

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.03.01 Химическая технология
Отделение школы (НОЦ): Отделение химической инженерии

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Моделирование жидкофазного процесса алкилирования изобутана олефинами

УДК 547.214:66.095.253

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Вакалова Снежана Евгеньевна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Чузлов В.А.	К.Т.Н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Якимова Т.Б.	К.Э.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД ШБИП	Сечин А.А.	К.Т.Н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Мойзес О.Е.	К.Т.Н.		

Планируемые результаты обучения по ООП

18.03.01 Химическая технология

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС ВПО, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р1	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ПК-1, 2, 3, 19, 20), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), CDIO (пп. 1.1, 4.1, 4.3, 4.8)
Р2	Применять знания в области современных химических технологий для решения производственных задач.	Требования ФГОС (ПК-7, 11, 17, 18, ОК-8), Критерий 5 АИОР (пп. 1.1, 1.2), CDIO (пп. 1.1, 3.2, 4.2, 4.3, 4.5, 4.6)
Р3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии.	Требования ФГОС (ПК-1, 5, 8, 9, ОК-2,3), Критерий 5 АИОР (п. 1.2), CDIO (пп. 1.2, 2.1, 4.5)
Р4	Разрабатывать <i>новые</i> технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии, <i>проектировать объекты химической технологии в контексте предприятия, общества и окружающей среды.</i>	Требования ФГОС (ПК-11, 26, 27, 28), Критерий 5 АИОР (п. 1.3), CDIO (пп. 1.3, 4.4, 4.7)
Р5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий.	Требования ФГОС (ПК-4, 21, 22, 23, 24, 25, ОК-4,6), Критерий 5 АИОР (п. 1.4), CDIO (п. 2.2)
Р6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, <i>выводить на рынок новые материалы</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.	Требования ФГОС (ПК-6, 10, 12, 13, 14, 15, ОК-6, 13, 15), Критерий 5 АИОР (п. 1.5), CDIO (пп. 4.1, 4.7, 4.8, 3.1, 4.6)
<i>Общекультурные компетенции</i>		
Р7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-5, 9, 10, 11), Критерий 5 АИОР (пп. 2.4, 2.5), CDIO (п. 2.5)

P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1, 2, 7, 8, 12), Критерий 5 АИОР (п. 2.6), CDIO (п. 2.4)
P9	<i>Активно</i> владеть <i>иностранным языком</i> на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-14), Критерий 5 АИОР (п. 2.2), CDIO (пп. 3.2, 3.3)
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, <i>демонстрировать лидерство в инженерной деятельности и инженерном предпринимательстве</i> , ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.	Требования ФГОС (ОК-3, 4), Критерий 5 АИОР (пп. 1.6, 2.3), CDIO (пп. 4.7, 4.8, 3.1)

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.03.01 Химическая технология
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Мойзес О.Е.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

бакалаврской работы

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
2Д6В	Вакаловой Снежане Евгеньевне

Тема работы:

Моделирование жидкофазного процесса алкилирования изобутана олефинами	
Утверждена приказом директора ИШПР(дата, номер)	от 01.06.2020 г. №153-53/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	20.05.2020
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Объект исследования – технология жидкофазного сернокислотного алкилирования изобутана олефинами. Технология предназначена для получения высокооктанового компонента автомобильных бензинов – алкилата.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	1 Литературный обзор 1.1 Катализаторы процесса алкилирования изобутана олефинами 1.1.1 Гомогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами 1.1.2 Гетерогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами 1.2 Технологии алкилирования изобутана бутиленом 1.2.1 Технология алкилирования Haldor Topsøe A/S 1.2.2 Технология алкилирования ExSact компании Exelus 1.2.3 Технология алкилирования AlkyClean 1.2.4 Технология фтороводородного алкилирования Phillips Petroleum

	1.2.5 Технология серноокислотного алкилирования STRATCO 1.2.6 Технология серноокислотного алкилирования ExxonMobil 1.2.7 Технология серноокислотного алкилирования ГК РАН 1.2 Основные подходы к моделированию процесса алкилирования изобутана бутиленом 2 Объект и методы исследования 2.1 Характеристика объекта исследования 2.2 Химизм процесса алкилирования изобутана бутиленом 2.3 Кинетическая модель процесса серноокислотного алкилирования 2.4 Проверка кинетической модели на адекватность 3 Экспериментальная часть 3.1 Сырье процесса алкилирования 3.2 Анализ работы промышленной установки 3.3 Результаты расчетов и их обсуждение 3.3.1 Влияние температуры 3.3.2 Влияние расхода бутан – бутиленовой фракции 3.3.3 Влияние расхода циркулирующего изобутана 3.3.4 Влияние мольного соотношения изобутан : олефины
--	--

Перечень графического материала

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

Раздел	Консультант
«Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	Якимова Татьяна Борисовна
«Социальная ответственность»	Сечин Андрей Александрович

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

Нет

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	10.03.2020
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ	Чузлов В.А.	К.Т.Н.		10.03.2020

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Вакалова Снежана Евгеньевна		10.03.2020

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
 Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии
 Направление подготовки 18.03.01 Химическая технология
 Профиль «Химическая технология подготовки и переработки нефти и газа»
 Уровень образования бакалавриат
 Период выполнения весенний семестр 2019/2020 учебного года

Форма представления работы:

<i>бакалаврской работы</i>

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
 выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	20.05.2020
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
12.03.2020 г.	Введение	10
23.03.2020 г.	Катализаторы процесса алкилирования изобутана олефинами. Гомогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами. Гетерогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами. Технологии процесса алкилирования. Основные подходы к моделированию процесса алкилирования изобутана бутиленом.	10
07.04.2020 г.	Цель и задачи исследования. Функционирование промышленной установки сернокислотного алкилирования в условиях переменного углеводородного состава перерабатываемого сырья. Характеристика объекта исследования. Химизм процесса алкилирования изобутана бутиленом. Кинетическая модель процесса сернокислотного алкилирования. Проверка кинетической модели на адекватность.	20
30.04.2020 г.	Обсуждение результатов. Проведение расчетов с использованием математической модели: влияние состава перерабатываемого сырья; влияние температуры; влияние расхода бутан – бутиленовой фракции; влияние расхода циркулирующего изобутана; влияние мольного соотношения изобутан : олефины.	50
17.05.2020 г.	Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». Раздел «Социальная ответственность». Заключение.	10

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Чузлов В.А.	К.Т.Н.		10.03.2020

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Вакалова Снежана Евгеньевна		10.03.2020

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Мойзес О.Е.	К.Т.Н.		10.03.2020

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2Д6В	Вакалова Снежана Евгеньевна

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	18.03.01 Химическая технология

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

1. <i>Стоимость ресурсов исследования: материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Стоимость выполняемых работ, материальных ресурсов, согласно применяемой техники и технологии, в соответствии с рыночными ценами. Оклады в соответствии с окладами сотрудников «НИ ТПУ».
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	- районный коэффициент- 1,3; - коэффициент дополнительной заработной платы – 0,12; - норма амортизации 25%.
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Отчисления во внебюджетные фонды – 30,2 %

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Анализ потенциальных потребителей, анализ конкурентных технических решений, оценка готовности проекта к коммерциализации
Формирование плана и графика разработки проекта	Определение этапов работ; определение трудоемкости работ; разработка графика Ганта
Планирование и формирование бюджета проекта	Определение затрат на проектирование (смета затрат)
Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Определение эффективности проекта

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

<ol style="list-style-type: none"> 1. Карта сегментирования рынка 2. Оценка конкурентоспособности технических решений 3. Матрица SWOT 4. Календарный план график проведения работ 	
---	--

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Якимова Т.Б.	К.Э.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Вакалова Снежана Евгеньевна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2Д6В	Вакаловой Снежане Евгеньевне

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/ специальность	18.03.01 Химическая технология

Тема ВКР:

Моделирование жидкофазного процесса алкилирования изобутана бутиленом	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объект исследования – процесс алкилирования изобутана бутиленом. Область применения – нефтехимическая промышленность.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> – "Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ – СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы. – СНиП 21-01-97 Пожарная безопасность зданий и сооружений
2. Производственная безопасность: <ul style="list-style-type: none"> 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия 	Анализ вредных факторов: <ul style="list-style-type: none"> – Отклонение показателей микроклимата; – Статические физические перегрузки; – Нервно-психические перегрузки; – Перегрузка зрительного аппарата; – Повышенный уровень шума;

	<p>– Недостаточная освещенность рабочей зоны;</p> <p>Анализ опасных факторов:</p> <p>– Электрический ток;</p> <p>– Пожарная безопасность;</p>
3. Экологическая безопасность:	<p>На литосферу оказывают влияние отходы, образующиеся при выполнении работ: бумага, пластик, отработанные люминесцентные лампы и т.д.</p> <p>Основной задачей предотвращения влияния является подбор способов их утилизации. На гидросферу и атмосферу в процессе разработки математической модели влияние минимально.</p>
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<p>Возникновение ЧС, требующих обеспечения электро- и пожаро- взрывобезопасности на рабочем месте.</p> <p>Перечень возможных ЧС:</p> <p>- пожар;</p>

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД	Сечин А.А.	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Вакалова Снежана Евгеньевна		

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 95 страниц, 40 рисунков, 29 таблиц, 36 источников, 1 приложение.

Ключевые слова: алкилирование, изобутан, бутилены, модель.

Работа представлена введением, пятью разделами и выводами, приведен список использованных источников.

Объектом исследования является технология процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленами.

Цель работы – создание модели установки сернокислотного алкилирования и исследование влияния основных технологических параметров на процесс алкилирования изобутана олефинами.

В ходе работы создана модель алкилирования изобутана бутиленом, проведен анализ работы промышленной установки, исследовано влияние основных технологических параметров на выход и качество продукции установки, рассчитана экономическая эффективность.

Содержание

Введение.....	15
1 Литературный обзор	17
1.1 Катализаторы процесса алкилирования изобутана олефинами	17
1.1.1 Гомогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами	18
1.1.2 Гетерогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами	19
1.2 Технологии алкилирования изобутана бутиленом.....	20
1.2.1 Технология алкилирования Haldor Topsøe A/S.....	20
1.2.2 Технология алкилирования ExSact компании Exelus.....	21
1.2.3 Технология алкилирования AlkyClean.....	22
1.2.4 Технология фтороводородного алкилирования Phillips Petroleum	23
1.2.5 Технология сернокислотного алкилирования STRATCO	24
1.2.6 Технология сернокислотного алкилирования ExxonMobil	25
1.2.7 Технология сернокислотного алкилирования ГК РАН.....	26
1.2 Основные подходы к моделированию процесса алкилирования изобутана бутиленом.....	28
2 Объект и методы исследования	30
2.1 Характеристика объекта исследования.....	30
2.2 Химизм процесса алкилирования изобутана бутиленом.....	31
2.3 Кинетическая модель процесса сернокислотного алкилирования	33
2.4 Проверка кинетической модели на адекватность	36
3 Экспериментальная часть.....	37
3.1 Сырье процесса алкилирования.....	37
3.2 Анализ работы промышленной установки.....	39
3.3 Результаты расчетов и их обсуждение.....	45
3.3.1 Влияние температуры.....	45
3.3.2 Влияние расхода бутан – бутиленовой фракции	49
3.3.3 Влияние расхода циркулирующего изобутана	52
3.3.4 Влияние мольного соотношения изобутан : олефины	56
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение...	60

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	60
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	60
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений	62
4.1.3 SWOT-анализ.....	64
4.1.4 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	67
4.2 Планирование проекта.....	67
4.3 Бюджет исследования.....	70
4.3.1 Расчет материальных затрат	71
4.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование	71
4.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы.....	72
4.3.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы.....	73
4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	74
4.3.6 Формирование бюджета исследовательского проекта.....	74
5 Социальная ответственность	75
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	75
5.2 Производственная безопасность.....	78
5.2.1 Отклонение показателей микроклимата	80
5.2.2 Статические физические перегрузки	80
5.2.3 Нервно-психические перегрузки	81
5.2.4 Перегрузка зрительного аппарата	82
5.2.5 Повышенный уровень шума	82
5.2.6 Недостаточная освещенность рабочей зоны	83
5.2.7 Электрический ток	83
5.2.8 Пожарная безопасность	84
5.3 Экологическая безопасность.....	85
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	86
Заключение	87

Список использованных источников	88
Приложение А	93

Введение

Одним из основных способов повышения октанового числа бензинов является алкилирование изобутана бутиленом. Задача максимизации эффективности работы существующих установок алкилирования изобутана олефинами является очень актуальной и важной с точки зрения повышения энергоэффективности и ресурсоэффективности их работы.

Для решения данной задачи используют математическое моделирование, позволяющее прогнозировать поведение реальных установок: математические модели, разработанные с учетом термодинамических и кинетических закономерностей процесса чувствительны к изменению состава сырья и технологического режима.

Таким образом, **целью работы** является создание модели установки сернокислотного алкилирования и исследование влияния основных технологических параметров на процесс алкилирования изобутана олефинами.

Для достижения цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Изучение и обработка данных хроматографического анализа сырья и продуктов процесса сернокислотного алкилирования.
2. Составление списка всех теоретически возможных химических реакций, протекающих в процессе алкилирования изобутана бутиленом
3. Расчет термодинамических и кинетических параметров данных реакций.
4. Составление формализованной схемы превращений на основании термодинамических расчетов.
5. Исследование влияния температуры, расхода бутан – бутиленовой фракции, расхода циркулирующего изобутана и мольного соотношения изобутан : олефины на процесс сернокислотного алкилирования путем варьирования их в определенных интервалах.

Объектом исследования в данной работе является технология процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом.

Научная новизна:

- Разработана формализованная схема процесса сернокислотного алкилирования, включающая стадии образования карбокатионов.
- Установлено количественное влияние технологического режима и сырьевого состава на выход и качество алкилата.

Практическая значимость работы заключается в том, что применение разработанной модели позволит подбирать оптимальный технологический режим.

1 Литературный обзор

Алкилированием называют все процессы, при которых в молекулу какого-либо вещества вводится алкил, т.е. интермедиат, являющийся частицей предельного углеводорода с одним свободным электроном. Алкилирование в нефтяной промышленности чаще всего представляет собой каталитический процесс взаимодействия парафинов с заранее полученными из олефинового ряда – карбокатионами, возникающими в результате переноса водорода.

В ходе алкилирования получают более высококипящие парафиновые углеводороды – алкилат. Промышленное значение процесса алкилирования заключается в получении высококачественного бензина, содержащего высокооктановый алкилат [1].

Алкилирование изобутана бутиленом – один из наиболее распространённых видов алкилирования, результатом которого является получение бензиновых фракций с высоким октановым числом, обладающих высокой стабильностью и детонационной стойкостью [2].

Из вышеизложенного следует, что одним из наиболее приоритетных направлений исследований в нефтеперерабатывающей промышленности является углубленное исследование процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом.

В данной работе при исследовании процесса алкилирования используется метод математического моделирования, т.к. в сравнении с физическим моделированием он обладает рядом существенных преимуществ: позволяет с минимальными затратами спроектировать наиболее приближенную к реальной установку.

1.1 Катализаторы процесса алкилирования изобутана олефинами

В данном подразделе рассмотрены катализаторы процесса алкилирования изобутана олефинами.

1.1.1 Гомогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами

В качестве гомогенных катализаторов в промышленности используют серную и плавиковую кислоты. Активность катализаторов напрямую зависит от активности используемой кислоты. Физико-химические свойства кислот приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Основные физико-химические свойства кислот [3]

Наименование свойства	Серная кислота (98%)	Плавиковая кислота (50%)
Плотность при 20 °С, г/см ³	1,8356	1,155
Вязкость, мПа·с	24,5 (при 25 °С)	0,53 (при 0 °С)
Диэлектрическая постоянная	114 (при 25 °С)	86 (при 0 °С)
Константа диссоциации кислоты	вторая ступень $1,15 \cdot 10^{-2}$	0,62
Температура плавления, °С	0,1	-83,4
Температура кипения, °С	332,4	19,4
Растворимость изобутана, %	0,070 (при 25 °С)	1,44 (при 13 °С)

И фтороводородная, и серная кислоты в качестве катализаторов обладают рядом негативных свойств:

- высокая токсичность, коррозионная агрессивность;
- требуется утилизировать отработанные кислоты;
- требуется выделять и нейтрализовать алкилат из реакционной смеси;
- процесс алкилирования при использовании данных кислот является экологически опасным для здоровья человека и природы.

Однако, если сравнивать кислоты между собой, плавиковая кислота обладает неоспоримым плюсом: она способна растворить больше изобутана, чем серная кислота, на 1-2 порядка [4]. Соответственно, скорость реакции при данном катализаторе выше, а отношение изобутан : олефины будет большим.

1.1.2 Гетерогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами

В настоящее время для процесса алкилирования изобутана бутиленом разработаны твердые каталитические системы, к которым можно отнести: оксиды, цеолиты, катиониты. Применение гетерогенных катализаторов весомо упрощает технологию их отделения и восстановления, снижает коррозию и повышает селективность процесса алкилирования изобутана бутиленом.

Синтез высокооктанового алкилата методом алкилирования обычно осуществляют на носителях, для промотирования которых использовались катионы металлов 8-ой группы Периодической системы Д.И. Менделеева: Ru, Pt, Ni, Pd. Широкомасштабное применение данных катализаторов в промышленности затруднено в связи с их дефицитом и дороговизной. Поэтому, в последнее время ведутся разработки медьсодержащих катализаторов и исследования их эффективности.

Медные катализаторы синтезируют пропиткой гранул носителя водным раствором активного компонента (CuCl_2). Гранулы носителя, в свою очередь, получают формированием цеолита со связующим компонентом и последующим его улучшением путем dealюминирования и декатионирования. В качестве цеолитов обычно применяют синтетические цеолиты типа фожазит NaY и морденит [5].

Альтернативой по отношению к гетерогенным и гомогенным катализаторам является использование в процессе алкилирования изобутана олефинами ионных жидкостей.

В настоящее время проведены исследовательские работы по изучению эффективности применения ионной жидкости состава 1-метил-3-бутилимидазолий хлорид ($[\text{BMIM}]\text{Cl}$) – хлорид алюминия [6].

1.2 Технологии алкилирования изобутана бутиленом

В данном подразделе рассмотрены наиболее распространенные технологии алкилирования изобутана олефинами.

1.2.1 Технология алкилирования Haldor Topsøe A/S

В технологии алкилирования, разработанной компанией Haldor Topsøe A/S используется реактор с неподвижным слоем катализатора, в качестве которого выступает сверхкислота, адсорбированная на твердом носителе.

Принципиальная схема процесса приведена на рисунке 1.

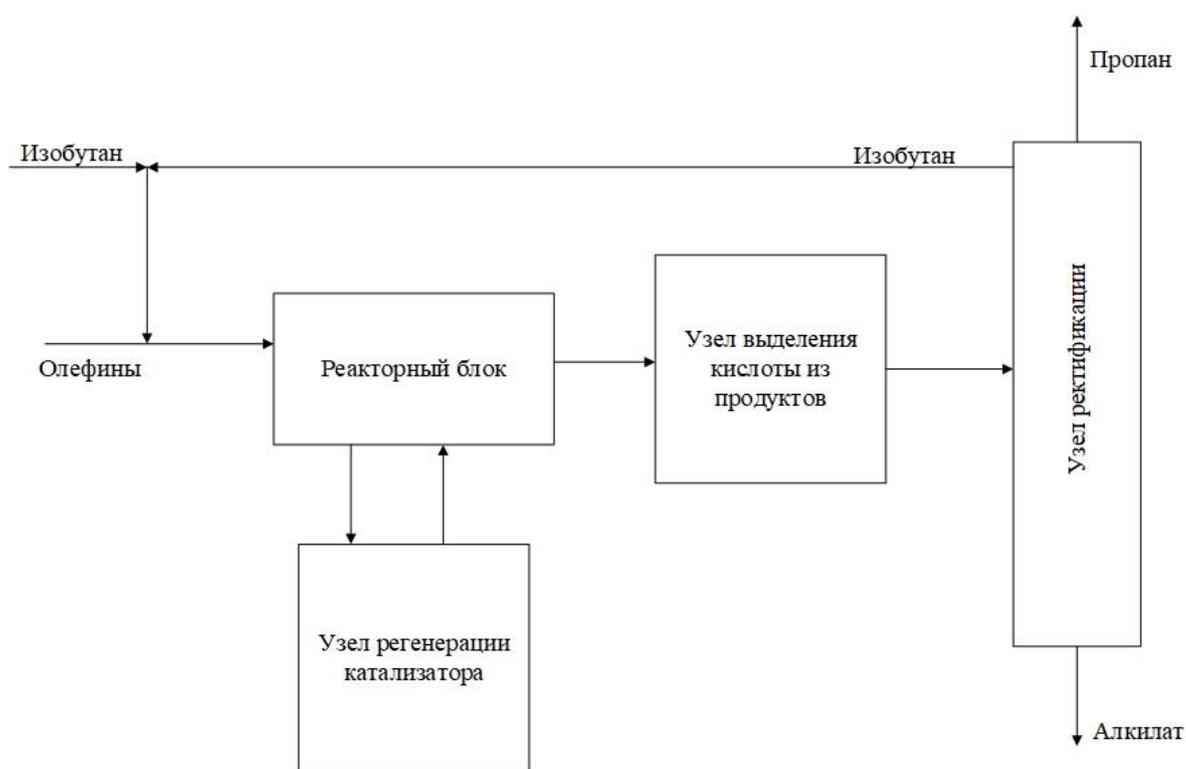


Рисунок 1 – Принципиальная схема алкилирования по технологии фирмы Haldor Topsøe A/S [7]

Олефин и изобутан смешиваются с рециркулирующим потоком бутана и направляются в реакторный блок.

В узле обработки продуктов происходит выделение растворенной в алкилате кислоты. В секции ректификации выделяют следующие фракции: пропановую, изобутановую, нормальный бутан и продуктовый алкилат.

Высокооктановый алкилат, образующийся в ходе алкилирования обладает низким давлением паров и содержит минимальное количество серы, поэтому является пригодным для компаундирования бензинов.

1.2.2 Технология алкилирования ExSact компании Exelus

Особенностью технологии алкилирования компании Exelus является наличие блока регенерации катализатора в атмосфере водорода.

На рисунке 2 приведена принципиальная схема процесса ExSact.

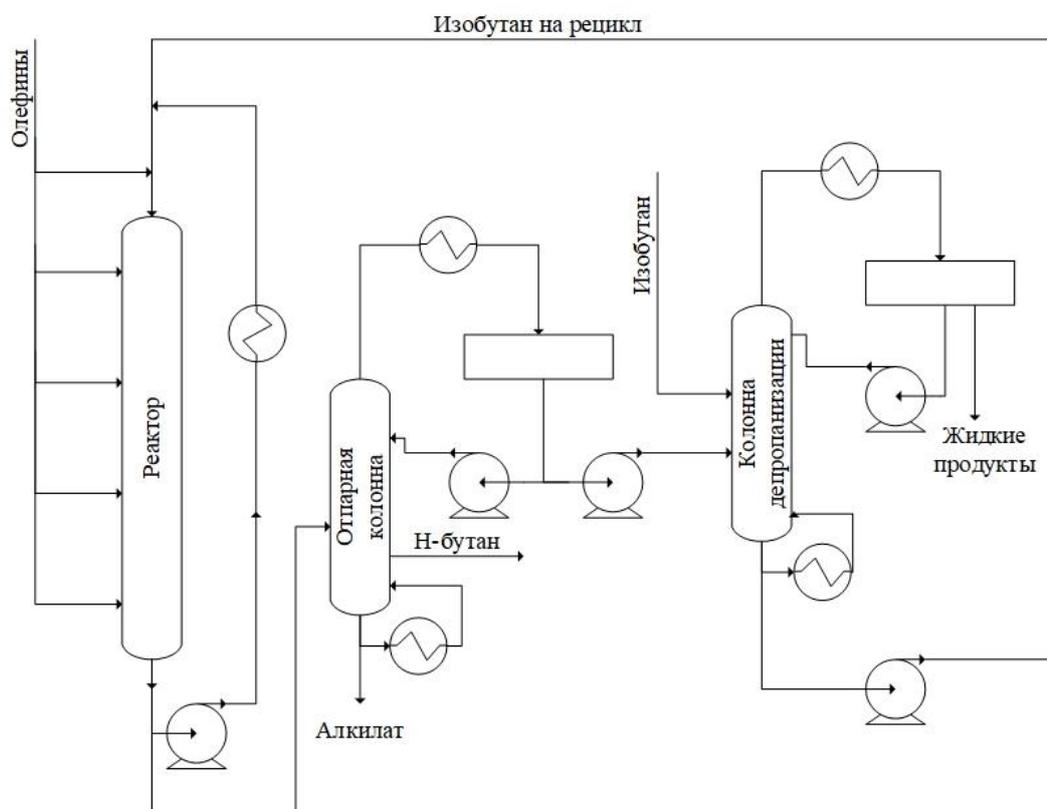


Рисунок 2 – Принципиальная схема процесса ExSact [8]

Подача олефинового сырья осуществляется несколькими параллельными потоками, каждый из которых направляется в соответствующий слой катализатора. Также в реактор осуществляют подачу рециркулирующего и сырьевого изобутана. Из рисунка 2 следует, что избыток нормального бутана и изобутана удаляют в результате фракционирования в отпарной колонне. Алкилат, выходящий головным погоном отпарной колонны поступает в колонну депропанзации.

1.2.3 Технология алкилирования AlkyClean

Основой технологии является использование твердокислотного катализатора.

Технология алкилирования AlkyClean включает четыре блока: узел подготовки сырья, реакторный блок, блок регенерации катализатора и узел разделения продуктов (рисунок 3).

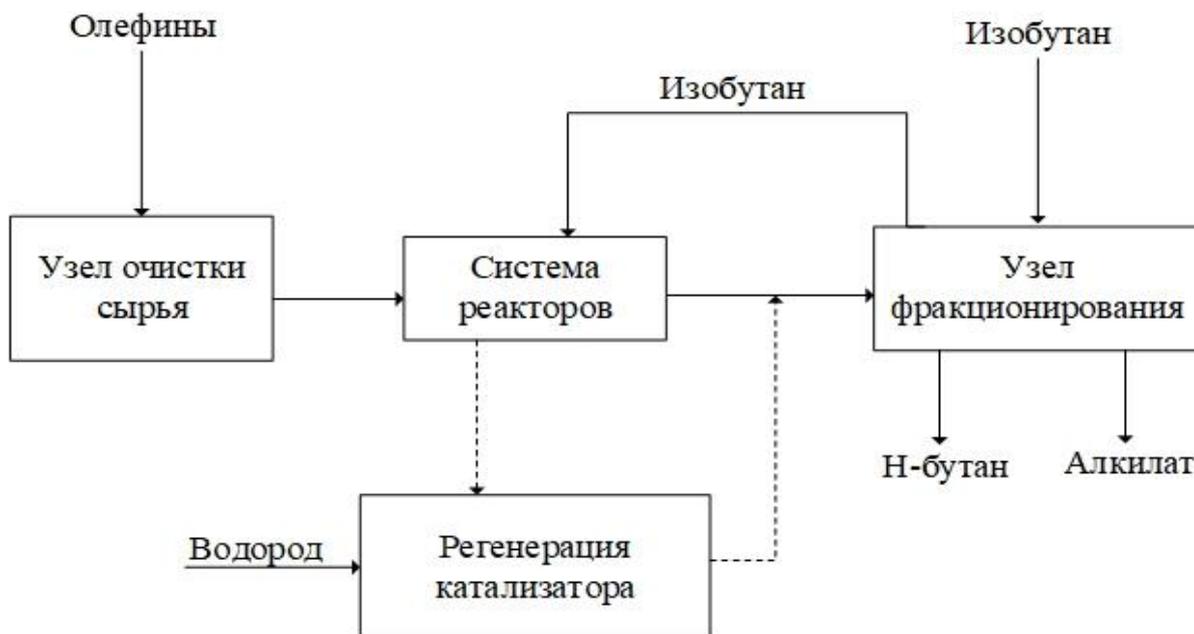


Рисунок 3 – Блок – схема процесса AlkyClean [9]

Данная технология обладает рядом преимуществ [9]:

- низкая коррозионная активность катализатора процесса, и, как следствие, безопасность производства;
- малые производственные затраты, несмотря на высокую эффективность производства;
- высокая окупаемость установки;
- низкая чувствительность процесса к изменениям состава олефинового сырья;
- конкурентоспособность установки, вызванная высоким качеством алкилата;
- устойчивость катализатора к различным примесям в сырье.

1.2.4 Технология фтороводородного алкилирования Phillips Petroleum

Одной из самых распространенных технологий фтороводородного алкилирования является технология компании Phillips Petroleum, типовая схема которой изображена на рисунке 4.

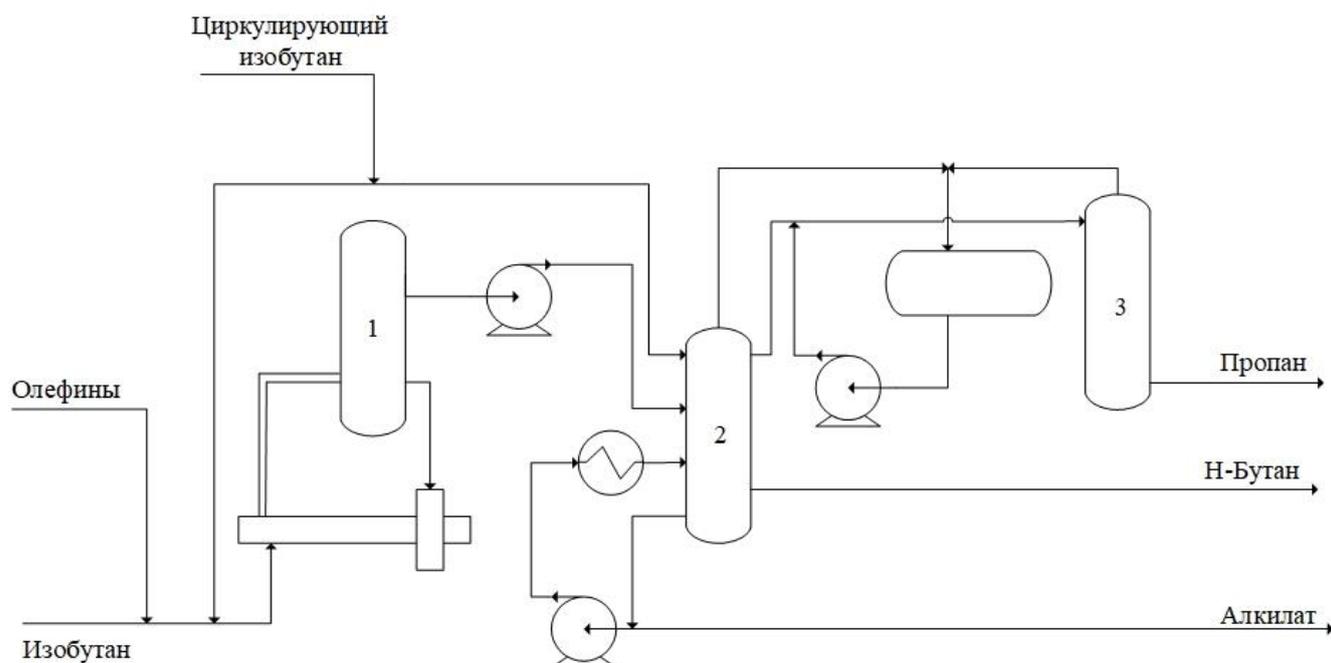


Рисунок 4 – Принципиальная схема установки фтористоводородного алкилирования по технологии фирмы «Phillips Petroleum»:

1 – реактор; 2 – фракционирующая колонна; 3 – отпарная колонна

После смешения в реакторе 1 олефинов, фтороводородной кислоты и изобутана протекают химические реакции, продукт которых поступает во фракционирующую колонну 2, предназначенную для отделения фракций пропана, циркулирующего изобутана, н-бутана и алкилата. Отработанный катализатор отправляют обратно в реактор. Товарные продукты процесса подвергают щелочной очистке [10].

1.2.5 Технология сернокислотного алкилирования STRATCO

В технологии сернокислотного алкилирования в качестве сырья применяют смесь бутиленов, пропилена и амиленов с изобутаном. Принципиальная схема установки изображена на рисунке 6.

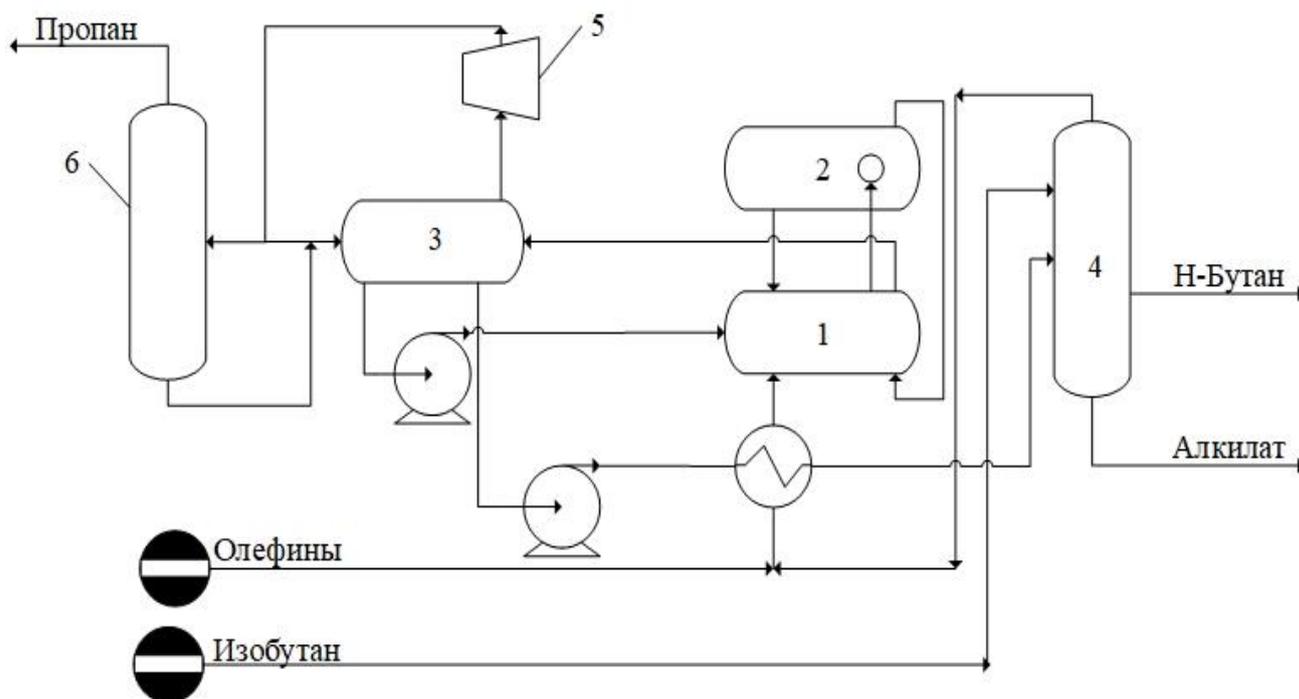


Рисунок 6 – Схема установки сернокислотного алкилирования по технологии STRATCO [12]:

1 – контактор, 2 – отстойник, 3 – сепаратор, 4 – деизобутанизатор, 5 – компрессор,
6 – пропановая колонна

Смешение олефинов и паров изобутана с циркулирующим катализатором происходит в реакторе-контакторе 1. Подача жидких продуктов реакции углеводородов и кислоты из отстойника 2 осуществляется с высокой скоростью и в максимально большом количестве. Поддержание полного объема в контакторе происходит при постоянной температуре. Проходя через каплеотбойник 3, продукты реакции поступают в изобутановую колонну 4, сбоку которой выходит н – бутан, а с низа колонны – целевой продукт – алкилат. Изобутан – головной погон колонны, возвращают в контактор.

1.2.6 Технология сернокислотного алкилирования ExxonMobil

В процессе алкилирования компания ExxonMobil использует каскадные реакторы, имеющие ряд преимуществ в сравнении с контактными установками компании STRATCO [13]:

- Отказ от использования хладагента в пользу применения «автоохлаждения»;
- Низкая температура реакции, в связи с чем, улучшенные свойства алкилата;
- Ступенчатое осуществление процесса, повышающее качество алкилата.

Принципиальная схема установки представлена на рисунке 7.

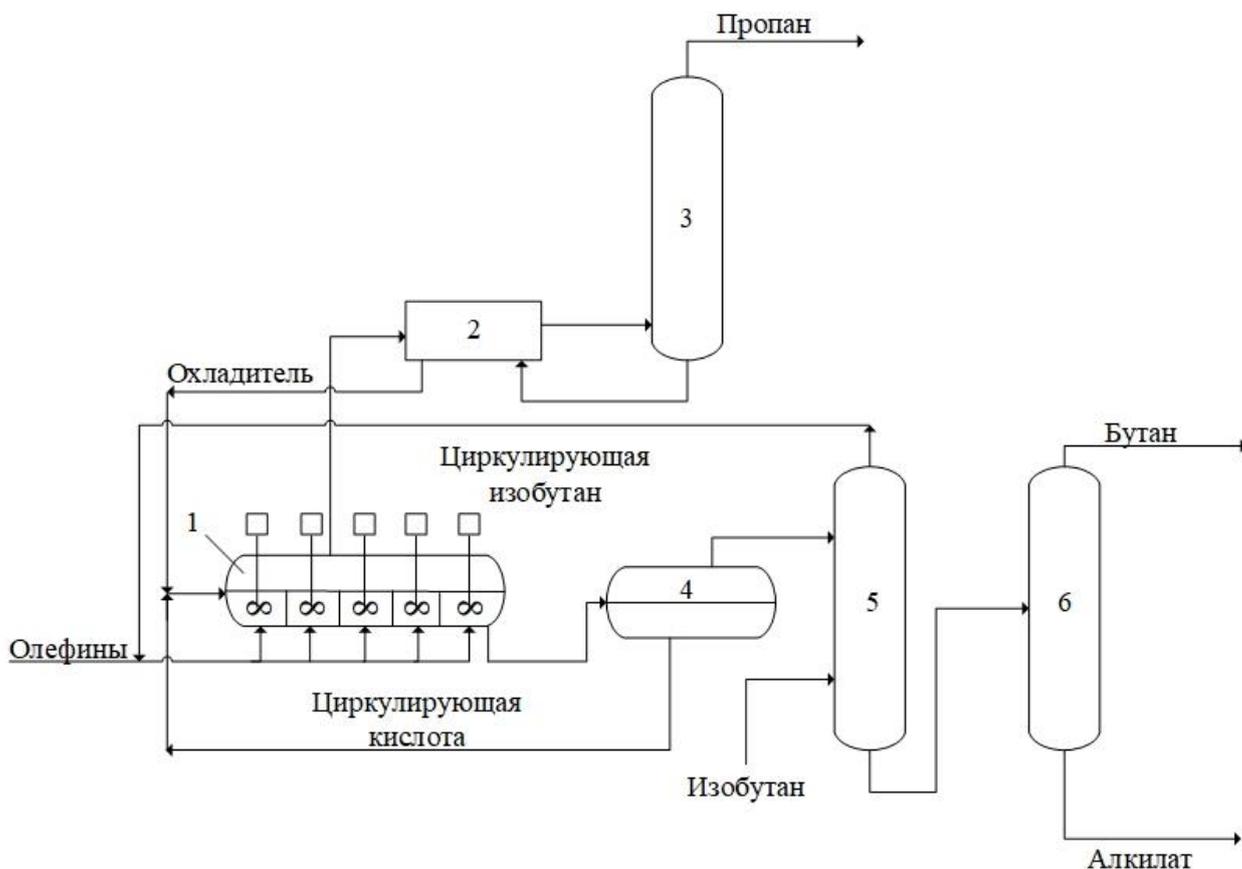


Рисунок 7 – Схема установки сернокислотного алкилирования по технологии ExxonMobil:

- 1 – реактор, 2 – охлаждающий компрессор, 3 – депропанизатор, 4 – отстойник,
5 – деизобутанизатор, 6 – бутановая колонна

В реактор 1 поступает олефиновое сырье и циркулирующий бутан. Для увеличения контакта между реагентами и катализатором применяют механическое перемешивание. Для подавления теплоты реакции используют автоохлаждение: испаряющиеся в реакторе углеводороды поступают в охлаждающий компрессор 2, в котором происходит компримирование газа и конденсация жидких продуктов, с последующим возвратом их в реактор. Компримированный газ же поступает далее в депропанизатор 3. Продукты реакции необходимо отделить от циркулирующей серной кислоты, поэтому из реактора они поступают в отстойник 4. Затем углеводороды очищают от циркулирующего изобутана в деизобутанизаторе 5. Последняя стадия процесса – выделение из алкилата растворенных бутанов протекает в бутановой колонне 6.

1.2.7 Технология сернокислотного алкилирования ГК РАН

В сравнении с технологиями, описанными выше, технология сернокислотного алкилирования ГК РАН обладает рядом значительных преимуществ, главными из которых являются: удобство в обслуживании установки, более низкие эксплуатационные и капитальные расходы.

Показатели качества алкилбензина, вырабатываемого на установке при этом не уступают аналогам (таблица 2).

Таблица 2 – Сравнительные характеристики технологий сернокислотного алкилирования [14]

Показатель	ExxonMobil	Stratco	Ran Group
Рабочая температура, °С max	9	9	15
Объем производства алкилата т/сут	850	850	850
Октановое число	96.3 RON	96.3 RON	96.3 RON
Количество реакторов	1	4	4
Количество отстойников	1	4	5

Принципиальная схема установки приведена на рисунке 8.

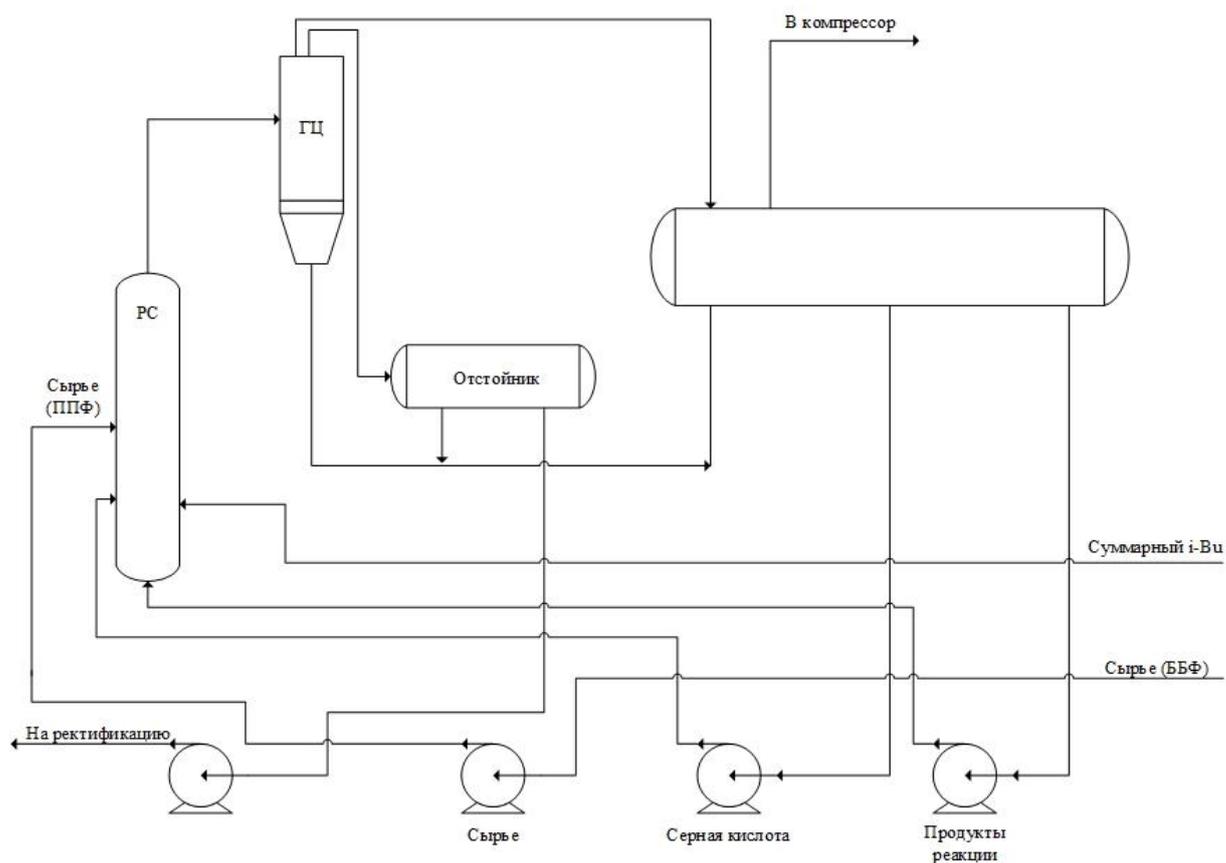


Рисунок 8 – Схема установки сернокислотного алкилирования по технологии
ГК РАН

Особенностью процесса алкилирования в данной технологии является использование струйного реактора (РС), предназначенного для эффективного перемешивания эмульсии и гидроциклона (ГЦ), в котором происходит мгновенное разделение эмульгированных двухфазных систем [15].

Процесс аликилирования по технологии ГК РАН осуществляется следующим образом:

Охлажденные кислота, изобутан и олефины поступают в реактор, который представляет собой три последовательно соединенных смесителя. В первом инжекторном смесителе происходит смешение кислоты и изобутана. Далее в полученную смесь вводят по перфорированной трубе олефины. Затем проводят реакцию за один проход через зону реакции. Поглощение тепла, образующегося в ходе реакции осуществляется продуктами реакции. После прохождения реакторного блока, продукты поступают в гидроциклон для

отделения от катализатора. Затем, отчищенные от серной кислоты продукты направляют в колонну для фракционирования и выделения алкилата.

Приведённые в данном подразделе технологии процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом обладают рядом недостатков, к которым можно отнести:

- относительно низкая селективность процесса;
- большой расход щелочных реагентов, вызванный высокой кислотностью алкилата;
- повышенное содержание в продуктивном алкилате легколетучих углеводородов, выделяющихся в окружающую среду;

1.2 Основные подходы к моделированию процесса алкилирования изобутана бутиленом

Актуальность исследования процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом обеспечивает достаточно большую базу научных работ по данной тематике. Метод математического моделирования – основа для изучения данного процесса.

В совокупности, математические модели процесса алкилирования базируются на следующих подходах [16]:

- К основным этапам моделирования можно отнести оценку термодинамических параметров процесса, определение кинетических, составление модели реактора и проверка ее на адекватность.
- Разработанная модель должна отражать сущность физико-химических процессов, протекающих в ходе алкилирования. Так, для исследуемого процесса важен учет стадии образования карбкатионов.
- При составлении модели необходимо учитывать основные конструктивные характеристики применяемых аппаратов, а также технологические связи между элементами схемы.

- Математическая модель представляет собой совокупность уравнений материального и теплового балансов, и их функциональных связей. Однако процесс получения алкилата является экзотермическим и учетом теплового баланса можно пренебречь в случае, если предусмотрено автоохлаждение системы.

- При моделировании процесса целесообразным является учет дезактивации катализатора.

- Для обеспечения функциональности модели процесса сернокислотного алкилирования – ее адекватности и прогнозирующей способности – необходимо подобрать кинетические параметры, обеспечивающие правильность расчетов при различном составе сырья. В качестве неизвестных кинетических параметров принимают предэкспоненциальные множители в выражениях скоростей химических реакций.

- Поиск кинетических параметров осуществлялся путем решения обратной кинетической задачи.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

В данном разделе рассматривается конкурентоспособность предложенных разработок, их ресурсоэффективность и учитывается ресурсосбережение.

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование.

Целевой рынок – сегмент рынка, на котором в будущем будет разработка. Иначе, сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками [23].

Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга) [24].

Критерием сегментирования может служить вид оказываемых услуг с применением математической модели процесса производства алкилата:

1. Продажа программного продукта (ПО).
2. Оказание услуг по мониторингу и оптимизации процесса алкилирования на предприятиях нефтеперерабатывающей отрасли.
3. Оказание услуг по обучению и переподготовки персонала на предприятии, т.е. компьютерного тренажера для исследования процесса производства алкилбензина.

Лидирующие позиции в настоящее время занимают продукты компаний – SimulationSciences (SimSci), AspenTechnologies и Hysprotech. Программные продукты данных компаний: Hysys и Hysim, Pro II и ProVision, AspenPlus и Speed UP ориентированы на моделирование процессов не только

промышленной подготовки нефти и газа, но и на процессы химической их переработки и предназначены для проектирования новых промышленных объектов, а не для прогнозирования и оптимизации действующих. Также имеется возможность выполнять расчеты основных конструктивных характеристик, оценку стоимости оборудования, разрабатывать и отлаживать схемы регулирования процессов и т.д. Сегментирование приведено в таблице 9.

Таблица 9 – Карта сегментирования рынка услуг

Потребитель:		Крупные НПЗ	Средние НПЗ	Мелкие НПЗ	Проектные организации	Образовательные учреждения
Вид услуги	Продажа программного продукта (SimSci)					
	Услуги по мониторингу и оптимизации процесса (AspenTechnologies)					
	Продажа тренажера (Hyprotech)					

Продажа разработанной моделирующей системы для процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом ограничивается количеством нефтеперерабатывающих заводов (НПЗ), на которых реализован данный процесс.

Тренажерная система, разработанная в программе для анализа отклонений в работе процесса алкилирования изобутана олефинами, и тестовые задания позволят расширить целевой рынок за счёт образовательных учреждений и НПЗ, которые планируют построить установки алкилирования в будущем.

Как видно из таблицы 9 целевой рынок разработки достаточно широк, и наиболее перспективным сегментом являются крупные НПЗ.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении [25]. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешнее противостоять своим соперникам. Важно реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения.

Поскольку разработок по созданию компьютерных моделирующих систем процесса сернокислотного алкилирования в литературе не обнаружено, был проведен анализ сравнения возможных программных обеспечений, позволяющих смоделировать процесс нефтепереработки.

Лидирующие позиции в настоящее время занимают продукты компаний – SimulationSciences (SimSci), AspenTechnologies и Hysprotech. Программные продукты Hysys и HysimPro и ProVision, AspenPlus и SpeedUP. Программные продукты ChemCAD, PROSIM DESIGN, КОМФОРТ, GIBBS предоставляют значительно меньше возможностей и позволяют рассчитывать ограниченный круг задач инженера – технолога.

В таблице 10 представлена оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений. Согласно оценочной карте, разрабатываемая модель процесса алкилирования изобутана бутиленом является достаточно конкурентоспособной.

К основным недостаткам модели можно отнести ее ограниченную функциональность: программные продукты конкурентов моделируют гораздо большее число процессов и сроки выхода на рынок.

Таблица 10 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
Повышение производительности	0,15	4	3	3	0,6	0,45	0,45
Удобство в эксплуатации	0,08	4	4	3	0,32	0,32	0,24
Энергоэкономичность	0,08	4	3	3	0,32	0,24	0,24
Надежность	0,10	3	4	4	0,30	0,40	0,40
Уровень шума	0,02	5	5	5	0,10	0,10	0,10
Безопасность	0,08	5	5	5	0,40	0,40	0,40
Потребность в ресурсах памяти	0,02	4	3	3	0,08	0,06	0,06
Функциональная мощность	0,08	3	4	4	0,24	0,32	0,32
Простота эксплуатации	0,06	5	4	3	0,30	0,24	0,18
Экономические критерии оценки эффективности							
Конкурентоспособность продукта	0,10	3	4	4	0,30	0,40	0,40
Уровень проникновения на рынок	0,05	4	4	4	0,20	0,20	0,20
Цена	0,08	3	2	2	0,24	0,16	0,16
Предполагаемый срок эксплуатации	0,02	4	4	4	0,08	0,08	0,08
Финансирование научной разработки	0,02	4	4	4	0,08	0,08	0,08
Срок выхода на рынок	0,05	3	4	4	0,15	0,20	0,20
Наличие сертификации разработки	0,01	3	4	4	0,03	0,04	0,04
Итого	1	62	61	58	3,74	3,69	3,55

4.1.3 SWOT-анализ

В таблице 11 представлена матрица SWOT – анализа.

Таблица 11 – Матрица SWOT – анализа

	<p>Сильные стороны научно – исследовательского проекта (С):</p> <p>С1. Высокая точность математической модели.</p> <p>С2. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки.</p> <p>С3. Наличие бюджетного финансирования.</p> <p>С4. Чувствительность модели к изменению ее параметров и состава сырья.</p> <p>С5. Заявленная экономичность технологии.</p>	<p>Слабые стороны научно – исследовательского проекта (Сл):</p> <p>Сл1. Отсутствие учета диффузии при создании модели.</p> <p>Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров для работы с моделью процесса.</p> <p>Сл3. Использование в качестве исходных данных экспериментальных данных одной установки.</p> <p>Сл4. Не разработан бизнес-план коммерциализации разработки.</p>
<p>Возможности (В):</p> <p>В1. Внедрение разработанной модели на предприятия нефтепереработки для оптимизации процесса производства бензина высокого качества.</p> <p>В2. Внедрение разработанной модели процесса в образовательные программы профессиональных переподготовок сотрудников.</p> <p>В3. Внедрение разработанной модели в образовательные программы университетов.</p>	<p>1. Повышение эффективности использования сырья и ресурсов на предприятии.</p> <p>2. Проведение проверки на адекватность в лабораториях ТПУ.</p> <p>3. Совершенствование интерфейса программы на основе разработанной модели.</p>	<p>1. Использование модели для исследования процесса алкилирования с применением других катализаторов.</p> <p>2. Приобретение необходимого оборудования опытного образца.</p> <p>3. Моделирование всей технологической схемы процесса с целью прогнозирования промышленных данных.</p>
<p>Угрозы (У):</p> <p>У1. Отсутствие спроса со стороны предприятий, вызванное низкой распространенностью процесса алкилирования.</p> <p>У2. Развитая конкуренция со стороны других систем моделирования</p>	<p>1. Продвижение новой технологии с целью появления спроса на усовершенствованную модель.</p> <p>2. Сокращение временных затрат на создание модели.</p>	<p>1. Разработка научного исследования.</p> <p>2. Приобретение необходимых экспериментальных данных по составу сырья и продукта с промышленной установки.</p>

Согласно таблице 11 построена интерактивная матрица разработки проекта, приведенная в таблице 12.

Таблица 12 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта						
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	+	+	-	+	+
	B2	+	+	+	+	0
	B3	+	+	+	+	0
Сильные стороны проекта						
Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	У1	-	0	-	0	+
	У2	0	-	+	+	+
Слабые стороны проекта						
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	
	B1	+	+	+	0	
	B2	+	+	+	0	
	B3	+	+	-	+	
Слабые стороны проекта						
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	
	У1	+	+	-	0	
	У2	+	+	+	0	

В рамках третьего этапа SWOT-анализа была составлена итоговая матрица SWOT-анализа, представленная в таблице 13.

На основе SWOT-анализа были показаны проблемы, стоящие перед разработанной программой.

Для проекта по моделированию процесса сернокислотного алкилирования характерен баланс сильных и слабых сторон, а также возможностей и угроз, т. е. разработанная модель находится в достаточно стабильных условиях.

Таблица 13 – Итоговая матрица SWOT – анализа

	<p>Сильные стороны научно – исследовательского проекта (С):</p> <p>С1. Высокая точность математической модели.</p> <p>С2. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки.</p> <p>С3. Наличие бюджетного финансирования.</p> <p>С4. Чувствительность модели к изменению ее параметров и состава сырья.</p> <p>С5. Заявленная экономичность технологии.</p>	<p>Слабые стороны научно – исследовательского проекта (Сл):</p> <p>Сл1. Отсутствие учета диффузии при создании модели.</p> <p>Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров для работы с моделью процесса.</p> <p>Сл3. Использование в качестве исходных данных экспериментальных данных одной установки.</p> <p>Сл4. Не разработан бизнес-план коммерциализации разработки.</p>
<p>Возможности (В):</p> <p>В1. Внедрение разработанной модели на предприятия нефтепереработки для оптимизации процесса производства бензина высокого качества.</p> <p>В2. Внедрение разработанной модели процесса в образовательные программы профессиональных переподготовок сотрудников.</p> <p>В3. Внедрение разработанной модели в образовательные программы университетов.</p>	<p>1. Повышение эффективности использования сырья и ресурсов на предприятии. (В1С1С2С4С5)</p> <p>2. Проведение проверки на адекватность в лабораториях ТПУ. (В2С1С2С3С4)</p> <p>3. Совершенствование интерфейса программы на основе разработанной модели. (В3С1С2С3С4)</p>	<p>1. Использование модели для исследования процесса алкилирования с применением других катализаторов. (В1Сл1Сл2Сл3)</p> <p>2. Приобретение необходимого оборудования опытного образца. (В2Сл1Сл2Сл3)</p> <p>3. Моделирование всей технологической схемы процесса с целью прогнозирования промышленных данных. (В3Сл1Сл2Сл4)</p>
<p>Угрозы (У):</p> <p>У1. Отсутствие спроса со стороны предприятий, вызванное низкой распространенностью процесса алкилирования.</p> <p>У2. Развитая конкуренция со стороны других систем моделирования</p>	<p>1. Продвижение новой технологии с целью появления спроса на усовершенствованную модель. (У1С5)</p> <p>2. Сокращение временных затрат на создание модели. (У2С3С4С5)</p> <p>3. Развитие конкурентной среды. (У1С5)</p>	<p>1. Разработка научного исследования. (У1Сл1Сл2)</p> <p>2. Приобретение необходимых экспериментальных данных по составу сырья и продукта с промышленной установки. (У2Сл1Сл2Сл3)</p> <p>3. Приобретение необходимого оборудования опытного образца. (У1Сл1Сл2)</p>

4.1.4 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

В таблице 14 представлена морфологическая матрица моделирования процесса алкилирования изобутана олефинами.

Таблица 14 – Морфологическая матрица моделирования процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом

	1	2	3
А. Среда, в которой написан программный продукт	Delphi 7	C++	Anjuta
Б. Метод определения термодинамических параметров	В программе Gaussian	В программе «ПРИРОДА»	Экспериментально
В. Учёт нестационарности модели	С использованием статической модели	Динамическая модель	Детерминированная

Согласно данной таблице можно выделить несколько альтернатив проведения научного исследования, в основе которых лежит использование различных языков программирования.

4.2 Планирование проекта

В таблице 15 представлен перечень работ и распределение их исполнителей.

Таблица 15 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследований	Инженер
	3	Обзор современных методов исследований по выбранному направлению	Инженер
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Инженер

Продолжение таблицы 15 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Теоретическое обоснование и проведение экспериментальных исследований	5	Теоретическое обоснование и выбор экспериментальных методов исследований	Руководитель, Инженер
	6	Построение моделей и проведение экспериментов	Инженер
	7	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Инженер
Обобщение полученных результатов, выводы по проделанной работе	8	Оценка эффективности проведенных исследований	Руководитель
	9	Определение целесообразности проведения ВКР	Инженер
Разработка технической документации и проектирование	10	Разработка модели и ее компьютерная реализация	Инженер
	11	Оценка эффективности	Инженер
	12	Сбор информации по охране труда	Инженер
	13	Подбор данных для выполнения экономической части работы	Инженер
Оформление отчета по ВКР	14	Составление пояснительной записки	Руководитель, Инженер
	15	Сдача работы на рецензию	Инженер
	16	Предзащита	Руководитель, Инженер
	17	Подготовка к защите дипломной работы	Инженер
	18	Защита дипломной работы	Руководитель, Инженер

Календарный график проведения работ представлен в таблице 16.

Таблица 16 – Календарный график проведения работ на 2019 – 2020 г.

Содержание работ	Должность исполнителя	Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь
Составление и утверждение технического задания	Руководитель										
Выбор направления исследований	Инженер										
Обзор современных методов исследований по выбранному направлению	Инженер										
Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Инженер										
Теоретическое обоснование и выбор экспериментальных методов исследований	Руководитель, Инженер										
Построение моделей и проведение экспериментов	Инженер										
Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Инженер										
Оценка эффективности проведенных исследований	Руководитель										
Определение целесообразности проведения ВКР	Инженер										
Разработка модели и ее компьютерная реализация	Инженер										
Оценка эффективности	Инженер										
Сбор информации по охране труда	Инженер										

Продолжение таблицы 16 – Календарный график проведения работ на 2019 – 2020 г.

Подбор данных для выполнения экономической части работы	Инженер											
Составление пояснительной записки	Руководитель, Инженер											
Сдача работы на рецензию	Инженер											
Предзащита	Руководитель, Инженер											
Подготовка к защите дипломной работы	Инженер											
Защита дипломной работы	Руководитель, Инженер											

Расчет действительных рабочих дней представлен в таблице 17.

Таблица 17 – Планирование работ

	Количество календарных дней	Количество рабочих дней
Руководитель	28	22
Студент	112	86

Согласно полученным данным количество рабочих дней для студента составляет 86 дней, для руководителя – 22 дня.

4.3 Бюджет исследования

При планировании бюджета исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям [25]:

- материальные затраты и накладные расходы;
- затраты на специальное оборудование для научных исследований;
- основная и дополнительная заработные платы исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);

4.3.1 Расчет материальных затрат

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_M = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхi}$$

Принимаем $k_T = 20\%$ от стоимости материалов.

Материальные затраты, необходимые для разработки модели сернокислотного алкилирования, отражены в таблице 18.

Таблица 18 – Материальный затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы (Z_M), руб
Бумага	листов	100	1,5	180
Чернила для принтера	мл	100	1,1	132
Тетрадь	шт.	3	75	270
Ручка	шт.	4	35	168
Карандаш	шт.	2	20	48
Итого:				798

Суммарные материальные затраты составляют 798 рублей.

4.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование

Для выполнения исследовательского проекта требуется приобрести персональный компьютер, ПО MicrosoftOffice 365 для создания документов, лицензионное программное обеспечение Gaussian и лицензионного программного пакета Delphi 7 для компьютерной реализации модели. Также требуется получить экспериментальные данные с завода, запросив их на нефтеперерабатывающем заводе или проведя испытания самостоятельно на кафедре.

Все расчеты по приобретению спецоборудования, включая 15% на затраты по доставке и монтажу, отображены в таблице 19.

Таблица 19 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования

№ п/п	Наименование оборудования	Количество единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
1	ПО MicrosoftOffice	1	2,5	2,5
2	Borland Delphi 7	1	10	10
3	Gaussian DM Calculator v1.0	1	15	15
4	Персональный компьютер	1	50	50
5	Принтер	1	4	4
Итого:				84,5

В таблице 20 приведен расчет амортизационных отчислений.

При расчете амортизации принимаем средневзвешенную норму амортизации равной 25%.

Таблица 20 – Расчет амортизационных отчислений

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во	Цена единицы оборудования, тыс. руб	Срок службы*, дней	Амортизация оборудования, тыс.руб
1	Компьютер	1	50	303	10,38
2	Принтер	1	4	303	0,83
Итого:					11,21

Срок службы принимаем равным учебному периоду, выделенному на выполнение работы - 10 месяцев (303 дня).

4.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Баланс рабочего времени приведен в таблице 21.

Таблица 22 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Научный руководитель проекта	Инженер
Календарное число дней	303	303
Количество нерабочих дней		
- выходные	87	87
- праздничные	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	0	14
- больничный	4	7
Действительный годовой фонд рабочего времени	198	185

Расчет основной заработной платы приведен в таблице 23.

Таблица 23 – Основная заработная плата

	Базовый оклад, руб.	Районный коэффициент	Месячный должностной оклад, руб.	Среднедневная заработная плата, руб	Количество рабочих дней, шт	Общая заработная плата, руб.
Руководитель	27770	1,3	54151,5	2734,92	22	60168,24
Студент	12130	1,3	23653,5	1278,57	86	109957,02
Итого:						170125,26

Расчеты показали, что суммарная общая заработная плата составляет 170125,26 рублей.

4.3.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

В таблице 24 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 24 – Итоговая заработная плата

Исполнители	Основная заработная плата, руб.	Коэффициент дополнительной заработной платы	Дополнительная заработная плата, руб.	Итоговая зарплата, руб.
Руководитель	60168,24	0,12	7220,19	67388,43
Студент	109957,02		13194,84	123151,86
Итого:				190540,29

Расчеты показали, что итоговая заработная плата составляет 190540,29 рублей.

4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Расчет отчислений во внебюджетные фонды осуществляется на основании Налогового кодекса Российской Федерации, согласно которому размер отчислений во внебюджетные фонды составляет 30% плюс страхование от несчастных случаев и травматизма. Примем размер отчислений во внебюджетные фонды в размере – 30,2%. Результаты представлены в таблице 25.

Таблица 25 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнители	Зарботная плата, руб	Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	Размер отчислений, руб.
Научный руководитель	67388,43	0,302	20351,31
Инженер	123151,86		37191,86
Итого:			57543,17

Согласно расчетам, размер отчислений составляет 57543,17 рублей.

4.3.6 Формирование бюджета исследовательского проекта

Итоговая таблица формирования бюджета исследовательского проекта приведена ниже.

Таблица 26 – Расчет бюджета затрат исследовательской работы

Наименование	Сумма, руб.
Материальные затраты	798
Амортизационные отчисления	11210
Зарботная плата руководителя ВКР	67388,43
Зарботная плата исполнителя проекта	123151,86
Отчисления во внебюджетные фонды	57543,17
Бюджет затрат	260091,46

Согласно расчетам, бюджет затрат работы составляет 260091,46 рублей.

Вывод:

В данном разделе был произведен анализ сильных и слабых сторон математической модели процесса, выявлены возможности и опасности для ее реализации

В результате выполненного анализа, можно сделать вывод, что разработка не уступает аналогам, поэтому является пригодной к исполнению.

5 Социальная ответственность

Объектом исследования данной работы является установка серноокислотного алкилирования изобутана бутиленом.

Сырьем для установки служит изобутановая фракция установки газофракционирования и бутан-бутиленовая фракция установок предприятия, содержащая около 50% олефинов.

Данная дипломная работа выполнялась в аудитории 133, расположенной на первом этаже учебного корпуса номер 2 Томского политехнического университета. Аудитория 133 оборудована 12 ЭВМ. Экспериментальная часть бакалаврской работы осуществлялась на персональном компьютере (далее ПК). Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления и кондиционирования воздуха. Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Основным нормативным документом, отражающим права и обязанности сотрудника и работодателя, является Федеральный закон "Об основах охраны труда в Российской Федерации" от 17.07.1999 N 181-ФЗ. Настоящий Федеральный закон устанавливает правовые основы регулирования отношений в области охраны труда и направлен на создание условий труда, соответствующих требованиям сохранения жизни и здоровья работников в процессе трудовой деятельности [26].

К основным нормативным документам также можно отнести Федеральный закон "Об обязательном социальном страховании от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний" от 24.07.1998 N 125-ФЗ. Данный ФЗ устанавливает в Российской Федерации правовые, экономические и организационные основы обязательного социального страхования от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний и определяет порядок возмещения вреда,

причиненного жизни и здоровью работника при исполнении им обязанностей по трудовому договору и в иных установленных настоящим Федеральным законом случаях [27].

Для реализации приведенных выше законов приняты Постановления Правительства РФ “О государственном надзоре и контроле за соблюдением законодательства РФ о труде и охране труда”, “О службе охраны труда”, “О Федеральной инспекции труда” и др.

Также одним из основных документов, устанавливающих государственные гарантии трудовых прав и свобод граждан является "Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ [28].

Основными задачами трудового законодательства являются создание необходимых правовых условий для достижения оптимального согласования интересов сторон трудовых отношений, интересов государства, а также правовое регулирование трудовых отношений и иных непосредственно связанных с ними отношений по:

- организации труда и управлению трудом;
- трудоустройству у данного работодателя;
- подготовке и дополнительному профессиональному образованию работников непосредственно у данного работодателя;
- социальному партнерству, ведению коллективных переговоров, заключению коллективных договоров и соглашений;
- участием работников и профессиональных союзов в установлении условий труда и применении трудового законодательства в предусмотренных законом случаях;
- материальной ответственности работодателей и работников в сфере труда;
- государственному контролю (надзору), профсоюзному контролю за соблюдением трудового законодательства (включая законодательство

об охране труда) и иных нормативных правовых актов, содержащих нормы трудового права;

- разрешению трудовых споров;
- обязательному социальному страхованию в случаях, предусмотренных федеральными законами.

Рассмотрим более подробно организацию рабочего места сотрудника. Правильная организация рабочего места оказывает непосредственное влияние на производительность труда. Повышению трудовой деятельности способствует просторное хорошо проветриваемое помещение, в котором соблюден баланс освещения. Согласно гигиеническим нормам СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 [29] помещение в целом и рабочее место должны быть освещены достаточно и равномерно. При оборудовании рабочей зоны необходимо также учесть, что яркий солнечный свет порождает блики на мониторе, следовательно, существует потребность в установке жалюзи.

Так как трудовая деятельность в данном случае непосредственно связана с работой на ЭВМ, необходимо соблюдать меры безопасности, направленные на сохранение полноценного зрения сотрудника:

- экран видеомонитора должен находиться от глаз пользователя на оптимальном расстоянии 600 – 700 мм, но не ближе 500 мм с учетом размеров алфавитно-цифровых знаков и символов;
- уровень глаз при вертикально расположенном экране должен приходиться на центр или 2/3 высоты экрана. Линия взора должна быть перпендикулярна центру экрана и оптимальное её отклонение от перпендикуляра, проходящего через центр экрана в вертикальной плоскости, не должно превышать 5 градусов, допустимое 10 градусов.

Для того, чтобы минимизировать последствия «сидячей» работы, необходимо оборудовать рабочее место подставкой для ног, имеющей ширину не менее 300 мм, глубину не менее 400 мм, регулировку по высоте в пределах до 150 мм и по углу наклона опорной поверхности подставки до 20 градусов.

5.2 Производственная безопасность

Производственная безопасность представляет собой систему организационных мероприятий и технических средств, уменьшающих вероятность воздействия на персонал опасных производственных факторов, вредных воздействий технологических процессов, энергии, средств, предметов, условий и режимов труда до приемлемого уровня. Необходимо выявить вредные и опасные производственные факторы, которые могут возникать при разработке и эксплуатации математической модели сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом. Выбор факторов производится с использованием ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация» [30]. Выявленные факторы перечислены в таблице 27.

Таблица 27. – Опасные и вредные факторы при моделировании и эксплуатации модели сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом

Наименование фактора	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы
Статические физические перегрузки	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы

Продолжение таблицы 27. – Опасные и вредные факторы при моделировании и эксплуатации модели серноокислотного алкилирования изобутана бутиленом

Нервно-психические перегрузки	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы
Перегрузка зрительного аппарата	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы
Повышенный уровень шума	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы
Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы
Электрический ток	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов.
Пожарная безопасность	+	+	+	СНиП 21-01-97* Пожарная безопасность зданий и сооружений

5.2.1 Отклонение показателей микроклимата

К метеорологическим факторам, влияющим на человека, относятся температура, влажность, скорость движения воздуха. Данные факторы при длительном воздействии оказывают влияние на психологическое и физическое состояние человека.

В производственных помещениях, в которых работа с использованием персональных электронных вычислительных машин является должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата для категории работ 1а и 1б в соответствии с действующими санитарно-эпидемиологическими нормативами микроклимата производственных помещений.

Оптимальные величины показателей микроклимата на рабочем месте для помещений данных категорий приведены в таблице 28.

Таблица 28. – Оптимальные характеристики микроклимата

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Iа (до 139)	22-24	21-25	60-40	0,1
	Iб (140-174)	21-23	20-24	60-40	0,1
Теплый	Iа (до 139)	23-25	22-26	60-40	0,1
	Iб (140-174)	22-24	21-25	60-40	0,1

С целью защиты сотрудника от воздействия данного вредного фактора предусмотрены системы вентиляции и обогрева помещения. Также установлены нормы проветривания рабочего места.

5.2.2 Статические физические перегрузки

Так как работы с персональными электронно-вычислительными машинами подразумевают сидячее положение сотрудника, они способны вызывать физические перегрузки статического характера.

К требованиям СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 касательно оптимального устройства рабочего места и минимальной физической нагрузки можно отнести следующие требования [29]:

- Конструкция рабочего стула (кресла) должна обеспечивать поддержание рациональной рабочей позы при работе на ПЭВМ, позволять изменять позу с целью снижения статического напряжения мышц шейно-плечевой области и спины для предупреждения развития утомления.
- Тип рабочего стула (кресла) следует выбирать с учетом роста пользователя, характера и продолжительности работы с ПЭВМ.
- Рабочий стул (кресло) должен быть подъемно-поворотным, регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а также расстоянию спинки от переднего края сиденья, при этом регулировка каждого параметра должна быть независимой, легко осуществляемой и иметь надежную фиксацию.
- Поверхность сиденья, спинки и других элементов стула (кресла) должна быть полумягкой, с нескользящим, слабо электризующимся и воздухопроницаемым покрытием, обеспечивающим легкую очистку от загрязнений.

5.2.3 Нервно-психические перегрузки

Нервно – психические перегрузки при работе с персональным компьютером могут быть вызваны рядом факторов, среди которых: нарушение микроклимата, монотонность труда, умственное перенапряжение, вызванное информационной нагрузкой и т.д.

Для контроля данного рода перегрузок предусмотрены перерывы в работе. При трудовой деятельности за персональным компьютером требуется после каждого часа устанавливать перерывы. Такие перерывы нужно включать в общее рабочее время и не вычитать из продолжительности смены. Если установленный рабочий день равен 8 часам, то сумма времени на перерывы

составляет от 50 минут до 1,5 часа. Если рабочее время составляет 12 часов, то - 80 – 140 минут.

Регламентированные перерывы прописываются экспертами в картах спецоценки условий труда.

5.2.4 Перегрузка зрительного аппарата

Работы с персональным компьютером непосредственно связаны с перегрузками зрительного аппарата, вызванными длительным сосредоточенным наблюдением и световыми нагрузками.

Для минимизации перегрузки зрительного аппарата необходимо учитывать нормы освещенности и расположение ПК.

5.2.5 Повышенный уровень шума

Повышенный уровень шума связан с работой агрегатов персонального компьютера. В производственных помещениях при выполнении основных или вспомогательных работ с использованием ПЭВМ уровни шума на рабочих местах не должны превышать предельно допустимых значений, установленных для данных видов работ в соответствии с действующими санитарно-эпидемиологическими нормативами (таблица 29)

Таблица 29 – Допустимые значения уровней звукового давления в октавных полосах частот и уровня звука, создаваемого ПЭВМ [31]

Уровни звукового давления в октавных полосах со среднегеометрическими частотами									Уровни звука в дБА
31,5 Гц	63 Гц	125 Гц	250 Гц	500 Гц	1000 Гц	2000 Гц	4000 Гц	8000 Гц	
86 дБ	71 дБ	61 дБ	54 дБ	49 дБ	45 дБ	42 дБ	40 дБ	38 дБ	50

Для уменьшения общего уровня шума шумящее оборудование (печатающие устройства, серверы и т.п.), уровни шума которого превышают нормативные, должно размещаться вне помещений с ПЭВМ.

5.2.6 Недостаточная освещенность рабочей зоны

Данный вредный фактор возникает при неправильном комбинировании света в рабочем помещении. Как указано выше, недостаточная освещенность рабочей зоны оказывает негативное воздействие на зрительную систему.

Предусмотрены следующие нормы освещения при работе с ПК [32]:

- Освещенность на поверхности стола в зоне размещения рабочего документа должна быть 300-500 лк. Освещение не должно создавать бликов на поверхности экрана. Освещенность поверхности экрана не должна быть более 300 лк.

- Следует ограничивать прямую блескость от источников освещения, при этом яркость светящихся поверхностей (окна, светильники и др.), находящихся в поле зрения, должна быть не более 200 кд/м².

- Следует ограничивать неравномерность распределения яркости в поле зрения пользователя ПЭВМ, при этом соотношение яркости между рабочими поверхностями не должно превышать 3:1-5:1, а между рабочими поверхностями и поверхностями стен и оборудования 10:1.

Соблюдение данных требований способствует установлению светового баланса в рабочем помещении и минимизирует его воздействие на зрительный аппарат.

5.2.7 Электрический ток

Источниками электрической опасности являются [33]:

- оголенные части проводов или отсутствие изоляции;
- отсутствие заземления;
- замыкания;
- статическое напряжение.

От токоведущих частей электроустановок человека защищают изолирующие защитные средства. Они подразделяются на основные и дополнительные. Основными изолирующими средствами защиты разрешается

прикасаться к токоведущим частям электроустановок, имеющих рабочее напряжение до 1000 Вольт. В первую очередь, к таким защитным средствам относится слесарно-монтажный инструмент, снабженный изолирующими рукоятками – плоскогубцы, ножи, отвертки и т.п.

Электробезопасность работающего персонала и посторонних лиц должна обеспечиваться выполнением следующих мероприятий [33]:

1. Соблюдение соответствующих расстояний до токоведущих частей;
2. Изоляция токопроводимых частей;
3. Применение блокировки аппаратов и ограждающих устройств для предотвращения ошибочных операций и доступа к токоведущим частям;
4. Использование предупреждающей сигнализации, надписей и плакатов;
5. Применение устройств для снижения напряженности электрических и магнитных полей до допустимых значений;
6. Использование средств защиты и приспособлений.

5.2.8 Пожарная безопасность

Работа с персональными компьютерами связана с рисками возгорания электрического оборудования, в связи с чем в зданиях должны быть предусмотрены конструктивные, объемно-планировочные и инженерно-технические решения, обеспечивающие в случае пожара [34]:

- возможность эвакуации людей независимо от их возраста и физического состояния наружу на прилегающую к зданию территорию (далее - наружу) до наступления угрозы их жизни и здоровью вследствие воздействия опасных факторов пожара;
- возможность спасения людей;
- возможность доступа личного состава пожарных подразделений и подачи средств пожаротушения к очагу пожара, а также проведения мероприятий по спасению людей и материальных ценностей;

– ограничение прямого и косвенного материального ущерба, включая содержимое здания и само здание, при экономически обоснованном соотношении величины ущерба и расходов на противопожарные мероприятия, пожарную охрану и ее техническое оснащение.

5.3 Экологическая безопасность

В данном разделе рассматривается характер воздействия проектируемого решения на окружающую среду. Поскольку, со стороны экологической безопасности, суть работы заключается в использовании персонального компьютера, принтера, бумаги и других материальных ресурсов, следовательно, основное влияние на экологическую безопасность оказывают процессы их утилизации. Так, бумажные отходы оказывают влияние на литосферу. Целесообразным решением вопроса утилизации бумаги является сбор макулатуры с целью вторичной переработки.

Одним из основных ресурсов, необходимым при выполнении работ являются различные источники света. Аудитория, в которой осуществлялась разработка проекта оснащена люминесцентными лампами, которые, согласно Постановлению Правительства РФ от 3 сентября 2010 г. N 681 "Об утверждении Правил обращения с отходами производства и потребления в части осветительных устройств, электрических ламп, ненадлежащие сбор, накопление, использование, обезвреживание, транспортирование и размещение которых может повлечь причинение вреда жизни, здоровью граждан, вреда животным, растениям и окружающей среде" необходимо утилизировать как ртутьсодержащие лампы [35].

Также значительное влияние на литосферу оказывает пластик, входящий в состав основных электронных устройств, используемых при выполнении работы. Однако, влияние проводимых работ на атмосферу и гидросферу минимально.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Наиболее вероятная чрезвычайная ситуация, которая может возникнуть при работе с персональным компьютером – пожар, так как в современных ЭВМ очень высокая плотность размещения элементов электронных схем, в непосредственной близости друг от друга располагаются соединительные провода и кабели, при протекании по ним электрического тока выделяется значительное количество теплоты, при этом возможно оплавление изоляции и возникновение возгорания.

В связи с этим, участки, на которых используется компьютерная техника, по пожарной опасности относятся к категории пожароопасных “В”.

При пожаре люди должны покинуть помещение в течение минимального времени согласно плану эвакуации.

В помещениях с компьютерной техникой, недопустимо применение воды и пены ввиду опасности повреждения или полного выхода из строя дорогостоящего электронного оборудования.

Для тушения пожаров необходимо применять углекислотные и порошковые огнетушители, которые обладают высокой скоростью тушения, большим временем действия, возможностью тушения электроустановок, высокой эффективностью борьбы с огнем. Воду разрешено применять только во вспомогательных помещениях [36].

Помещение офиса должно быть оборудовано пожарными извещателями, которые позволяют оповестить дежурный персонал о пожаре.

Вывод:

В данном разделе ВКР проведен анализ проекта с точки зрения социальной ответственности за моральные, общественные, экономические, экологические возможные негативные последствия. Работы выполнены в соответствии с нормативными документами и требованиями.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были проведены расчеты кинетических и термодинамических параметров реакций, протекающих в процессе сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом.

На основе термодинамического анализа, была составлена формализованная схема превращений, которая обеспечивает чувствительность модели к изменению технологического режима, а именно: к варьированию температуры, расхода бутан – бутиленовой фракции, расхода циркулирующего изобутана и изобутана хладагента.

На основе формализованной схемы была составлена кинетическая модель процесса, состоящая из уравнений покомпонентного материального и теплового балансов. За основу взята модель идеального смешения.

Разработанная математическая модель позволяет определять состав алкилата, его основные характеристики и параметры технологического режима. Адекватность модели подтверждена путем сравнения расчётных и экспериментальных концентраций изооктанов в алкилате.

Расчеты, произведенные при помощи данной модели, показали, что при увеличении температуры в интервале от $-2,7$ до $2,8^{\circ}\text{C}$ происходит увеличение выхода алкилата, концентрации триметилпентанов в нем и, как следствие, увеличение октанового числа в нем.

При варьировании расхода бутан – бутиленовой фракции в интервале от 30 до $80 \text{ м}^3/\text{час}$, октановое число алкилата снижается. Это вызвано уменьшением мольного соотношения изобутан : олефины, которое в свою очередь оказывает влияние на протекание побочных реакций, снижающих качество продуктового алкилата. Увеличение подачи циркулирующего изобутана аналогично увеличению мольного соотношения изобутан : олефины приводит к минимизации влияния побочных реакций, следовательно, к увеличению октанового числа.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Солодова Н.Л., Хасанов И.Р. Перспективные процессы алкилирования изопарафинов олефинами// Вестник технологического университета. – 2015. – №9. – с.117-121.
2. Левинбук М.И., Каминский Э.Ф. «О некоторых проблемах российской переработки» // Химия и технология топлив и масел. – 2000. – №2. – с.6-11.
3. Стась, Н. Ф. Справочник по общей и неорганической химии: учеб. пособие для прикладного бакалавриата / Н. Ф. Стась. - 4-е изд. - М.: Изд-во Юрайт, 2018. – 92 с.
4. Лавренов А.В., Богданец Е.Н., Дуплякин В.К. Твердокислотное алкилирование изобутана бутенами: путь от выяснения причин быстрой дезактивации катализаторов к технологическому оформлению процесса// Институт проблем переработки углеводородов СО РАН, г. Омск. – 2009. – с. 28-38.
5. Пакина М. И. и др. Медьсодержащие цеолитные катализаторы селективного алкилирования изобутана //Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). – 2015. – №. 32. – с. 34 – 37.
6. Кочкина Е. С. и др. Исследование реакции алкилирования изобутана бутан-бутиленовой фракцией в присутствии хлоралюминатной ионной жидкости //Башкирский химический журнал. – 2015. – Т. 22. – №. 1.
7. Патент №2163588 (RU). МПК С07С2/62. Способ получения углеводородной фракции, предназначенной для использования в моторах; авторы Свен Ивар ХОММЕЛЬТОФТ.; патентообладатель ХАЛЬДОР ТОПСЕЭ А/С; дата подачи заявки: 1995.12.01; дата публикации патента: 2001.02.27.
8. Патент №2679624 (RU). МПК С07С2/58. Установка твердокислотного алкилирования; авторы Егизарьян Аркадий Мамаикович, Тюрников Андрей Николаевич, Муравьев Александр Сергеевич;

патентообладатель Акционерное общество "Газпромнефть - Московский НПЗ"; дата подачи заявки: 2017.12.18; дата публикации патента: 2019.02.12.

9. Патент №2622294 (RU). МПК C07C2/58. Устройство для алкилирования изобутана олефинами на твердом катализаторе; авторы Кузичкин Николай Васильевич, Лисицын Николай Васильевич, Сладковский Дмитрий Андреевич, Зернов Петр Алексеевич, Семикин Кирилл Вадимович; патентообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)" (СПбГТИ (ТУ)); дата подачи заявки: 2015.09.01; дата публикации патента: 2017.06.14.

10. Дышкант М.С. Изучение влияния основных технологических факторов процесса фтористоводородного алкилирования на выход и качество целевого продукта // Вестник Полоцкого государственного университета. – 2011. – с.123 – 129.

11. Капустин, В. М. Технология переработки нефти. Деструктивные процессы /В. М. Капустин, А. А Гуреев. – Москва: издательство КолосС. – 2008. – 334 с.

12. Дорогочинский А.З. и др. Серноокислотное алкилирование изопарафинов олефинами. –М.: Химия, 1970 – 270 с.

13. В. М. Капустин, С. Г. Кукес, Р. Г. Бертолусини. Нефтеперерабатывающая промышленность США и бывшего СССР. М., Химия, 1995. — 304 с.

14. Технология серноокислотного алкилирования [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://rangroup.ru/areas/newdevelopment/ska/> (дата обращения 17.11.2019).

15. Патент №2092475 (RU). МПК C07C2/62. Способ получения алкилбензина; авторы Кирилин Ю.А.; Гершуни С.Ш.; Капустин В.М.; Суманов В.Т.; Мельман А.З.; Заяшников Е.Н.; Бобылев А.Б.; патентообладатель Кирилин

Юрий Андреевич; дата подачи заявки: 1995.12.06; дата публикации патента: 1997.10.10.

16. Боруцкий П.Н. Алкилирование. Изомеризация. Олигомеризация. В кн. Новый справочник химика и технолога. Сырье и продукты промышленности органических и неорганических веществ. // Под ред. Ю.В. Поконовой и В.И.Страхова. – Санкт-Петербург: Изд-во НПО «Профессионал», «Мир и семья», 2002. – Ч. 1. – 873 с.

17. Технологический регламент установки сернокислотного алкилирования ТР 25-12, 2013 г.

18. Ахметов С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа: Учебное пособие для вузов. – Уфа: Гилем, 2002 – 672 с.

19. Дорогочинский А.З. и др. Сернокислотное алкилирование изопарафинов олефинами. –М.: Химия, 1970– 270 с.

20. Алкилирование. Исследования и промышленное оформление процесса /под ред. Л.Ф.Олбрайта и А.Р. Голдсби. -М., Химия. – 1982 – 342 с.

21. Основные процессы нефтепереработки: справочник/ Роберт А. Мейерс (ред.) ; пер. с англ. яз. 3-го изд. под ред. О. Ф. Глаголевой, О. П. Лыкова, Handbook of petroleum refining processes СПб.: Профессия, 2012 – 940 с.

22. Бадикова А. Б. Усовершенствование процесса сернокислотного алкилирования изоалканов олефинами: автореф. дисс. к. т. н., Башкирский гос. университет. – Уфа, 2000 г. – 158 с.

23. Маркетинг: целевые рынки [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.e-biblio.ru/xbook/new/xbook307/book/part-004/page.htm> (дата обращения 26.04.2020).

24. Сегментирование [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://activetraffic-ru.turbopages.org/s/activetraffic.ru/wiki/segmentirovanie/> (дата обращения 26.04.2020).

25. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / И.Г. Видяев, Г.Н. Сери, Н.А. Гаврикова, Н.В. Шаповалова, Л.Р.Тухватулина, З.В. Креницына; Томский

политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014 – 36 с.

26. Федеральный закон от 17.07.1999 N 181-ФЗ «Об основах охраны труда в Российской Федерации» [Электронный ресурс] / http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_1983/ (дата обращения 28.04.2020)

27. Федеральный закон от 24.07.1998 N 125-ФЗ "Об обязательном социальном страховании от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний" [Электронный ресурс] / http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_19559/ (дата обращения 28.04.2020)

28. "Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ [Электронный ресурс] /http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_34683/ (дата обращения 28.04.2020)

29. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы (с изменениями на 21 июня 2016 года). - М.: Федеральный центр госсанэпиднадзора Минздрава России, 2003. – 56 с.

30. ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация»

31. Шум. Общие требования безопасности. – М.: Стандартинформ, 2008. – 13 с.

32. СНиП 23-05-95 «Естественное и искусственное освещение».

33. ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

34. ГОСТ 12.1.004. – 91. Пожарная безопасность

35. Постановление Правительства РФ от 3 сентября 2010 г. N 681 "Об утверждении Правил обращения с отходами производства и потребления в части осветительных устройств, электрических ламп, ненадлежащие сбор, накопление, использование, обезвреживание, транспортирование и размещение которых

может повлечь причинение вреда жизни, здоровью граждан, вреда животным, растениям и окружающей среде" [Электронный ресурс]
http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_104420/ (дата обращения 28.04.2020)

36. Чрезвычайные ситуации при работе с ПЭВМ [Электронный ресурс]
https://studopedia.ru/8_107307_osveshchenie-pomeshcheniy-vichislitelnih-tsentrov.html (дата обращения 28.04.2020)

Приложение А

(справочное)

Таблица А.1 – Состав бутан – бутиленовой фракции процесса сернокислотного алкилирования

Содержание компонента, мас. %	Сутки													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
бутадиен-1,3	0,3	0,27	0,26	0,26	0,2	0,25	0,25	0,25	0,26	0,26	0,24	0,25	0,26	0,27
бутилен	15,75	15,83	15,67	15,59	15,53	15,49	15,42	14,97	15,28	15,28	15,29	15,91	15,77	15,88
изо-бутан	43,41	44,64	44,93	44,65	44,92	44,82	46,1	42,89	43,16	43,16	45,12	46,22	43,18	42,4
изо-бутилен	5,76	5,11	5,29	5,13	5,11	4,95	3,66	8	6,22	6,22	5,6	3,75	5,83	5,78
н-бутан	8,43	8,3	8,18	8,31	8,25	8,29	8,38	8,06	8,19	8,19	8,22	8,41	8,1	8,44
транс-бутилен	16,07	15,92	15,77	15,88	15,81	15,93	15,91	15,24	15,55	15,55	15,43	15,77	16,26	16,53
цис-бутилен	9,92	9,67	9,58	9,76	9,73	9,9	9,82	9,44	9,49	9,49	9,15	9,41	10,01	10,21

Таблица А.2 – Состав циркулирующего изобутана процесса сернокислотного алкилирования

Содержание компонента, мас. %	Сутки													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
изо-бутан	84,73	85,77	87,17	86,96	85,43	86,6	87,8	85,63	84,2	84,2	86,54	84,7	83,67	86,93
н-бутан	11,88	10,73	9,89	9,91	10,99	10,31	9,3	10,74	11,53	11,53	9,76	12,44	11,23	9,39
пропан	3,08	3,27	2,72	2,9	3,38	2,93	2,77	3,28	3,72	3,72	3,52	2,45	4,73	3,33
сумма C5	0,31	0,23	0,22	0,23	0,2	0,16	0,13	0,35	0,55	0,55	0,18	0,39	0,37	0,34

Таблица А.3 – Состав изобутана хладагента процесса сернокислотного алкилирования

Содержание компонента, мас. %	Сутки													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
изо-бутан	79,04	82,33	82,28	79,99	82,45	80,85	82,25	79,82	80,61	80,61	78,79	81,38	77,95	82,28
н-бутан	11,01	9,73	9,56	10,21	9,54	10,13	9,35	9,92	10,08	10,08	9,85	11,78	10,23	9,01
пропан	8,4	7,25	7,47	8,41	7,43	8,35	7,89	9,34	8,5	8,5	10,66	6,09	11,04	7,98
сумма С5	1,55	0,69	0,69	0,75	0,58	0,67	0,51	0,92	0,81	0,81	0,7	0,75	0,78	0,73
сумма С6+	0	0	0	0,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Таблица А.4 – Технологический режим процесса сернокислотного алкилирования

Наименование параметра	Сутки													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Подача ББФ на установку, м ³ /ч	71,49	70,17	70,02	66,11	64,89	65,03	46,91	68,13	70,01	70,08	70,00	70,02	68,03	67,98
Подача циркулирующего изобутана на установку, м ³ /ч	118,2	117,0	117,0	119,2	118,6	114,1	100,8	108,9	116,0	118,0	110,0	127,0	123,1	125,9
Подача хладагента в 1 контактор, м ³ /ч	25,00	24,96	24,98	25,01	25,02	24,98	24,99	24,95	25,02	24,95	24,96	22,99	22,27	23,98
Подача хладагента в 2 контактор, м ³ /ч	40,05	37,84	36,53	34,61	32,65	33,91	24,24	35,79	36,54	36,73	35,13	42,39	38,69	35,51
Подача хладагента в 3 контактор, м ³ /ч	40,05	37,83	36,53	34,63	32,66	33,90	19,60	35,77	36,50	36,70	35,12	42,38	38,70	38,73
Подача хладагента в 4 контактор, м ³ /ч	37,00	36,07	36,04	36,01	36,06	33,93	24,23	35,77	36,54	36,72	33,03	24,01	38,72	38,76
Температура на входе в 1 контактор, °С	1,80	1,54	1,60	1,49	1,40	2,43	-0,39	-1,84	-1,16	-0,04	-3,13	-2,64	-10,6	-7,62
Температура на входе во 2 контактор, °С	1,82	1,54	2,15	1,94	2,78	2,52	2,87	1,36	1,51	1,32	0,57	1,27	-6,89	-3,72
Температура на входе в 3 контактор, °С	0,38	-0,49	-0,74	0,34	-0,98	-1,13	1,88	1,15	1,08	2,14	0,06	-0,90	-3,36	0,55
Температура на входе в 4 контактор, °С	-0,70	-1,87	-2,10	-2,16	-2,48	-1,07	-0,39	-0,54	-0,60	-0,27	0,12	-4,64	-8,64	-5,48
Давление перед реакторным блоком, МПа	0,63	0,63	0,63	0,63	0,63	0,63	0,61	0,61	0,62	0,62	0,64	0,64	0,63	0,63

Продолжение таблицы А.4 – Технологический режим процесса сернокислотного алкилирования

Концентрация кислоты, % масс	98,17	98,20	98,11	98,22	98,36	98,38	98,02	98,39	98,51	98,50	98,53	97,98	98,29	98,03
Подача свежей кислоты 1 контур, м ³ /час	3,20	2,90	2,60	2,49	2,50	2,45	1,58	2,38	2,41	2,60	2,40	2,55	2,75	2,70
Подача свежей кислоты 2 контур, м ³ /час	3,58	3,30	2,90	2,80	2,85	2,85	2,50	2,65	2,64	2,80	2,75	2,65	2,85	2,75