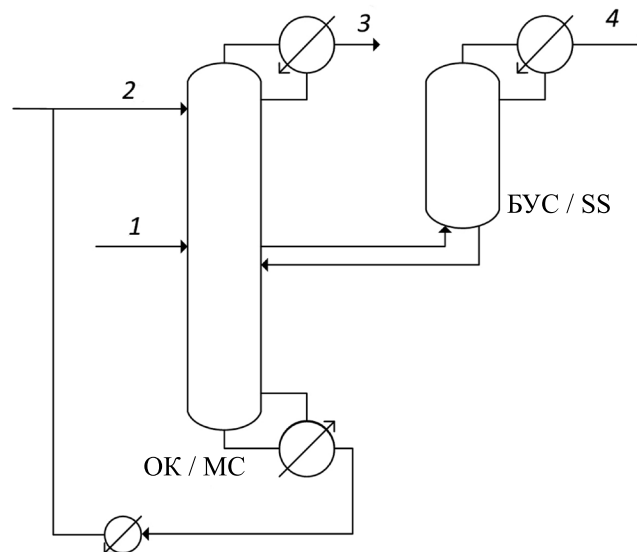


Рис. 2. Комплекс с ЧСТМП: ОК – основная колонна; БУС – боковая укрепляющая секция.

Fig. 2. PTCDS scheme: MC – main column, SS – side section.

Схема на рис. 2 получена преобразованием традиционной схемы (рис. 1) по алгоритмам [11, 12, 24]. Она представляет собой одну сложную колонну с боковой укрепляющей секцией (БУС). На следующем этапе по алгоритму, предложенному в [17] определяли величины потока и уровня подачи бокового отбора. По данным ряда исследований оптимальные значения других переменных, такие как номер тарелки подачи питания, тарелки подачи разделяющего агента и потока разделяющего агента в схемах с ЧСТМП не отличаются или отличаются незначительно от соответствующих параметров традиционной схемы [12, 24], поэтому оптимизация комплексов с ЧСТМП для снижения размерности задачи по этим параметрам может не проводиться. Для ряда тарелок бокового отбора при помощи инструмента SQP Optimization определяли его величину, соответствующую минимальной нагрузке на кипятильник Q_{reb} . Полученные на этом этапе данные приведены в табл. 3.

Таблица 3. Оптимизация рабочих параметров комплекса ЧСТМП. Размерность Q – [кВт]
 Table 3. Operation parameters optimization of PTCDS. Q units are [kW]

N_V	$V, \text{ кг/ч}$ $V, \text{ kg/h}$	$Q_{\text{reb}}^{\text{MC}}$	$Q_{\text{cond}}^{\text{SS}}$	R^{MC}	$Q_{\text{cond}}^{\text{SS}}$	R^{SS}
44	1721	611	-337	4.4	-162	1.4
45	1645	569	-335	4.2	-157	1.4
46	1622	532	-339	3.9	-154	1.4
47	1612	522	-327	3.7	-156	1.2
48	1692	521	-318	3.6	-161	1.3
49	1858	528	-311	3.4	-176	1.5
50	2214	560	-313	3.4	-206	1.9
51	2901	608	-305	3.4	-262	2.8

Видно, что минимальный поток бокового отбора наблюдается при значении $N_V = 47$, а минимальные энергетические затраты в кипятильнике – при $N_V = 48$. Оптимальные рабочие параметры комплекса представлены в табл. 4.

Таблица 4. Оптимальные рабочие параметры комплекса ЧСТМП
 Table 4. Optimal operating parameters of PTCDS

Рабочие параметры Operating parameters	Колонны / Columns	
	ОК / MC	БУС / SS
N_{total}	57	17
N_F	35	–
N_V	48	–
N_S	12	–
$V, \text{ кг/ч} / V, \text{ kg/h}$	1692	–
$Q_{\text{reb}}, \text{ кВт} / Q_{\text{reb}}, \text{ kW}$	521	–
$Q_{\text{cond}}, \text{ кВт} / Q_{\text{cond}}, \text{ kW}$	-318	-161
R	3.6	1.3
$T_{\text{cond}}, \text{ }^\circ\text{C}$	96.8	104.9
$T_{\text{reb}}, \text{ }^\circ\text{C}$	147.0	–
$P_{\text{cond}}, \text{ кПа} / P_{\text{cond}}, \text{ kPa}$	101.3	104.0
$P_{\text{reb}}, \text{ кПа} / P_{\text{reb}}, \text{ kPa}$	107.5	–
$S, \text{ кг/ч} / S, \text{ kg/h}$	2450	–
$T_S, \text{ }^\circ\text{C}$	120.0	–

Совместное применение комплекса с ЧСТМП и ТН

На основе комплекса с ЧСТМП, рассмотренного выше, была синтезирована схема совместного использования комплекса ЧСТМП с ТН открытого типа (Схема III), представленная на рис. 3.

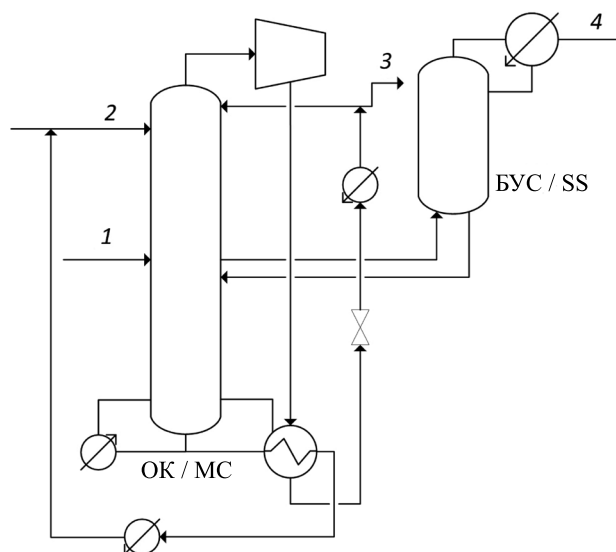


Рис. 3. Комплекс с ЧСТМП и ТН открытого типа:
 ОК – основная колонна; БУС – боковая укрепляющая секция.
 Fig. 3. PTCDS scheme with open type:
 MC – main column, SS – side section.

Авторы [25] для предварительной оценки эффективности применения ТН на основе выражения КПД тепловой машины Карно и уравнения для расчета теплоты, требуемой для разделения, предложили коэффициент эффективности ТН C_{ef} :

$$C_{\text{ef}} = \frac{Q_{\text{reb}}}{A} = \frac{T_{\text{reb}}}{(T_{\text{reb}} - T_{\text{cond}})}, \quad (4)$$

где Q_{reb} – нагрузка на кипятильник колонны, A – термодинамическая работа, T_{cond} и T_{reb} – абсолютные температуры в конденсаторе и кипятильнике ректификационной колонны, соответственно.

Исходя из данных табл. 4, для комплекса с ЧСТМП $C_{ef} = 8.3$. В работе [25] отмечается, что применение ТН может быть целесообразно при значениях $C_{ef} > 5$.

Отметим, что при выводе выражения (4) изначально был принят ряд допущений и, в частности, он предназначался для оценки применимости ТН при разделении зеотропных смесей. Несмотря на это, в ряде работ критерий используется и в случаях применения комплексов с ЧСТМП с ТН при разделении азеотропных смесей, в том числе ЭР [20, 26, 27].

В качестве рабочего тела для ТН выбран паровой поток основной колонны, так как его теплосодержание больше, чем у верхнего парового потока БУС. При этом, необходимая для эффективного обогрева куба колонны температура парового потока обеспечивается при степени сжатия в компрессоре, равной 5.2. Известно, что высокая экономическая эффективность от применения ТН достигается при степени сжатия в компрессоре менее 3 [28, 29]. Таким образом, для корректного сравнения рассматриваемых схем необходима экономическая оценка, которая приведена далее.

Для ряда положений тарелки бокового отбора N_V и соответствующего им оптимального количества бокового отбора V , рассмотренного при оптимизации комплекса с ЧСТМП, подобраны рабочие параметры ТН открытого типа. Результаты представлены в табл. 5.

В данном случае Q_{reb}^{MC} и Q_{cond}^{MC} – нагрузки на вспомогательный кипятильник и конденсатор, соответственно, W_{comp} – потребляемая компрессором мощность, Q_{HE} – передаваемая в теплообменнике ТН теплота, Q_{red}^{HP} – приведенные энергетические затраты, определенные по формуле (2).

Таблица 5. Зависимость рабочих параметров схем с ТН от N_V и V . Размерность Q и W – [кВт]
Table 5. Operation parameters' dependence on N_V and V for HP schemes. Q and W units are [kW]

N_V	V , кг/ч V , kg/h	Q_{reb}^{MC}	Q_{cond}^{SS}	R^{MS}	W_{comp}	Q_{HE}	Q_{red}^{HP}
44	1721	295	-86	4.4	62	331	481
45	1645	273	-81	4.2	60	302	453
46	1622	269	-74	3.9	54	276	431
47	1612	267	-71	3.7	52	263	423
48	1692	274	-68	3.6	49	248	421
49	1858	287	-66	3.4	48	240	431
50	2214	335	-66	3.4	47	230	476
51	2901	409	-65	3.4	46	224	547

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные на основе расчетных данных (табл. 3 и 5) итоговые зависимости нагрузок на кипятильник комплекса с ЧСТМП и приведенных энергозатрат при применении комплекса с ЧСТМП совместно с ТН от положения и количества бокового отбора показаны на рис. 4.

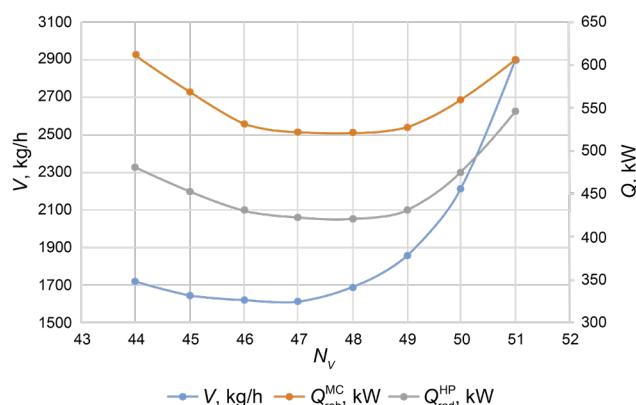


Рис. 4. Энергозатраты комплекса с ЧСТМП (Q_{cond}^{MC} , кВт), приведенные энергозатраты комплекса с ЧСТМП совместно с ТН (Q_{red}^{HP} , кВт) и оптимальное количество бокового отбора (V , кг/ч) в зависимости от положения тарелки бокового отбора (N_V).

Fig. 4. PTCDS heat duty (Q_{cond}^{MC} , kW), PTCDS with HP reduced heat duty (Q_{red}^{HP} , kW) and V , kg/h dependence on side-stream stage (N_V).

Из табл. 5 и рис. 4 видно, что с увеличением N_V уменьшается эффективность применения ТН, однако минимальные приведенные энергетические затраты Q_{red}^{HP} наблюдаются при том же значении N_V и V , что и минимальные энергетические затраты комплекса ЧСТМП без ТН. Сравнение энергетических затрат традиционной схемы и наилучших вариантов комплекса с ЧСТМП и совместного применения комплекса с ЧСТМП и ТН представлено в табл. 6.

Как уже указывалось, для корректного сравнения рассмотренных решений необходимо произвести экономическую оценку. Для этого необходимо оценить некоторые конструкционные параметры ректификационных колонн – диаметр колонны (D) и высоту тарельчатой (насадочной) части (H), а также выбрать тип контактных устройств. Такая оценка была произведена с использованием программного комплекса Aspen Plus, результаты представлены в табл. 7.

Общие результаты экономической оценки, проведенной средствами Aspen Process Economic

Analyzer, и рассчитанные по формуле 3 на основании этих результатов значения ТАС приведены в табл. 8.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование показало, что для процесса ЭР смеси АС (30 мас. %) и АА (70 мас. %) с *n*-бутилпропионатом применение комплекса с ЧСТМП и такого же комплекса совместно с ТН позволяет значительно снизить энергетические затраты. При этом установлено, что изменение основных переменных (уровень подачи и величина потока бокового отбора),

Таблица 6. Энергетические затраты оптимальных схем с ЧСТМП (II) и совместным применением ЧСТМП и ТН (III) в сравнении с традиционной схемой ЭР (I)

Table 6. Energy duties of optimal PTCDS (II) and PTCDS with HP (III) schemes in comparison with conventional ED scheme (I)

Энергетические затраты Energy duties	Схема / Scheme		
	I	II	III
Q_{total} , кВт / Q_{total} , kW	674	521	274
W_{comp} , кВт / W_{comp} , kW	0	0	49
Q_{red} , кВт / Q_{red} , kW	674	521	421
ΔQ_{red} , %	0	22	38

Таблица 7. Конструкционные параметры колонн
Table 7. Construction parameters of columns

Колонна / Column	ЭК / EC	ПК / RC	ОК / MC	БУС / SS
D , м	0.6	0.75	0.7	0.45
H , м	19	11	23	3
Тип контактного устройства / Tray/pack type	Клапанные тарелки / Valve trays	Клапанные тарелки / Valve trays	Клапанные тарелки / Valve trays	Кольца Рашига / Raschig rings

Таблица 8. Экономическая оценка
Table 8. Economical evaluation

Экономические параметры Economic parameters	Схема / Scheme		
	I	II	III
OC , USD/год / OC , USD/year	222420	179493	132675
ΔOC , %	0	19.3	40.3
CC , USD	502400	368000	1077100
TAC_{10}	272660	216293	240385
TAC_{20}	247540	197893	186530
ΔTAC_{10} , %	0	20.7	11.8
ΔTAC_{20} , %	0	20.1	24.7

влияющих на энергетическую эффективность комплексов с ЧСТМП, влияет и на эффективность применения ТН в комплексе. Однако в рассмотренном случае минимальные энергетические затраты достигаются при одинаковых условиях в комплексах ЧСТМП как с ТН, так и без него. Снижение концентрации в исходной смеси компонента, выделяемого в дистилляте ЭК, приводит к снижению энергетиче-

ской и экономической эффективности применения ТН. По результатам экономической оценки по критерию полных годовых затрат при времени функционирования установки в 10 лет целесообразнее использовать комплекс с ЧСТМП без ТН. Однако при времени функционирования в 20 лет схема с ТН обеспечивает снижение полных годовых затрат на 24%, а комплекс ЧСТМП без ТН – на 20.1%.

Обозначения / Abbreviations

A – термодинамическая работа / thermodynamic work;

C_{ef} – коэффициент эффективности / efficiency factor;

CC – капитальные затраты / capital costs;

D – диаметр / diameter;

H – высота / height;

N – номер тарелки / plate number;

K – общее число колонн / total number of columns;

OC – эксплуатационные затраты / operating costs;

OT – срок эксплуатации установки / operating time;

P – абсолютное давление / absolute pressure;

Q – тепловая нагрузка / heat duty;

R – флегмовое число / reflux ratio;

S – расход разделяющего агента / flow rate of an entrainer;

T – температура / temperature;

TAC – полные годовые затраты / total annual costs;

$TAC10$ – полные годовые затраты при сроке функционирования в 10 лет / total annual costs with a 10-year operating life;

$TAC20$ – полные годовые затраты при сроке функционирования в 20 лет / total annual costs with a 20-year operating life;

V – боковой отбор / side flow;

W – потребляемая мощность / power consumption;

АС – аллиловый спирт / AAL – allyl alcohol;

АА – аллилацетат / AAC – allyl acetate;

БУС – боковая укрепляющая секция / SS – side section;

БП – *n*-бутилпропионат / BP – *n*-butyl propionate;

ОК – основная колонна / MC – main column;

РК – колонна регенерации экстрактивного агента / RC – entrainer regeneration column;

ТН – тепловой насос / HP – heat pump;

ЧСТМП – частично связанные тепловые и материальные потоки / PTCDS – partially thermally coupled distillation sequence;

ЭК – колонна экстрактивной ректификации / EC – extractive distillation column;

ЭР – экстрактивная ректификация / ED – extractive distillation.

Индексы / Indices

comp – компрессор / compressor;

cond – конденсатор / condenser;

i – номер колонны / numbers of the column;

F – питание / feed;

HE – теплообменник / heat exchanger;

HP – тепловой насос / heat pump;

min – минимальное значение / the minimum value;

opt – оптимальное значение / optimal value;

reb – кипятильник / reboiler;

red – приведенный / reduced;

S – экстрактивный агент / entrainer;

total – суммарный.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Государственного задания РТУ МИРЭА, тема № 0706-2020-0020.

Acknowledgments

The study was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the state task of MIREA – Russian Technological University, No. 0706-2020-0020.

Вклад авторов

П.С. Клаузнер – планирование и проведение исследований, анализ материалов исследований, написание текста статьи;

Д.Г. Рудаков – проведение исследований, анализ материалов исследований;

Е.А. Анохина – руководство и научное консультирование;

А.В. Тимошенко – формулировка научной концепции работы, общее руководство.

Authors' contributions

P.S. Klauzner – planning and conducting research, analyzing research materials, writing the manuscript;

D.G. Rudakov – conducting research, analyzing research materials;

E.A. Anokhina – management and scientific consulting;

A.V. Timoshenko – formulation of the scientific concept, general management.

*Авторы заявляют об отсутствии конфликтов интересов.
The authors declare no conflicts of interest.*

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Григорьев А.А., Кацман Е.А. Аллилацетат и синтезы на его основе. *Катализ и нефтехимия*. 2001;7:27–39.
2. Анохина Е.А., Кардона К., Писаренко Ю.А., Саксонова О.И., Пономарев В.Н. Основные этапы разработки совмещенных процессов на примере НСРРП получения аллилового спирта бутанолизом аллилацетата. Часть 1. *Хим. пром.* 1996;9:3–9.
3. Анохина Е.А., Кардона К., Писаренко Ю.А., Саксонова О.И., Пономарев В.Н. Основные этапы разработки совмещенных процессов на примере НСРРП получения аллилового спирта бутанолизом аллилацетата. Часть 2. *Хим. пром.* 1996;11:689–693.
4. Клаузнер П.С., Рудаков Д.Г., Анохина Е.А., Тимошенко А.В. Применение комплекса с частично связанными тепловыми и материальными потоками и тепловых насосов в экстрактивной ректификации смеси аллиловый спирт – аллилацетат с *n*-бутилпропионатом. *Химия и технол. орг. вещ.* 2020;4(16):42–56.
5. You X., Rodriguez-Donis I., Gerbaud V. Improved design and efficiency of the extractive distillation process for acetone–methanol with water. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2015;54(1):491–501. <https://doi.org/10.1021/ie503973a>
6. Luyben W.L. Distillation column pressure selection. *Sep. Purif. Technol.* 2016;168:62–67. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2016.05.015>
7. Luyben W.L. Control of heat-integrated extractive distillation processes. *Comp. Chem. Eng.* 2018;111:267–277. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.12.008>
8. Tiverios P.G., van Brunt V. Extractive distillation solvent characterization and shortcut design procedure for methylcyclohexane–toluene mixtures. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2000;39(6):1614–1623. <https://doi.org/10.1021/ie990654k>
9. Петлюк Ф.Б., Серафимов Л.А. *Многокомпонентная ректификация, теория и расчет*. М.: Химия; 1983. 304 с.
10. Петлюк Ф.Б., Платонов В.М., Славинский Д.М. Термодинамически оптимальный способ разделения многокомпонентных смесей. *Хим. пром.* 1965;3:206–211.
11. Тимошенко А.В., Моргунов А.В., Анохина Е.А. Синтез схем экстрактивной ректификации азеотропных смесей в комплексах колонн с частично связанными тепловыми и материальными потоками. *Теор. основы хим. технол.* 2007;41(6):649–654.
12. Анохина Е.А. Энергосбережение в процессах экстрактивной ректификации. *Вестник МИТХТ*. 2013;8(5):3–19.
13. Wang C., Guang C., Cui Y., Wang C., Zhang Z. Compared novel thermally coupled extractive distillation sequences for separating multi-azeotropic mixture of acetone/nitrile/benzene/methanol. *Chem. Eng. Res. Des.* 2018;136:513–528. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.06.017>

REFERENCES

1. Grigoriev A.A., Katsman E.A. Allylacetate and Syntheses on Its Basis. *Kataliz i neftekhimiya = Catalysis and Petrochemistry*. 2001;7:27–39 (in Russ.).
2. Anokhina E.A., Kardona K., Pisarenko Y.A., Saksonova O.I., Ponomarev V.N. The main stages of the combined processes development on the example of NSRRP for the production of allyl alcohol by butanolysis of allyl acetate. Part 1. *Khim. Prom. = Chem. Ind.* 1996;9:3–9 (in Russ.).
3. Anokhina E.A., Kardona K., Pisarenko Y.A., Saksonova O.I., Ponomarev V.N. The main stages of the combined processes development on the example of NSRRP for the production of allyl alcohol by butanolysis of allyl acetate. Part 2. *Khim. Prom. = Chem. Ind.* 1996;11:689–693 (in Russ.).
4. Klauzner P.S., Rudakov D.G., Anokhina E.A., Timoshenko A.V. Application of a complex with patricianly coupled thermal and energy flows and heat pumps in extractive distillation of allyl alcohol–allyl acetate mixture with *n*-butylpropionate. *Chem. Technol. of Org. Subst.* 2020;4(16):42–56 (in Russ.).
5. You X., Rodriguez-Donis I., Gerbaud V. Improved design and efficiency of the extractive distillation process for acetone–methanol with water. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2015;54(1):491–501. <https://doi.org/10.1021/ie503973a>
6. Luyben W.L. Distillation column pressure selection. *Sep. Purif. Technol.* 2016;168:62–67. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2016.05.015>
7. Luyben W.L. Control of heat-integrated extractive distillation processes. *Comp. Chem. Eng.* 2018;111:267–277. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.12.008>
8. Tiverios P.G., van Brunt V. Extractive distillation solvent characterization and shortcut design procedure for methylcyclohexane–toluene mixtures. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2000;39(6):1614–1623. <https://doi.org/10.1021/ie990654k>
9. Petlyuk F.B., Serafimov L.A. *Mnogokomponentnaya rektifikatsiya. Teoriya i raschet (Distillation of Multicomponent Mixtures. Theory and Calculation)*. Moscow: Khimiya; 1983. 304 p. (in Russ.).
10. Petlyuk F.B., Platonov B.M., Slavinskii D.M. The thermodynamic optimal methods of separation of multicomponent mixtures. *Khim. Prom. = Chem. Ind.* 1965;3:206–211 (in Russ.).
11. Timoshenko A.V., Morgunov A.V., Anokhina E.A. Flowsheet synthesis for 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>

14. Gutierrez-Guerra R., Segovia-Hernández J.G., Hernandez S., Bonilla-Petriciolet A., Hernández H. Design and Optimization of Thermally Coupled Extractive Distillation Sequences. *Comp. Aid. Chem. Eng.* 2009;26:189–194. [https://doi.org/10.1016/S1570-7946\(09\)70032-X](https://doi.org/10.1016/S1570-7946(09)70032-X)
15. Yang A., Sy Y., Chien I.L., Jin S., Yan C., Wei S., Shen W., *et al.* Investigation of an energy-saving double-thermally coupled extractive distillation for separating ternary system benzene/toluene/cyclohexane. *Energy.* 2019;186:115756. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.07.086>
16. Anokhina E., Timoshenko A. Criterion of the energy effectiveness of extractive distillation in the partially thermally coupled columns. *Chem. Eng. Res. Des.* 2015;99:65–175. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2015.03.006>
17. Anokhina E.A., Timoshenko A.V., Akishin A.Y., Remizova A.V. Benzene purification from thiophene using dimethylformamide as an entrainer in thermally coupled extractive distillation columns. *Chem. Eng. Res. Des.* 2019;146(5):391–403. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.04.003>
18. Gerbaud V., Rodriguez-Donis I., Hegelyc L., Langc P., Denis F., Youe X.Q. Review of extractive distillation. Process design, operation, optimization and control. *Chem. Eng. Res. Des.* 2019;141:229–271. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.09.020>
19. You X., Rodriguez-Donis I., Gerbaud V. Reducing process cost and CO₂ emissions for extractive distillation by double-effect heat integration and mechanical heat pump. *App. Energy.* 2016;166:128–140. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.01.028>
20. Luo H., Bildea C.S., Kiss A.A. Novel Heat-pump-assisted extractive distillation for bioethanol purification. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2015;54(7):2208–2213. <https://doi.org/10.1021/ie504459c>
21. Wang C., Zhuang Y., Liu L., Zhang L., Du J. Heat pump assisted extractive distillation sequences with intermediate-boiling entrainer. *App. Therm. Eng.* 2021;186:116511. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2020.116511>
22. Gu J., You X., Tao C., Li J. Analysis of heat integration, intermediate reboiler and vapor recompression for the extractive distillation of ternary mixture with two binary azeotropes. *Chem. Eng. Process.* 2019;142:107546. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2019.107546>
23. Aurangzeb Md., Jana A.K. Vapor recompression with interreboiler in a ternary dividing wall column: Improving energy efficiency and savings, and economic performance. *App. Therm. Eng.* 2018;147:1009–1023. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2018.11.008>
24. Тимошенко А.В., Анохина Е.А., Рудаков Д.Г., Тимофеев В.С., Тациевская Г.И., Матюшенкова Ю.В. Энергосбережение в ректификации с использованием комплексов со связанными потоками. *Вестник МИТХТ.* 2011;6(4):28–39.
25. Plesu V., Bonet-Ruiz A.E., Bonet J., Llorens J. Simple equation for suitability of heat pump use in distillation. *Comp. Aided Chem. Eng.* 2014;33:1327–1332. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63455-9.50056-8>
26. Patraşcu I., Bildea C.S., Kiss A.A. Eco-efficient Downstream Processing of Biobutanol by Enhanced Process Intensification and Integration. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 2018;6(4):5452–5461. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.8b00320>
27. Shi P., Zhang Q., Zeng A., Ma Y., Yuan X. Eco-efficient vapor recompression-assisted pressure-swing distillation process for the separation of a maximum-boiling azeotrope. *Energy.* 2020;196(13):117095. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117095>
- [Original Russian Text: Timoshenko A.V., Morgunov A.V., Anokhina E.A. Flowsheet synthesis for extractive distillation of azeotropic mixtures in systems consisting of columns with partially coupled heat and material flows. *Teor. Osnovy Khim. Tekhnol.* 2007;41(6):649–655 (in Russ.).]
12. Anokhina E.A. Energy saving in extractive distillation. *Vestnik MITHT (Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.)* 2013;8(5):3–19. (in Russ.).
13. Wang C., Guang C., Cui Y., Wang C., Zhang Z. Compared novel thermally coupled extractive distillation sequences for separating multi-azeotropic mixture of acetonitrile/benzene/methanol. *Chem. Eng. Res. Des.* 2018;136:513–528. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.06.017>
14. Gutierrez-Guerra R., Segovia-Hernández J.G., Hernandez S., Bonilla-Petriciolet A., Hernández H. Design and Optimization of Thermally Coupled Extractive Distillation Sequences. *Comp. Aid. Chem. Eng.* 2009;26:189–194. [https://doi.org/10.1016/S1570-7946\(09\)70032-X](https://doi.org/10.1016/S1570-7946(09)70032-X)
15. Yang A., Sy Y., Chien I.L., Jin S., Yan C., Wei S., Shen W., *et al.* Investigation of an energy-saving double-thermally coupled extractive distillation for separating ternary system benzene/toluene/cyclohexane. *Energy.* 2019;186:115756. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.07.086>
16. Anokhina E., Timoshenko A. Criterion of the energy effectiveness of extractive distillation in the partially thermally coupled columns. *Chem. Eng. Res. Des.* 2015;99:65–175. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2015.03.006>
17. Anokhina E.A., Timoshenko A.V., Akishin A.Y., Remizova A.V. Benzene purification from thiophene using dimethylformamide as an entrainer in thermally coupled extractive distillation columns. *Chem. Eng. Res. Des.* 2019;146(5):391–403. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.04.003>
18. Gerbaud V., Rodriguez-Donis I., Hegelyc L., Langc P., Denis F., Youe X.Q. Review of extractive distillation. Process design, operation, optimization and control. *Chem. Eng. Res. Des.* 2019;141:229–271. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.09.020>
19. You X., Rodriguez-Donis I., Gerbaud V. Reducing process cost and CO₂ emissions for extractive distillation by double-effect heat integration and mechanical heat pump. *App. Energy.* 2016;166:128–140. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.01.028>
20. Luo H., Bildea C.S., Kiss A.A. Novel Heat-pump-assisted extractive distillation for bioethanol purification. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2015;54(7):2208–2213. <https://doi.org/10.1021/ie504459c>
21. Wang C., Zhuang Y., Liu L., Zhang L., Du J. Heat pump assisted extractive distillation sequences with intermediate-boiling entrainer. *App. Therm. Eng.* 2021;186:116511. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2020.116511>
22. Gu J., You X., Tao C., Li J. Analysis of heat integration, intermediate reboiler and vapor recompression for the extractive distillation of ternary mixture with two binary azeotropes. *Chem. Eng. Process.* 2019;142:107546. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2019.107546>
23. Aurangzeb Md., Jana A.K. Vapor recompression with interreboiler in a ternary dividing wall column: Improving energy efficiency and savings, and economic performance. *App. Therm. Eng.* 2018;147:1009–1023. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2018.11.008>
24. Timoshenko A.V., Anokhina E.A., Rudakov D.G., Timofeev V.S., Tatsievskaya G.I., Matyushenkova Yu.V. Power saving in distillation using complexes with coupled flows. *Vestnik MITHT (Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.)* 2011;6(4):28–39 (in Russ.).

28. Reay D.A., Macmichael D. *Heat pumps. Design and applications*. UK: Pergamon Press; 1979. 302 p.

29. Kiss A.A., Ferreira C.A. *Heat Pumps in Chemical Process Industry*. US-FL: CRC Press; 2016. 442 p. <https://doi.org/10.1201/9781315371030>

25. Plesu V., Bonet-Ruiz A.E., Bonet J., Llorens J. Simple equation for suitability of heat pump use in distillation. *Comp. Aided Chem. Eng.* 2014;33:1327–1332. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63455-9.50056-8>

26. Patraşcu I., Bildea C. S., Kiss A. A. Eco-efficient Downstream Processing of Biobutanol by Enhanced Process Intensification and Integration. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 2018;6(4):5452–5461. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.8b00320>

27. Shi P., Zhang Q., Zeng A., Ma Y., Yuan X. Eco-efficient vapor recompression-assisted pressure-swing distillation process for the separation of a maximum-boiling azeotrope. *Energy*. 2020;196(13):117095. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117095>

28. Reay D.A., Macmichael D. *Heat pumps. Design and applications*. UK: Pergamon Press; 1979. 302 p.

29. Kiss A.A., Ferreira C.A. *Heat Pumps in Chemical Process Industry*. US-FL: CRC Press; 2016. 442 p. <https://doi.org/10.1201/9781315371030>

Об авторах:

Клаузнер Павел Сергеевич, ассистент кафедры химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр. Вернадского, д. 86). E-mail: klauzner@mirea.ru. ResearcherID AAJ-7842-2021, <https://orcid.org/0000-0001-5844-549X>

Рудаков Данила Григорьевич, к.т.н., доцент кафедры химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр. Вернадского, д. 86). E-mail: rudakov@mitht.ru. Scopus Author ID 37018548000, ResearcherID M-5241-2014, <https://orcid.org/0000-0002-9892-7909>

Анохина Елена Анатольевна, к.т.н., доцент кафедры химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр. Вернадского, д. 86). E-mail: anokhina.ea@mail.ru. Scopus Author ID 6701718055, ResearcherID E-5022-2016.

Тимошенко Андрей Всеволодович, д.т.н., профессор кафедры химии и технологии основного органического синтеза Института тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр. Вернадского, д. 86). E-mail: timoshenko@mitht.ru. Scopus Author ID 56576076700, ResearcherID Y-8709-2018.

About the authors:

Pavel S. Klauzner, Assistant, Department of Chemistry and Technology of Basic Organic Synthesis, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, MIREA – Russian Technological University (86, Vernadskogo pr., Moscow, 119571, Russia). E-mail: klauzner@mirea.ru. ResearcherID AAJ-7842-2021, <https://orcid.org/0000-0001-5844-549X>

Danila G. Rudakov, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Department of Chemistry and Technology of Basic Organic Synthesis, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, MIREA – Russian Technological University (86, Vernadskogo pr., Moscow, 119571, Russia). E-mail: rudakov@mitht.ru. Scopus Author ID 37018548000, ResearcherID M-5241-2014, <https://orcid.org/0000-0002-9892-7909>

Elena A. Anokhina, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Department of Chemistry and Technology of Basic Organic Synthesis, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, MIREA – Russian Technological University (86, Vernadskogo pr., Moscow, 119571, Russia). E-mail: anokhina.ea@mail.ru. Scopus Author ID 6701718055, ResearcherID E-5022-2016.

Andrey V. Timoshenko, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Department of Chemistry and Technology of Basic Organic Synthesis, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, MIREA – Russian Technological University (86, Vernadskogo pr., Moscow, 119571, Russia). E-mail: timoshenko@mitht.ru. Scopus Author ID 56576076700, ResearcherID Y-8709-2018.

Поступила: 19.04.2021; получена после доработки: 27.05.2021; принята к опубликованию: 10.06.2021.
The article was submitted: April 19, 2021; approved after reviewing: May 27, 2021; accepted for publication: June 10, 2021.