

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт природных ресурсов
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
Профиль Химическая технология топлива и газа
Кафедра химической технологии топлива и химической кибернетики

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Моделирование технологии алкилирования бензола низшими олефинами с использованием методов вычислительной гидродинамики

УДК 66.023:2.095:532.5:51

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Беккер Александр Викторович		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ивашкина Елена Николаевна	д.т.н., про- фессор		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Чулков Николай Александрович	к.т.н., доцент		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
	Юрьев Егор Михайлович	к.т.н., доцент		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять <i>глубокие</i> естественно-научные, математические и инженерные <i>знания</i> для создания <i>новых</i> материалов
P2	Применять <i>глубокие знания</i> в области современных технологий химического производства для решения <i>междисциплинарных</i> инженерных задач
P3	Ставить и решать <i>инновационные</i> задачи <i>инженерного анализа</i> , связанные с созданием материалов и изделий, с использованием системного анализа и моделирования объектов и процессов химической технологии
P4	Разрабатывать химико-технологические процессы, <i>проектировать</i> и использовать <i>новое</i> оборудование для создания материалов, конкурентоспособных на <i>мировом</i> рынке
P5	Проводить теоретические и экспериментальные <i>исследования</i> в области создания <i>новых</i> материалов, современных химических технологий, нанотехнологий
P6	Внедрять, <i>эксплуатировать</i> современные высокотехнологичные линии автоматизированного производства, обеспечивать их <i>высокую эффективность</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды
<i>Универсальные компетенции</i>	
P7	Использовать <i>глубокие знания</i> по <i>проектному менеджменту</i> для ведения <i>инновационной</i> инженерной деятельности с учетом юридических аспектов защиты интеллектуальной собственности
P8	<i>Активно</i> владеть <i>иностранным языком</i> на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности
P9	Эффективно работать индивидуально, в качестве <i>члена и руководителя группы</i> , состоящей из специалистов различных направлений и квалификаций, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность <i>следовать корпоративной культуре</i> организации
P10	Демонстрировать <i>глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов</i> инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах <i>устойчивого развития</i>
P11	<i>Самостоятельно учиться</i> и непрерывно <i>повышать квалификацию</i> в течение всего периода профессиональной деятельности

Министерство образования и науки Российской Федерации
 федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт природных ресурсов
 Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
 Профиль Химическая технология топлива и газа
 Кафедра химической технологии топлива и химической кибернетики

УТВЕРЖДАЮ:
 Зав. кафедрой
 _____ Юрьев Е.М.

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

магистерской диссертации

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ4Б	Беккеру Александру Викторовичу

Тема работы:

Моделирование технологии алкилирования бензола низшими олефинами с использованием методов вычислительной гидродинамики	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	от 09.03.2016 №1750

Срок сдачи студентом выполненной работы:	1 июня 2016 г.
--	----------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Установка алкилирования бензола этиленом ОАО «Ангарский завод полимеров», установка алкилирования бензола пропиленом ОАО «Омский каучук». Режим работы установок – непрерывный, круглогодичный.</p>
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке;</i></p>	<p>Процессы алкилирования бензола низшими олефинами: технологическая схема, технологический режим установок, химизм и механизм протекания процесса. Программные продукты для моделирования движения жидкости и газа. Исследование гидродинамики аппаратов процессов алкилирования. Гидродинамический режим реакторов. Смешение реагентов в реакторе. Выводы и рекомендации по модернизации устройств, оптимизации</p>

заключение по работе).	процессов.
------------------------	------------

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)	
--	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	доцент, к.т.н., Криницына Зоя Васильевна
Социальная ответственность	доцент, к.т.н., Чулков Николай Александрович

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:

<p>1 Современное состояние технологий алкилирования бензола низшими олефинами и средств моделирования движения жидкости и газов</p> <p>1.1 Современное состояние технологии алкилирования бензола этиленом</p> <p>1.1 Современное состояние технологии алкилирования бензола пропиленом</p> <p>1.2 Обзор современных компьютерных программ для моделирования движения жидкости и газа</p>

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ивашкина Елена Николаевна	д.т.н., профессор		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Беккер Александр Викторович		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ4Б	Беккеру Александру Викторовичу

Институт	ИПР	Кафедра	ХТТ и ХК
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	Химическая технология топлива и газа

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Материально-технические ресурсы – 288,75 Финансовые – 207000,0 Человеческие ресурсы – 146686,5
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Лист А4 – 200 шт. Тетрадь – 1 шт. Ручка – 2 шт.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Общая система налогообложения – 30% налог во внебюджетные фонды

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Значение степени проработанности научного проекта $B_{\text{сум}} = 64$ и уровня имеющихся знаний у разработчика $B_{\text{сум}} = 54$ позволяет говорить о перспективности выше среднего готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации.
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Составлен календарный план проекта, проведен расчет бюджета НИИ, составлен список возможных рисков
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Определены ресурсная ($I_m=4,45$), финансовая ($I_f=0,89$) и экономическая ($I_s=4,7$) эффективность исследования, а также показатель эффективности разработки ($I_p=4,2$).

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Альтернативы проведения НИ
3. График проведения и бюджет НИ
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры менеджмента	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Беккер Александр Викторович		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 2ДМ4Б	ФИО Беккеру Александру Викторовичу
------------------------	--

Институт	ИПР	Кафедра	ХТТ и ХК
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	Химическая технология топлива и газа

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<i>1. Характеристика объекта исследования: Установка алкилирования бензола этиленом ОАО «Ангарский завод полимеров», установка алкилирования бензола пропиленом ОАО «Омский каучук»</i>	<i>Исследование гидродинамики реакторов алкилирования бензола низшими олефинами.</i>
---	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<i>1. Анализ выявленных вредных факторов:</i>	<ul style="list-style-type: none"> -физико – химическая природа фактора, его связь с разрабатываемой темой; -действие вредных веществ на организм человека (дизельное топливо, оксид алюминия, этанол, гексан, бензол, серная кислота, формалин); -приведение допустимых норм с необходимой размерностью (с ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); -предлагаемые средства защиты – индивидуальные защитные средства – одноразовые перчатки, халат, очки).
<i>2. Анализ выявленных опасных факторов:</i>	<ul style="list-style-type: none"> -термические опасности (муфельная печь, сушильный шкаф); -электробезопасность (наличие химически активной и органической среды, разрушающей изоляцию и токоведущие части электрооборудования); -пожаровзрывобезопасность (причины – наличие легковоспламеняющихся жидкостей, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).
<i>3. Охрана окружающей среды:</i>	<ul style="list-style-type: none"> -анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); -анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы).
<i>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</i>	<ul style="list-style-type: none"> -перечень возможных ЧС на объекте; -выбор наиболее типичной ЧС; -разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; -разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; -разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.
<i>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</i>	<ul style="list-style-type: none"> -специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; -организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.

Перечень графического материала:

<i>При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию (обязательно для специалистов и магистров)</i>	
---	--

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ЭБЖ	Чулков Н. А.	к.т.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Беккер Александр Викторович		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 106 с., 25 рисунков, 32 таблицы, 49 источников, 3 приложения.

Ключевые слова: вычислительная гидродинамика, геометрическая модель, математическое моделирование, реактор, смеситель, алкилирование, пропилен, этилен, этилбензол, кумол.

Объектами исследования являются установки алкилирования бензола пропиленом и бензола этиленом.

Цель работы – численное моделирование и сравнительный анализ конструкций реакторов различных установок алкилирования с помощью методов вычислительной гидродинамики.

В работе использовались методы вычислительной гидродинамики, программный комплекс *FlowVision*.

В ходе работы определена оптимальная конструкция смесительного устройства реактора алкилирования бензол этиленом, реакторов алкилирования бензола пропиленом и бензола этиленом.

Создание геометрических моделей проектируемого оборудования осуществлено на основании чертежей, предоставленных представителями нефтехимических предприятий.

Часть результатов работы принята в качестве рекомендации к внедрению на промышленном предприятии.

В дипломной работе представлено обоснование экономической эффективности разработки в рамках предоставления результатов исследования в качестве инжиниринговых услуг предприятию.

Результатами выполненной работы являются цветковые и векторные схемы.

.

Введение.....	12
1 Современное состояние технологий алкилирования бензола низшими олефинами и средств моделирования движения жидкости и газов.....	14
1.1 Современное состояние технологии алкилирования бензола этиленом.....	14
1.1 Современное состояние технологии алкилирования бензола пропиленом	17
1.2 Обзор современных компьютерных программ для моделирования движения жидкости и газа	19
2 Объекты и методы исследования	24
2.1 Технологическая схема отделения алкилирования бензола этиленом.....	24
2.2 Технологическая схема отделения алкилирования бензола пропиленом.....	25
3. Исследование гидродинамики реактора алкилирования бензола пропиленом	29
3.2 Задание физической модели реактора алкилирования бензола пропиленом .	29
3.3 Генерация расчетной сетки	31
3.4 Проверка расчетной сетки на сходимость.....	32
3.5 Результаты исследования гидродинамики реактора алкилирования бензола пропиленом	33
4 Исследование гидродинамики смесительного устройства реактора алкилирования бензола этиленом.....	36
4.1 Задание физической модели смесительного устройства	37
4.5 Результаты исследования гидродинамики смесительного устройства	39
4.5.1 Моделирование ввода катализатора в первый патрубок, бензола во второй	40
4.5.2 Моделирование ввода бензола в первый патрубок, катализатора во второй	42
5. Исследование гидродинамики реактора алкилирования бензола этиленом...	44
5.1 Задание физической модели реактора алкилирования бензола этиленом....	44
5.1 Генерация расчетной сетки	44
5.2 Проверка расчетной сетки на сходимость.....	44

5.3 Результаты исследования гидродинамики реактора алкилирования бензола этиленом.....	45
6 Финансовый менеджмент и ресурсоэффективность	48
6.1 Потенциальные потребители результатов исследования	48
6.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	48
6.3 Диаграмма Исикавы.....	50
6.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	52
6.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	53
6.6 Инициация проекта	53
6.7 Планирование управления научно-техническим проектом.....	55
6.8 Иерархическая структура работ проекта	56
6.9 Контрольные события проекта	56
6.10 План проекта.....	57
6.11 Бюджет научного исследования	61
6.12 Организационная структура проекта	63
6.13 Матрица ответственности	64
6.14 План управления коммуникациями проекта.....	64
6.15 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	65
6.16 Оценка абсолютной эффективности исследования.....	65
6.17 Оценка сравнительной эффективности исследования	69
7 Социальная ответственность	72
7.1 Введение.....	72
7.2 Анализ опасных и вредных факторов	73
7.2.1 Вредные вещества	73
7.2.2 Освещение.....	75
7.2.3 Вибрации и шум	75
7.2.4 Микроклимат помещений	76
7.3 Анализ опасных факторов производственной среды.....	76

7.3.1 Термические опасности	76
7.3.2 Электробезопасность	77
7.3.3 Пожаровзрывоопасность	77
7.4 Охрана окружающей среды	78
7.4.1 Воздействие на атмосферу	78
7.4.2 Воздействие на гидросферу	79
7.4.3 Воздействие на литосферу	80
7.5 Защита в чрезвычайных ситуациях	80
7.6 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	81
Заключение	82
Список публикаций студента.....	84
Список литературы	88
Приложение А Реактор алкилирования бензола пропиленом.....	95
Приложение Б Реактор алкилирования бензола этиленом	96
Приложение В.....	98

Введение

Бурное развитие отечественного нефтехимического производства происходило во второй половине двадцатого века, и к началу 90-х годов пик российской нефтехимии сменился продолжительной рецессией. Если представить уровень технологичности отечественного производства в виде графика, по горизонтальной оси представить временную шкалу, а по вертикали индекс химического производства в % к 1991 году, то из графика будет видно, что рецессия 90-х годов сменяется продолжительным ростом.

Обеспечить рост химического производства возможно двумя путями:

- применение прогрессивных технологий;
- оптимизация действующих производств.

Очевидно, что оптимизация действующих производственных фондов наиболее актуальна для предприятий, выпускающих нефтехимическую продукцию более 40 лет на изношенных производственных мощностях.

В данной работе рассматриваются две технологические установки производства алкилароматических соединений, это установка получения этилбензола ОАО «Ангарского завода полимеров» и установка получения изопропилбензола ОАО «Омский каучук».

Этилбензол широко используется в нефтехимической промышленности в качестве промежуточного продукта при получении стирола, сырья для производства полистирола, АБС-пластиков и синтетических каучуков. В настоящее время мощность мирового производства этилбензола достигает 45 млн. т в год [1].

Изопропилбензол используется в качестве промежуточного продукта в процессах получения ацетона и фенола, только для этих целей производится свыше 8,5 млн. т в год изопропилбензола.

Численное исследование гидродинамики процесса смешения с применением методов вычислительной гидродинамики позволит сделать вывод о целесообразности реконструкции смесительного оборудования реакторного блока

установки получения этилбензола, а определить оптимальную конструкцию реактора алкилирования.

Целью данной работы стало численное моделирование и сравнительный анализ конструкций реакторов различных установок алкилирования с помощью методов вычислительной гидродинамики.

1 Современное состояние технологий алкилирования бензола низшими олефинами и средств моделирования движения жидкости и газов

1.1 Современное состояние технологии алкилирования бензола этиленом

Спрос на этилбензол большей частью покрывается за счет этилбензола, полученного алкилированием бензола этиленом в присутствии катализаторов кислотного типа. При этом реакция алкилирования протекает с выделением тепла.

В промышленности применяются два различных процесса:

1. Жидкофазное алкилирование: алкилирование в жидкой фазе по реакции Фриделя-Крафтса в присутствии кислотных катализаторов $AlCl_3$, BF_3 , $FeCl_3$, $ZrCl_4$, $SnCl_4$, H_3PO_4 (реализовано в процессах BASF, CdF Chimie, Dow, Monsanto, UCC и т.д.)

2. Газофазное алкилирование: процесс протекает в газовой фазе на алюмосиликатах (реализовано в процессах Koppers, Philips и UOP, или на цеолитах в процессе Mobil-Badger и UOP) [2].

На большинстве предприятий-эмитетов этилбензола в России реализован жидкофазный процесс получения этилбензола на алюмохлористом катализаторе.

Алкилирование бензола этиленом в присутствии хлорида алюминия осуществляют в технологическом процессе фирмы «Monsanto Co», а также в России.

Первый газофазный процесс алкилирования бензола этиленом с использованием катализатора на основе среднепористого цеолита типа ZSM-5 был внедрен компанией «Mobil-Badger» в 1980 г. Катализатор обеспечивает высокую селективность по этилбензолу (ЭБ), однако процесс протекает при температурах 380 - 420 °С и, следовательно, является энергозатратным. Высокое мольное отношение бензол/этилен (Б/Э) в реакционной смеси, необходимое

для 100 %-й конверсии этилена, приводит к дополнительным затратам на рецикл бензола.

Технология жидкофазного алкилирования (ЖФА) бензола этиленом с использованием катализатора на основе широкопористого цеолита типа Y была внедрена в 1990 г. компаниями «UOP» и «Lummus». Процесс протекает при температурах 200 - 260 °С, характеризуется длительным межрегенерационным пробегом катализатора, при сохранении его высокой активности. Однако, крупные поры цеолита способствуют образованию продуктов поликонденсации. Это приводит к закоксовыванию катализатора и его дезактивации [3].

Позднее, компаниями «Chevron», «Polimeri Europe» и «Mobil» были разработаны катализаторы на основе цеолита β , имеющим высокую активность, и MCM-22, обладающим более высокой селективностью, по сравнению с катализатором, содержащим цеолит типа Y.

В мире существует 70 установок по производству этилбензола, из них 17 до сих пор работают на гомогенном катализаторе – хлориде алюминия, 28 применяют газофазную технологию, с использованием цеолитных катализаторов, и еще 25 – жидкофазную [4].

Преимущества жидкофазного процесса перед газофазным следующие:

- снижение энергозатрат;
- увеличение выхода ЭБ.
- уменьшение выхода побочных продуктов;
- увеличение срока службы и межрегенерационного пробега катализатора.

ЖФА бензола этиленом получило большое распространение. Процесс протекает при температуре, давлении и мольном отношении Б/Э, поддерживающих сырье в зоне алкилирования в жидкой фазе. Одним из условий осуществления ЖФА является подача алкилирующего агента (этилен) в реактор полностью растворенного в бензоле [4].

Большинство цеолитсодержащих катализаторов, применяемых в процессах

ЖФА бензола этиленом, характеризуются быстрой дезактивацией из-за образования кокса в результате отложения на активных центрах цеолита крупных молекул, медленно диффундирующих из пористой структуры цеолита. Поэтому катализаторы, содержащие крупнопористые цеолиты типов γ , β или морденит, обладают наилучшими свойствами в этом процессе [5, 6].

Некоторые цеолитсодержащие катализаторы одинаково эффективны в процессах алкилирования и трансалкилирования. Одним из таких является катализатор на основе цеолита типа β . Высокая каталитическая активность катализатора проявляется, когда цеолит типа β находится в H^+ -форме [7, 8].

Являясь последовательно-параллельным процессом, алкилиралкилирование бензола этиленом может идти через образование диэтилбензолов (ДЭБ) и триэтилбензолов (ТЭБ) вплоть до получения гексаэтилбензола. Увеличение содержания олефина в реакционной массе сдвигает процесс в сторону образования полиэтилбензолов. Для селективного получения ЭБ необходимо проводить реакцию в избытке

бензола, поддерживая в сырье высокое мольное отношение Б/Э.

Одновременно, с основной реакцией алкилирования, в присутствии избытка бензола, происходят реакции трансалкилирования бензола ДЭБ и ТЭБ с образованием вторичного ЭБ [9].

Алкилирование бензола в процессе «Lummu Liest inc.-Vnical-UOP» осуществляется в жидкой фазе на стационарном слое цеолитного катализатора. Продолжительность работы катализатора до регенерации составляет 1...2 года. Выход этилбензола достигает 99,5% при чистоте 99,9%. По сравнению с процессом алкилирования на $AlCl_3$ при таком алкилировании нет вредных отходов, а оборудование изготавливается из углеродистой стали. Лицензировано 13 таких установок. В жидкофазном процессе «Mobil/Badger EB Max», лицензируемом «Raytheon Engineers and Constructor. Inc.», используется катализатор фирмы «Mobil» на основе цеолита MCM-22.

Парофазный процесс алкилирования (и трансалкилирования в одном реакторе) на цеолите ZSM-5 фирмы «Mobil» осуществляется в процессе фирмы

«Badger Co.. Inc». Преимуществом данной технологии является возможность применения газов с концентрацией этилена до 10%. Выходы продуктов в процессе практически совпадают со стехиометрическими. Тепло, затраченное на процесс и выделившееся при реакции, почти полностью используется для выработки пара.

Совмещенный реакционно – ректификационный процесс. «ABB Lumus Global» предусматривает совмещение реактора алкилирования на цеолите, размещенном в специальных пакетах в верхнем аппарате, с колонной отгонки бензола в нижней части.

Непрореагировавшие этилен и бензол, уходящие из верхней части зоны алкилирования, после конденсации бензола поступают в доводящий реактор, где оставшийся этилен реагирует с бензолом на таблетированном цеолитном катализаторе. В качестве сырья в процессе может быть использована этиленовая фракция с содержанием этилена до 10 %. Выход этилбензола превышает 99,5 % при чистоте продукта 99,9 % [24].

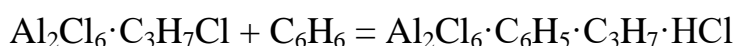
1.1 Современное состояние технологии алкилирования бензола пропиленом

Алкилирование бензола пропиленом производится в присутствии катализатора - хлористого алюминия - при мольном соотношении бензола к пропилену в пределах 1:0,3-0,33.

Первой стадией процесса является присоединение олефина к хлористому алюминию в присутствии хлористого водорода:

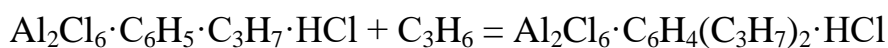


Затем присоединяется бензол и образуется тройной комплекс:

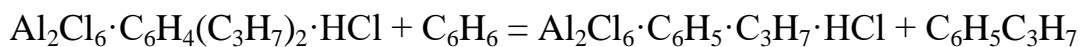


После образования тройного комплекса реакция протекает по следующей схеме:

а) присоединяется олефин к комплексу:

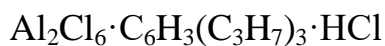
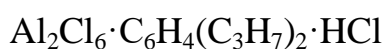


б) реакция обмена между комплексом и исходным углеводородом (бензолом) с образованием алкилбензола:



Все эти комплексы находятся в состоянии подвижного равновесия, т.е. алкильные радикалы непрерывно переходят из одного комплексного соединения в другое.

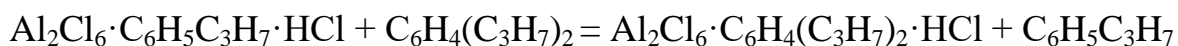
Хлористый алюминий может образовывать тройные комплексы не только с одним, но и с двумя, тремя и так далее алкильными радикалами:



В результате присоединения олефина образуются комплексы с еще большим числом алкильных радикалов, которые при обменной реакции с исходным углеводородом (бензолом) дают полиалкилбензолы:



Комплексы могут вступать в обменную реакцию не только с бензолом, но и с продуктами реакции, например, с диалкилбензолами, тогда происходит процесс деалкилирования:



Чем больше концентрация алкильных радикалов в среде, окружающей комплекс, тем больше алкильных радикалов будет содержаться в комплексных соединениях хлористого алюминия, и тем больше будет образовываться полиалкилбензолов. Следовательно, с увеличением отношения поглощенного олефина к бензолу реакция идет в сторону образования полиалкилбензолов.

Таким образом, в результате протекающих реакций образуется ИПБ и вся гамма алкилбензолов и, в то же время, меняется углеводородная часть комплекса.

Этот процесс продолжается до тех пор, пока не установится совершенно определенный состав продуктов реакции, который обуславливается

только отношением алкильных радикалов к бензольным ядрам в реакционной смеси и не зависит от состава исходного сырья.

Реакция алкилирования бензола пропиленом осуществляется в алкиляторе при температуре не выше 130 °С и давлении не выше 0,4 МПа (4 кгс/см²).

Тепловой эффект реакции алкилирования равен 621 ккал/кг поглощенного пропилена.

1.1 Обзор современных компьютерных программ для моделирования движения жидкости и газа

Для моделирования движения жидкостей и газов существует множество математических программ, к наиболее известным программным продуктам для решения задач движения жидкостей и газов относятся *Comsol Multiphysics*, *Autodesk Simulation CFD*, *Fluent* и российский аналог *FlowVision*.

COMSOL Multiphysics - программная среда, обеспечивающая все этапы моделирования (определение геометрических параметров, описание физики, визуализация), позволяющая моделировать любые физические процессы, которые могут быть представлены в виде системы дифференциальных уравнений в частных производных. Предопределенные *Multiphysics*-шаблоны предназначены для решения многих распространенных типов задач. К данному пакету также существует набор дополнительных модулей для решения различных прикладных задач.

Доступные модули:

Chemical Reaction Engineering Module - продукт для моделирования химических реакций. С помощью данного компонента пользователи могут создать виртуальную лабораторную среду, позволяющую изучать химические реакции в различных условиях. Пользователи могут контролировать множество различных параметров, влияющих на ход реакции. Данный продукт полностью соответствует стандарту *CAPE-OPEN*. Продукт может быть использован для

моделирования задач, связанных с изготовлением полупроводников, фармацевтическим синтезом и т.д.

Autodesk Simulation CFD предоставляет пользователям комплекс методов вычислительной гидродинамики для проведения расчетов по таким направлениям, как охлаждение электронной аппаратуры, проектирование клапанов, поддержание температурного режима светодиодов, тепловой комфорт и упаковка продукции. Вы можете проводить ассоциативное изучение проектных вариантов, пользуясь следующими передовыми возможностями: модельно-ориентированный интерфейс, автоматизированное построение сеток для анализа методом конечных элементов, быстродействующие решающие модули и специальная среда для изучения проекта и принятия оптимальных решений.

Продукты семейства *Autodesk Simulation CFD* применяются для решения различных задач, требующих моделирования потоков жидкостей и процессов теплопередачи.

ANSYS FLUENT - программное обеспечение, которое обладает широкими возможностями моделирования физических процессов с целью анализа влияния жидкости на изделие или оборудование.

Решатель *ANSYS FLUENT* основан на методе конечных объемов, при этом:

- область течения разделяется на конечное множество контрольных объемов;
- в этом множестве контрольных объемов решаются уравнения сохранения массы, импульса, энергии и т.д.
- уравнения в частных производных дискретизируются в систему алгебраических уравнений;
- затем производится численное решение этих алгебраических уравнений в расчетной области.

ANSYS FLUENT надежно и эффективно выполняет расчеты для всех физических моделей и типов, включая стационарное или переходное течение, несжимаемый или сжимаемых течений (от малых дозвуковых до гиперзвуко-

вых), ламинарный или турбулентный потоки, ньютоновских или неньютоновских жидкостей, идеального или реального газа.

Программный комплекс *FlowVision* является инструментом моделирования течения жидкости и/или газа в технических устройствах или природных условиях с последующим анализом результатов расчетов.

FlowVision ориентирован на моделирование течения в условиях, характеризующихся следующими чертами: сложной формой границ области течения, что позволяет моделировать функционирование реальных технических устройств турбулентностью течения произвольными скоростями течения (от течения несжимаемой жидкости до сверхзвуковых течений) конвективным и лучистым теплообменом, теплопроводностью и сопряженным теплообменом неньютоновской реологией текущей среды наличием относительного движения тел (частей конструкции) в расчетной области течения наличием свободной поверхности жидкость/газ или жидкость/жидкость диффузией и химическими реакциями между компонентами, горением

Программный комплекс *FlowVision* оснащен разнообразными средствами подготовки проекта расчета, которые включают: средства импорта геометрических объектов, составляющих границы расчетной области, из программ геометрического моделирования (CAD-систем) средства создания геометрических объектов элементарной формы средства автоматической генерации расчетной сетки, учитывающей особенности формы объектов в расчетной области средства задания граничных и начальных условий течения и теплообмена в расчетной области

Расчетный блок программного комплекса, обеспечивает численное решение совокупности уравнений, описывающих движение жидкости и/или газа в расчетной области, в том числе: уравнений сохранения массы, импульса и энергии уравнений состояния уравнений моделей турбулентности уравнений специальных моделей (свободной поверхности газ/жидкость, горения, лучистого теплообмена, течения в тонком зазоре)

Решение системы уравнений выполняется на декартовой сетке, которая автоматически локально измельчается. Измельчение сетки может быть сосредоточено в районе высоких градиентов или сложной геометрической формы. Ячейки сетки, пересекающиеся с границами расчетной области и расчетных подобластей, обрезаются поверхностями границ.

Во FlowVision реализована технология расчета течения с телами, движущимися в расчетной области относительно неподвижных тел.

Расчетный блок FlowVision может функционировать на компьютерах различной конфигурации: на персональном компьютере, в сети компьютеров или на кластере. Распараллеливание вычислительных процедур выполняется автоматически и обеспечивает эффективное использование многопроцессорной техники.

В состав *FlowVision* входят разнообразные средства анализа результатов моделирования: средства контроля и экспресс-анализа промежуточных результатов расчета средства накопления интегральных характеристик различных процессов средства анализа и визуализации результатов расчета, включающие в себя широко распространенные средства отображения скалярных и векторных переменных в объеме расчетной области и на ее границе

Программный комплекс FlowVision применяется, в основном, для моделирования и анализа течения в технических устройствах различного назначения. Моделирование течений, как правило, проводится для решения задач двух типов: для экспертизы проектных решений для расчетного обеспечения проектирования технических устройств

Экспертиза проектных решений выполняется путем моделирования течений в техническом устройстве, построенном по проекту, предлагаемому проектной организацией. Сопоставление параметров рассчитанного течения с ожидаемыми подтверждает правильность проектного решения или дает информацию о необходимости внесения корректив в проект.

Использование *FlowVision* при решении задач проектирования часто не ограничивается экспертизой отдельных проектных решений, а является более

глубоким. Во многих случаях, когда используемые методы проектирования не могут гарантировать надлежащие параметры проектируемого устройства, необходим этап доводки проектируемого технического объекта. *FlowVision* позволяет выполнить многовариантный поиск требуемого технического решения до его реализации.

Таким образом, в качестве программы для проведения данного исследования был выбран отечественный программный комплекс *FlowVision*, причинами для такого выбора стали:

- удобный интерфейс программы на русском языке;
- предоставление бесплатной лицензии программы студентам;
- возможность импорта геометрии из других программных сред;
- техническая поддержка на протяжении всего срока действия лицензии.

В данной работе, с помощью программного комплекса *FlowVision* был осуществлен расчет гидродинамики для реактора алкилирования бензола пропиленом, смесительного устройства и реактора алкилирования бензола этиленом.

2 Объекты и методы исследования

2.1 Технологическая схема отделения алкилирования бензола этиленом

Принципиальная технологическая схема отделения алкилирования представлена в приложении А.

Получение катализатора происходит в аппарате с мешалкой – реакторе Пн-1. Приготовление катализатора производится по непрерывной схеме, для чего в реактор Пн-1 постоянно подается бензол, хлорэтил и хлористый алюминий.

Из реактора Пн-1 катализаторный комплекс через переливной (боковой) штуцер сливается в сборник Е-1б. В процессе приготовления катализаторного комплекса выделяется хлористый водород, который направляется в скруббер К-34а, орошаемый оборотной водой. Кислая вода из скруббера сливается в отстойник Е-116 [3].

В алкилатор К-3, через смесительную камеру (рис.1), подается свежий и циркулирующий каткомплекс, бензол-конденсат, бензол и ПАБ из колонны К-31. Также через барботер подается этилен. С верха колонны отводятся пары для последующей конденсации и возвращения в реактор бензола-конденсата [4].

Реакционная масса из алкилатора К-3, пройдя через систему теплообменников, поступает в отстойник Е-11, в котором происходит отделение алкилата от каталитического комплекса.

Однако, поскольку после отстойника в алкилате все еще содержится большое количество каткомплекса, в смесителе Sulzer Пн-13 происходит его смешение с водой в соотношении 0,6:1. Затем эта эмульсия направляется в отстойник Е-14, где отделяется вода. Остатки соединений хлора отмываются в колонне К-15.

Для нейтрализации алкилата его смешивают с раствором щелочи в смесителе Пн-19. После чего смесь разделяют в отстойнике Е-20. Остатки щелочи вымываются водой в колонне К-21.

В последнем отстойнике E-22 отделяется промывочная вода и далее алкилат направляется в отделение ректификации для дальнейшей очистки.

2.2 Технологическая схема отделения алкилирования бензола пропиленом

Технологическая схема узла алкилирования бензола пропиленом в реакторе колонного типа представлена на рисунке 1.

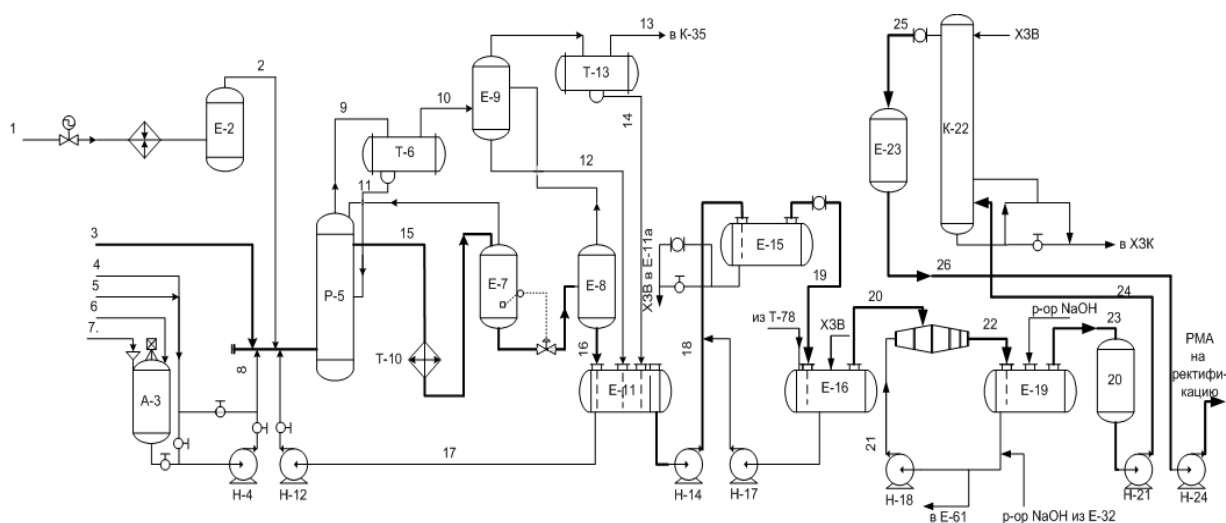


Рисунок 1 - Технологическая схема узла алкилирования бензола пропиленом

В качестве катализатора в процессе используется хлорид алюминия.

Хлорид алюминия доставляется в отделение И-14 со склада предприятия в бочках или барабанах, которые устанавливаются на площадку хранения катализатора. С площадки бочки или барабаны поднимаются электроподъемником на 2-й этаж катализаторного отделения.

Приготовление катализаторного комплекса производится в аппарате с мешалкой периодически в следующей последовательности:

- в аппарат с мешалкой из отделения И-15а подается осушенная бензольная шихта (ОБШ) из резервуара насосом;
- в бункер загружается хлористый алюминий из расчета приготовления катализаторного комплекса с концентрацией не более 10 %;

- для получения хлористого водорода, являющегося инициатором процесса, используется вода, которая добавляется в аппарат в количестве 1-2 % массовых от веса загруженного хлористого алюминия;

- включается в работу мешалка и производится перемешивание в течение 2-4 часов;

- приготовленная суспензия катализаторного комплекса насосом подается в алкилатор.

После освобождения аппарата, процесс приготовления суспензии катализаторного комплекса повторяется.

Процесс алкилирования происходит в реакторе Р-5, давление процесса не более 0,4 МПа, температура не выше 130 °С. Для реакции на смешивание в алкилатор поступают:

а) осушенная бензольная шихта 8 (ОБШ) из резервуара отделения И-15а насосом;

б) пропиленовая фракция 2, предварительно пройдя через испаритель, обогреваемый паром Р-0,6 МПа (6 кгс/см²), и сепаратор-буфер;

в) свежий катализаторный комплекс насосом 3;

г) возвратный катализаторный комплекс 17 из большого отсека отстойника.

При реакции алкилирования выделяется большое количество тепла, которое отводится за счет испарения бензола в алкилаторе. Пары бензола вместе с абгазами поступают в конденсатор Т-6, где конденсируются промышленной водой.

Сконденсированный бензол стекает в алкилатор, а абгазы с оставшимися парами бензола направляются через сепаратор и конденсатор Т-13, охлаждаемый промышленной водой, на одну из двух систем улавливания бензола из абгазов.

Бензол из конденсатора самотеком стекает в малый отсек отстойника Е-11.

Реакционная масса из алкилятора непрерывно направляется в теплообменник, где охлаждается промышленной водой.

Охлажденная реакционная масса поступает в промежуточный сборник. После сборника давление реакционной массы дросселируется до 0,02 МПа (0,2 кгс/см²) и реакционная масса поступает в сепаратор E-8.

Давление реакционной массы дросселируется клапаном, установленным на линии перелива из сборника E-7 в сепаратор E-8.

Сконденсированный бензол из сепаратора E-9 самотеком сливается в большой отсек отстойника E-11. Сюда же поступает реакционная масса из сепаратора E-8.

В отстойнике происходит отстой реакционной массы от катализаторного комплекса. Отстоявшийся катализаторный комплекс 17 из большого отсека отстойника насосом возвращается на гребенку алкилятора P-5.

Реакционная масса алкилирования из большого отсека отстойника переливается через перегородку в малый отсек, откуда насосом подается на установку разложения катализаторного комплекса и нейтрализации реакционной массы E-15.

При последовательной работе отстойников, реакционная масса из малого отсека отстойника насосом подается на установку разложения катализаторного комплекса и нейтрализации реакционной массы.

Продукт из сепаратора сливается в большой отсек отстойника. Уровень в сепараторе измеряется прибором, при появлении уровня и достижении максимального значения уровня, включается световая и звуковая сигнализация.

При последовательной работе отстойников, продукт сливается из сепаратора в большой отсек отстойника.

Разложение катализаторного комплекса осуществляется в смесителе E-16, путем смешивания реакционной массы и раствора хлорида алюминия.

Циркулирующий раствор хлорида алюминия (РХА) получается в процессе многократного возвращения воды, первоначально взятой для промывки реакционной массы (РМ) из линии конденсата после холодильника.

Перемешивание РМ и РХА происходит в смесителе.

Соотношение РМ : РХА = 2:1.

Смесь реакционной массы и РХА из смесителя поступает в аппарат, где происходит разделение РМ от РХА за счет разности плотностей.

В колонне происходит укрупнение мелкодисперсных частиц РХА и осаждение РХА в кубе колонны.

РМ из верхней части колонны поступает в отстойник Е-19.

Реакционная масса из нижней части отстойника поступает для нейтрализации на насос, куда одновременно подается раствор щелочи из отстойника. Далее реакционная масса со щелочью подается через смеситель в отстойник Е-19.

Реакционная масса и раствор щелочи перемешиваются, при этом происходит нейтрализация реакционной массы и отмывка ее от фенолов.

Соотношение РМ : раствор щелочи = 1 : 1.

Концентрация щелочи РМ 2-25 % масс.

Реакционная масса из верхней части отстойника перетекает в сборник 20, откуда подается в промывную колонну К-22.

В промывной колонне реакционная масса отмывается от унесенной щелочи.

Реакционная масса из верхней части колонны стекает в сборник Е-23, откуда насосом откачивается в отделение И-15а в резервуар для отстоя от взвешенной гидроокиси алюминия.

Основываясь на технологическом режиме ведения процессов алкилирования бензола этиленом и бензола пропиленом, созданы модели оборудования и произведен гидродинамический расчет для каждого аппарата.

3. Исследование гидродинамики реактора алкилирования бензола пропиленом

Моделирование движение жидкости и газа с помощью специальных программных продуктов происходит в несколько этапов.

На подготовительном этапе создается геометрическая модель, задаются физические условия, начальные и граничные условия.

На этапе расчета программа, решает основные уравнения на основе заданных математических параметров и происходит запись результатов расчета.

Результаты решения отображаются в виде графиков, таблиц, а также контурных/векторных схем, привязанных к исходной геометрии.

С помощью программного продукта *Abaqus 6.6 Student Edition* была создана геометрическая модель реактора алкилирования бензола пропиленом.

Чертеж проектируемого реактора представлен в приложении Б.

3.2 Задание физической модели реактора алкилирования бензола пропиленом

Задание физической модели начинается с заданием физико-химических свойств смешиваемых веществ. Создано четыре потока веществ: пропан-пропиленовая фракция, осушенная бензольная шихта, возвратный катализаторный комплекс и свежий катализаторный. Физико-химические свойства представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Физико-химические свойства сырьевых потоков

	Бензол	Толуол	Изо-пропил-бензол	Н-пропил-бензол	Пропан	Пропилен
Молярная масса, кг/моль	78,11	92,14	120,19	120,2	44,1	42,08
Плотность, кг/м ³	878,6	866,94	861,8	861,8	1,2503	1,2503

Для задания массовых потоков в программе необходимо задать массовые скорости, массовые скорости приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Определение массовых скоростей сырьевых потоков

	Пропилен	Бензол	Возвратный кат. комплекс	Свежий кат. комплекс
Радиус, мм	40	30	40	60
Площадь, м ²	0,005	0,0028	0,005	0,011
Расход, т/ч	2,3	24	11	0,028
Массовая скорость, (кг/(м ² ·с))	127,1	2359,05	608,19	0,688

Модель движения жидкости/газа - выбрана ньютоновская жидкость, модель жидкости. Жидкости и газы, подчиняющиеся закону трения Ньютона (1), называются ньютоновскими:

$$\tau = \mu \frac{\partial v}{\partial n}, \quad (1)$$

где μ - динамическая вязкость, Па · с; v - скорость жидкости, м/с; n - направление, перпендикулярное границе частицы жидкости, в точке которой определяется касательное напряжение [4].

Массоперенос осуществляется за счет перемешивания и химических реакций, выбираем модель массопереноса - Перемешивание + Химия. Модель турбулентности Стандартная $k - \varepsilon$ модель,

Стандартная модель турбулентности $k - \varepsilon$. Чтобы замкнуть турбулентность, необходимо определить связь между напряжениями по Рейнольдсу и параметрами осредненного течения. Эту связь определяют с помощью различных моделей турбулентности. В этих моделях принимаются определенные допущения, на основе которых вводится недостающее число уравнений, что позволяет найти все неизвестные. Одним из допущений является введение турбулентной вязкости, которое впервые осуществил Буссинеск. Турбулентную динамическую вязкость μ_t он ввел по аналогии с динамической вязкостью (2):

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2)$$

В данной модели вводятся два важных понятия – генерация P и диссипация ε . Физический смысл генерации турбулентности P заключается в порождении новых вихрей и пульсаций, которые и образуют турбулентность. Диссипация ε напротив, представляет собой рассеивание больших вихрей на более малые, приводит к усреднению течения и уменьшению турбулентности. Два уравнения переноса позволяют рассматривать турбулентность в пространстве и времени. Данная модель является полуэмпирической и опирается на феноменологический подход и результаты, полученные опытным путем.

$$\partial_t k + \bar{u}_j \partial_j k = P - \varepsilon + \partial_j \left(\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \partial_j k \right). \quad (3)$$

Уравнение (3) является уравнением для кинетической энергии k . σ_k -параметр, обеспечивающий нужную размерность для слагаемого с ν_T . Обычно принимается $\sigma_k=1$. Уравнение для диссипации ε (4) аналитически не выводится и просто записывается по аналогии с (3):

$$\partial_t \varepsilon + \bar{u}_j \partial_j \varepsilon = \frac{C'_{1\varepsilon} P - C'_{2\varepsilon} \varepsilon}{T} + \partial_j \left(\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \partial_j \varepsilon \right), \quad (4)$$

где $T=k/\varepsilon$ обеспечивает нужную размерность, а константы $C'_{1\varepsilon}$, $C'_{2\varepsilon}$, σ_ε вводятся, поскольку форма уравнения (4) лишь предполагается, но не выводится аналитически[5].

3.3 Генерация расчетной сетки

Начальная расчетная сетка строится в прямоугольном параллелепипеде, описывающем расчетную область. Этот параллелепипед является объемом, в котором строится начальная сетка. Ячейки начальной сетки, попавшие в расчетную область, являются расчетными, ячейки, лежащие вне границы расчетной области, — нерасчетными.

Дифференциальные уравнения аппроксимируются на расчётной сетке в предположении, что каждая ячейка представляет собой конечный объём, в котором скорости изменения физических величин сбалансированы потоками этих величин через грани ячейки [1].

Количество ячеек по осям задаем следующие:

$$nX = 30; nY = 70; nZ = 30;$$

В результате была сгенерирована расчетная сетка из 22462 ячеек.

3.4 Проверка расчетной сетки на сходимость

Моделирование течения всегда предполагает проведение расчётов одних и тех же физических процессов с фиксированными начальными и граничными условиями на нескольких сетках: "грубой", "средней", "мелкой".

Моделируемые параметры задачи (например, перепад давления на устройстве) при этом должны сходиться к некоторому значению, соответствующему бесконечно мелкой сетке. Если этого не происходит, то полученные характеристики течения достоверными считать нельзя. В этом случае нужно тщательно проанализировать постановку численной задачи и топологию расчётной сетки.

Сходимость по сетке является оценкой точности получаемого решения, когда экспериментально полученные данные получить невозможно или данные недостоверны. Решение основано на проведении серии расчетов одной и той же задачи с различными расчетными сетками.

В качестве исследуемых параметров были выбраны массовые доли веществ в произвольном сечении реактора.

Для трех различных сеток были получены данные, на основании которых построены графики.

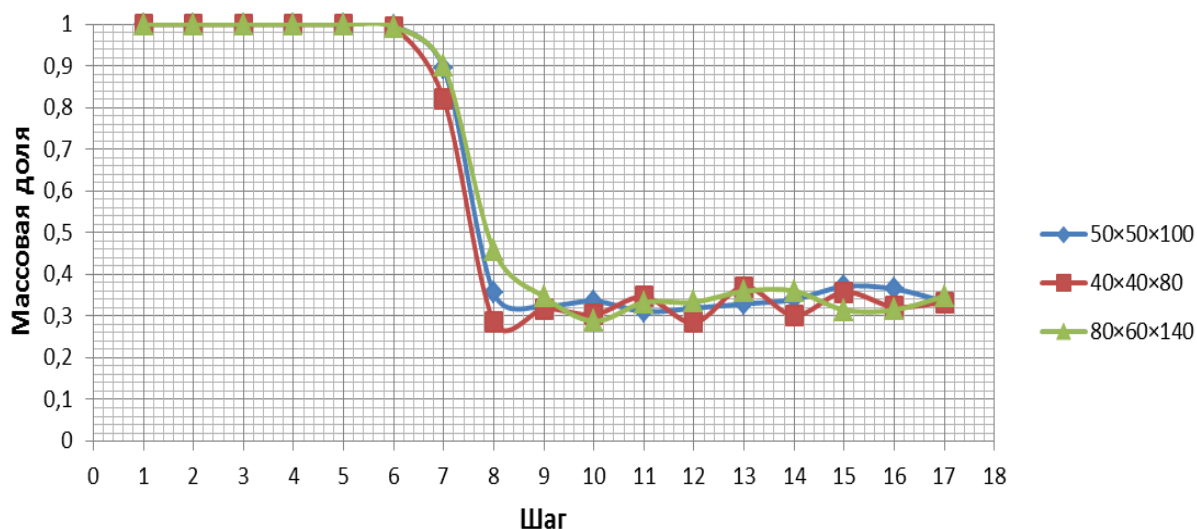


Рисунок 2 – Изменение массовой доли пропилена в сечении ректора.

В начальных условиях массовая доля пропилена в реакторе принята равной 1, т.е. пропилен заполнял все внутреннее пространство реактора перед началом расчета. Именно поэтому массовая доля пропиелена в сечении реактора максимальна на протяжении первых шести шагов, затем, в течение трех шагов идет резкое уменьшение концентрации и устанавливается стационарный режим.

На основании приведенных графиков делаем вывод о сходимости расчета по сетке. Выбранные сетки показывают неплохую сходимость, отклонения от средних значений невелики и составили от 3 до 5 процентов. Однако, согласно рекомендациям, в дальнейшем будем использовать сетку 30×70×30.

3.5 Результаты исследования гидродинамики реактора алкилирования бензола пропиленом

В программе заданные физическая и геометрическая модели реактора позволили произвести расчет процесса, результатом являются цветовые схемы с распределением массовых и мольных долей реагентов и катализатора по сечению реактора.

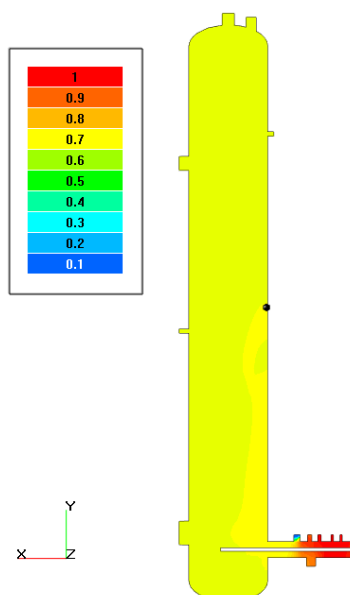


Рисунок 3 – Мольная доля бензола в продольном сечении реактора

Как видно из рисунка 11, распределение концентраций по реактору равномерное, массовая доля бензола в реакторе 0,36 – 0,42. При этом наблюдается выраженная область высоких концентраций внизу реактора, что говорит о наличии постоянного уровня жидкого реагента в реакторе.

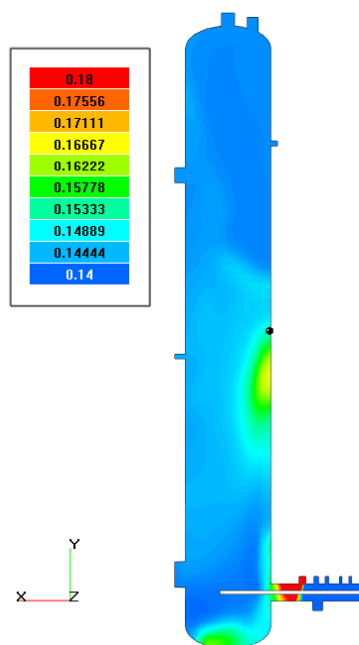


Рисунок 4 – Мольная доля катализатора в продольном сечении реактора

Катализатор по реактору распределен менее равномерно, чем бензол, наблюдаются зоны пульсаций жидкости в реакторе, из – за высокой плотности зона высокой концентрации смещена в нижнюю часть реактора.

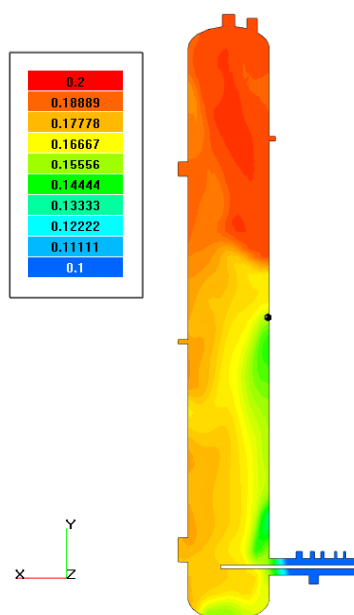


Рисунок 5 – Мольная доля пропилена в продольном сечении реактора

Для пропилена наблюдается аналогичная, как и для бензола и катализатора ситуация, при этом повышенные концентрации пропилена в зоне ввода реагента, что негативно сказывается на результате ведения процесса.

Определим режим течения в трубопроводе подачи пропилена по формуле:

$$Re = \frac{Q \cdot D_r}{\vartheta \cdot A}$$

где, Q – объёмная скорость потока, $\text{м}^3/\text{с}$;

D_r – гидравлический диаметр, м;

ϑ – кинематическая вязкость среды, $\text{м}^2/\text{с}$;

A – площадь сечения трубы, м^2 .

Критерий Рейнольдса получили $Re = 1489,3$ что соответствует ламинарному режиму движения газа в трубопроводе.

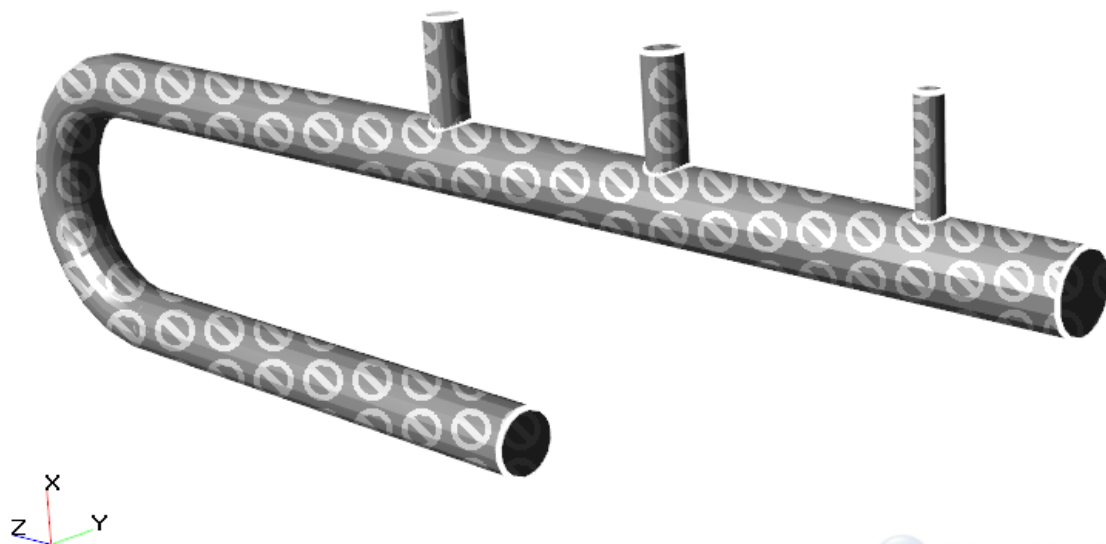
4. Исследование гидродинамики смесительного устройства реактора алкилирования бензола этиленом

С помощью программного продукта Abaqus 6.6 Student Edition была создана геометрическая модель смесительного элемента SMV фирмы Sulzer



Рисунок 6 – Модель смесительного элемента SMV фирмы Sulzer

А также модель смесительного устройства, в которую монтируются данные элементы (рисунок 7).



FlowVision

Рисунок 7 – Модель участка трубы. 1,2,3-граничное условие вход, 4-граничное условие свободный выход, 5-граничное условие стенка.

Конструкционные параметры смесителя представлены в табл.2.

Таблица 3 – Конструкционные параметры смесителя.

Параметр	Значение, м
Длина участка трубы	2
Диаметр трубы	0,15
Диаметр патрубка для ввода осушенного бензола	0,08
Диаметр патрубка для ввода возвратного каталитического комплекса	0,08
Диаметр патрубка для ввода свежего каталитического комплекса	0,05
Диаметр смесительного элемента	0,15

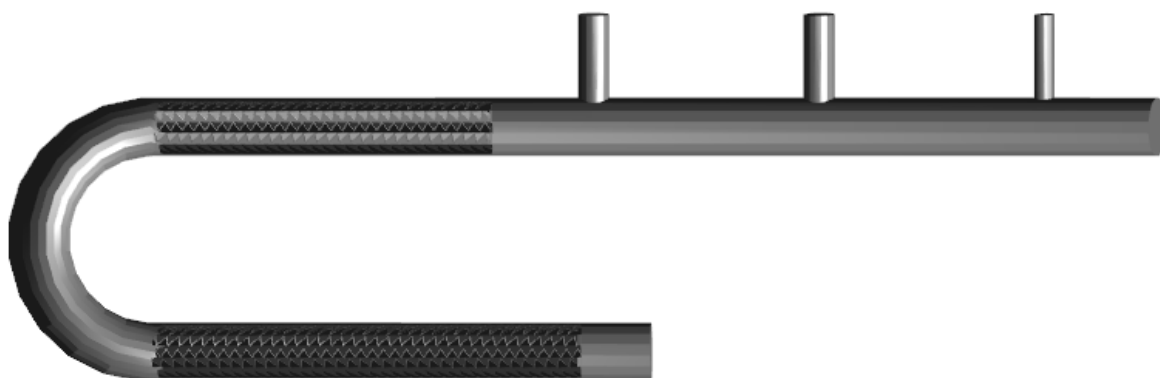


Рисунок 8 - Модель смесителя в продольном сечении.

4.1 Задание физической модели смесительного устройства

Физико-химические свойства представлены в таблице 4.

Таблица 4 – Физико-химические свойства сырьевых потоков

Свойство	Размерность	Бензол	Св. кат.	Цирк. кат.	Этилен
1	2	3	4	5	6
Молярная масса	кг/моль	0,0781	0,4095	0,024	0,024
Плотность	кг/м ³	878	1050	1,178	1,178
Вязкость	кг/(м·сек)	0,0006	0,001	$1,04 \cdot 10^{-5}$	$1,04 \cdot 10^{-5}$

1	2	3	4	5	6
Расход	кг/ч	14495,65	505	7872,50	1248,69
Массовая скорость	кг/(м ² ·сек)	801,7	716,35	435,27	19,66

4.2 Генерация расчетной сетки

Количество ячеек по осям задаем следующие:

$$nX = 50; nY = 100; nZ = 60;$$

В результате была сгенерирована расчетная сетка из 117616 ячеек. Модель со сгенерированной расчетной сеткой представлена на рис. 4.

4.3 Проверка расчетной сетки на сходимость

В качестве исследуемых параметров были выбраны массовые доли поступающих в смеситель веществ на выходе из него.

Для двух различных сеток были получены данные, на основании которых построены графики.

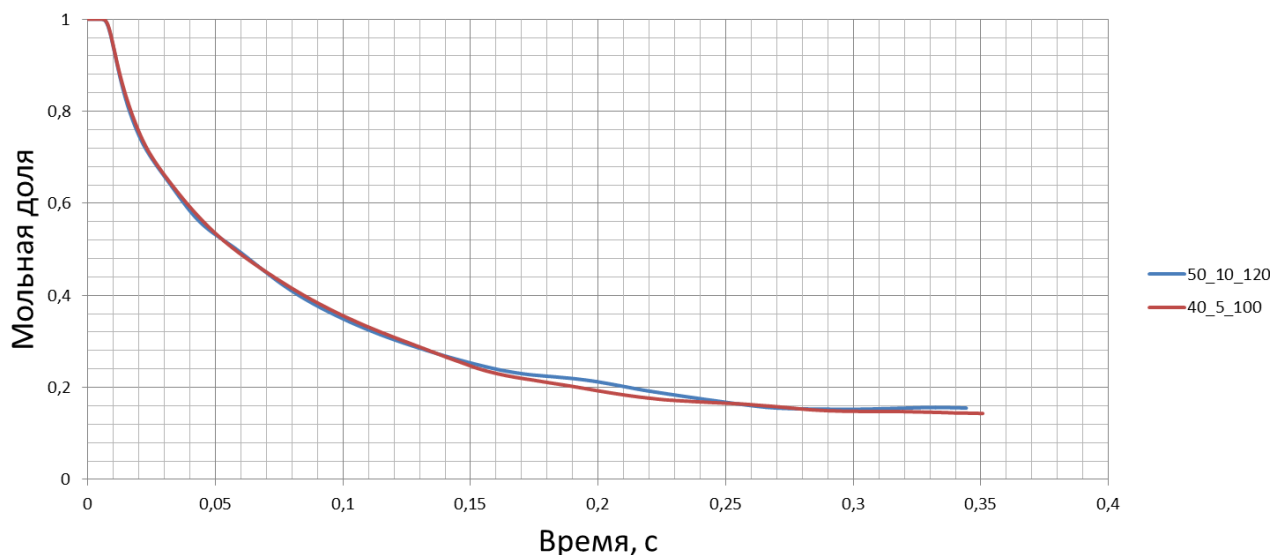


Рисунок 9 – Изменение массовой доли катализатора на выходе из смесителя по шагам

В начальных условиях массовая доля катализатора в смесителе была принята равной 1, т.е. катализатор заполнял все внутреннее пространство смесителя перед началом расчета. Именно поэтому массовая доля катализатора на выходе максимальна на протяжении первых шести шагов, затем, в течение трех шагов идет резкое уменьшение концентрации и устанавливается стационарный режим.

На основании приведенных графиков делаем вывод о сходимости расчета по сетке. Выбранные сетки показывают неплохую сходимость, отклонения от средних значений невелики и составили от 3 до 5 процентов. Однако, согласно рекомендациям, в дальнейшем будем использовать сетку $80 \times 60 \times 140$.

4.5 Результаты исследования гидродинамики смесительного устройства

Эффективность перемешивающего устройства характеризует качество проведения процесса перемешивания. Для его оценки необходимо определить дисперсию концентрации. Для прямоточных смесителей эффективность перемешивания, характеризуется дисперсией концентрации в плоскости перпендикулярной оси аппарата после смесительного участка:

$$\sigma = \frac{1}{S} \int_S (C - C_{cp})^2 dS$$

а средняя концентрация:

$$C_{cp} = \frac{1}{S} \int_S C dS$$

где σ – дисперсия концентрации;

C – мольная доля компонента;

C_{cp} – средняя мольная доля данного компонента в заданной плоскости;

S – исследуемая плоскость.

Представленный расчет имел задачу, определить в какой из патрубков использовать для ввода бензола, а какой для ввода катализаторного комплекса. Поэтому расчет проводился для двух вариантов, в первом варианте ввод бензола производится в первый патрубок, катализатора во второй. Во втором варианте, наоборот, в первый патрубок вводили катализатор, во второй бензол. Результаты решения представлены в форме цветовых схем, цветовая шкала на рисунке отражает численное значение массовой/мольной доли и соответствующий цвет.

4.5.1 Моделирование ввода катализатора в первый патрубок, бензола во второй

Схема ввода представлена на рисунке 10.

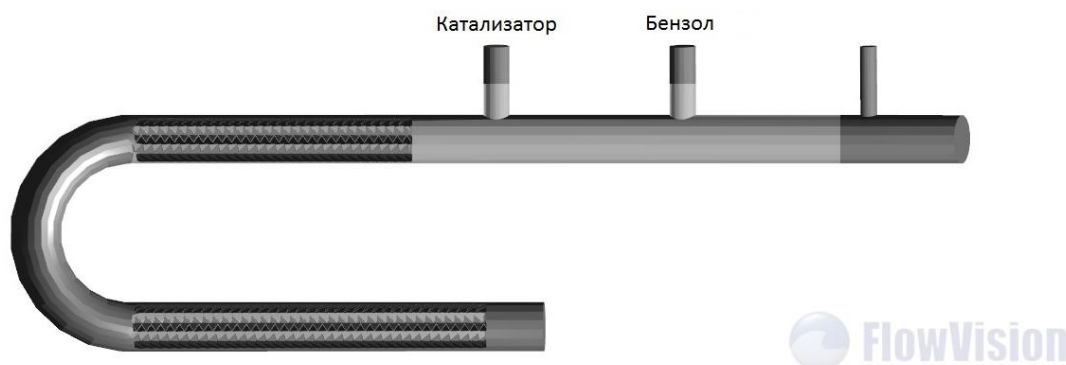


Рисунок 10 - Схема ввода реагентов.

Как видно из рисунка 11, хорошее перемешивание потоков наблюдается уже после второго смешительного элемента, мольная доля бензола на выходе из смешительного устройства находится на уровне 0.7-0.8.

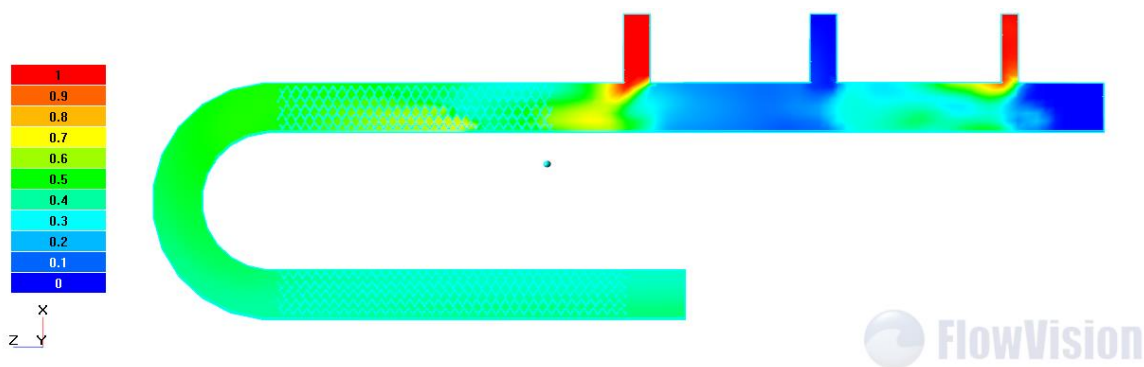


Рисунок 11 - Мольная доля бензола в продольном сечении устройства.

Мольная доля катализатора на выходе из трубы составляет 0.1-0.15 (рисунок 11), при этом, структура выходящего потока объясняется физическими свойствами веществ, поступающих на смешения. Катализатор, из-за высокой плотности и молярной массы находится у нижней стенки смесительного устройства, затем следует слой бензола максимальной мольной доли бензола и в самом веру в сечения наблюдается максимальная мольная доля этилена.

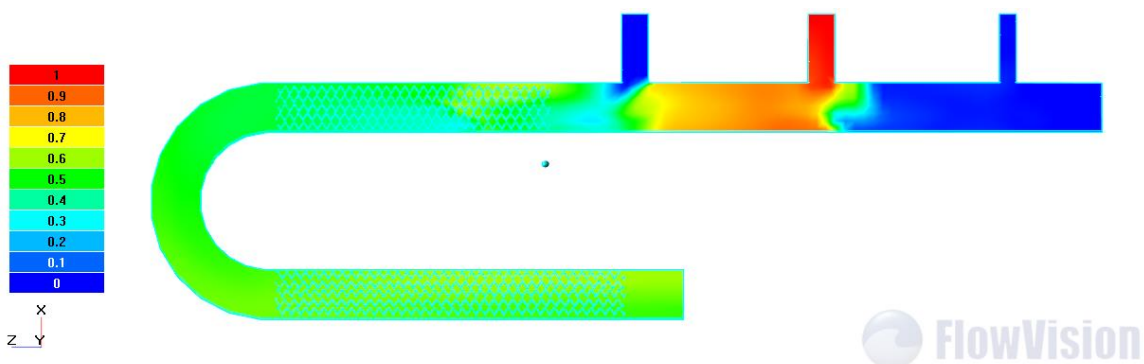


Рисунок 12 - Мольная доля катализатора в продольном сечении устройства.

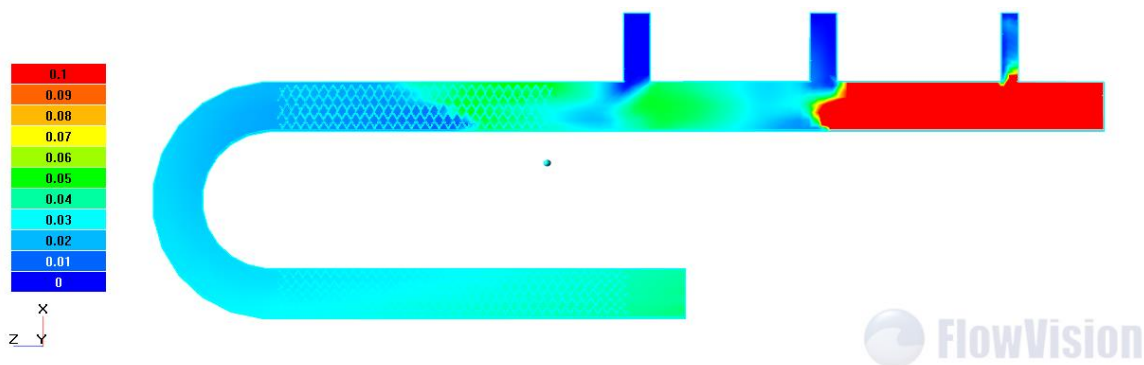


Рисунок 13 – Мольная доля этилена в продольном сечении устройства.

4.5.2 Моделирование ввода бензола в первый патрубок, катализатора во второй

Схема ввода представлена на рисунке ниже.

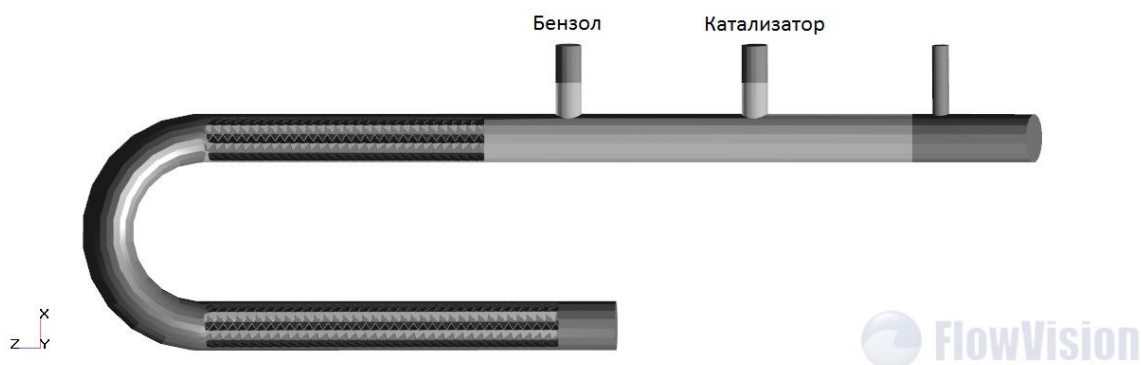


Рисунок 14 - Схема ввода реагентов.

При данном варианте ввода мы получаем на выходе из смесителя мольную долю выше, чем в первом варианте, 0,8-0,9. Структура потока менее однородна, чем в первом варианте.

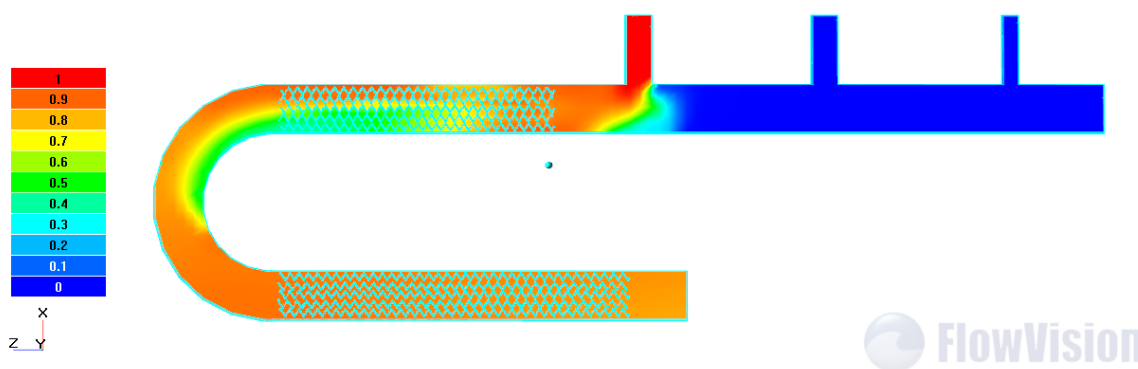


Рисунок 15 - Мольная доля бензола в продольном сечении устройства.

Мольная доля катализатора в сечении смесителя 0.06-0.08, ниже чем в первом варианте.

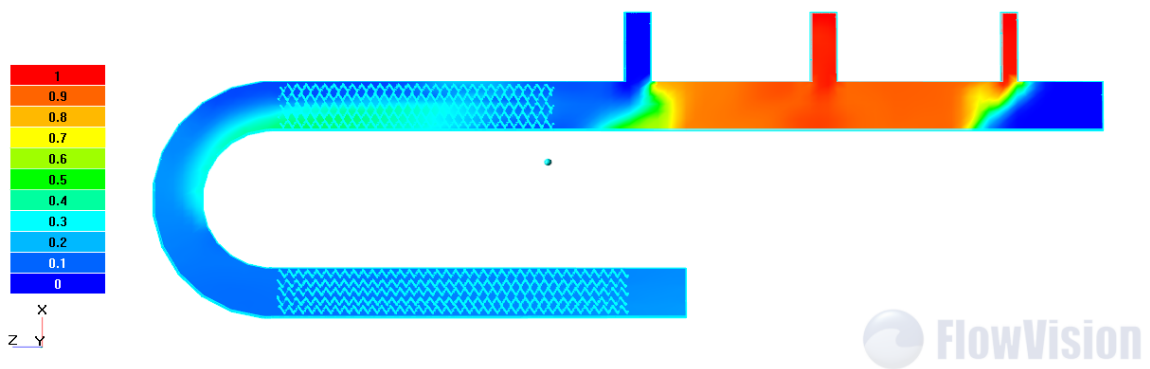


Рисунок 16 - Мольная доля катализатора в продольном сечении устройства.

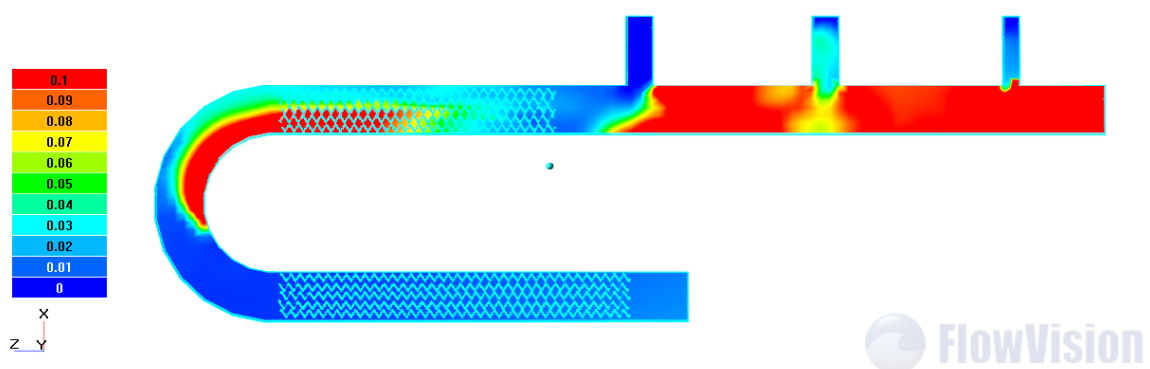


Рисунок 17 – Мольная доля этилена в продольном сечении устройства.

На рисунке 18 представлена зависимость дисперсии мольной доли этилена на выходе из смесителя от времени. Как видно из графика, оптимальным вариантом ввода является ввод .. в правый патрубок, ... в левый патрубок.

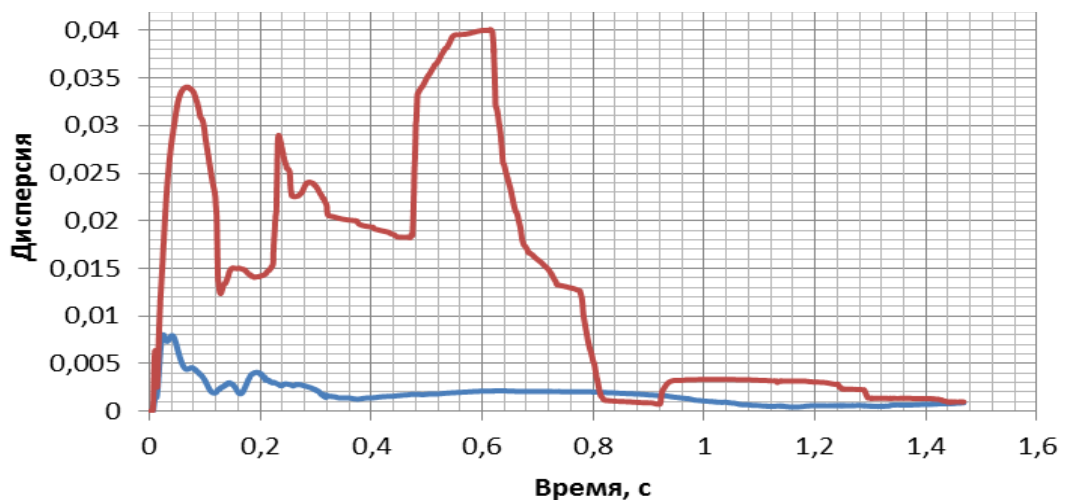


Рисунок – 18 Дисперсия мольной доли этилена на выходе из смешительного устройства

5. Исследование гидродинамики реактора алкилирования бензола этиленом

С помощью программного продукта *Abaqus 6.6 Student Edition* была создана геометрическая модель реактора алкилирования бензола этиленом.

Чертеж проектируемого реактора представлен в приложении Б.

5.1 Задание физической модели реактора алкилирования бензола этиленом

Физико-химические свойства представлены в таблице 4.

Таблица 5 – Физико-химические свойства сырьевых потоков

Свойство	Размерность	Бензол	Св. кат.	Цирк. кат.	Этилен
Молярная масса	кг/моль	0,0781	0,4095	0,024	0,024
Плотность	кг/м ³	878	1050	1,178	1,178
Вязкость	кг/(м·сек)	0,0006	0,001	$1,04 \cdot 10^{-5}$	$1,04 \cdot 10^{-5}$
Расход	кг/ч	14495,65	505	7872,50	1248,69
Массовая скорость	кг/(м ² ·сек)	801,7	716,35	435,27	19,66

5.1 Генерация расчетной сетки

Количество ячеек по осям задаем следующие:

$$nX = 30; nY = 60; nZ = 30;$$

В результате была сгенерирована расчетная сетка из 78825 ячеек.

5.2 Проверка расчетной сетки на сходимость

В качестве исследуемых параметров были выбраны массовые доли веществ в произвольном сечении реактора.

Для двух различных сеток были получены данные, на основании которых построены графики.

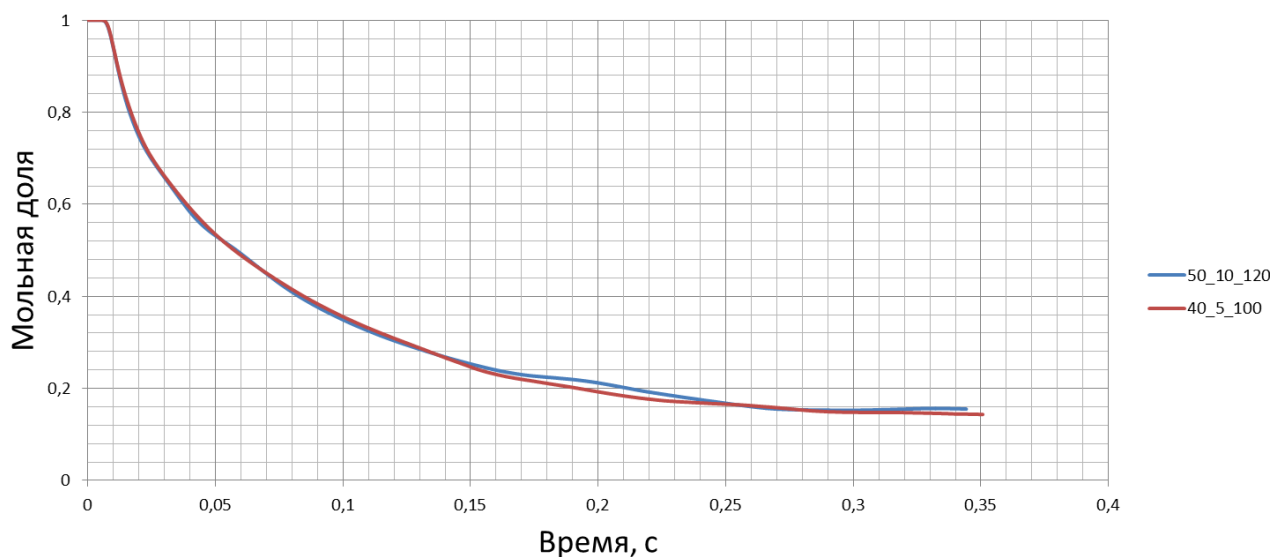


Рисунок 19 – Изменение массовой доли катализатора на входе в реактор.

На основании приведенного графика делаем вывод о сходимости расчета по сетке. Выбранные сетки показывают неплохую сходимость, отклонения от средних значений невелики и составили от 3 до 5 процентов. Однако, согласно рекомендациям, в дальнейшем будем использовать сетку $30 \times 70 \times 30$.

5.3 Результаты исследования гидродинамики реактора алкилирования бензола этиленом

В программе заданные физическая и геометрическая модели реактора позволили произвести расчет процесса, результатом являются цветковые схемы с распределением массовых и мольных долей реагентов и катализатора по сечению реактора.

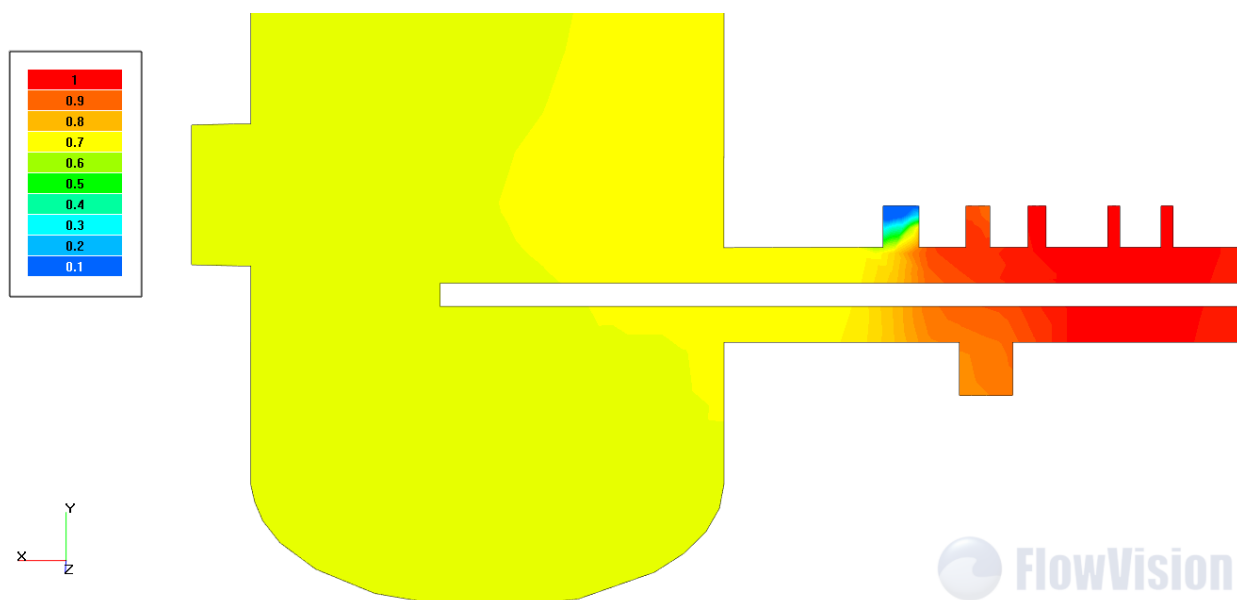


Рисунок 20 – Мольная доля бензола в продольном сечении реактора

Как видно из рисунка 20, распределение концентраций по реактору равномерное, мольная доля бензола в реакторе 0,7 – 0,8. При высокие концентрации в смесительной камере на входе реагентов.

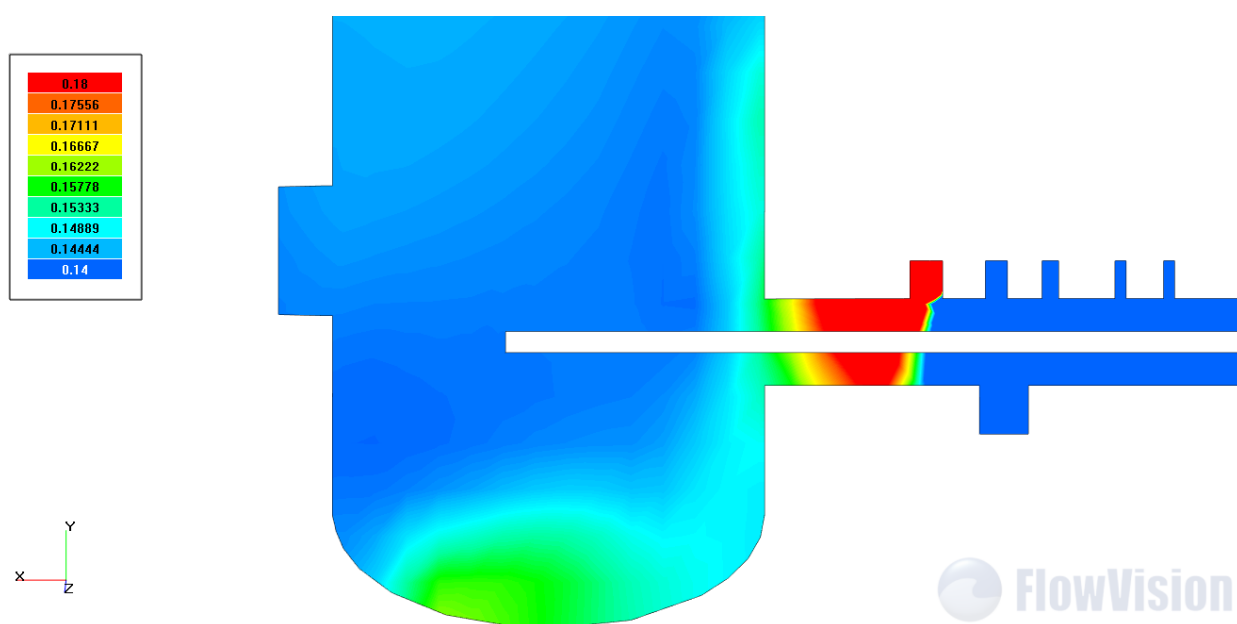


Рисунок 21 – Мольная доля катализатора в продольном сечении реактора

Катализатор по реактору распределен менее равномерно, чем бензол, наблюдаются зоны пульсаций жидкости в реакторе, из – за высокой плотности зона высокой концентрации смещена в нижнюю часть реактора.

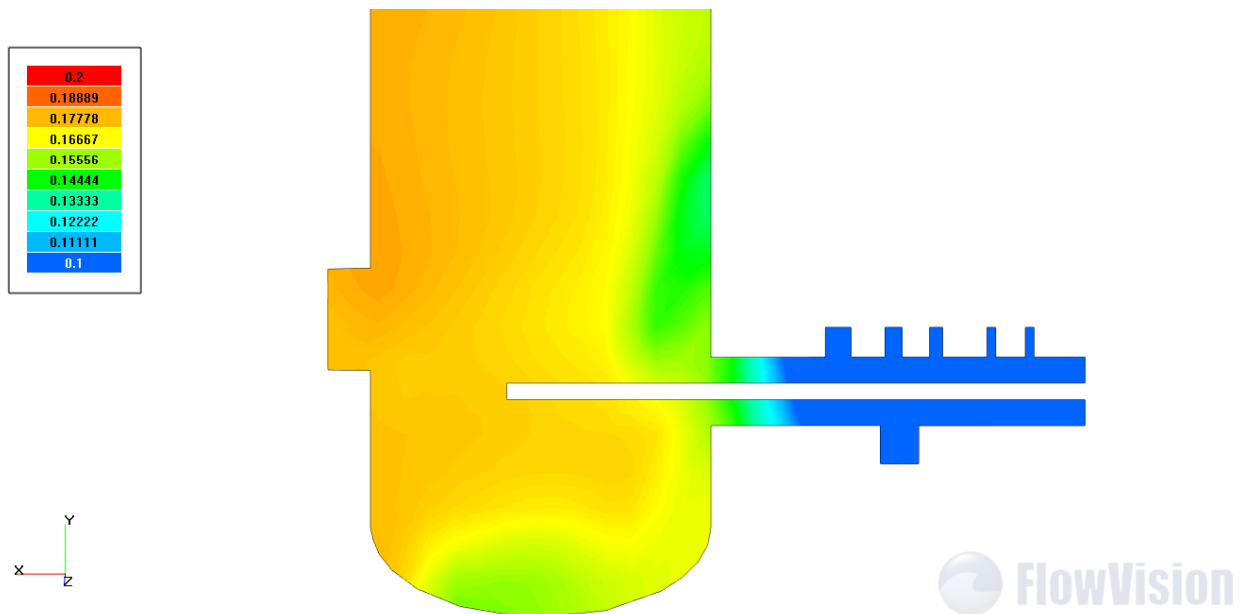


Рисунок 22 – Мольная доля этилена в продольном сечении реактора

Для этилена наблюдается аналогичная, как и для бензола и катализатора ситуация, при этом повышенные концентрации пропилена в зоне ввода реагента, что негативно сказывается на результате ведения процесса.

6 Финансовый менеджмент и ресурсоэффективность

6.1. Потенциальные потребители результатов исследования

Анализ рынка производства этилбензола в России позволил выявить четырёх продуцентов этилбензола - ОАО «Нижекамскнефтехим», ОАО «Салаватнефтеоргсинтез», ЗАО «Сибур-Химпром», ОАО «Ангарский завод полимеров». При этом на двух предприятиях используется технология американской компании The Badger Licensing LLC с цеолитным катализатором. На двух оставшихся применяется технология получения этилбензола с использованием хлорида алюминия в качестве катализатора.

На основании вышесказанного можно сделать вывод о том, что результаты исследования будут интересны для ОАО «Ангарский завод полимеров» и ОАО «Нижекамскнефтехим».

		Катализатор процесса	
		Цеолитный	Хлорид алюминия
Производитель	ОАО «Нижекамскнефтехим»	v	
	ОАО «Салаватнефтеоргсинтез»		x
	ЗАО «Сибур-Химпром»	v	
	ОАО «Ангарский завод полимеров»		x

Рисунок 18 – Карта сегментирования рынка этилбензола в России

6.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Конечным продуктом для данного исследования являются предложения по техническому усовершенствованию существующего реакторного блока на основе гидродинамического расчета.

На сегодняшний день существует масса программных комплексов, позволяющих проводить сложные гидродинамические расчеты, однако можно выделить два продукта, которые получили наибольшее распространение – Fluent (Б_{к1}) и Comsol (Б_{к2}), российским аналогом этих программ выступает программа FlowVision (Б_ф). В таблице 6 представлена оценочная карта для сравнения возможностей и качества всех трёх программных комплексов.

Таблица 6 – Оценочная карта для сравнения конкурентных программных комплексов для решения задач производства

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
Технические критерии оценки программных комплексов							
1. Производительность	0,1	5	5	5	0,5	0,5	0,5
2. Удобность интерфейса	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
3. Адекватность расчета	0,2	4	5	4	0,8	1,0	0,8
4. Воспроизводимость полученного результата	0,1	4	5	4	0,4	0,5	0,4
6. Доступность программы	0,05	5	3	4	0,25	0,15	0,02
7. Наличие техподдержки	0,05	5	3	3	0,25	0,15	0,15
Экономические критерии оценки программных комплексов							
1. Стоимость лицензии	0,2	5	2	3	1,0	0,4	0,6
2. Стоимость технической поддержки	0,05	5	3	3	1,0	0,6	0,6
3. Срок лицензии	0,05	3	4	4	0,15	0,2	0,2
4. Наличие сертификации разработки	0,1	5	5	5	0,5	0,5	0,5
Итого	1	46	39	39	5,35	4,4	4,17

Анализ конкурентных технических решений определялся по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_j, \quad (1)$$

где K – конкурентоспособность программного комплекса;

V_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

На основании оценочной карты как наиболее оптимальный программный комплекс для расчета выбран FlowVision, при этом следует обратить внимание на то, что использование FlowVision по льготной программе, которая предполагает полную бесплатную лицензию на два месяца использования и постоянную техническую поддержку.

6.3 Диаграмма Исикавы

Для процесса алкилирования, по которому в данной работе проводится исследование, составлена причинно-следственная диаграмма, диаграмма представлена на рисунке 23. Стоит отметить, что главная причина возникшей проблемы всё же устаревшая технология, в которой в качестве катализатора используется хлорид алюминия.

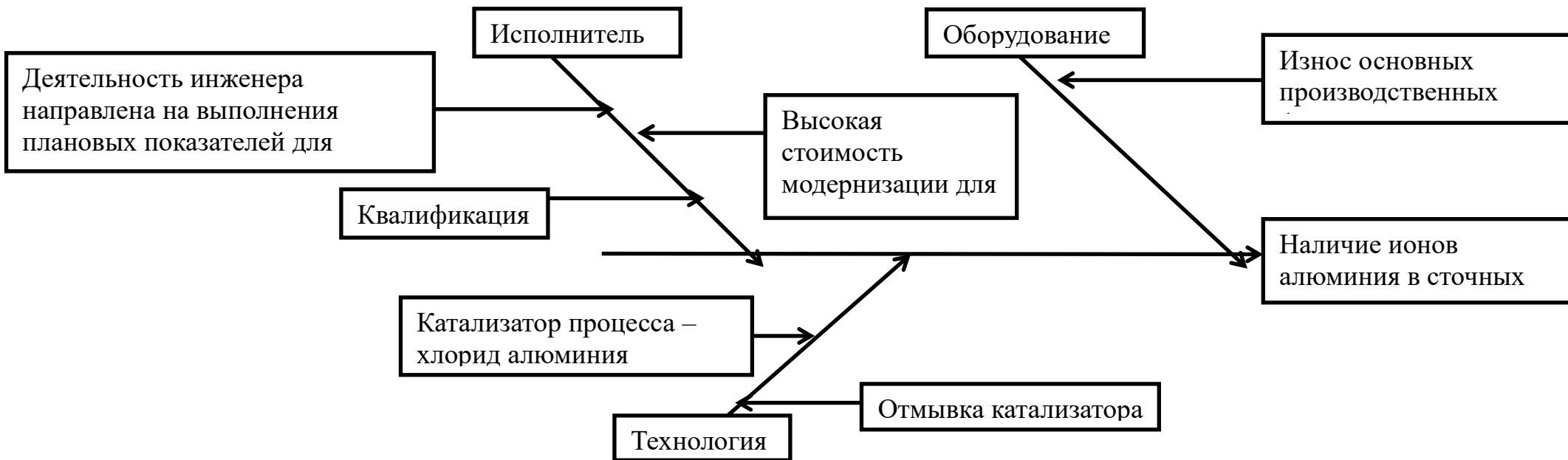


Рисунок 23 – Причинно-следственная диаграмма

6.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

Для оценки степени готовности проекта к коммерциализации разработан и заполнен специальный бланк оценки степени готовности проекта к коммерциализации. Бланк представлен в таблице 7.

Таблица 7 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1	2	3	4
1	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
2	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	4	5
3	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	3
4	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	4
5	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	5
6	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	5	2
7	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	4
8	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	5	5
9	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	4
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	5	3
11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	4	2
12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки	3	3

1	2	3	4
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	3
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	4
15	Проработан механизм реализации научного проекта	4	3
	ИТОГО БАЛЛОВ	64	54

Итоговый балл – 108, таким образом перспективность разработки выше среднего, результаты исследования направлены на предприятие компании - потенциального Заказчика на рассмотрение к возможному применению.

6.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

В качестве метода коммерциализации выбран проектный инжиниринг, поскольку разработка представляет собой комплекс обоснованных расчетами рекомендаций по изменению конструктивных параметров действующей установки с повышением эффективности протекания процесса. Анализ рынка, проведенный ранее показал, что для данного проекта целевыми потребителями (Заказчиками) выступают две российских компании, при этом выбор инжиниринга в качестве метода коммерциализации позволит проецировать результаты исследования на аналогичные процессы, а также позволит использовать работу в качестве шаблона, последовательности определенных операций для выполнения исследований других процессов.

6.6 Инициация проекта

Заинтересованные стороны проекта представлены в таблице 8.

Таблица 8 - Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
ОАО «Салаватнефтеоргсинтез»	Интенсификация процесса, снижение расхода катализатора, снижение расхода бензола и этилена.
ОАО «Ангарский завод полимеров»	Улучшение протекание процесса, снижение расхода катализатора, снижение расхода бензола и этилена.

Цели проекта включают в себя цели в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения, таблица 9.

Таблица 9 - Цели и результат проекта

Цели проекта	Модернизация существующего реактора алкилирования
Ожидаемые результаты проекта:	Снижение концентрации катионов алюминия в сточных водах, снижение расходов реагентов,
Критерии приемки результата проекта:	Обоснованные расчетами технические решения. Экономическая целесообразность модернизации. Соответствие предлагаемых решений нормам технологического регламента.
Требования к результату проекта:	Требование:
	Дешевизна
	Эффективность
	Безопасность

Для разработки проекта создана рабочая группа, в состав которой вошли: исполнитель, руководитель и эксперт.

Таблица 10 - Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Т/з, час.
1	2	3	4	5
1	Ивашкина Е.Н., НИ ТПУ, профессор кафедры ХТТиХК	<i>Руководитель проекта</i>	Постановка задач, определение методов исследования, координирование работы исполнителя	40

1	2	3	4	5
2	Ткачев В.В., ОАО «Ангарский завод полимеров», начальник установки	<i>Эксперт проекта</i>	Предоставление исходных данных для исследования, экспертная оценка результатов исследования	30
3	Беккер А.В., НИ ТПУ, магистрант	<i>Исполнитель по проекту</i>	Выполнение расчетов, проведение исследования, анализ результатов	60
ИТОГО:				130

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а так же «границы проекта» - параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта.

Таблица 11 - Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
3.1. Бюджет проекта	-
3.1.1 Источник финансирования	-
3.2. Сроки проекта:	13.01.2016-01.06.2016
3.2.1 Дата утверждения плана управления проектом	12.03.2016
3.2.2 Дата завершения проекта	24.05.2016
3.3. Прочие ограничения и допущения	Ограниченная лицензия на использование специализированного ПО сроком на 2 месяца

6.7 Планирование управления научно-техническим проектом

Группа процессов планирования состоит из процессов, осуществляемых для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательности действий, требуемых для достижения данных целей.

План управления научным проектом должен включать в себя следующие элементы:

6.8 Иерархическая структура работ проекта

Структура работ по проекту представлена в виде схемы на рисунке 24.

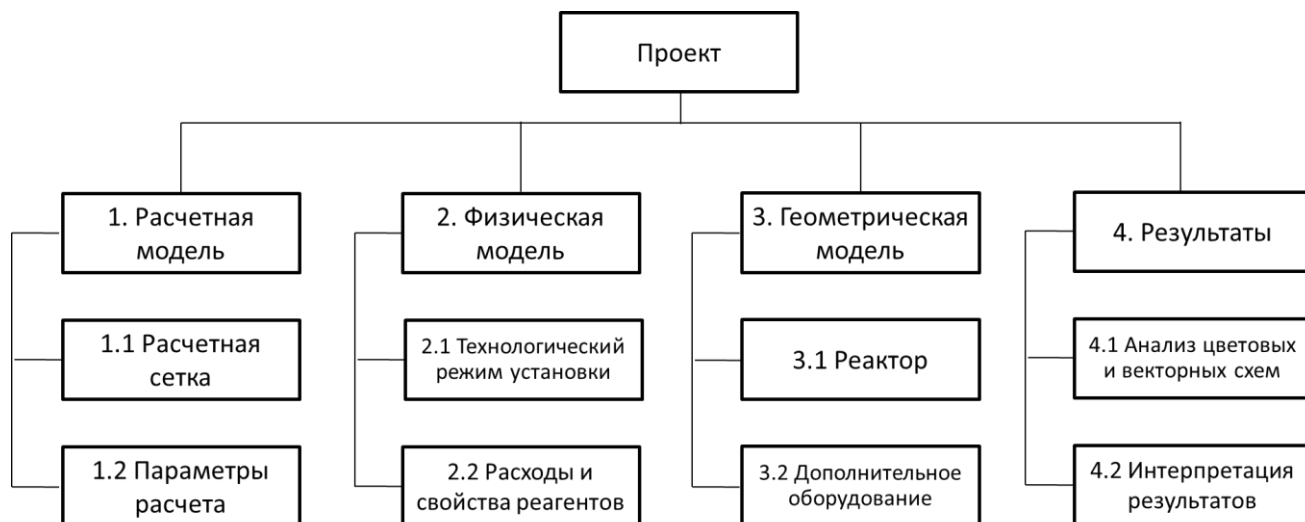


Рисунок 24 – Схема иерархической структуры работ проекта

6.9 Контрольные события проекта

В рамках данного раздела определены ключевые события проекта, их даты и результаты (таблица 12).

Таблица 12 - Контрольные события проекта

п/п	Контрольное событие	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	2	3	4
1	Сбор исходных данных для проектирования установки алкилирования бензола этиленом	01.02.16	Получены свойства исходных веществ, конструкция установки, расходы веществ на входе в реактор, технологический режим установки.
2	Сбор исходных данных для проектирования установки получения кумола	15.02.16	Получены свойства исходных веществ, конструкция установки, расходы веществ на входе в реактор, технологический режим установки.
3	Создание геометрической модели ректора этилбензола	28.02.16	Геометрическая 3D модель реактора, созданная в специализированном ПО

1	2	3	4
4	Создание геометрической модели реактора этилбензола	15.03.16	Геометрическая 3D модель реактора, созданная в специализированном ПО
5	Разработка физической модели реактора процесса алкилирования бензола этиленом	01.04.16	Разработана модель реактора, подготовленная для гидродинамического расчета
6	Разработка физической модели реактора процесса получения кумола	15.04.16	Разработана модель реактора, подготовленная для гидродинамического расчета
7	Решение поставленных задач в специализированном ПО	10.05.16	Выполненный расчет, с оформленными результатами в виде цветowych, векторных схем и данных о распределении концентраций веществ на выходе из реактора
8	Анализ и интерпретация результатов.	20.05.16	Вынесены рекомендации по реконструкции установок.

6.10 План проекта

Линейный график представлен в виде таблицы (таблица 13).

Таблица 13 - Календарный план проекта

Код работ	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников (ФИО ответственных исполнителей)
1	2	3	4	5	6
1.1	Расчетная сетка	8	01.02.16	10.02.16	Беккер А.В.
1.2	Параметры расчета	6	11.02.16	18.02.16	Беккер А.В.
2.1	Технологический режим установки	2	19.02.16	22.02.16	Беккер А.В., Ткачев В.В.
2.2	Расходы и свойства реагентов	4	23.02.16	26.02.16	Беккер А.В., Ткачев В.В.
3.1	Реактор	12	29.02.16	15.03.16	Беккер А.В.
3.2	Дополнительное оборудование	10	16.03.16	29.03.16	Беккер А.В.

1	2	3	4	5	6
4.1	Анализ цветowych и векторных схем	14	30.03.16	18.04.16	Беккер А.В., Ивашкина Е.Н.
4.2	Интерпретация результатов. Проверка на адекватность.	24	19.04.16	20.05.16	Беккер А.В., Ивашкина Е.Н.
Итого:		82			

Диаграмма Ганта – это тип столбчатых диаграмм (гистограмм), который используется для иллюстрации календарного плана проекта, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ (таблица 14).

Таблица 14 - Календарный план-график проектирования

Код	Вид работ	Исполнители	Т _к	Продолжительность выполнения работ												
				февр		март			апрель			май			июнь	
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
1.1	Расчетная сетка	Исп.	8	■												
1.2	Параметры расчета	Исп.	6	■												
2.1	Технологический режим установки	Исп., эксперт	2		■											
2.2	Расходы и свойства реагентов	Исп., эксперт	4		■											
3.1	Реактор	Исп.	12			■	■	■	■							
3.2	Дополнительное оборудование	Исп.	10				■	■	■	■						
4.1	Анализ цветowych и векторных схем	Исп., руководитель	14					■	■	■	■	■	■	■		
4.2	Интерпретация результатов	Исп., руководитель	24									■	■	■	■	■

Исполнитель
 Руководитель
 Эксперт

Сетевой график – графическое отображение комплекса работ по теме с установленными между ними взаимосвязями.

Составление сетевого план-графика основывается на методе критического пути.



Рисунок 25 – Сетевой план-график выполнения проекта

Таблица 15 -Параметры сетевого графика

Название работы	№ раб.	$T_{\text{кал}}$	$t_{\text{рн}}$	$t_{\text{ро}}$	$t_{\text{пн}}$	$t_{\text{по}}$	$R_{\text{п}}$	$R_{\text{с}}$
Расчетная сетка	1.1	8	0	8	0	8	0	8
Параметры расчета	1.2	6	8	14	8	24	0	16
Технологический режим установки	2.1	2	8	10	8	10	0	2
Расходы и свойства реагентов	2.2	4	20	24	20	24	0	4
Реактор	3.1	12	8	20	8	20	0	12
Дополнительное оборудование	3.2	10	10	20	10	24	0	14
Анализ цветовых и векторных схем	4.1	14	24	38	24	38	0	14
Интерпретация результатов. Проверка на адекватность	4.2	24	38	62	38	62	0	0
	i	120						
Резерв времени полного пути $R(L_{\text{п}})=14$								
Критический путь $T_{\text{кр}}=120$								

6.11 Бюджет научного исследования

Таблица 16 - Группировка затрат по статьям

Затраты по статьям					
Сырье, материалы, руб.	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ, руб.	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.	Отчисления на социальные нужды (30,5%), руб.	Итого плановая себестоимость, руб.
288,75	39950	146686,50	0	44739,38	207000,0

Таблица 17 - Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Марка, размер	Количество	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Лист	A4	200	1	200
Тетрадь	48 листов, клетка	1	45	45
Ручка	Гелиевая, черная	2	15	30
Всего за материалы				275
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				13,75
Итого по статье $C_{\text{м}}$				288,75

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ (таблица 18).

Таблица 18 - Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, т.р.	Общая стоимость оборудования, т.р.
Ноутбук Asus Aspire	1	39,95	39,95

Основная заработная плата (таблица 14)

Таблица 19 - Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистр	Эксперт
Календарное число дней	162	162	162
Количество нерабочих дней	41	41	41
- выходные дни	9	9	9
- праздничные дни			
Потери рабочего времени			
- отпуск	13	-	13
- невыходы по болезни	-	-	-
Действительный полугодовой фонд рабочего времени	71	95	71

Таблица 20 - Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_{б}$, руб.	k_p	$Z_{м}$, Руб	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб.дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	30000	1,3	39000	1300	71	92300
Инженер	15000	1,3	19500	650	71	46150
Магистрант	2000	1,3	2600	86,7	95	8236,5

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала (таблица 21).

Таблица 21 - Зарплата исполнителей проекта

Зарплата	Руководитель	Магистрант	Инженер
Основная зарплата	92300	8236,5	46150
Дополнительная зарплата	0	0	0
Итого по статье $C_{зп}$	0	0	0

Отчисления на социальные нужды – это такая статья, которая включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}})$$

где $k_{\text{внеб}}=30,5$ % коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Таблица 22 - Отчисления на социальные нужды

	Руководитель	Исполнитель	Эксперт
Зарплата	92300,00	8236,50	46150,00
Отчисления на социальные нужды	28151,50	2512,13	14075,75

6.12 Организационная структура проекта

Наиболее подходящей является проектная организационная структура научного проекта.

Таблица 23 - Выбор организационной структуры научного проекта

Критерии выбора	Функциональная	Матричная	Проектная
Степень неопределенности условий реализации проекта	Низкая	Высокая	Высокая
Технология проекта	Стандартная	Сложная	Новая
Сложность проекта	Низкая	Средняя	Высокая
Взаимозависимость между отдельными частями проекта	Низкая	Средняя	Высокая
Критичность фактора времени (обязательства по срокам завершения работ)	Низкая	Средняя	Высокая
Взаимосвязь и взаимозависимость проекта от организаций более высокого уровня	Высокая	Средняя	Низкая

6.13 Матрица ответственности

Для распределения ответственности между участниками проекта формируется матрица ответственности (таблица 24).

Таблица 24 - Матрица ответственности

Этапы проекта	Исполнитель/ магистрант	Руководитель/ профессор	Эксперт/ начальник установки
Расчетная модель	И	О	
Физическая модель	И	О	
Геометрическая модель	И	О	
Результаты	И	О	С

О – Ответственный

И – Исполнитель

С – согласующий

6.14 План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта (таблица 25).

Таблица 25 - План управления коммуникациями

№ п/п	Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
1	Статус проекта	Исполнитель проекта	Руководителю	Еженедельно (вторник)
2	Обмен информацией о текущем состоянии проекта	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Еженедельно (вторник)
3	Документы и информация по проекту	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Не позже сроков графиков и к. точек
4	О выполнении контрольной точки	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Не позже дня контрольного события по плану управления

6.15 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Эффективность научного ресурсосберегающего проекта включает в себя социальную эффективность, экономическую и бюджетную эффективность. Показатели общественной эффективности учитывают социально-экономические последствия осуществления инвестиционного проекта как для общества в целом, в том числе непосредственные результаты и затраты проекта, так и затраты и результаты в смежных секторах экономики, экологические, социальные и иные внеэкономические эффекты.

Показатели экономической эффективности проекта учитывают финансовые последствия его осуществления для предприятия, реализующего данный проект. В этом случае показатели эффективности проекта в целом характеризуют с экономической точки зрения технические, технологические и организационные проектные решения.

Бюджетная эффективность характеризуется участием государства в проекте с точки зрения расходов и доходов бюджетов всех уровней.

Кроме выше перечисленных видов эффективности можно выделить ресурсный эффект (характеризуется показателями, отражающими влияние инновации на объем производства и потребления того или иного вида ресурса), научно-технический (оценивается показателями новизны и полезности) и др.

6.16 Оценка абсолютной эффективности исследования

Составим план денежных потоков (таблица 21).

Таблица 26 - План денежных потоков

№	Показатель, млн.руб	Номер шага (периода) расчета (<i>t</i>)					
		0	1	2	3	4	5
1	2	3	4	5	6	7	8
Операционная деятельность							
1	Выручка без НДС	0,0	500,0	500,0	500,0	500,0	500,0

1	2	3	4	5	6	7	8
2	Полные текущие издержки, в том числе:	0,0	-191,7	-191,7	-191,7	-191,7	-191,7
3	прямые материальные затраты	0,0	-0,288	-0,288	-0,288	-0,288	-0,288
4	ФОТ основных рабочих, включая взносы во внебюджетные фонды	0,0	-191,4	-191,4	-191,4	-191,4	-191,4
5	Коммерческие расходы	30,0	30,0	30,0	30,0	30,0	30,0
6	Денежный поток от производственной (операционной) деятельности (п.1-п.2)	30,0	308,3	308,3	308,3	308,3	308,3
Инвестиционная деятельность							
7	Поступление инвестиций	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
8	Капиталовложения, обслуживание инвестиций	-200,0	-100,0	0,0	0,0	0,0	0,0
9	Сальдо от инвестиционной деятельности (п.7+п.8)	-200,0	-100,0	0,0	0,0	0,0	0,0
10	Сальдо суммарного потока (п.6+п.7)	-200	208,3	308,3	308,3	308,3	308,3
11	Сальдо накопленного потока	-200,0	8,3	316,6	624,9	933,2	1241,5
12	Коэффициент дисконтирования при ставке дохода 10%	1,00	0,909	0,826	0,751	0,683	0,621
13	Дисконтированное сальдо суммарного потока (стр.10*стр.12)	-200,0	189,3	254,6	231,5	210,5	191,4
14	Дисконтированные инвестиции	-200,0	-90,9	0,0	0,0	0,0	0,0

Чистый доход (ЧД) указан в последнем столбце 5 строки 11 таблицы: ЧД=1241,5тыс.руб. Определим ЧДД проекта при норме дисконта $E=10\%$, приводя поток к шагу 0 ($t_0=0$). Чистый дисконтированный доход определяется суммированием строки 13: ЧДД = 877,3 тыс.руб. Таким образом, проект, приведенный в примере, эффективен.

ВНД определяется, исходя из стр.10, подбором значения нормы дисконта. В результате получим $ВНД=124\%$. Это еще раз подтверждает эффективность проекта, так как $ВНД>E$. Потребность в финансировании (ПФ) определяется максимальным отрицательным значением по строке 11 и равно 200 тыс.руб (в периоде 1).

Сроком окупаемости:

$$t = \frac{-C_{н1}}{C_{сум2}} = \frac{200}{308,3} = 0,65 \text{ периода} \quad (1)$$

Где $C_{сум2}$ - сальдо суммарного потока 2 периода

$C_{н1}$ - сальдо накопленного потока 1 периода

Срок окупаемости, отсчитанный от начала нулевого периода, составляет 2,65 года, если же отсчитывать его от начала операционной деятельности (конец нулевого периода), он окажется равным 1,65 года.

Индекс доходности инвестиций:

$$ИД = 1 + \frac{ЧД}{K} = 1 + \frac{1241,5}{300,0} = 5,13$$

Для определения дисконтированного индекса доходности (ИДД) найдем сумму дисконтированных инвестиций (ДК). Для всех инвестиций ДК равна абсолютной величине суммы элементов строки 14, т.е. ДК=290,9 тыс.руб. Тогда

$$ИДД = 1 + \frac{ЧДД}{ДК} = 1 + \frac{877,3}{290,9} = 4,01$$

Так как ЧДД > 0, то ИДД > 1.

Расчет уровня безубыточности в периоде t (УБt) производится по формуле:

$$УБ_t = \frac{C_t - C_{vt} - DC_t}{V_t - C_{vt}} \quad (2)$$

Где V_t - объем производства (продаж) в периоде t;

C_t - полные текущие издержки производства;

C_{vt} - условно-переменная часть полных текущих издержек производства;

DC_t - доходы от внереализационной деятельности за вычетом расходов по этой деятельности в периоде.

Оценим уровень безубыточности для проекта, описанного в примере (таблица 27).

Таблица 27 - Расчет безубыточности

№	Показатель, млн.руб	Номер шага (периода)расчета (t)				
		1	2	3	4	5
1	Выручка без НДС	500,0	500,0	500,0	500,0	500,0
2	Полные текущие издержки, в том числе:	191,7	191,7	191,7	191,7	191,7
3	прямые материальные затраты	0,288	0,288	0,288	0,288	0,288
4	ФОТ основных рабочих, включая взносы во внебюджетные фонды	191,4	191,4	191,4	191,4	191,4
8	Коммерческие расходы	30,0	30,0	30,0	30,0	30,0
10	Условно переменные издержки (стр3+4+5+8)	221,7	221,7	221,7	221,7	221,7
11	Уровень безубыточности УБt [(стр. 2 - стр.10)/(стр. 1 - стр. 10)]	0,11	0,11	0,11	0,11	0,11

Для оценки социальной эффективности проекта выявлены критерии социальной эффективности (таблица 28).

Таблица 28 - Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Превышена ПДК катионов алюминия в сточных водах	Концентрация катионов алюминия снижена до предельно-допустимой
Нагрузка на оборудование	Загруженность ниже за счет улучшения качества протекания процесса
Взрывопожароопасность объекта	Объект безопаснее за счет снижения опасного вещества на площадке установки

6.17 Оценка сравнительной эффективности исследования

Проведем анализ сравнительной эффективности исследования текущего проекта и его аналога. Для проведения аналогичного исследования может потребоваться более дорогое оборудование, в частности, каталитическая установка исследования процессов в условиях повышенных давлений. Также возможно проведение исследования более квалифицированным работником, что будет отражено в расходах на заработную плату.

Таблица 29 – Группировка затрат по статьям аналогов разработки

Вариант исполнения	Сырье	Специальное оборудование	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Итого плановая себестоимость
Разработка	288,75	39950	146686,5	0	44739,4	231664,6
Аналог	288,75	39950	168689,5	0	51450,3	260378,5

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{231664,6}{260378,5} = 0,89$$

$$I_{\Phi}^{a1} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{260378,5}{260378,5} = 1$$

где I_{ϕ}^p - интегральный финансовый показатель разработки; Φ_{pi} - стоимость i-го варианта исполнения; Φ_{max} - максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное удешевление стоимости разработки в разы.

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p \quad (3.7)$$

где I_m - интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов; a_i - весовой коэффициент i-го параметра; b_i^a , b_i^p - бальная оценка i-го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания; n - число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы, пример которой приведен ниже.

Таблица 30 - Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,15	4	3
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	4	5
3. Срок эксплуатации	0,20	5	5
4. Цена	0,25	5	3
5. Надежность	0,25	4	5
ИТОГО	1	22	21

$$I_m^p = 4,45$$

$$I_1^a = 4,2$$

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{финр}^p$) и аналога ($I_{финр}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p} = \frac{4,45}{0,89} = 5$$

$$I_{финр}^a = \frac{I_m^{a1}}{I_\phi^{a1}} = \frac{4,2}{1} = 4,2$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта. Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^a} = \frac{5}{4,2} = 1,19$$

где $\mathcal{E}_{ср}$ – сравнительная эффективность проекта; I_m^p – интегральный показатель разработки; I_m^a – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 31 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Аналог	Разработка
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	0,89
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,45	4,2
3	Интегральный показатель эффективности	5	4,2
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,19	

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило выбрать наиболее оптимальный вариант технологии проектирования, с использованием программного комплекса FlowVision.

7 Социальная ответственность

7.1 Введение

В 2014 году правительством РФ подписано генеральное соглашение с общероссийскими объединениями профсоюзов и работодателей на 2014-2016 годы [1]. По традиции в данном соглашении затронуты проблемы охраны труда и стратегии их решения. В частности, в соглашении говорится о стремлении к совершенствованию нормативной правовой базы и улучшения здоровья работников. Затронута задача по разработке комплекса мер, направленных на экономическое стимулирование технического перевооружения и модернизацию производства в целях улучшения условий труда. Говорится также о необходимости содействовать развитию системы послесменной реабилитации работников и совершенствовать систему обеспечения работающих современными средствами индивидуальной защиты.

Система управления охраной труда даёт предприятию возможность разработать свою концепцию по охране труда, установить цели (целевые показатели) охраны труда, организовать трудовые процессы с принятием необходимых мер повышения результативности охраны труда, а также создать социально-ориентированное производство, исключить ущерб в результате аварий, инцидентов и несчастных случаев [2]. Ненадлежащее соблюдение нормативов может привести к авариям на предприятии и остановкам производства, включая остановки в связи с ремонтом установок и отдельных химических аппаратов в силу непредвиденных обстоятельств, что чревато не только экономическими убытками. Как показывает история становления и развития химической промышленности, нельзя исключать также возможность экологической катастрофы при ненадлежащем обеспечении безопасности и строгой регламентированности, что включает большое количество этапов, начиная охраной труда индивидуальных работников и заканчивая строгими управленческими принципами на предприятии в целом.

Охрана труда — система сохранения жизни и здоровья работников в процессе трудовой деятельности, включающая в себя правовые, социально-экономические, организационно-технические, санитарно-гигиенические, лечебно-профилактические, реабилитационные и иные мероприятия [3].

Кроме того, охрана труда рассматривается в юридической литературе ещё с нескольких позиций:

1. Как основной принцип трудового права и трудовых правоотношений;
2. Как система законодательных актов, а также предупредительных и регламентирующих социально-экономических, организационных, технических, санитарно-гигиенических и лечебно-профилактических мероприятий, технических средств и методов, направленных на обеспечение безопасных условий труда [4].

Охрана окружающей среды — комплекс мер, предназначенных для ограничения отрицательного влияния человеческой деятельности на природу. Одной из таких мер может являться, в случае химического предприятия, ограничение выбросов в атмосферу и гидросферу с целью улучшения общей экологической обстановки.

Нельзя недооценивать важность учёта указанных мер, включая охрану окружающей среды и охрану труда и здоровья работников предприятия в рамках любой научно-исследовательской работы, так или иначе связанной с инновациями в сфере технологий.

7.2 Анализ опасных и вредных факторов

7.2.1 Вредные вещества

В процессе алкилирования используются химически вредные вещества: этилен, бензол, хлороводород, этилбензол.

Целевым продуктом данного производства является этилбензол

В таблице 1 представлен перечень вредных веществ и класс опасности, согласно [5]

Таблица 32 – Характеристика токсичных свойств сырья, полупродуктов и готовой продукции производства.

Наименование вредных веществ	Класс опасности по ПУЭ	ПДК в воздухе рабочей зоны, мг/м ³	Характеристика токсичности
Этилен	4	300	На организм человека действует как наркотик. При лёгком отравлении вначале чувствуется головная боль, головокружение, сердцебиение, слабость, беспричинная весёлость, сухость во рту, тошнота.
Хлороводород	1	0,015	Вдыхание хлороводорода может привести к кашлю, удушью, воспалению носа, горла и верхних дыхательных путей, а в тяжёлых случаях, отёк легких, нарушение работы кровеносной системы, и даже смерть
Бензол	2	0,5	При концентрации в воздухе выше 2,2% об. происходит молниеносное отравление – быстрая потеря сознания и смерть. С повышением температуры окружающей среды сила токсического воздействия повышается.
Этилбензол	2	0,5	Токсичен, отравление им приводит к следующим симптомам: головная боль, сонливость, головокружение и кашель

Работа с вредными и опасными химическими реактивами проводится в специальных помещениях, оборудованных вытяжными шкафами. В соответствии с законодательством Российской Федерации, рабочие и служащие, связанные по роду своей деятельности с вредными и опасными условиями труда, должны в обязательном порядке проходить медицинский осмотр. В производственных помещениях следует иметь аптечки, укомплектованные медикаментами, для оказания первой доврачебной помощи.

Каждый работник или посетитель производства обеспечивается следующими средствами защиты:

- головы (каска);
- органов дыхания (изолирующие дыхательные аппараты, противогазы, респираторы);

- лица и органов зрения (лицевые щитки, защитные очки, прозрачные экраны);
- кожи рук (защитные перчатки, рабочие рукавицы).

7.2.2 Освещение

Требования к освещению рабочих мест зафиксированы в [6]. Освещённость на рабочем месте для зрительной работы высокой точности и наименьшего размера объекта различения от 0,30 до 0,50 мм, составляет 200 лк.

Отраженная блесккость на рабочих поверхностях (экран, стол, приборная панель и др.) должна быть ограничена за счет правильного выбора типа светильников и расположения рабочих мест по отношению к источникам естественного и искусственного освещения.

Для обеспечения нормируемых показателей освещенности необходим постоянный контроль исправности осветительного оборудования и его замена, в случае неисправности.

7.2.3 Вибрации и шум

Источниками шума и вибрации на рабочем месте в операторской являются электродвигатели насосов насосной станции, а именно насосы позиции Н-59/1,2, нагнетательный компрессор, которые находятся в непосредственной близости от рабочего места.

Нормальный уровень громкости не оказывающий вредного воздействия на органы слуха для звуков с частотой 1000 Гц соответствует давлению 75 дБ. При длительном воздействии шума снижается острота слуха, нарушается сердечно-сосудистая, центральная нервная система, происходит нарушение координации движения. Весь комплекс изменений, возникающих в организме

человека при длительном воздействии шума, рассматривается как "шумовая болезнь" [6].

Вибрация вызывает в организме человека многочисленные реакции, которые являются причиной функциональных расстройств периферийной нервной системы, суставов, крови (тромбы). Вредное воздействие вибрации выражается в виде повышенного утомления, головной боли, болей в суставах.

Если порог слышимости характеризовать в дБ, то болевой порог составит примерно 130-140 дБ. Допустимый уровень вибрации - 63 Гц [6].

Для снижения уровня шума и вибраций оборудование и приборы устанавливают на фундаменты и амортизирующие прокладки. Уменьшить уровень шума возможно использованием звукопоглощающих материалов с максимальными коэффициентами звукопоглощения в области частот 63-8000 Гц для отделки помещений.

7.2.4 Микроклимат помещений

Биофизическая совместимость характеристик человека и характеристик среды обеспечена в соответствии с [7].

Оптимальные параметры микроклимата на рабочих местах соответствуют требованиям Санитарных правил и нормативов "Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений" применительно к выполнению работ различных категорий в холодный и теплый период года.

7.3 Анализ опасных факторов производственной среды

7.3.1 Термические опасности

Источником термической опасности на данном производстве являются теплообменное оборудование, трубопроводные магистрали с подогретыми реагентами, а также реактор алкилирования, в котором проходит экзотермическая реакция. К тому же, установка эксплуатируется при

повышенной температуре 110 - 135°C. Нарушение герметичности оборудования, приводит к получению ожогов.

Для того чтобы избежать термических повреждений, нужно следовать инструкции при эксплуатации оборудования.

Используемые средства защиты:

- лицевые щитки, защитные очки, прозрачные экраны;
- защитные перчатки, рабочие рукавицы;
- спецодежда;
- каски.

7.3.2 Электробезопасность

Поражение электрическим током возможно при повреждении изоляции применяемых персоналом электрическим прибором или устройств, если человек одновременно касается включенного в сеть поврежденного участка электрической проводки, например, питающего прибор шнура и потенциально опасных частей устройств или стоит на токопроводящем полу и касается металлической части прибора с поврежденной изоляцией и включенным в сеть.

Безопасность работы обеспечена в конструкции установки. Источник питания установки имеет металлический кожух, который исключает возможность прикосновения к токоведущим частям, имеется зануление.

7.3.3 Пожаровзрывоопасность

Установка алкилирования отличается от других установок наличием в системе большого количества этилена, бензола, этилбензола - сырья установки и других углеводородных газов, имеющих широкий предел взрываемости.

Существует опасность взрыва или пожара в смеси с кислородом без прямого воздействия огня.

Противопожарные меры не исключают возможность возникновения пожара от аварийной разгерметизации оборудования или неправильной организации проведения огневых работ, небрежных действий персонала.

Одним из основных требований предупреждения несчастных случаев и пожаров является исключение скопления паров, газов и жидких нефтепродуктов путем вентиляции мест возможного их скопления и уборки разлитого нефтепродукта.

Для своевременной ликвидации очагов возможных загораний применяются первичные средства пожаротушения, к которым относятся: ящики с песком и лопатами, которые находятся на аппаратном дворе, в доступном месте; асбестовое полотно; водяной пар; огнетушители порошковые; огнетушители углекислотные; вода.

Средства пожаротушения и противопожарный инвентарь должны быть в исправном состоянии и окрашен в красный цвет.

7.4 Охрана окружающей среды

7.4.1 Воздействие на атмосферу

Производство этилбензола имеет следующие выбросы вредных веществ в атмосферу:

выбросы от неплотностей оборудования, от маслосклада, от воздушника дренажной емкости, от емкостей, выбросы от вентиляции, выбросы с компрессоров и т.д. (углеводородные газы).

выбросы технологических систем в атмосферу (сод. бензол, HCl, этилбензол).

В соответствии с Законом Российской Федерации о государственном предприятии природоохранные мероприятия должны полностью компенсировать отрицательное воздействие деятельности предприятия на окружающую среду.

Для защиты окружающей среды предусмотрены следующие мероприятия:

технологический процесс проводится в герметичном оборудовании, поэтому неорганизованные выбросы за счёт неплотностей технологического оборудования сведены к минимуму;

освобождение оборудования от газообразных продуктов при сбросе давления осуществляется в закрытую факельную систему через факельный сепаратор.

7.4.2 Воздействие на гидросферу

Данное производство оказывает негативное влияние на гидросферу, основным источником опасности для окружающей среды, в данном случае являются:

- сточные воды от торцевых уплотнений насосов;
- химзагрязненные стоки (содержат катионы алюминия, ароматические углеводороды, этилбензол, бензол);
- дождевые и талые воды.

Основные меры, принимаемые для защиты окружающей среды:

- для перекачки нефтепродуктов и токсичных продуктов применяются насосы с двойным торцевым уплотнением;
- сточные воды через трапы, воронки и дождеприемные колодцы по самотечному трубопроводу поступают в самотечную закрытую сеть промливневой канализации предприятия и далее совместно со сточными водами ОАО «АЗП» отводятся на заводские очистные сооружения.

Бытовые сточные воды отводятся по закрытой самотечной сети канализации.

Объект не оказывает отрицательного воздействия на растительный и животный мир, т.к. этот вопрос решён при строительстве основных производственных объектов этого района.

7.4.3 Воздействие на литосферу

На данном производстве осуществляется ежегодный плановый ремонт оборудования и чистка трубопроводов, реакторных устройств и контактных поверхностей от шлама, который необходимо утилизировать. Утилизация данных отходов оказывает негативное влияние на литосферу. Для утилизации необходимо проводить захоронение на специальных полигонах для промышленных отходов.

7.5 Защита в чрезвычайных ситуациях

Мероприятия, проводимые во время чрезвычайных ситуаций (аварий, стихийных бедствий, военных конфликтов), представляют собой проведение спасательных работ и неотложных аварийно-восстановительных работ в очаге поражения. Данные мероприятия должны проводиться на основании положения комплекса государственных стандартов по предупреждению и ликвидации чрезвычайной ситуации и определены в [9].

Чрезвычайные ситуации могут сложиться в результате следующих нарушений: прекращение подачи сырья; остановка газовых нагнетателей; остановка воздушных нагнетателей; прекращение подачи воды; прекращение подачи электроэнергии; нарушение герметичности соединений трубопроводов, аппаратов или их разрыв; неисправность средств контроля и автоматики.

При возникновении аварийной ситуации технологический персонал должен немедленно сообщить об аварийной ситуации диспетчеру, начальнику установки и принять соответствующие меры по ликвидации аварии, руководствуясь "Планом локализации аварийных ситуаций" (ПЛАС).

Во избежание отравления ядовитыми парами необходимо воспользоваться противогазами, которые находятся на видном месте рабочего помещения.

Для исключения возможности несчастных случаев должны проводиться обучение и проверка знаний работников требований безопасности труда в соответствии с [9].

Типичной ЧС для нефтехимического производства является пожар, это обуславливается широким спектром горючих веществ, используемых в производстве.

7.6 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

В соответствии с [3] каждый человек имеет право на труд в условиях, отвечающих требованиям безопасности и гигиены, и право на охрану здоровья. А в соответствии с п. 5 Генерального соглашения между общероссийскими объединениями профсоюзов, общероссийскими объединениями работодателей и Правительством Российской Федерации на 2014 - 2016 годы [1] обеспечение безопасности жизни и здоровья работников в процессе трудовой деятельности является одним из национальных приоритетов в целях сохранения человеческого капитала и рассматриваются в неразрывной связи с решением задач по улучшению условий и охраны труда, промышленной и экологической безопасности.

Большое значение имеет выбор средств освещения. При освещении рабочих мест необходимо обеспечить достаточный уровень общего освещения, специальное освещение рабочей поверхности или пространства, одинаковость освещения разных приборов, контраст между рабочими элементами и фоном, отсутствие слепящего действия света.

Заключение

Современные компьютерные программы для моделирования движения жидкостей и газа позволяют оценить эффективность аппаратов химической технологии уже на стадии проектирования.

Моделирование реакторов алкилирования бензола этиленом и бензола пропиленом с применением методов вычислительной гидродинамики показало, что применение смесительных устройств для перемешивания реагентов, а также использование барботера в качестве оборудования для подачи этилена в реактор достаточно эффективно с точки зрения равномерного распределения газообразных веществ в жидкой фазе.

Для повышения эффективности работы смесительного устройства перед реактором алкилирования требуется более равномерное распределение концентраций по сечению смесительного устройства, что достигается путем установки дополнительных смесительных элементов.

В исследуемом смесителе, на основании проведенных гидродинамических расчетов, предпочтительнее будет следующий вариант ввода реагентов: ввод катализатора в первый патрубок, бензола – во второй. Обоснованием данного выбора является более равномерное распределение реагентов по сечению смесителя, мольная доля катализатора 0,1 – 0,15 (при другом варианте 0,06–0,08). Результаты исследования обусловлены физическими свойствами жидкостей, а также большим массовым расходом бензола относительно расхода катализаторного комплекса.

Реактор алкилирования бензола пропиленом характеризуется отсутствием дополнительных смесительных устройств на входе в реактор, поэтому в результате проведенных численных исследований получено градиентное распределение мольных долей реагентов по сечению реактора из-за подачи пропилена не через барботер, а через трубопровод. Критерий Рейнольдса потока, проходящего через трубопровод подачи пропилена, равен 1489,3, что

соответствует ламинарному режиму движения в трубопроводе, но близко к переходному значению.

По результатам работы вынесены следующие рекомендации по оптимизации конструкции реакторов: 1) для реактора алкилирования бензола пропиленом требуется увеличение диаметра подводящего пропилен трубопровода; 2) подача пропилена через барботер; 3) необходимо предусмотреть дополнительную смесительную камеру для интенсификации процесса смешения реагентов и катализаторного комплекса; 4) для реактора алкилирования бензола этиленом наиболее эффективным является ввод катализатора в первый патрубок, бензола – во второй; 5) необходимо сместить барботер ниже устройства ввода реагентов.

Список публикаций студента

1. Khlebnikova E. S. , Bekker A. V. , Ivashkina E. N. , Dolganova I. O. , Yurjev E. M. Thermodynamic Analysis of Benzene Alkylation with Ethylene // Procedia Chemistry. - 2015 - Vol. 15. - p. 42-48
2. Khlebnikova E. S. , Bekker A. V. , Ivashkina E. N. Hydrodynamics of reactant mixing in benzene with ethylene alkylation // Procedia Chemistry. - 2014 - Vol. 10. - p. 297-304
3. Ивашкина (Михайлова) Е. Н. , Хлебникова Е. С. , Беккер А. В. , Белинская Н. С. , Ткачев В. В. Исследование процесса смешения реагентов в технологии алкилирования бензола этиленом с использованием методов вычислительной гидродинамики // Химическая промышленность сегодня : Ежемесячный научно-технический журнал. - . - 2014 - №. 8. - С. 46-56
4. Bekker A. V. , Khlebnikova E. S. Die Modellierung der Mischerarbeit der Anlage von Alkylierungdes Benzols mit Athylen // Problems of Geology and Subsurface Development : Proceedings of the 18th International Scientific Symposium of students, Postgraduates and young Scientists devoted to the 115th Anniversary of Academician K.N. Satpaev and 120th Anniversary of Corresponding member of RAN of USSR F.N. Shakhov. - Tomsk : TPU Publishing House. - 2014 - Vol. 2. - p. 734-736
5. Беккер А. В. , Заболотнов А. Ю. Моделирование процесса смешения реагентов в технологии жидкофазного алкилирования бензола этиленом // Современные научные исследования и инновации. - 2014 - №. 8. - С. 1-4
6. Bekker A. V. , Khlebnikova E. S. CFD - Programme fur analyse der arbeit von erdolchemischen productionsausrustung // Проблемы геологии и освоения недр: труды XIX Международного симпозиума имени академика М. А. Усова студентов и молодых ученых, посвященного 70-летнему юбилею Победы советского народа над фашистской Германией , Томск, 6-10 Апреля 2015. - Томск: Изд-во ТПУ, 2015 - Т. 2 - С. 781-782
7. Беккер А. В. Проблемы современного инженерного образования с точки зрения студента // Современные техника и технологии: сборник трудов XXI

- Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых: в 2 т, Томск, 5-9 Октября 2015. - Томск: ТПУ, 2015 - Т. 2 - С. 263-266
8. Беккер А. В. , Ивашкина (Михайлова) Е. Н. , Хлебникова Е. С. Sozдание modeli smesitelnogo ustroystva v tehnologii polucheniya etilbenzola. [Model development of mixing chamber in ethylbenzene production] // Эффективное использование ресурсов и охрана окружающей среды - ключевые вопросы развития горно-металлургического комплекса; Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов: материалы международных конференций: в 2 т., Усть-Каменогорск, 20-23 Мая 2015. - Усть-Каменогорск: ВКГТУ им. Д. Серикбаева, 2015 - Т. 1 - С. 413-419
9. Верлинский М. В. , Беккер А. В. Гидродинамика жидкофазного процесса алкилирования бензола пропиленом // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XVI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, посвященной 115-летию со дня рождения профессора Л.П. Кулёва: в 2 т., Томск, 25-29 Мая 2015. - Томск: ТПУ, 2015 - Т. 2 - С. 329-331
10. Khlebnikova E. S. , Dolganova I. O. , Belinskaya N. S. , Ivashkina E. N. , Bekker A. V. Analysis of reactor and mixing equipment for benzene alkylation with ethylene using mathematical model // Seventh Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology: TOCAT 7. Book of Abstracts, Kyoto, June 1-6, 2014. - Tokyo: Catalysis Society of Japan, 2014 - p. 1-2
11. Bekker A. V. , Khlebnikova E. S. Die modellierung der mischerarbeit der anlage Von alkylierungdes benzols mit athylen // Проблемы геологии и освоения недр: Труды XVIII Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых ученых, посвященного 115-летию со дня рождения академика Академии наук СССР, профессора К.И. Сатпаева, 120-летию со дня рождения члена-корреспондента Академии наук СССР, профессора Ф.Н. Шахова, Томск, 7-11 Апреля 2014. - Томск: Изд-во ТПУ, 2014 - Т. 2 - С. 734-736

12. Хлебникова Е. С. , Беккер А. В. Применение методов вычислительной гидродинамики для анализа работы промышленных объектов нефтехимии // Современные техника и технологии: сборник трудов XX международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых: в 3 т., Томск, 14-18 Апреля 2014. - Томск: ТПУ, 2014 - Т. 2 - С. 267-268
13. Хлебникова Е. С. , Беккер А. В. , Белинская Н. С. Численные исследования процесса алкилирования бензола этиленом // Проблемы геологии и освоения недр: Труды XVIII Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых ученых, посвященного 115-летию со дня рождения академика Академии наук СССР, профессора К.И. Сатпаева, 120-летию со дня рождения члена-корреспондента Академии наук СССР, профессора Ф.Н. Шахова, Томск, 7-11 Апреля 2014. - Томск: Изд-во ТПУ, 2014 - Т. 2 - С. 237-239
14. Беккер А. В. Исследование гидродинамики процесса смешения реагентов в технологии алкилирования бензола этиленом с использованием вычислительных методов // XXV Менделеевская конференция молодых учёных: сборник тезисов, Томск, 19-25 Апреля 2015. - Москва: Национальное образование, 2015 - С. 68
15. Khlebnikova E. S. , Dolganova I. O. , Belinskaya N. S. , Ivashkina E. N. , Bekker A. V. Intensification of reactants mixing during benzene alkylation with ethylene [Electronic resorces] // XXI International Conference on Chemical Reactors (CHEMREACTOR 21) [Electronic resource] : abstracts/ Delft University of Technology, TU Delft Process Technology Institute, The Netherlands ; ed.: A.S. Noskov, Delft, September 22-25, 2014. - Novosibirsk: Boreskov Institute of Catalysis SB RAS, 2014 - p. 251-252 – CD
16. Беккер А. В. , Ивашкина (Михайлова) Е. Н. , Хлебникова Е. С. Моделирование работы смесительного устройства установки алкилирования бензола этиленом // Химия под знаком СИГМА: исследование, инновации, технологии: тезисы докладов IV Всероссийской научной молодежной школы-

конференции , Омск, 12-18 Мая 2014. - Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2014 - С. 301-302.

Список литературы

1. Производство и рынок этилбензола в России // Евразийский химический рынок. 2011. - Т. 76, № 1. URL: www.chemmarket.info (дата обращения: 26.01.2014).
- 2 Einführung in die Herstellung von Ethylbenzol [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.chemgapedia.de> (дата обращения 20.01.2015).
- 3 Carlo Perego, Patrizia Ingallina. Combining alkylation and transalkylation for alkylaromatic production // Green Chemistry. 2004. Issue 6. PP. 274 - 279. DOI: 10.1039/B403277M
- 4 Meyers R.A. Handbook of Petrochemicals Production Process. McGraw-Hill professional. 2005. Chapter 5.3.
- 5 Forni L., Cremona G., Missineo F., Bellussi G., Perego C., Pazzuconi G. Transalkylation of m-diethylbenzene over large-pore zeolites // Applied Catalysis A: General. 1995. Volume 121. Issue 2. PP. 261 - 272. DOI: 10.1016/0926-860X(94)00209-6
- 6 Michal Hornáček, Pavol Hudec, Agáta Smiešková, Tibor Jakubík. Alkylation of Benzene with 1-Alkenes over Zeolite Y and Mordenite // Acta Chimica Slovaca. 2009. Volume 2. Issue 1. PP. 31 - 45.
- 7 Patent 5,081,323 USA. C07C 266. Liquid phase alkylation or transalkylation process using zeolite beta / Innes, A.Robert, Nacamuli, J.Gerald, Zones; I.Stacey / Chevron Research and Technology Company; Filling date: 22.11.1989; Issue date: 14.01.1992.
- 8 Patent 7,745,674 USA. IPC C07C 2/66; C07C 6/12. Alkylation slurry reactor / Boyer, C. Christopher, Jr. Smith, A. Lawrence / Catalytic Distillation Technologies; Filling date: 20.08.2008; Issue date: 29.06.2009.
- 9 Thomas F. Degnan Jr., C. Morris Smith, Chaya R. Venkat, Thomas F. Degnan Jr. Alkylation of aromatics with ethylene and propylene: recent developments in commercial processes // Applied Catalysis A: General. 2011, Volume 221. Issue 1-2. PP. 283 - 294. DOI: 10.1016/S0926-860X(01)00807-9

10. Технологический регламент производства этилбензола цеха 126/127 ОАО «АЗП»
11. Технологическая инструкция по эксплуатации отделения алкилирования и приготовления катализаторного комплекса производства этилбензола цеха 126/127 ОАО «АЗП»
12. Chenier Philips J. Survey of Industrial Chemistry. – New York: Kluwer Academic, 2002. – P. 469-470.
13. Райд К. Курс физической органической химии. – М.: Мир, 1972. – 576 с.
14. [Тимофеев В.С. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза: учебное пособие для вузов / В.С. Тимофеев, Л.А. Серафимов. – 2-е изд., перераб. – М.: Высшая школа, 2003. – 536 с.
15. Сайт. Chemguide. Helping you to understand chemistry. – Режим доступа: www.chemguide.co.uk, вход свободный.
16. Чижиумов С. Д. Основы гидродинамики : Учебное пособие / С. Д. Чижиумов. – Комсомольск-на-Амуре : ГОУВПО «КНАГТУ», 2007. – 106 с.
19. Коркодинов Я. А. Обзор семейства $k - \epsilon$ моделей для моделирования турбулентности / Пермский национальный исследовательский политехнический университет, режим доступа: <http://vestnik.pstu.ru>
20. Моделирование трехмерных стационарных и нестационарных течений жидкости и газа [Электронный ресурс]. – Режим доступа: - <http://www.flowvision.ru/>
21. ГОСТ 12.1.005—88. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны [Текст]. - введ. 01.01.1989.- М.: Стандартинформ, 2008. – 49 с.
22. СанПиН 2.2.4.584-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. Санитарные правила и нормы.
23. ГОСТ 12.1.007. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.
24. ГОСТ 12.1.003-89. Шум. Общие требования безопасности.

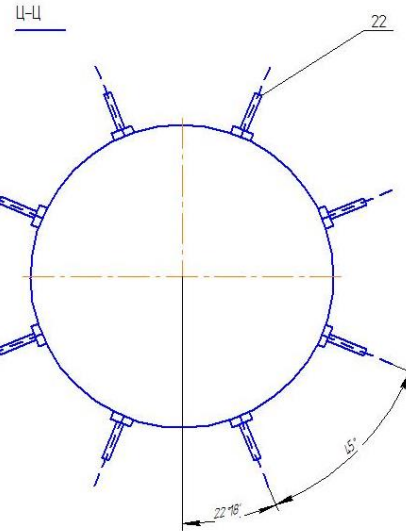
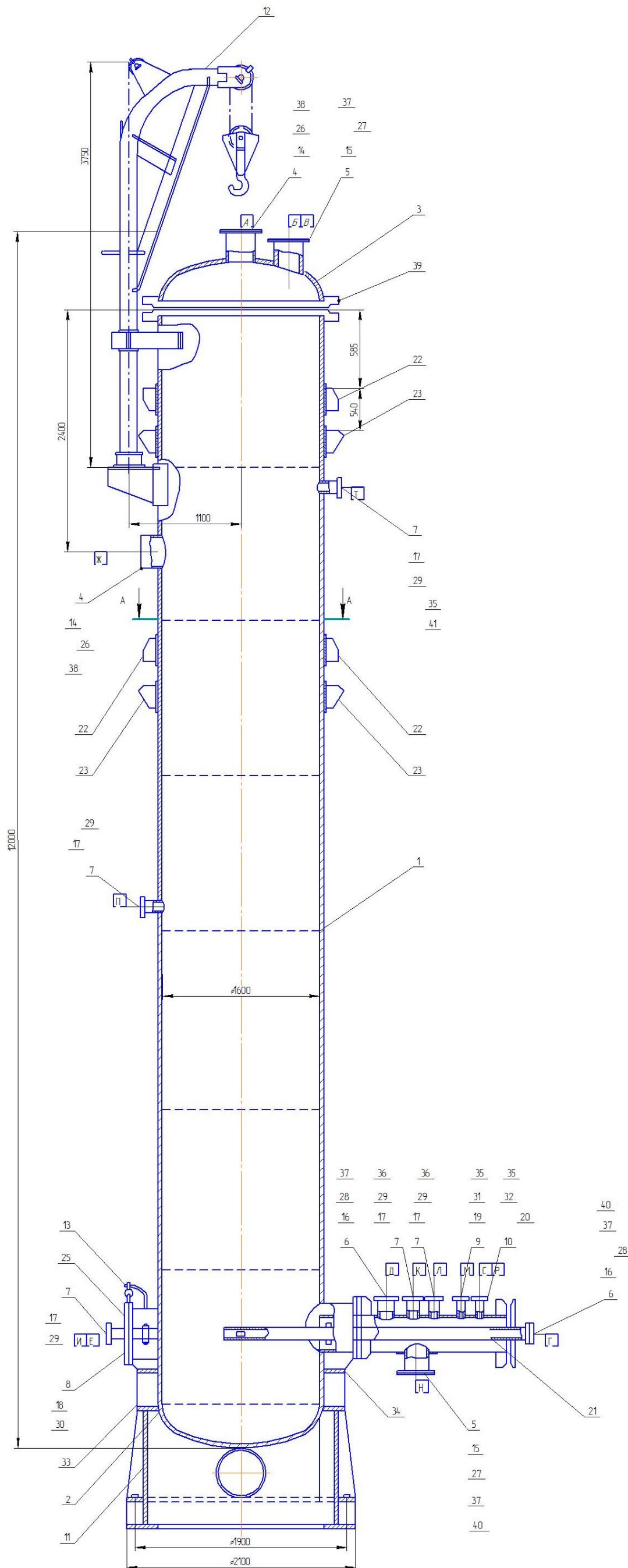
25. ГОСТ 12.1.012-90. Вибрационная безопасность. Общие требования.
26. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.
27. ГОСТ 12.1.002–84. Электрические поля промышленной частоты. Допустимые уровни и требования к проведению контроля на рабочем месте [Текст].-введ. 01.01.1986.- М.: Стандартинформ, 2009. – 7 с.
28. СанПиН 2.2.4.1191-03.Электромагнитные поля в производственных условиях зданий [Электронный ресурс]. - Режим доступа [www.URL: http://www.vrednost.ru/2241191-03.php](http://www.vrednost.ru/2241191-03.php)
29. ГОСТ Р 22.0.01-94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения [Текст]. - введ. 01.01.1995.- М.: Издательство стандартов, 1994. – 11 с.
30. ГОСТ 12.0.004-90. Организация обучения безопасности труда [Текст]. - введ. 01.07.1991.- М.: Стандартинформ, 2010. – 16 с.
31. Конституция Российской Федерации [Электронный ресурс]. - Режим доступа [www. URL: http://www.consultant.ru/popular/cons](http://www.consultant.ru/popular/cons)
32. Генеральное соглашение между общероссийскими объединениями профсоюзов, общероссийскими объединениями работодателей и Правительством Российской Федерации на 2014 - 2016 годы от 25 декабря 2013 г. [Электронный ресурс]: - Режим доступа [www.URL: http://www.rg.ru/2013/12/30/a904631-dok.html](http://www.rg.ru/2013/12/30/a904631-dok.html)
33. Белов С.В., Ильницкая А.В., Козьяков А.Ф. Безопасность жизнедеятельности и др. 7-е изд., стер. — М.: Высшая школа, 2007. — 616 с.
34. ГОСТ 12.1.038–82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.
35. Генеральное соглашение между общероссийскими объединениями профсоюзов, общероссийскими объединениями работодателей и Правительством Российской Федерации на 2014 – 2016 годы;

36. ГОСТ 12.0.009-2009 «Система управления охраной труда на малых предприятиях. Требования и рекомендации по применению»;
37. Трудовой кодекс Российской Федерации;
38. ГОСТ 12.0.230-07 «Система безопасности труда. Системы управления охраной труда. Общие требования»;
39. Приказ Минтруда России от 24.07.2013 N 328н "Об утверждении Правил по охране труда при эксплуатации электроустановок" (Зарегистрировано в Минюсте России 12.12.2013 N 30593);
40. Шум. Общие требования безопасности. [Текст]. –введ. 01.07.1984. – М.: Стандартиформ, 2008. – 13 с.;
41. ГОСТ 12.1.005–88. Общие санитарно–гигиенические требования к воздуху рабочей зоны [Текст]. –введ. 01.01.1989. – М.:Стандартиформ, 2008. – 49 с.;
42. ГОСТ 12.1.038-82 «Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов»;
43. ГОСТ Р 22.0.01–94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения [Текст]. – введ. 01.01.1995. – М.: Издательство стандартов, 1994. – 1
44. Тимофеев В.С., Серафимов Л.А. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза. Учебное пособие для ВУЗов. 2-е изд. - М.: Высш. шк., 2003. - 536 с.
45. Нефтегазовая вертикаль. Растущий рынок кумола. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.ngv.ru/magazines/article/rastushchiy-rynok-kumola/>.
46. Постоянный технологический регламент на производство изопропилбензола методом алкилирования бензола пропиленом. ОАО «Омский каучук». Цех И-14-15-15а. ТР 2-035-2006.
47. Растатурин В.А., Соколов В.М. Проектирование химических реакторов для проведения гетерогенных каталитических реакций на неподвижном катализаторе. – Л.: Химия, 1983. – 100с.

48. Лашинский А.А., Толчинский А.Р. Основы конструирования и расчета химической аппаратуры: Справочник. – 3-е изд., стереотипное. – М.: ООО ИД «Альянс», 2008. – 752с.

49. Физические величины. Справочник. А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. - М.: Энергоатомиздат, 1991. - 1232 с.

Приложение А Реактор алкилирования бензола пропиленом



- Технические условия:
- 1 Аппарат подлежит действию "Правил Гостехнадзора";
 - 2 При изготовлении, испытании и поставке аппарата должны выполняться требования ГОСТ 12.2.003-74 "Оборудование производственное. Общие требования безопасности" и ОСТ 26-281-79 "Сосуды и аппараты стальные сварные. Технические требования";
 - 3 Материал деталей аппарата, соприкасающихся с агрессивной средой - сталь Х18Н10Т ГОСТ 5632-72, остальных - Ст20, Ст25, Ст35;
 - 4 Материал прокладок - паронит ПОН-1 ГОСТ 481-79;
 - 5 Аппарат испытывать на прочность и плотность гидравлически в вертикальном положении под давлением 0,4 МПа;
 - 6 Сварные соединения должны соответствовать требованиям ОСТ 26-01-82-77 "Сварка в химическом машиностроении";
 - 7 Сварные швы в 100% объеме контролировать рентгенографически;
 - 8 * Размеры для справок.

Параметр	Единица	Значение
Рабочее давление	МПа	0,4
Расчетное давление	МПа	0,4
Пробное гидравлическое давление	МПа	0,53
Пробное пневматическое давление	МПа	-
Рабочая температура среды	°С	130
Расчетная температура стенки	°С	130
Минимально допустимая температура стенки	°С	-20
Состав среды	-	катализаторный комплекс и бензол
Класс опасности по ГОСТ 12.1.007-76	-	II
Воспламеняемость по ГОСТ 12.1.004-85	-	ЛВЖ
Категория и группа взрывоопасности по ГОСТ 12.1.011-78	-	IIA-T1
Прибавка для компенсации коррозии и эрозии	мм	1
Число циклов нагружения за весь срок службы, не более	-	1000
Группа аппарата по табл.1 ОСТ 26-291-87	-	1
Поверхность теплообмена	-	-
Емкость геометрическая	м ³	19
Габариты	мм	2100x3700x13800
Срок службы аппарата	лет	10

Обозн.	Назначение штуцера	Ди, мм	Кол-во	Рз, МПа
А	Выход продукта	300	1	0,4
Б	Уравнительная линия	200	1	0,4
В	Для предохранительного клапана	200	1	0,4
Г	Выход продукта	150	1	0,4
Д	Вход продукта	150	1	0,4
Е	Для термометра	100	1	0,4
Ж	Выход продукта	300	1	0,4
И	Лок лаз	500	1	0,4
К	Вход продукта	100	1	0,4
Л	Вход продукта	100	1	0,4
М	Вход продукта	80	1	0,4
Н	Спуск продукта	200	1	0,4
П	Вход продукта	100	1	0,4
Р	Вход продукта	65	1	0,4
С	Вход продукта	65	1	0,4
Т	Для термометра	100	1	0,4

Приложение Б Реактор алкилирования бензола этиленом

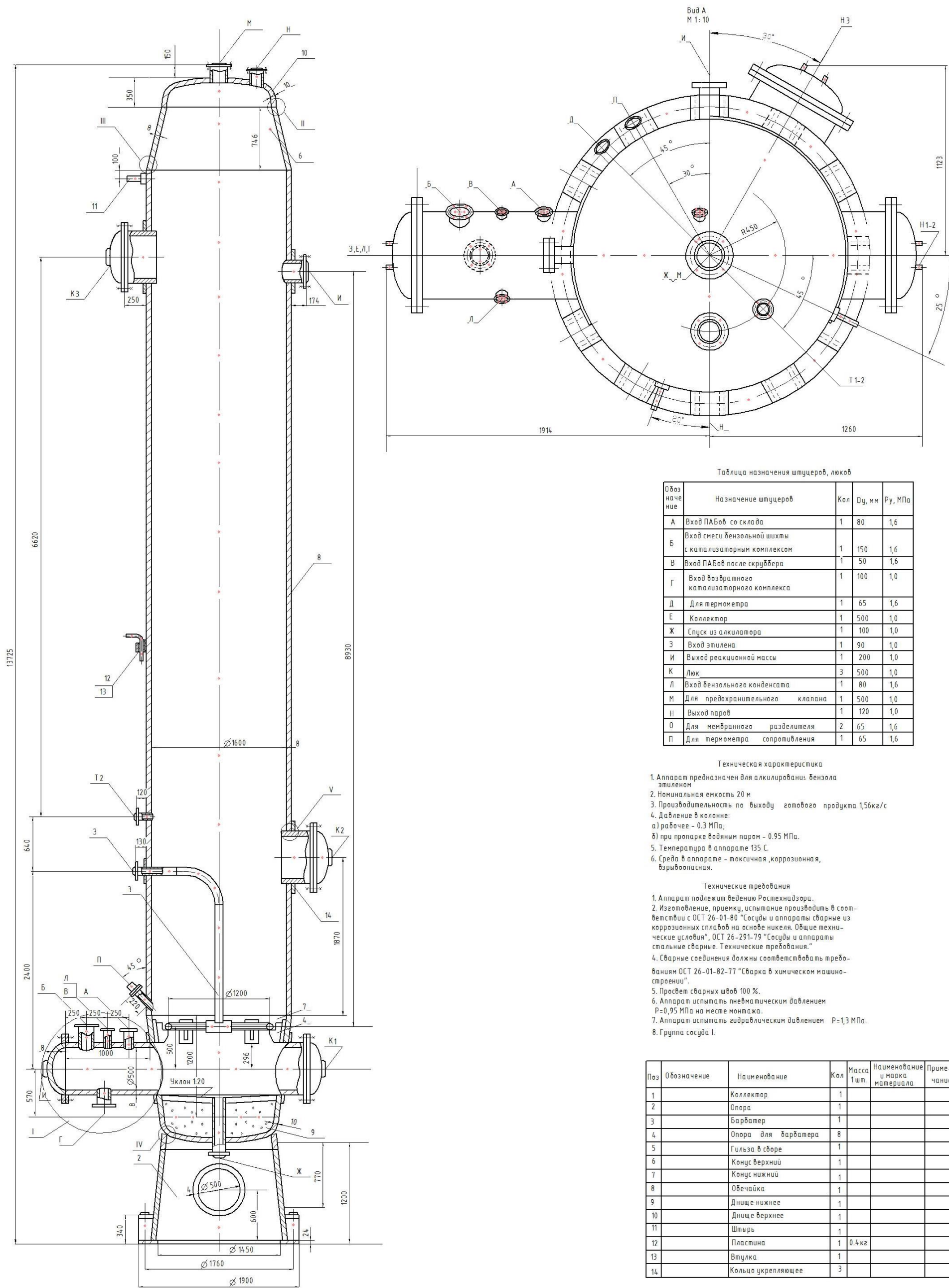


Таблица назначения штуцеров, люков

Обозначение	Назначение штуцеров	Кол	Ди, мм	Р _у , МПа
А	Вход ПАБов со склада	1	80	1,6
Б	Вход смеси бензольной шихты с катализаторным комплексом	1	150	1,6
В	Вход ПАБов после скруббера	1	50	1,6
Г	Вход возвратного катализаторного комплекса	1	100	1,0
Д	Для термометра	1	65	1,6
Е	Коллектор	1	500	1,0
Ж	Спуск из алкилятора	1	100	1,0
З	Вход этилена	1	90	1,0
И	Выход реакционной массы	1	200	1,0
К	Люк	3	500	1,0
Л	Вход бензольного конденсата	1	80	1,6
М	Для предохранительного клапана	1	500	1,0
Н	Выход паров	1	120	1,0
О	Для мембранного разделителя	2	65	1,6
П	Для термометра сопротивления	1	65	1,6

Техническая характеристика

- Аппарат предназначен для алкилирования бензола этиленом
- Номинальная емкость 20 м
- Производительность по выходу готового продукта 1,56 кг/с
- Давление в колонне:
 - рабочее - 0,3 МПа;
 - при пропарке водяным паром - 0,95 МПа.
- Температура в аппарате 135 С.
- Среда в аппарате - токсичная, коррозионная, взрывоопасная.

Технические требования

- Аппарат подлежит ведению Ростехнадзора.
- Изготовление, приемку, испытание производить в соответствии с ОСТ 26-01-80 "Сосуды и аппараты сварные из коррозионных сплавов на основе никеля. Общие технические условия", ОСТ 26-291-79 "Сосуды и аппараты стальные сварные. Технические требования."
- Сварные соединения должны соответствовать требованиям ОСТ 26-01-82-77 "Сварка в химическом машиностроении".
- Прокат сварных швов 100 %.
- Аппарат испытать пневматическим давлением Р=0,95 МПа на месте монтажа.
- Аппарат испытать гидравлическим давлением Р=1,3 МПа.
- Группа сосуда I.

Поз	Обозначение	Наименование	Кол	Масса 1шт.	Наименование и марка материала	Примечание
1		Коллектор	1			
2		Опора	1			
3		Барбатер	1			
4		Опора для барбатера	8			
5		Гильза в сборе	1			
6		Конус верхний	1			
7		Конус нижний	1			
8		Обечайка	1			
9		Днище нижнее	1			
10		Днище верхнее	1			
11		Штырь	1			
12		Пластина	1	0,4 кг		
13		Втулка	1			
14		Кольцо укрепляющее	3			

Приложение В

1 Der moderne Zustand der Technologien des Benzols niedrigst und der Mittel der Modellierung der Bewegung der Flüssigkeit und der Gase

1.1 Der moderne Zustand der Technologie des Benzols vom Äthylen

1.2 Der moderne Zustand der Technologie des Benzols vom Propylen

1.3 Die Übersicht der modernen Computerprogramme für die Modellierung der Bewegung der Flüssigkeit und des Gases

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Беккер Александр Викторович		

Консультант кафедры ХТТ и ХК:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ивашкина Елена Николаевна	д.т.н., профессор		

Консультант – лингвист кафедры ИЯПР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры иностранных языков	Когут Светлана Валерьевна	преподаватель		

1 Literarische Übersicht der modernen Programme für die Modellierung der Bewegung der Flüssigkeit und der Gase und der Technologien von Alkylierung

1.1 Moderner Zustand der Technologie des Benzols vom Äthylen Alkylierung

In der Industrie des Benzols vom Äthylen verwirklicht sich von verschiedenen Methoden [3]:

- Hochtemperatur in der flüssigen Phase (der Prozess «Monsanto Co» und «Lummus Crest, Inc.»);
- in der flüssigen Phase (der Prozess «Unical - UOP» und «Lummus Crest, Inc.»);
- Dampf im Reaktor vom Katalysator («The Badger Co. Inc.»);
- Es ist vom Prozess in der Anwesenheit des Katalysators (der Prozess «CDTECH» des Gemeinschaftsunternehmens "ABB Lummus Global» und "Chemical Research and Licensing») reaktionär-rektifikazionnym.

Des Benzols vom Äthylen in Anwesenheit des Chlorids des Aluminiums verwirklichen im technologischen Prozess der Firma "Monsanto Co», sowie in Russland. Im technologischen Prozess der Firmen «Lummus Crest, Inc.»); und "Monsanto Co» verwirklicht sich von den Gasen, die von 15 bis zu 100 % das Äthylen in der flüssigen Phase enthalten, in Anwesenheit ununterbrochen eingeführt AlCl_3 [3], [4].

Erster war der Prozess des Benzols vom Äthylen unter Ausnutzung des Katalysators auf der Grundlage als ZSM-5 von der Gesellschaft "Mobil-Badger" in 1980 der Katalysator eingeführt gewährleistet die hohe Selektivität nach , jedoch verläuft der Prozess bei den Temperaturen 380 - 420 °C und, ist also. Hoch die Beziehung bringt das Benzol/Äthylen in der reaktionären Mischung, notwendig für 100 % - die Konversion des Äthylens, zum Mehraufwand auf des Benzols.

Die Technologie des Benzols vom Äthylen war unter Ausnutzung des Katalysators auf der Grundlage als Y in 1990 von den Gesellschaften "UOP" und «Lummus» eingeführt. Der Prozess verläuft bei den Temperaturen 200 - 260 °C, wird mit

einem langwierigen Interregenerationslauf des Katalysators, bei der Erhaltung seiner hohen Aktivität charakterisiert. Jedoch tragen groß der Zeit цеолита zur Bildung der Lebensmittel der Polykondensation bei. Es bringt zu des Katalysators und seiner Dekontamination [5]. Später, den Gesellschaften "Chevron", «Polimeri Europe» und «Mobil» waren die Katalysatoren auf der Grundlage цеолита β , habend die hohe Aktivität, und MCM-22, verfügend über die höhere Selektivität, im Vergleich zum Katalysator entwickelt, der als Y enthält. In der Welt existieren 70 Anlagen nach der Produktion, von ihnen 17 arbeiten auf dem homogenen Katalysator – den Chlorid des Aluminiums bis jetzt, 28 verwenden die Technologie, unter Ausnutzung der Katalysatoren, und noch [6].

Die Vorteile des Prozesses vor газофазным bestehen in:

- Die Senkung;
- Die Vergrößerung des Ausgangs.
- Die Verkleinerung des Ausgangs der Nebenprodukte;
- Die Vergrößerung der Laufzeit und des Interregenerationslaufes des Katalysators.

Des Benzols vom Äthylen hat den großen Vertrieb bekommen. Der Prozess verläuft bei der Temperatur, dem Druck und мольном die Beziehung, unterstützend den Rohstoff in der Zone in der flüssigen Phase. Von einer der Bedingungen über Die Vorteile des Prozesses vor газофазным bestehen in:

- Die Senkung;
- Die Vergrößerung des Ausgangs;
- Die Verkleinerung des Ausgangs der Nebenprodukte;
- Die Vergrößerung der Laufzeit und des Interregenerationslaufes des Katalysators.

Des Benzols vom Äthylen hat den großen Vertrieb bekommen. Der Prozess verläuft bei der Temperatur, dem Druck und die unterstützend den Rohstoff in der Zone in der flüssigen Phase. Eine der Bedingungen der Verwirklichung ist die Abgabe des Agenten (des Äthylens) in den Reaktor vollständig aufgelöst im Benzol [6].

Die Mehrheit der Katalysatoren, die in verwendet werden

Des Benzols vom Äthylen, werden mit der schnellen Dekontamination wegen der Bildung des Kokes infolge der Ablagerung auf den aktiven Zentren der grossen Moleküle, langsam aus der porösen Struktur charakterisiert. Deshalb verfügen die Katalysatoren, die großporigen die Typen Y enthalten, β oder, über die besten Eigenschaften in diesem Prozess [7, 8]. Einige sind die Katalysatoren in den Prozessen wirksam. Einer von solchen ist der Katalysator auf der Grundlage des Typs β . Die hohe katalytische Aktivität des Katalysators wird gezeigt, wenn sich des Typs β in H der +-Form [9, 10 befindet].

Folglich-parallelnym Prozess seiend, kann e des Benzols vom Äthylen durch die Bildung und bis zum Erhalten gehen. Die Vergrößerung des Inhalts in der reaktionären Masse schiebt den Prozess zur Seite der Bildung. Für das selektive Erhalten ЭБ muss man die Reaktion im Überfluss durchführen

Des Benzols, im Rohstoff hoch die Beziehung unterstützend.

Gleichzeitig, mit der Hauptreaktion, in Anwesenheit des Überflusses des Benzols, geschehen die Reaktionen des Benzols und mit der Bildung nochmalig [11].

Alkylierung des Benzols im Prozess "Lummu Liest inc.-Vnical-UOP» verwirklicht sich in der flüssigen Phase auf der stationären Schicht des Kattes-lisatora. Die Dauer der Arbeit des Katalysators bis zur Regeneration mit-stawljajet 1... 2 Jahre. Der Ausgang erreicht 99,5 % bei der Sauberkeit 99,9 %. Im Vergleich zum Prozess auf A1C13 bei solchem gibt es keine schädliche Abfälle, und die Ausrüstung wird aus des Stahls hergestellt. Es ist solche 13 Anlagen lizenziert. In den Prozess «Mobil/Badger EB der Schwung», lizenziert «Raytheon Engineers and Constructor. Inc.», wird der Katalysator der Firma "Mobil" auf der Grundlage MCM-22 verwendet.

Das Dampfphasenverfahren (und in einem Reaktor) auf цеолите ZSM-5 die Firmen "Mobil" verwirklicht sich im Laufe der Firma "Badger Co. Inc». Ein Vorteil der vorliegenden Technologie ist die Möglichkeit der Anwendung der Gase mit der Konzentration des Äthylens bis zu 10 %. Die Ausgänge der Lebensmittel im Prozess

stimmen mit tatsächlich überein. Warm, aufgewendet auf den Prozess und sich heraushebend bei der Reaktion, fast wird für die Leistung des Festmahles vollständig verwendet.

Der Vereinte ist es – der Prozess reaktionär. «ABB Lumus Global» sieht die Vereinigung des Reaktors $\alpha\lambda\kappa$ vor 1.2 Übersicht der modernen Computerprogramme für die Modellierung der Bewegung der Flüssigkeit und des Gases

Für die Modellierung der Bewegung der Flüssigkeiten und der Gase existiert eine Menge der mathematischen Programme, zu den bekanntesten Softwareprodukten für die Lösung der Aufgaben der Bewegung der Flüssigkeiten und der Gase verhalten sich Comsol Multiphysics, Autodesk Simulation CFD, Fluent und das russische Analogon FlowVision.

COMSOL Multiphysics - die Programmumgebung, die alle Etappen der Modellierung gewährleistet (die Bestimmung der geometrischen Parameter, die Beschreibung Physik, die Visualisierung), zulassend, beliebige physische Prozesse zu modellieren, die in Form vom System der Differentialgleichungen in den privaten Ableitungen vorgestellt sein können. Die vorherbestimmten Multiphysics-Schablonen sind für die Lösung vieler verbreiteter Typen der Aufgaben vorbestimmt. Zum gegebenen Paket existiert der Satz der zusätzlichen Module für die Lösung verschiedener angewandter Aufgaben auch.

Die zugänglichen Module:

Chemical Reaction Engineering Module - das Produkt für die Modellierung der chemischen Reaktionen. Mit Hilfe der gegebenen Komponente können die Benutzer die virtuelle labormässige Umgebung, zulassend schaffen, die chemischen Reaktionen in verschiedenen Bedingungen zu studieren. Die Benutzer können eine Menge verschiedener Parameter, die den Lauf der Reaktion beeinflussen kontrollieren. Das vorliegende Produkt entspricht dem Standard CAPE-OPEN vollständig. Das Produkt kann für die Modellierung der Aufgaben, die mit der Herstellung der Halbleiter verbunden sind, der pharmazeutischen Synthese usw. verwendet sein

Autodesk Simulation CFD gewährt den Benutzern den Komplex meto-dow der Rechenhydrodynamik für die Durchführung der Berechnungen nach solchen

Richtungen, wie die Abkühlung der elektronischen Apparatur, die Projektierung der Ventile, die Aufrechterhaltung des Temperaturregimes der Leuchtdioden, den thermischen Komfort und die Verpackung der Produktion. Sie können das assoziative Studium der Projektvarianten durchführen, die folgenden führenden Möglichkeiten benutzend: das model-ausgerichtete Interface, die automatisierte Konstruktion *сеток* für die Analyse von der Methode der endlichen Elemente, die schnellwirkenden entscheidenden Module und die spezielle Umgebung für das Studium des Projektes und der Annahme der optimalen Lösungen.

Die Lebensmittel der Familie Autodesk Simulation CFD werden für die Lösung verschiedener Aufgaben, die die Modellierung der Ströme der Flüssigkeiten und die Prozesse der Wärmeübertragung fordern verwendet.

ANSYS FLUENT - die Software, die über die umfassenden Möglichkeiten der Modellierung der physischen Prozesse zwecks der Analyse des Einflusses der Flüssigkeit auf das Erzeugnis oder die Ausrüstung verfügt.

ANSYS FLUENT ist auf der Methode der endlichen Umfänge, dabei gegründet:

- Das Gebiet der Strömung wird auf eine endliche Menge der Kontrollumfänge geteilt;
- In dieser Menge der Kontrollumfänge entscheiden sich die Angleichungen der Erhaltung der Masse, des Impulses, der Energie usw.
- Die Angleichungen in den privaten Ableitungen *дискретизируется* ins System der algebraischen Angleichungen;
- Dann die numerische Lösung diese algebraisch *уравне-ни* auf dem Rechengebiet erzeugt zu werden.

ANSYS FLUENT sicher und erfüllt die Berechnungen für alle physischen Modelle und die Typen, einschließlich die stationäre oder instationäre Strömung, nicht zusammengesprengt oder der zusammengesprengten Strömungen (von klein *дозвуковых* bis zu hyperlautlich), laminar wirksam.