

## ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ ПІНЧ-АНАЛІЗУ ДЛЯ СИНТЕЗУ ОПТИМАЛЬНИХ СХЕМ ГАЗООЧИЩЕННЯ

Безносик Ю. О., Бугаєва Л. М.

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ПИНЧ-АНАЛИЗА ДЛЯ СИНТЕЗА ОПТИМАЛЬНЫХ СХЕМ ГАЗООЧИСТКИ

Безносик Ю. А., Бугаева Л. Н.

## APPLICATION OF THE PINCH ANALYSIS METHODS FOR SYNTHESIS OF OPTIMAL GAS CLEANING SCHEMES

Beznosyk Yu., Bugaieva L.

Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»  
Київ, Україна  
[Beznosyk.yurii@iit.kpi.ua](mailto:Beznosyk.yurii@iit.kpi.ua)

*Розглянуто метод синтезу оптимальних масообмінних мереж для очищення газів, що відходять. Метод синтезу заснований на вирішенні завдання змішаного цілочисельного нелінійного програмування (MINLP). Рішення математичної моделі синтезу масообмінних мережі (MINLP) зводиться до вирішення двох послідовних завдань: завдання нелінійного програмування (NLP) та задачі цілочислового лінійного програмування (MILP), яка описує технологічні зв'язки в масообмінних системах. Запропонований підхід реалізований в програмному середовищі VBA. Як приклад вирішена задача синтезу системи газоочищення від сірководню.*

**Ключові слова:** масообмінні мережі, очищення газів, пінч-аналіз, нелінійне програмування, цілочислове лінійне програмування

*Рассмотрен метод синтеза оптимальных массообменных сетей для очистки отходящих газов. Метод синтеза основан на решении задачи смешанного целочисленного нелинейного программирования (MINLP). Решение математической модели синтеза массообменной сети (MINLP) сводится к решению двух последовательных задач: задачи нелинейного программирования (NLP) и задачи целочисленного линейного программирования (MILP), которая описывает технологические связи в массообменной системе. Предложенный подход реализован в программной среде VBA. В качестве примера решена задача синтеза системы газоочистки от сероводорода.*

**Ключевые слова:** массообменные сети, очистка газов, пинч-анализ, нелинейное программирование, целочисленное линейное программирование

*A method for the synthesis of optimal mass transfer networks for the purification of waste gases is considered. The synthesis method is based on solving a mixed integer nonlinear programming (MINLP) problem. The solution of the mathematical model of the synthesis of a mass transfer network (MINLP) is reduced to the solution of two sequential problems: the nonlinear programming problem (NLP) and the integer linear programming problem (MILP), which describes the technological connections in the mass transfer system. The proposed approach is implemented in the VBA software environment. As an example, the problem of synthesis of a gas purification system from hydrogen sulfide has been solved.*

**Keywords:** mass transfer networks, gas cleaning, pinch analysis, nonlinear programming, and integer linear programming

## ДОСЛІДЖЕННЯ СИНТЕЗУ МАСООБМІННИХ МЕРЕЖ

Синтез систем розділення добре досліджена проблема тому, що процеси розділення представляють вагому частину повних загальних інвестиційних та щорічних експлуатаційних витрат підприємства. Розрізняють два основних підходи до рішення задач синтезу систем розділення: еволюційний, коли деякий початковий варіант поліпшується із використанням евристик та підхід на базі методів математичного програмування. Інтеграція технологій переробки з метою мінімізації викидів разом із розробкою самих процесів, націленою на зменшення цих викидів, стала важливою альтернативою в управлінні викидами. Для рішення будь-якої задачі розділення, проектувальник має здійснити вибір необхідних масообмінних процесів (абсорбції, адсорбції, хемосорбції і т.д.) та поєднати їх у системі очищення. Ця задача й складає зміст синтезу масообмінних мереж (ММ). Декілька класів задач синтезу ММ були розглянуті у літературі [1–3]. Однак, всі ці дослідження обмежені ізотермічними мережами, в яких усі введені потоки залишають мережу без будь-якої температурної зміни. В багатьох додатках вигідно мати потік на різних температурних рівнях по всій ММ. Оптимальна температурна конфігурація для кожного потоку по всій ММ має бути відома. Це дає додаткові степені свободи для оптимізації мережі, що проектується. Взагалі, синтез тепло - та масообмінних мереж чутливий до вибору оптимальних масообмінних температур по всій мережі.

Масообмінна мережа може бути визначена як система масообмінних апаратів (абсорберів, хемосорберів та т. ін.). Очищення газових викидів крізь цю мережу розділення може бути виконано при використанні потоків, які вже існують у технологічній схемі. Таким чином, експлуатаційні витрати розділення стають такими ж важливими, як і капітальні витрати. Оскільки для більшості задач розділення може бути використано багато видів масових агентів, задача синтезу термодинамічно надійних та економічно оптимальних схем розділення набуває комбінаторної складності. Рішення таких задач синтезу доцільно проводити, використовуючи принципи Пінч-технології, згідно з якою пропанується на основі лінійних відношень рівноваги розробити таблицю інтервалів складу, яка аналогічна температурній інтервальній таблиці задачі синтезу теплообмінних мереж [3,4]. Мінімально допустимий склад представляється різницею між багатими та бідними потоками. Була прийнята складова концепція ламаної, яка також основана на Пінч-технології. Запропонований підхід дозволяє зробити декомпозицію початкової задачі на підмережі. Задача синтезу масообмінної мережі була описана через декомпозицію, яка заснована на принципах Пінч-технології. Точки Пінч були ідентифіковані і було розроблено формулювання задачі змішано – цілочисельного нелінійного програмування (*MINLP*), для того аби визначити мінімальне число порцій масообміну.

При синтезі масообмінних мереж вводимо багаті потоки згідно з їх компонентами, які можуть бути небажаними або забороненими втратами, або цінним різновидом багатьох допоміжних бідних потоків (Рис. 1). Інтеграція цих потоків націлена на очищення багатих потоків та відновлення розчинників та розчинів при мінімальних експлуатаційних витратах (вартість бідних потоків).

## ЗАДАЧА СИНТЕЗУ СХЕМ ГАЗООЧИЩЕННЯ

Задача синтезу ММ може бути представлена наступним чином [1, 2, 5]. Необхідно синтезувати масообмінну мережу для пар бідних та багатих потоків

оптимальної топології та інвестиційної вартості, яка задовольняє технологічним специфікаціям для багатих та бідних потоків, враховуючи:

– набір  $R_i$  багатих потоків процесу, їх масові норми потоку  $G_i$ , їх початкові склади, відносно компонента, який повинен бути видалений,  $y_i^s$  та їх бажаний склад виходу  $y_i^t$  у відповідності з охороною навколишнього середовища або економічними аспектами;

– набір  $L_j$  бідних потоків, їх початкові склади  $x_j^s$  та їх вихідні склади  $x_j^t$ ;

– відношення рівноваги для розподілу компонента, який передається між багатими потоками  $i$  та бідними потоками  $j$ :  $y_j = \Phi_{ij}(x_j)$ ;

– тип масообмінника для кожної пари багатих та бідних потоків.

Зроблено наступні припущення: масові норми кожного потоку слід вважати постійними по всій мережі; рівновага компонентів лінійна  $y_i = m_{ij}x_j + b_{ij}$ ; розглядається масообмін протиточного типу; не дозволяється масообмін між багатими потоками; мережа працює під постійним тиском.

Тоді задача синтезу масообмінної мережі може бути сформульована як задача змішаного цілочисельного нелінійного програмування. Модель складається з рівнянь, в яких описані:

1) Повна масова рівновага в початковому розділенні кожного потоку:

$$\sum_{(j \in LM_i), s} g_{ijs}^1 - G_i = 0 \quad i \in R \quad (1)$$

$$\sum_{(i \in RM_j), s} l_{ijs}^1 - L_j = 0 \quad j \in L \quad (2)$$

2) Повна масова рівновага в змішувачі, який стоїть перед кожним масообмінником для кожного потоку:

$$g_{ijs}^1 + \sum_{(j \in RJ_{ij}), s'} g_{jj'ss'}^{Bi} - g_{ijs}^E = 0 \quad (i, j) \in M \quad (3)$$

$$l_{ijs}^1 + \sum_{(l \in LJ_{ij}), s'} l_{jj'ss'}^{Bi} - l_{ijs}^E = 0 \quad (i, j) \in M \quad (4)$$

3) Повна масова рівновага в апараті поділу після кожного обмінника для кожного потоку:

$$g_{ijs}^o + \sum_{(j \in RJ_{ij}), s'} g_{jj'ss'}^{Bi} - g_{ijs}^E = 0 \quad (i, j) \in M \quad (5)$$

$$l_{ijs}^o + \sum_{(l \in LJ_{ij}), s'} l_{jj'ss'}^{Bi} - l_{ijs}^E = 0 \quad (i, j) \in M \quad (6)$$

4) Масова рівновага для компонента, який передається, у змішувачі, який стоїть перед кожним обмінником для кожного потоку:

$$g_{ijs}^1 y_i^s + \sum_{(j \in RJ_{ij}), s'} g_{jj'ss'}^{Bi} y_{ij's'}^o - g_{ijs}^E y_{ij's'}^1 = 0 \quad (i, j) \in M \quad (7)$$

$$l_{ijs}^1 x_i^s + \sum_{(l \in LJ_{ij}), s'} l_{jj'ss'}^{Bi} x_{ij's'}^o - l_{ijs}^E x_{ij's'}^1 = 0 \quad (i, j) \in M \quad (8)$$

5) Масова рівновага для компоненту, який передається в кінцевому змішувачі кожного потоку:

$$\sum_{(j \in LM_i), s} g_{ijs}^o y_{ijs}^o - G_i y_i^T = 0 \quad i \in R \quad (9)$$

$$\sum_{(j \in RM_i), s} I_{ijs}^o x_{ijs}^o - L_i x_i^T = 0 \quad j \in L \quad (10)$$

6) Масова рівновага для компоненту, який передається в кожному потенційному обміннику для кожного потоку:

$$g_{ijs}^E (y_{ijs}^l - y_{ijs}^o) - M_{ijs} = 0 \quad (i, j) \in M \quad (11)$$

$$I_{ijs}^E (x_{ijs}^1 - x_{ijs}^o) - M_{ijs} = 0 \quad (i, j) \in M \quad (12)$$

7) Обмеження які гарантують, що рухома сила для масопередачі буде більшою ніж нуль:

$$m_{ij} (x_{ijs}^o + \varepsilon_{ij}) + b_{ij} - y_{ijs}^l \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (13)$$

$$m_{ij} (x_{ijs}^l + \varepsilon_{ij}) + b_{ij} - y_{ijs}^o \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (14)$$

7) Рівняння зв'язку між апаратами масообмінної мережі:

$$M_{ijs} - y_{ijs} U \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (15)$$

$$g_{ijs}^E - y_{ijs} U \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (16)$$

$$g_{ijs}^l - y_{ijs} U \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (17)$$

$$g_{ijs}^o - y_{ijs} U \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (18)$$

$$\sum_{(j' \in RJ_{ij}), s'} g_{ij'ss'}^{Bi} - y_{ijs} U \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (19)$$

$$I_{ijs}^E - y_{ijs} U \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (20)$$

$$I_{ijs}^l - y_{ijs} U \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (21)$$

$$I_{ijs}^o - y_{ijs} U \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (22)$$

$$\sum_{(j' \in LJ_{ij}), s'} g_{ij'ss'}^{Bi} - y_{ijs} U \leq 0 \quad (i, j) \in M \quad (23)$$

8) Цільова функція:

$$\min z = \sum_{j \in L} (AC_j)(L_j) + \sum_{(i,j) \in Mp,s} (AC_{st})(N_{st,ijs}) + \sum_{(i,j) \in Mt,s} (AC_h)(H_{st,ijs}) \quad (24)$$

Рівняння (1)–(23), разом із цільовою функцією (24) визначають модель змішано-цілочисельного нелінійного програмування (MINLP), для рішення якої, використовується узагальнена криволінійна декомпозиція. Згідно з нею задача розбивається на дві підзадачі. Перша використовує модель нелінійного програмування (NLP), а друга головна – модель MILP, де визначені мережеві пари. Виконуючи ітерації між цими двома підзадачами, метод збігається до оптимальної мережі в термінах експлуатаційних та основних інвестиційних витрат. Досягнення

глобального оптимуму не можна гарантувати через те, що задача не є опуклою. Для цього можуть застосовуватися спеціальні алгоритми глобальної оптимізації.

### ПРИКЛАД РОЗРАХУНКУ СИСТЕМИ ГАЗООЧИЩЕННЯ

Запропонована модель *MINLP* синтезу ММ, заснована на розгляді структури масообмінної мережі, де прийняті до розгляду всі можливі варіанти масообмінних процесів. Модель передбачає систематичний підхід для визначення повної вартості оптимальної мережі та розмірів устаткування.

Програма для розрахунку моделі реакційної масообмінної мережі очищення потоків від сірководню реалізована в пакеті *VBA*. Програма розрахована на середнього користувача, має простий та зрозумілий інтерфейс, проста та легка у використанні. Програма дозволяє користувачеві змінювати ти чи інші вхідні дані та параметри розрахунку схеми без великих зусиль. Це дає можливість використовувати даний програмний продукт для оцінки впливу вхідних даних на вихідні дані.

Для перевірки роботи програми було розраховано систему газоочищення від сірководню  $H_2S$  у виробництві штучної бавовни [6–8]. У таблицях 1 та 2 наведені склади багатих та бідних потоків.

Таблиця 1. Багаті потоки в реакційній масообмінній мережі

Номер потоку	$G_i$ (м <sup>3</sup> /с)	$y^s_i$ (кмоль/м <sup>3</sup> )	$y^t_i$ (кмоль/м <sup>3</sup> )
$R_1$	0,87	$1,3 \cdot 10^{-5}$	$2,2 \cdot 10^{-7}$
$R_2$	0,10	$0,9 \cdot 10^{-5}$	$2,2 \cdot 10^{-7}$

Таблиця 2. Бідні потоки в реакційній масообмінній мережі

Номер потоку	$L^{up}_j$ (м <sup>3</sup> /с)	$x^s_j$ (кмоль/м <sup>3</sup> )	$x^{t,up}_j$ (кмоль/м <sup>3</sup> )
$S_1$	$2,0 \cdot 10^{-4}$	0	$2,2 \cdot 10^{-7}$
$S_2$	$\infty$	$2 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-3}$
$S_3$	$\infty$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$

Результати розрахунку моделі *MINLP* наведені у таблиці 3.

Таблиця 3. Потоки синтезованої реакційної масообмінної мережі

Потік	Витрата, м <sup>3</sup> /с	Поч. склад	Кінц. склад
$R_1$	0,87	1,3E-5	2,2E-7
$R_2$	0,1	0,9E-5	2,2E-7
$S_1$	1,19E-4	0	0,1
$S_3$	0,0113	1E-6	3E-6

По отриманих результатах була побудована Пінч-діаграма, використовуючи яку було отримано Пінч-склад потоків та проаналізовано процес видалення сірководню з багатих потоків.

### ВИСНОВКИ

Розглянуто повну змішано цілочисельну нелінійну модель реакційної масообмінної мережі. Розроблений алгоритм розрахунку моделі *MINLP*, який реалізовано в програмному пакеті на мові *VBA*. За допомогою розробленого програмного забезпечення розраховано модель для очищення потоків від сірководню.

### ЛІТЕРАТУРА

1. El-Halwagi M. M. Pollution Prevention through Process Integration. Alabama – Academic press, 1997. 318 p.
2. El-Halwagi M. M., Manousiouthakis V. Synthesis of mass-exchange networks. *AIChE J*, 1989. Vol. 35, № 8. P. 1233–1244.
3. Основы интеграции тепловых процессов // Смит Р., Клемеш Й., Товажнянский Л. Л. и др. Харьков: НТУ "ХПИ", 2000. 456 с.
4. Статюха Г. О., Жезовський Я., Безносик Ю. О. Використання методу Пінч-аналізу і модульної декомпозиції для синтезу теплообмінних систем. *Наукові вісті НТУУ „КПІ”*, 2002. № 3. С.24–31.
5. Бугаєва Л. М., Бойко Т. В., Безносик Ю. О. Системний аналіз хіміко-технологічних комплексів: Підручник. Київ, Інтерсервіс, 2017. 254 с.
6. Papalexandri K. P., Pistikopoulos E. N., Floudas A. Mass Exchange Networks for waste minimization: A Simultaneous Approach. *Trans I Chem. E.*, 1994. Vol. 72, № 5A. P.279–294.
7. Безносик Ю. О., Статюха Г. О., Гриненко А. Ю. Синтез оптимальних схем газоочищення. *Вісник Технологічного університету Поділля*, 2003. С. 245–249.
8. Безносик Ю., Бугаєва Л., Статюха Г. Синтез реактивних масообмінних мереж. *Вісник Вінницького політехнічного інституту*, 2005. № 6. С. 30–35.

### АВТОМАТИЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ СТВОРЕННЯ КІНЕТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ: ЗАСОБИ ТА ЗАСТОСУВАННЯ

Бугаєва Л. М., Вільбой М. О.

### АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА СОЗДАНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ: ИНСТРУМЕНТЫ И ПРИМЕНЕНИЕ

Бугаева Л. Н., Вильбой М. А.

### AUTOMATION OF THE PROCESS OF CREATING KINETIC MODELS FOR CHEMICAL PROCESSES: TOOLS AND APPLICATIONS

Bugaieva L., Vilboi M.

Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»  
Київ, Україна,  
[bugaeva\\_l@ukr.net](mailto:bugaeva_l@ukr.net)