

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
МОДЕЛИРОВАНИЕ СОВМЕЩЕННОГО РЕАКЦИОННО-РЕКТИФИКАЦИОННОГО ПРОЦЕССА СИНТЕЗА ЭТИЛ-ТРЕТ-БУТИЛОВОГО ЭФИРА

УДК 665.73.038-026.782

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2КМ61	Гарсия Серпас Карлос Энрике		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Самборская Марина Анатольевна	к.т.н.		

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
Ассистент	Авдеева Ирина Ивановна			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Самборская Марина Анатольевна	к.т.н.		

Томск – 2018 г.

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

Период выполнения _____ (осенний / весенний семестр 2017/2018 учебного года)

Форма представления работы:

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

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

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:

28.05.18 г.

Дата Контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
15/01/2017	Обзор литературы	20
15/03/2017	Объект и методы исследования	20
26/12/2017	Расчеты и аналитика	30
20/03/2018	Результаты проведенного исследования	30

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Самборская Марина Анатольевна	к. т. н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Самборская Марина Анатольевна	к. т. н.		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять глубокие, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в области энерго- и ресурсосберегающих процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии в профессиональной деятельности.
P2	Ставить и решать инновационные задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии с учетом минимизации антропогенного воздействия на окружающую среду.
P3	Разрабатывать новые технологические процессы на основе математического моделирования, проектировать и использовать энерго- и ресурсосберегающие оборудование химической технологии, нефтехимии и биотехнологии.
P4	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области разработки и оптимизации технологических процессов и систем с позиции энерго- и ресурсосбережения.
P5	Внедрять и эксплуатировать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.
<i>Общекультурные компетенции</i>	
P6	Демонстрировать глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов инновационной профессиональной деятельности.
P7	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.
P8	Активно владеть иностранным языком на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.
P9	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.

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



Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.04.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической
технологии, нефтехимии и биотехнологии
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Самборская М.А.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
2КМ61	Гарсия Серпас Карлос Энрике

Тема работы:

Моделирование совмещенного реакционно-ректификационного процесса синтеза этил-трет-бутилового эфира

Утверждена приказом директора (дата, номер) от 13.03.18 г. № 1651/с

Срок сдачи студентом выполненной работы: 28.05.18 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

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>	Объект исследования – совмещенный реакционно-ректификационный процесс для синтеза этил-трет-бутилового эфира (ЭТБЭ). Вид сырья – изобутиленовая фракция типичного состава, чистый этанол. Требования к эксплуатации – степень превращения изобутилена не ниже 98% мол., степень чистоты ЭТБЭ не ниже 95%. Метод исследования – вычислительная оптимизация с помощью компьютерных моделирующих систем.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	Аналитический обзор – общие сведения ЭТБЭ; процесс синтеза ЭТБЭ методом реакционной

<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; заключение по работе).</i>	ректификации; оптимизация технологической схемы реакционно-ректификационного процесса. Постановка задачи исследования. Описание процедуры исследования. Обсуждение результатов выполненной работы. Заключение по работе.
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	Реакционно-ректификационная колонна для синтеза ЭТБЭ.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Креницына Зоя Васильевна
Социальная ответственность	Авдеева Ирина Ивановна
Раздел ВКР на английском языке	Сыскина Анна Александровна
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
1. ВВЕДЕНИЕ 2. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	15.01.18 г.
---	--------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Самборская Марина Анатольевна	к.т.н		15.01.18 г.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2КМ61	Гарсия Серпас К. Э.		15.01.18 г.

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

Студенту:

Группа	ФИО
2КМ61	Карлосу Энрике Гарсия Серпас

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	18.04.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Бюджет затрат НИ составляет 225346 рублей</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Отчисления на социальные службы 27,1% составляют: 27067 рублей.</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	<i>Перспективность НИР средняя.</i>
2. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	<i>Составлен календарный план-график проведения НИР. Распланирован бюджет проекта.</i>
3. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	<i>Сравнительная эффективность разработки составила 1.</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Потенциальные потребители результатов исследования
2. Диаграмма Исикава
3. Методы коммерциализации результатов НТИ
4. Инициализация проекта
5. График проведения и бюджет НТИ
6. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н., доцент		01.03.2018

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2КМ61	Карлос Энрике Гарсия Серпас		01.03.2018

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2КМ61	Карлосу Энрике Гарсия Серпас

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	18.04.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</p> <ul style="list-style-type: none"> – вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения) – опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы) – негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу) – чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера) 	<p>Объектом исследования является реакционно – ректификационная колонна синтеза этил-трет-бутилового эфира.</p> <p>Рабочее место инженера-оператора представляет собой компьютер, стол. Клавиатура и мышь расположены на столе. Имеются стулья с нерегулируемой спинкой.</p> <p>Область применения – нефтеперерабатывающая промышленность.</p>
---	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты; – (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства). <p>1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты) 	<p>1.1 В производственной среде и при применении вычислительной техники вероятно воздействие следующих вредных факторов:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Отклонение показателей микроклимата в помещении; -Недостаточная освещенность; -Повышенный уровень шума; -Повышенный уровень электромагнитных излучений - Психологические производственные факторы -Вредные вещества, такие как: -оксиды азота; -оксид серы; -изобутилен; -оксид углерода. <p>Для защиты используют: хлопчатобумажные костюмы, защитные очки, ботинки кожаные, перчатки, противогазы, каска.</p> <p>1.2 К опасным факторам относят:</p> <ul style="list-style-type: none"> -горючесть, взрывоопасность, токсичность веществ, используемых на установке; -наличие электротехнических устройств высокого напряжения; -короткое замыкание; -статическое электричество; -превышение токсичных веществ в воздухе рабочей зоны. <p>СанПиН 2.2.4.548 – 96, ГОСТ 12.1.013 – 78, СанПиН</p>
--	---

	2.2.4.1191 – 03, СанПиН 2.6.1.1015 – 01, СанПиН 2.2.2/2.4.1340 – 03, СанПиН 2.2.4/2.1.8.055 – 96, инструкция по охране труда при работе на ПК.
<p>2. Экологическая безопасность:</p> <ul style="list-style-type: none"> – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); <p>разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.</p>	<p>Основными загрязнителями атмосферы на производстве являются:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Сероводород; -Углеводороды; -Оксид углерода. <p>Для повышения уровня экологической безопасности следует улучшить фильтрационные очистительные сооружения, проводить очистку сточных вод, для утилизации необходимо проводить захоронение на специальных полигонах для промышленных отходов, использовать очистку газа от токсичных веществ на абсорбционных установках.</p> <p>Также утилизации подлежат твердые отходы (отработанный катализатор), люминесцентные лампы, комплектующие ПК и оборудования.</p>
<p>3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p> <p>перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения;</p> <ul style="list-style-type: none"> – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий. 	<p>Возникновение ЧС, требующих обеспечение электро- и пожаровзрывобезопасности на рабочем месте.</p> <p>Перечень возможных ЧС:</p> <ul style="list-style-type: none"> -пожар; -взрыв; -розлив продуктов. <p>Для обеспечения безопасной эксплуатации колонны предусмотрена рациональная технологическая схема с комплексной автоматизацией технологического процесса, которая позволяет обеспечить непрерывный процесс производства и стабильную работу оборудования. Также предусмотрено отключение электрооборудования со щита операторной.</p>
<p>4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <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. 	<p>К нормативным актам, регулирующим вопросы охраны труда, в первую очередь относится Трудовой кодекс Российской Федерации. Для обеспечения безопасности на рабочем месте необходимо руководствоваться санитарными нормами и правилами. Для снижения вредного воздействия химических факторов работникам производства выдается молоко питьевое в количестве 0,5 л за смену для выведения из организма токсичных веществ. Конституция РФ, ГОСТ Р 12.1.009-2009.</p>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.03.2018
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Авдеева Ирина Ивановна			01.03.2018

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2КМ61	Карлос Энрике Гарсия Серпас		01.03.2018

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 144 с., 24 рисунков, 34 таблиц и 56 источников.

Ключевые слова: реакционная ректификация, синтез ЭТБЭ, математическое моделирование, оптимальное проектирование, множественность стационарных состояний.

Цель работы – оптимизация технологической схемы совмещенного реакционно-ректификационного процесса для синтеза этил-трет-бутилового эфира и проектирование соответствующей реакционно-ректификационной колонны.

В разделе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» проведен анализ экономической эффективности способа оптимизации, разработанного в ходе изучения вышесказанного процесса, как инструмент проектирования общих химико-технологических процессов.

В разделе «Социальная ответственность» были рассмотрены вопросы техники безопасности, разработаны мероприятия по охране труда и окружающей среды.

Дипломная работа выполнена в текстовом редакторе Microsoft Office Word 2016.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ, СОКРАЩЕНИЯ НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

Нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. АТК 24,200,04-90 Опоры-стойки вертикальных аппаратов. Типы, конструкция и размеры.
2. ГН 2.1.6.1338 – 03 Предельно-допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест.
3. ГОСТ 12.0.004-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Организация обучения безопасности труда. Общие положения.
4. ГОСТ 12.1.003 – 83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности.
5. ГОСТ 12.1.005-88 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.
6. ГОСТ 12.1.0076 Система стандартов безопасности труда. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.
7. ГОСТ 12.1.019-2009 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
8. ГОСТ 12.4.068 Система стандартов безопасности труда. Средства индивидуальной защиты дерматологические. Классификация и общие требования.
9. ГОСТ 1255-67 Фланцы с соединительным выступом стальные плоские приварные на Ру от 1 до 25 кгс/см кв. Конструкция, размеры и технические требования.
10. ГОСТ 17.1.3.13–86 Охрана природы. Гидросфера. Общие требования к охране поверхностных вод от загрязнений.
11. ГОСТ 21944-76 Аппараты колонные стальные. Ряд диаметров. Расстояния между тарелками.

12. ГОСТ 28759.2-90 Фланцы сосудов и аппаратов стальные плоские приварные. Конструкция и размеры.
13. ГОСТ 28759.6 Прокладки из неметаллических материалов. Конструкция и размеры. Технические требования.
14. ГОСТ Р 22.0.01-94 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения.
15. ГОСТ Р 55710 – 2013 Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений.
16. ОСТ 26-2002-83 Люки с плоскими крышками стальных сварных сосудов и аппаратов. Конструкция.
17. ОСТ 26-2003-83 Люки со сферическими крышками стальных сварных сосудов и аппаратов. Конструкция и размеры.
18. ОСТ 26-2009-83 Крышки сферические люков стальных сварных сосудов и аппаратов. Конструкция.
19. ОСТ 26-2037-96 Болты с шестигранной головкой для фланцевых соединений. Конструкция и размеры.
20. ОСТ 26-2038-96 Гайки шестигранные для фланцевых соединений. Конструкция и размеры.
21. ОСТ 26-805-73 Тарелки ситчатые колонных аппаратов. Тип и параметры. Конструкция и размеры.
22. ПОТ РМ-016-2001 Межотраслевые правила по охране труда (правила безопасности) при эксплуатации электроустановок.
23. СН 2.2.4/2.1.8.566 Производственная вибрация, вибрация в помещениях жилых и общественных зданий. Санитарные нормы.

Обозначения и сокращения

В настоящей работе использованы следующие сокращения:

ДИБ – диизобутилен

ИБ – изобутилен

КМС – Компьютерная Моделирующая Система

РР – реакционная ректификация

ЭТБЭ – этил-трет-бутиловый эфир

МТБЭ – метил-трет-бутиловый эфир

ЭтОН – этанол

CEPCI – индекс стоимости химического завода (Chemical Engineering Plant Cost Index)

SRK – Соаве-Редлих-Квонг

UNIFAC – функциональные групповые коэффициенты активности
UNIQUAC

UNIQUAC – универсальная квази-химическая модель коэффициента активности

В настоящей работе использованы следующие обозначения:

$C_{\text{кап}}$ – капитальные затраты (тыс. \$ год⁻¹)

$C_{\text{оп}}$ – оперативные затраты (тыс. \$ год⁻¹)

K_A – константа адсорбции

G – загрузка

k_r – константа скорости реакции (моль кг⁻¹ с⁻¹)

ΔP – перепад давления (Па)

a – активность

D – диаметр (м)

h – высота (мм)

K – константа химического равновесия

m – масса, кг

N – число (или идентификатор) тарелок

Q – массовый или объемный расход (кг ч⁻¹ или м³ ч⁻¹)

QN – тепловая нагрузка

r – скорость реакции (моль с⁻¹)

R – константа идеального газа (8,314 Дж моль⁻¹ К⁻¹)

RR – флегмовое число

t – время (год)

T – температура (К)

u – скорость (м/с)

x – концентрация (массовая доля)

X – вектор оптимизируемых параметров

ε – степень превращения (молярная доля)

θ – код сходимости

ρ – плотность (кг м⁻³)

σ – поверхностное натяжение (Н/м)

Ψ – критерий оптимальности

s – расстояние между тарелками (м)

d – диаметр отверстия (мм)

α – критерий бифуркации

ОГЛАВЛЕНИЕ

1 ВВЕДЕНИЕ	17
2 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.....	19
2.1 Общие сведения об ЭТБЭ.....	19
2.2 Реакция синтеза ЭТБЭ	20
2.3 Кинетика реакции	22
2.4 Промышленный синтез ЭТБЭ путем реакционной ректификации.....	23
2.4.1 Сырье.....	23
2.4.2 Технологический процесс	24
2.5 Методы проектирования реакционно-ректификационных процессов	27
2.5.1 Графические / топологические.....	27
2.5.2 Эвристические / эволюционные.....	28
2.5.3 Оптимизационные	29
2.6 Множественность стационарных состояний.....	32
3 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	34
4 РАСЧЕТЫ И АНАЛИТИКА	35
4.1 Предварительное моделирование	35
4.2 Обобщенная технологическая схема и задача оптимизации.....	38
4.2.1 Целевая функция оптимизации.....	41
4.2.2 Ограничения по материальному и тепловому балансам	43
4.2.3 Ограничения по геометрическим и гидравлическим соотношениям ..	43
4.2.4 Ограничения по качеству продукта и производительность процесса .	45
4.3 Способ решения задачи оптимизации	45
4.4 Поиск множественности стационарных состояний	47
5 РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕДЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ.....	48
5.1 Конструктивные и технологические параметры	48
5.2 Материальный и тепловой балансы, профили колонны РР.....	49
5.3 Множественность стационарных состояний.....	51
5.4 Конструктивно – механический расчет колонны РР	54

5.4.1	Конструкция, материал изготовления, толщина обечайки.....	54
5.4.2	Диаметр и высота аппарата.....	55
5.4.3	Контактное устройство.....	56
5.4.4	Штуцеры.....	56
5.4.5	Люки.....	58
5.4.6	Конструкция реакционной части.....	59
5.4.7	Размещение катализатора.....	59
5.4.8	Фланцы.....	61
5.4.9	Опора.....	62
5.4.10	Тепловая изоляция.....	64
5.5	Автоматизация и управление процессом.....	65
6	ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ	68
6.1	Предпроектный анализ.....	68
6.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования.....	68
6.1.2	Диаграмма Исикавы.....	70
6.1.3	Методы коммерциализации результатов исследования.....	71
6.2	Инициация проекта.....	72
6.3	Планирование управления научно-техническим проектом.....	74
6.3.1	Разработка графика проведения научного исследования.....	74
6.4	Бюджет научного исследования.....	75
6.5	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	81
6.5.1	Оценка сравнительной эффективности исследования.....	81
7	СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....	85
7.1	Введение.....	85
7.2	Производственная безопасность.....	85
7.3	Анализ опасных и вредных производственных факторов.....	86
7.3.1	Вредные вещества.....	86
7.3.2	Показатели микроклимата на рабочем месте.....	88
7.3.3	Освещенность рабочего места.....	89

7.3.4 Повышенный уровень производственной вибрации и шума	89
7.3.5 Механические опасности	90
7.3.6 Электробезопасность	90
7.3.7 Термические опасности	91
7.3.8 Психофизиологические производственные факторы	91
7.4 Мероприятия по защите от опасных и вредных факторов	92
7.5 Экологическая безопасность	93
7.5.1 Анализ воздействия разработки на биосферу	93
7.5.2 Воздействие на атмосферу	93
7.5.3 Воздействие на гидросферу	94
7.5.4 Воздействие на литосферу	94
7.6 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	95
7.6.1 Анализ возможных ЧС	95
7.6.2 Пожаровзрывоопасность	96
7.6.3 Защита в чрезвычайных ситуациях	97
7.7 Правовые вопросы обеспечения безопасности	98
7.8 Выводы	98
8 ЗАКЛЮЧЕНИЕ	100
9 СПИСОК ПУБЛИКАЦИИ СТУДЕНТА	102
10 СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	103
ПРИЛОЖЕНИЕ А	109
ПРИЛОЖЕНИЕ Б	125
ПРИЛОЖЕНИЕ В	126
ПРИЛОЖЕНИЕ Г	127
ПРИЛОЖЕНИЕ Д	131
ПРИЛОЖЕНИЕ Е	132
ПРИЛОЖЕНИЕ Ж	135
ПРИЛОЖЕНИЕ З	137
ПРИЛОЖЕНИЕ И	142
ПРИЛОЖЕНИЕ К	143

1 ВВЕДЕНИЕ

Эфиры, состоящие по крайней мере из 5 атомов углерода, часто применяют как кислородсодержащие добавки к бензинам, так как повысят октановые числа конечной смеси и уменьшают выбросы из-за неполного сгорания. Среди доступных эфиров добавок, этил-трет-бутиловый эфир (ЭТБЭ) обладает особой важностью.

Синтез ЭТБЭ основан на этерификации изобутилена с этанолом в присутствии кислотного катализатора. В промышленности изобутилен доступен в фракции С4 из блока жидкофазного каталитического крекинга, а этанол используют в чистом состоянии.

Традиционным образом процесс синтеза осуществляется в двух последовательных реакторах с последней ректификационной колонной, откуда ЭТБЭ отделяется как кубовой продукт и остаточный этанол рекуперировать из дистиллята экстракцией водой и дальнейшей ректификацией.

Интенсификацией процессов является схема реакционной ректификации, которая включает первый реактор и последовательную реакционно-ректификационную колонну. В этом же аппарате имеют место одновременно окончательное превращение изобутилена и разделение ЭТБЭ.

Этот подход предлагает ряд выгодных преимуществ – второй реактор и ректификационная колонна могут быть заменены одним аппаратом, тепло реакции может быть использовано для разделения фаз с сокращением расхода нагревательного пара, и постоянный отвод – рециркуляция продуктов и реагентов преодолевает пределы равновесия, что приводит к высоким степеням превращения.

Однако, взаимосвязь механизмов реакции и разделения усложняет проектирование реакционно-ректификационных колонн, поскольку их производительность должна быть оценена с учетом не только степени чистоты продукта, но и степени превращения реагентов.

Графические и эвристические методы различной сложности доступны в литературе, но их применение ограничивается только на оценки общей осуществимости и не могут гарантировать оптимальность технико-экономических показателей.

Математические модели, отражают взаимодействия между технологическими и конструктивными параметрами и способны точно предсказать функционирование колонны. При объединении с методами численной оптимизации, полные варианты проекта могут быть получены с соблюдением критериев оптимальности и требований по производительности.

Разработка моделей для применения этих подходов замедляет задачу проектирования. Несколько компьютерных моделирующих систем, доступных на рынке, могут ускорить стадию моделирования, так как обеспечивают готовые модели для настройки конечным пользователем. Однако, использование автономных программных обеспечений требует от методов оптимизации способности к работе с нелинейностями, невыпуклостями, целочисленными переменными и несколькими ограничениями без явной алгебраической модели.

Кроме того, нелинейности взаимовлияния между химической реакцией и фазовым равновесием приводит к множественности стационарных состояний, при наличии которых колонна может перейти от состояния высокой производительности к возможному состоянию низкой производительности.

В настоящей работе выполняется проектирование реакционно-ректификационной колонны на основе оптимизации технологической схемы, с использованием распространенной среды Aspen Plus. Также, выполнен поиск сочетаний технологических параметров, приводящих к множественности стационарных состояний.

2 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

2.1 Общие сведения об ЭТБЭ

Добавки к топливам – это вещества, помогающие в очистке компонентов двигателей и в улучшении сгорания применяемого топлива. Кислородсодержащие добавки непосредственно вводят кислород в горение топлива, обеспечивая таким образом полное сгорание, улучшение октанового числа и уменьшение выбросов твердых частиц и СО [1].

Эфиры, состоящие по крайней мере из 5 атомов углерода, являются подходящими добавками к бензинам [2]. Этил-трет-бутиловый эфир (ЭТБЭ) и метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ) – добавки особой важности, получаемые через реакцию изобутилена с этанолом и метанолом соответственно.

После отказа от использования свинецсодержащих добавок, МТБЭ был внедрен как октаноповышающая добавка, а начиная с 1990 г., ряд законов потребовал обогащения содержания кислорода в бензинах, что повысило его применение. Доклад о глобальном рынке показал спрос 22,0 миллиона тонн МТБЭ к 2002 г. [3].

Однако МТБЭ приносит вред окружающей среде и здоровью, так как имеет высокую растворимость в воде (42 мг/л) и низкую биоразлагаемость. Международное Агентство по Изучению Рака и Управление по Охране Окружающей Среды США классифицировали МТБЭ как угрозу здоровью в 2000 г. Кроме того, стоимость очистки подземных вод, загрязненных МТБЭ имеет отрицательный эффект в анализе затрат – результатов его применения в топливных смесях [3].

Перед этим, ЭТБЭ был выбран как альтернативная кислородсодержащая добавка ввиду следующих преимуществ.

Основным сырьем для производства ЭТБЭ является этанол, который может быть получен из возобновляемых источников – биомассы, мелассы и

сельскохозяйственных сырьевых материалов – в отличие от метанола, который является производным природного газа.

Вследствие своей низкой растворимости в воде ЭТБЭ является меньшей угрозой для окружающей среды [3]. Кроме того, деградация ЭТБЭ на биомассу и CO₂ под действием микробов может быть полной [4], [5].

ЭТБЭ был впервые использован во Франции. К 2001 г. производственная мощность в Европейском Союзе возросла на 4 миллиона тонн [3]. К настоящему времени разрешенное использование эфиров в качестве добавок – 15% об. с планируемым увеличением до 22% [2].

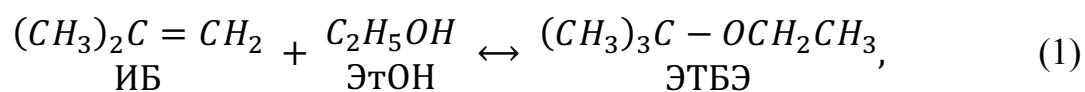
Химические технологии МТБЭ и ЭТБЭ в сущности подобны между собой. Существующие установки для МТБЭ могут быть использованы для производства ЭТБЭ, что помогает снизить капитальные затраты [6].

В 2009 году, корпорация Nippon Oil Corp. начала производство ЭТБЭ из биоэтанола, путем модификации одного имеющегося производственного объекта [7].

Недавний и постоянно возрастающий интерес к ЭТБЭ побуждает к исследованию, направленному на достижение высокой производительности. В этой области математическое моделирование является инструментом для понимания химической кинетики, эффективности основных процессов и аппаратов, и разработки стратегий оптимизации.

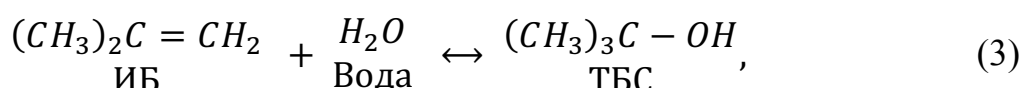
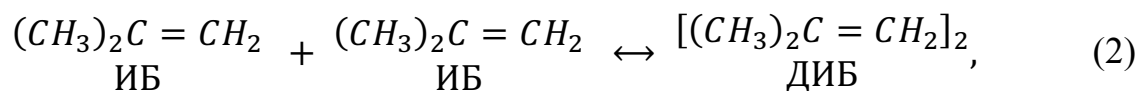
2.2 Реакция синтеза ЭТБЭ

Основным промышленным путем синтеза ЭТБЭ является реакция между изобутиленом (ИБ) и этанолом (ЭтОН) в жидкой фазе при наличии кислотного катализатора, как указано в уравнении (1) [8].



Реакция экзотермическая и обратимая; увеличение температуры действует отрицательно на смещение химического равновесия, снижая превращение изобутилена. При температурах ниже 61 °С, реакция протекает под контролем кинетики, а при высоких температурах, под контролем термодинамики [9].

Вместе с реакцией ИБ – ЭтОН происходит димеризация изобутилена в ди-изобутилен (ДИБ) и, если вода присутствует в реакционной среде (что возможно в сырьевом этаноле), также происходит гидратация изобутилена в трет-бутиловый спирт (ТБС). Такие реакции представлены в уравнениях (2) и (3) соответственно [8].



Катализатором является кислотная ионообменная смола макро-сшитого, сульфонового типа (сополимер полистирола и дивинилбензола). Смола Амберлист 15 (Ром энд Хаас) наиболее применяемая; его характеристика приведена в таблице 2.1 [10].

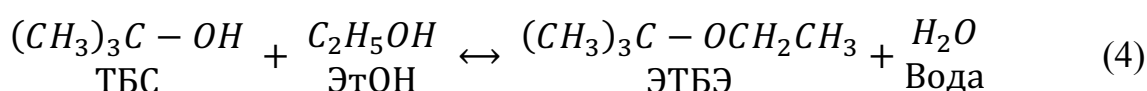
Таблица 2.1 – Характеристика катализатора Амберлист-15

Свойство	Значение	Свойство	Значение
Матрица	Макропор	Объем пор	0,26 см ³ /г
Форма	Бусина	Насыпная плотность	640,26 кг/м ³
Размер	475,0 мкм	Порозность	60,22 %
Средний диаметр пор	300 Å	Ионообменная способность	4,7 мэкв/г
Удельная поверхность	45,87 м ² /г		

Значительным недостатком при использовании ионообменных смол является их низкая термическая стабильность; их применение не рекомендуется при температурах выше 120 °С [11], кроме того они могут выделять серную кислоту при высокой рабочей температуре и давлении, что приводит к снижению каталитической активности. Цеолиты могут быть хорошей альтернативой для преодоления указанных недостатков [3].

Проведенные исследования по использованию цеолитов выявили ZSM-11 и ZSM-5 как самые эффективные варианты с подобными или лучшими селективностями по сравнению со смолами, но с низкими активностями и, следовательно, с более высокими рабочими температурами [12].

Альтернативный путь синтеза составляет получение ЭТБЭ из ТБС и этанола. ТБС может быть предпочтительнее ИБ, поскольку его стоимость ниже и получение ИБ ограничено мощностями каталитического крекинга. Основная реакция этого альтернативного способа представлена в уравнении (4), катализаторы составляют β -цеолиты и сульфат кислорода калия [10].



2.3 Кинетика реакции

В системе ИБ-ЭтОН, принятый механизм заключается в адсорбции этанола на двух центрах катализатора и изобутилена на соседнем центре, лимитирующий этап – реакция между адсорбированными веществами, и конечный этап состоит из десорбции продукта реакции. Выражение скорости реакции основано на модели Ленгмюра-Хиншельвуда-Хоугена-Уотсона. Кинетическая модель, полученная при исследованиях на катализаторе Амберлист 15, представлена в уравнениях (5) – (8) [8], [13].

Скорость реакции:

$$r_{\text{ЭТБЭ}} = m_{\text{кат}} k_{r,\text{ЭТБЭ}} \frac{a_{\text{ЭтОН}}^2 \left(a_{\text{ИБ}} - \frac{a_{\text{ЭТБЭ}}}{K_{\text{ЭТБЭ}} a_{\text{ЭтОН}}} \right)}{\left(1 + K_{A,\text{ЭтОН}} a_{\text{ЭтОН}} \right)^3}, \quad (5)$$

Константа скорости реакции:

$$k_{r,\text{ЭТБЭ}} = 2,0606 * 10^{12} \exp \left(- \frac{60,4 * 10^3}{R T} \right), \quad (6)$$

Константа адсорбции:

$$\ln K_{A,\text{EtOH}} = -1,0707 + \frac{1323,1}{T}, \quad (7)$$

Константа химического равновесия:

$$\ln K_{\text{ЭТБЭ}} = 10,387 + \frac{4060,59}{T} - 2,89055 \ln T - 0,0191544T + 5,28586 \cdot 10^{-5}T^2 - 5,32977 \cdot 10^{-8}T^3, \quad (8)$$

Димеризацию изобутилена можно принять равновесной при избытке этанола. Константа равновесия выражена уравнением (9) [8].

$$\ln K_{\text{ДИБ}} = 95,2633 + \frac{5819,8644}{T} - 17,2 \ln T - 0,00356 T, \quad (9)$$

В уравнении скорости реакции для ЭТБЭ (5) предполагается, что этанол является самым распространенным веществом на поверхности катализатора [8], при этом условии димеризация и гидратация изобутилена в сущности исключены.

2.4 Промышленный синтез ЭТБЭ путем реакционной ректификации

2.4.1 Сырье

В промышленности, изобутилен доступен как компонент смеси углеводородного сырья (С4), источники которого включают блоки жидкофазного каталитического крекинга (ЖКК), парового крекинга или дегидрирования изобутана [8]. Остальные углеводороды для практических целей можно принять инертными и по свойствам подобными 1-бутилену. В таблице 2.2 представлен средний состав промышленного сырьевого потока изобутилена – фракция С4 [9].

Таблица 2.2 – Средний состав промышленной фракции С4

Компонент	Концентрация (% моль)	Компонент	Концентрация (% моль)
Изобутан	1,7	Бутилен-1	33,2
н-бутан	7,6	Изобутилен	36,0
Транс-бутен-2	16,9	Цис-бутен-2	4,6

Сырьевой поток изобутилена содержит ряд примесей, которые негативно влияют на производительность катализатора [14]:

Нитрилы и ионы натрия из блока ЖКК, растворители из предшествующих процессов, NH_3 в метаноле и других углеводородах. Такие соединения необратимо нейтрализуют кислотные центры катализатора.

Кислородные соединения: вода в спиртах, сложные эфиры и альдегиды в этаноле, и другие. Такие соединения конкурируют с этанолом при сольватации кислотных центров, подавляют главную реакцию и могут способствовать развитию вторичных реакций.

Диолефины, которые полимеризируются и образуют смолы, забивающие и дезактивирующие катализатор.

Для устранения нежелательных примесей требуется предобработка сырьевого потока изобутилена, которая в общем состоит из очистки водой, и для этанола, чьи примеси удерживаются в ловушках со смолами [14].

2.4.2 Технологический процесс

На рисунке 2.1 показана принципиальная технологическая схема процесса синтеза ЭТБЭ путем реакционной ректификации.

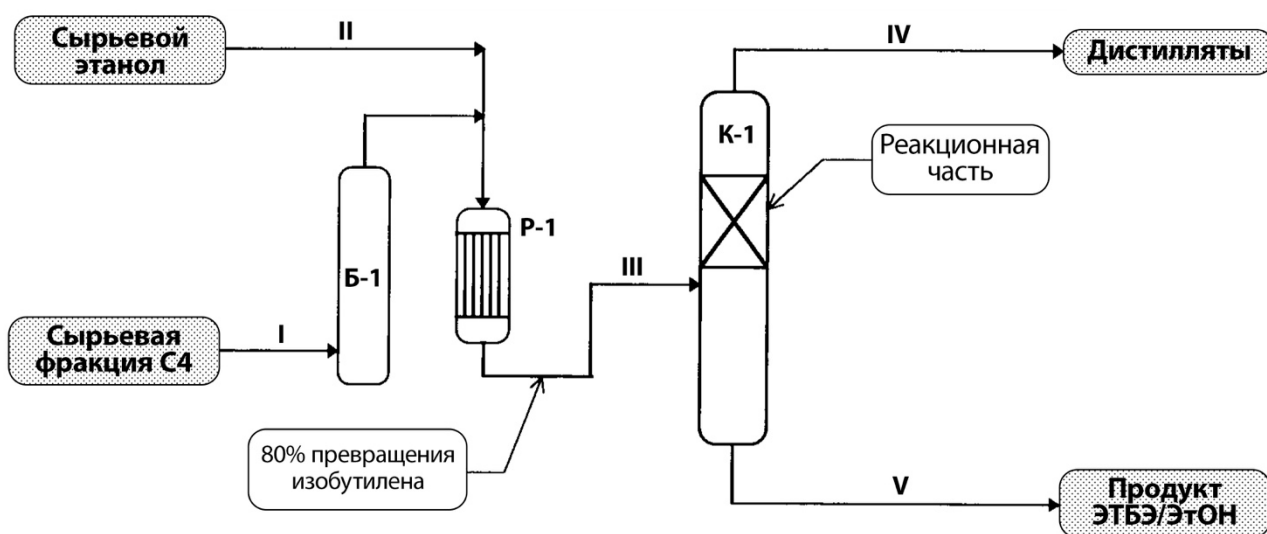


Рисунок 2.1 – Принципиальная технологическая схема процесса синтеза ЭТБЭ

На рисунке 2.1. Аппараты: Б-1 – блок обработки сырьевой фракции С4; Р-1 – трубчатый реактор; К-1 – реакционно ректификационная колонна. Потоки: I – сырьевая фракция С4; II – чистый этанол; III – Продукты реакции из реактора Р-1; IV – отработанная углеводородная фракция; V – товарный ЭТБЭ.

Обработанная сырьевая фракция С4 I смешивается с чистым этанолом II и поступает в реактор Р-1, где имеет место образование ЭТБЭ до степени превращения ИБ 85% мол.

Так как химическое равновесие с ростом температуры сдвигается в сторону образования исходных реагентов [14] с целью отвода тепла, выделенного в реакции, и созданию благоприятных условий для образования ЭТБЭ, реактор Р-1 имеет трубчатую конструкцию; реакция протекает в трубном пространстве, а постоянство температуры обеспечивается охлаждающей водой, циркулирующей в межтрубном пространстве реактора.

Продукты из реактора Р-1 поступают в реакционно-ректификационную колонну К-1, в которой несколько тарелок загружены катализатором. В этом аппарате имеют место одновременно окончательное превращение изобутилена и выделение ЭТБЭ, получаемого как кубовый продукт V с чистотой выше 95% масс; непрореагировавший этанол также присутствует в этом потоке.

Дистиллят IV состоит из инертных углеводородов сырьевой фракции С4 с изобутиленом и этанолом. Отсюда непрореагировавший этанол разделяется путем жидкостного извлечения с водой, затем дистиллируется и возвращается в блок реакции; в этом процессе происходит формирование азеотропа между этанолом и водой.

Однако, дальнейшая рекуперация этанола опциональная в зависимости от состава дистиллята и конфигурации нефтеперерабатывающего завода [8].

С целью достичь максимально возможной степени превращения изобутилена, реакционные тарелки расположены выше тарелки питания, так как в этой части колонны преобладают низкие температуры и концентрации ЭТБЭ по сравнению с нижней частью.

В колонну К-1 может подаваться вторичный поток чистого этанола или рецикл флегмы над реакционной частью, это позволяет регулировать температуру и поддерживать относительно высокие концентрация этанола как реагирующего вещества.

Также возможно из нижних тарелок колонны К-1 отводить рецикл в реактор Р-1 для превращения непрореагировавшего изобутилена. Полная степень превращения ИБ в процессе составляет 98% мол.

Вследствие высоких температур в первом реакторе катализатор подвергается к быстрому процессу дезактивации и заменяется примерно ежегодно; срок службы катализатора, размещенного в колонне длится 10 лет или дольше [11].

Физические свойства реагирующих веществ в системе ИБ-ЭтОН существенно отличаются и имеет место высокая склонность к образованию азеотропных смесей, из-за неидеальности жидкой фазы, которая отражена включением активностей в кинетических уравнениях вместо концентраций.

В таблице 2.3 показаны экспериментальные и предсказанные азеотропные смеси для ЭтОН [8]. При условиях ведения процесса в настоящей работе не было обнаружено азеотропных смесей.

Таблица 2.3 – Азеотропные смеси в системе ИБ-ЭтОН

Смесь	% ЭтОН при 0 кПа	% ЭтОН при 950 кПа	% ЭтОН при 1400 кПа
Экспериментально-наблюдаемые			
ЭтОН-ИБ	н/д	н/д	0,94%
ЭтОН-1Б	н/д	н/д	н/д
ЭтОН-ЭТБЭ	37%	н/д	н/д
Предсказанные методом UNIFAC			
ЭтОН-ИБ	Нет азеотропа	Нет азеотропа	1,25%
ЭтОН-1Б	Нет азеотропа	Нет азеотропа	1,45%
ЭтОН-ЭТБЭ	38%	59%	66%

н/д – нет данных.

2.5 Методы проектирования реакционно-ректификационных процессов

Как указывает González-Ruggerio [15], проектирование колонны РР заключается в определении размеров, расположений питания и условий процесса, удовлетворяющих представленным спецификациям. В литературе наблюдаются три основные группы подходов к проектированию: графические, эвристические и основанные на оптимизации.

2.5.1 Графические / топологические

Эти методы основаны на графическом изображении процесса ректификации в пространстве составов входящих в систему потоков, с учетом химического и фазового равновесия.

Метод анализа статики изображает, для данной равновесно лимитированной реакции, области осуществления прямой и обратимой реакции, а над ними, линии материального баланса, химического превращения и дистилляции. Эта диаграмма построена исходя из информации о химическом и фазовом равновесии, составе сырья на ректификацию и составе целевого продукта.

С помощью анализа статики возможно определить в азеотропных системах: (а) осуществимость процесса РР для данной реакции, (б) предельные стационарные состояния, обеспечивающие максимальный выход целевого продукта по всей области составов питания, и (в) возможные структуры процесса вместе с расположением реакционной части и числом теоретических ступеней реакции и разделения. Эти структуры могут состоять либо из единственной колонны РР, либо из последовательности колонны РР и обычной ректификации [16].

Метод анализа статики описан Giessler [17] и применен к систематическому созданию структур процесса РР при единственной

обратимой химической реакции. Писаренко [18] предлагает распространение его на системы с множественными химическими реакциями.

Еще примером важного значения является метод анализа кривых остатка, в котором изображается изменение состав жидкостной фазы по времени при простой перегонке. Этот метод широко использован для исследования фазового равновесия нереагирующих азеотропных систем и определения возможных составов продуктов ректификации [16].

Thiel, Sundmacher и Hoffman [19] исследуют применение этого метода к системам с единственной химической реакцией и рассматривают в качестве примера синтез ЭТБЭ. Almeida-Rivera и Grievink [20] предлагают распространение этого метода на многокомпонентные реагирующие системы с несколькими химическими реакциями, и применяют его к синтезу МТБЭ.

Almeida-Rivera, Swinkels и Grievik [16] также глубоко исследуют другие графические методы. В дополнении к тому обзору, Marcelino-Carrera и др. [21], [22] предлагают графический метод без ограничения в числе компонентов и реакций.

2.5.2 Эвристические / эволюционные

Несмотря на все преимущества графических методов, они приводят лишь к ориентировочным проектным решениям, поскольку не учитывают геометрические характеристики колонны [15], а исходя из своих основных допущений, оказываются ограниченными изучением только общей осуществимости [11].

Эвристические методы предлагают совокупность правил, которые ориентируют задачу проектирования на основе накопления опыта в развитии реакционной ректификации как производной обычной ректификации [16].

Эти правила используются для изменения структуры процесса РР с целью приближения к оптимальному сочетанию эффектов реакции и разделения, а также к минимизации некоторой функции затрат, с

сопровождением соответственного математического моделирования [23]. Таким образом, в дополнении к графическому подходу эвристические методы позволяют определить ключевые параметры, такие как масса катализатора, диаметр колонны и распределение питания в нескольких тарелках [16].

Li [23] предлагает обобщенный алгоритм для определения оптимальной структуры колонны РР на основе минимизации функции итоговых ежегодных затрат. Subawalla [24] также предлагает совокупность эвристических правил и применяет его к синтезу ТАМЭ.

Однако, хотя эвристические методы успешно применены к каталитической ректификации равновесно лимитированных реакций [16], они являются по существу ограниченными, так как нет никакого эвристического правила способного гарантировать оптимальное совпадение между реакцией и разделением [23].

2.5.3 Оптимизационные

Как указано Malone и Doherty [25], ключевым аспектом в проектировании columns РР является правильное определение сочетания явлений реакции и разделения, а более того, Frey и Stichlmair [26] утверждают, что полная способность реакционной ректификации может быть обнаружена только при оптимизированных процессах.

Методы проектирования на основе оптимизации оперируют сочетанием алгоритмов оптимизации и математических моделей, описывающих колонну РР любой степени сложности, с целью определения минимальной точки некоторой характеризующей целевой функции.

С этим, данные методы не только преодолевают ограничения графических методов и лишены недостатков эвристических правил, но также способны полностью оптимизировать проектирование [16].

Задача оптимизация систем РР заключается в интеграции структурных и оперативных параметров с целью максимизации одновременно степени

превращения реагирующих веществ, степени чистоты целевого продукта, и экономических прибылей.

Такие параметры имеют вид непрерывных и целочисленных переменных, как например, тепловые расходы на выпаривание / конденсацию, состав сырья и т.д (непрерывные), число реакционных ступеней, расположение питательной ступени, присутствие или наличие первичных реакторов, и т.д (целочисленные). Исходя из этого, данную задачу оптимизации можно считать проблемой типа Совмещенного Целочисленного – Нелинейного Программирования (СЦНП) [27].

Решение проблемы СЦНП состоит в минимизации заданной целевой функции Ψ при удовлетворении: (а) материально-энергетических балансов и уравнений, описывающих химическую кинетику, массообмен и гидравлику, из которых состоит математическая модель процесса, (б) целевых значений степени чистоты и превращения реагирующих веществ, и (в) произвольно поставленных пределов для непрерывных и целочисленных переменных (например, максимальный запас энергии и сырья и максимальное допустимое число тарелок).

Целочисленные переменные трактуют в виде вектора, состоящего из 0 и 1, где 1 обозначает присутствие аппарата (или потока) а 0 – отсутствие его. Следовательно, этот вектор изображает технологическую схему процесса РР.

К каждому элементу относится оценивающий коэффициент, который представляет некое связанное значение, включенное в функции Ψ (например, денежные затраты на приобретение аппарата или фиксированный расход данного средства на его эксплуатацию). Эти коэффициенты образуют матрицу, на которую умножается вектор целочисленных переменных.

Со своей стороны, непрерывные переменные трактуют непосредственно и соответствующие оценивающие значения определяют математическими функциями. В уравнениях (10) – (12) приведено математическое формулирование проблемы СЦНП, как представлено Vertran [28].

$$\min_{\omega, y} \Psi = c^T y + p(\omega), \quad (10)$$

С ограничениями:

$$r(\omega) = 0, \quad (11)$$

$$s(\omega) + By \leq 0, \quad (12)$$

$$\text{при } \omega \in R^n, y \in \{0; 1\},$$

где: Ψ – целевая функция,

ω – вектор непрерывных переменных,

y – вектор целочисленных переменных,

$p(\omega)$ – функции оценки связанная с непрерывными переменными,

c – матрица оценивающих коэффициентов, связанных с целочисленными переменными,

$r(\omega)$ – вектор ограничений равенства,

$s(\omega)$ – вектор ограничений неравенства,

B – матрица коэффициентов для целочисленных ограничений.

В работах Gómez [12] и Durruty [36] при выполнении оптимизации СЦНП реакционной ректификационной колонны для синтеза ЭТБЭ, уравнения (10) – (12) трактованы следующим образом:

Целевая функция Ψ является суммой капитальных и эксплуатационных затрат. Как видно в уравнении (10) эти затраты зависят совместно от структурных и оперативных переменных, а при этом, матрицы c , B и функция $p(\omega)$ представляют собой денежные затраты.

Уравнение (11) представляет совокупность материально-энергетических балансов и дополнительных уравнений процесса (т.е. математическая модель процесса РР).

Уравнение (12) включает все произвольно поставленные пределы. Здесь можно задать предельные значения степени чистоты и превращения.

Как указывает Diwekar и Grossman [29], анализ всех возможных бинарных векторов y приводит к созданию обобщенной структуры, которая включает все возможные варианты окончательного проектирования, и над

которой производится поиск оптимального сочетания целочисленных и непрерывных переменных.

2.6 Множественность стационарных состояний

Сочетание механизмов фазового равновесия и химической реакции приводит к возможности возникновения несколько возможных решений математической модели реакционно-ректификационной колонны, где каждое решение составляет одно стационарное состояние.

Данная множественность состояний принимает два вида: множественность входа – существование одинаковых состояний при разных входных параметрах; и множественность выхода – существование разных состояний при одинаковых входных параметрах.

Yang и др. [30] предлагают анализ параметрической чувствительности как практический способ нахождения множественности выхода. Рисунок 2.2 описывает часто наблюдаемое поведение переменной состояния y (например, чистота ЭТБЭ или степень превращения ИБ) в зависимости от входного технологического параметра λ (тепловая нагрузка или флегмовое число) в системе, показывающей множественные стационарные состояния выхода.

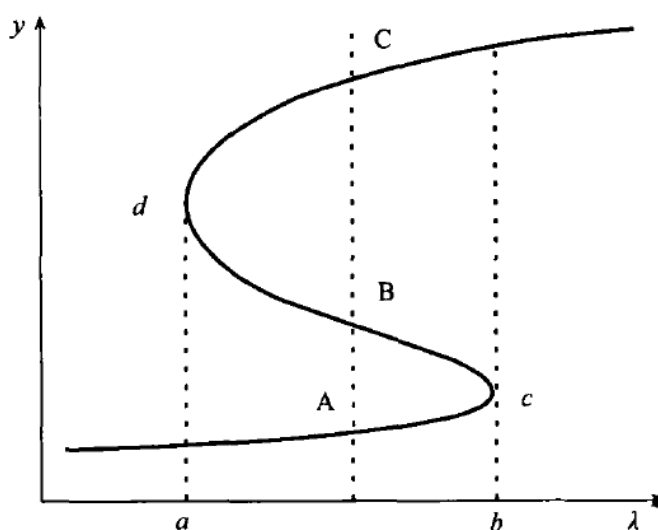


Рисунок 2.2 – Поведение переменной состояния при множественности выхода

В анализе чувствительности, параметр λ меняется постепенно при малых шагах $\Delta\lambda$ и изменения переменной y , Δy , регистрируются соответственно. Стационарные состояния являются отрезками с равномерными значениями $\Delta y/\Delta\lambda$, представлены на рисунке 2.2 в точках A , B и C .

В данной точке величина $\Delta y/\Delta\lambda$ меняется резко и затем может принимать разный знак, что указывает на покидание текущего состояния и достижение нового. Эти точки называют точками бифуркации, и показываются на рисунке 2.2 как точки c и d , которые соответствуют предельным значениям λ a и b .

Отрезок $a - b$ образует область множественности, в которой существуют одновременно три состояния: A и B – экстремальные, а C - промежуточное. Значение a соответствует убывающей ветке анализа чувствительности (с уменьшением λ), а значение b соответствует возрастающей ветке (с увеличением λ).

При проектировании реакционно-ректификационной колонны необходимо определить наличие множественности, ее топологию в пространстве технологических параметров, и оценивать желательность экстремальные состояния, так как некоторые из них являются низко производительными.

Как показано на рисунке 2.2, область множественности разграничена точками бифуркации, которые определяются экстремальной чувствительностью переменной состояния y от входного параметра λ (высокие значения $\Delta y/\Delta\lambda$).

При этом, для идентификации точек бифуркации и определения множественности выхода применяют анализ параметрической чувствительности с соблюдением критерия α , представленного в уравнении (13) [31].

$$\lim_{\Delta\lambda \rightarrow 0} \tan^{-1} \left(\frac{\Delta y}{\Delta\lambda} \right) \rightarrow \frac{\pi}{2} = \alpha \quad (13)$$

3 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Объектом настоящей работы является смещенный реакционно-ректификационный процесс для синтеза этил-трет-бутилового эфира (ЭТБЭ) и проектирование соответствующего реакционно-ректификационного аппарата.

Сырьем синтеза является изобутиленовая фракция типичного состава (С4) и чистый этанол (ЭтОН). Продукт процесса представляет собой товарный ЭТБЭ высокой чистоты. Состав и расходы потоков, условия ведения процесса и требованиям к продукту и производительности процесса приведены в таблице 3.1.

Таблица 3.1 – Исходная информация для проведения исследования

Исходные потоки					
Расходы			Состав		
Поток	кг/ч	кмоль/ч	Компонент	%масс	%мол
С4	6434,97	114,69	Изобутилен	45,45	45,45
			1-бутен	54,55	54,55
ЭтОН	2449,95	53,18	Этанол	100,00	100,00
Σ	8884,92	167,87			
Условия процесса					
Давление верха колонны <i>P</i> (бар изб.)		10			
Температура смеси С4 и ЭтОН (°С)		45			
Требования к продукту и производительности процесса					
Степень превращения изобутилена, мол. дол.		≥ 0,98			
Степень чистоты ЭТБЭ, мас. дол.		≥ 0,95			

Технологическая схема данного процесса включает изотермический реактор и реакционно-ректификационную колонну.

Методом исследования является математическое моделирование процесса в среде Aspen Plus с оптимизацией технологической схемы и режима работы колонны с помощью метода нелинейной оптимизации.

4 РАСЧЕТЫ И АНАЛИТИКА

4.1 Предварительное моделирование

За счет взаимовлияния механизмов химической реакции и фазового равновесия, оценка производительности колонны РР должна учитывать одновременно степень чистоты ЭТБЭ $x_{\text{ЭТБЭ}}$ и степень превращения ИБ $\varepsilon_{\text{ИБ}}$. При этом удобно определить целевой параметр в виде суммы разности квадратов, как показано в уравнении (14).

$$\Psi_0 = (1 - x_{\text{ЭТБЭ}})^2 + (1 - \varepsilon_{\text{ИБ}})^2, \quad (14)$$

В уравнении (14) параметр Ψ_0 стремится к нулю по мере того, как $x_{\text{ЭТБЭ}}$ и $\varepsilon_{\text{ИБ}}$ приближаются к единице; при этом минимизация Ψ_0 представляет собой стратегию оптимизации процесса.

Было проведено исследование влияния тепловой нагрузки кипятильника QN , флегмового числа RR и структуры колонны на $x_{\text{ЭТБЭ}}$ и $\varepsilon_{\text{ИБ}}$ предварительным моделированием колонны РР в среде Aspen Plus. Сырьевым потоком был принят выход изотермического реактора, и поэтому ЭТБЭ уже присутствует в его составе. Данные моделирования приведены в таблице 4.1; результаты показаны на рисунках 4.1 – 4.2.

Таблица 4.1 – Параметры предварительного моделирования колонны РР

Сырье	
Состав (масс. %)	ЭТБЭ (43,3); ЭТОН (6,1); ИБ (6,0); н-Бутилены (44,6. Приняты как 1-Бутилен)
Температура	30 °С
Давление	950 кПа
Расход	0,76 л/с
Допущения к моделированию	
Тип модели	Фазовое равновесие
Описание жидкостной фазы	Строгое неидеальное

Продолжение таблицы 4.1

Допущения к моделированию	
Теплофизические модели фаз	Жидкая – UNIFAC. Паровая – SRK.
Реакции (режим)	ЭТБЭ (кинетический) ДИБ (равновесный)
Реагирующая фаза	Жидкая
Структура	
Происхождение сырья	Реагирующая смесь из выхода первого изотермического реактора.
Питание	Единственное
Боковые отборы	Нет
Всего тарелок	10
Конденсатор – кипятильник	Полный – парциальный
Реакционная часть	Тарелки 3 – 5
Загрузка катализатора	6 кг/тарелка
Номер тарелки питания	6 (подача над тарелкой)
Орошение	Единственное, на тарелку 2
Давление верха	950 кПа, перепад давления 0.
Флегмовое число	5
Тепловая нагрузка кипятильника	8,26 кВт

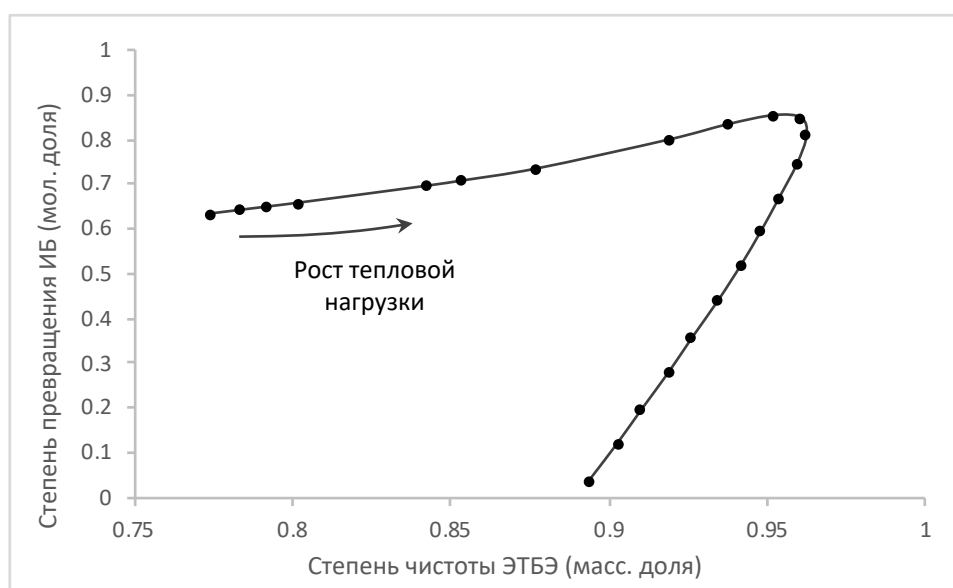


Рисунок 4.1 – Взаимосвязь между степенью превращения ИБ и степенью чистоты ЭТБЭ. RR=5

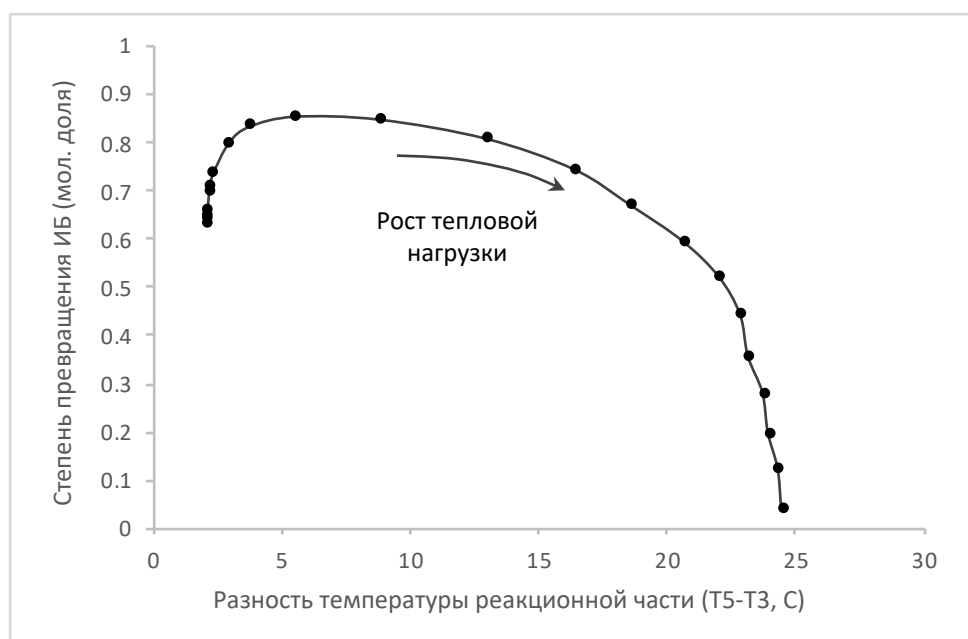


Рисунок 4.2 – Степень превращения ИБ в зависимости от разности температур в реакционной части. RR=5

Как показано на рисунке 4.1, $x_{\text{ЭТБЭ}}$ и $\varepsilon_{\text{ИБ}}$ возможно максимизировать одновременно, а эта точка соответствует к определенному сочетанию тепловой нагрузки и флегмового числа. На рисунке также показан нелинейный характер реакционной ректификации, при котором возможны одинаковые степени превращения ИБ и чистоты ЭТБЭ при разных тепловых нагрузках.

На рисунке 4.2 видно, что максимальная степень превращения соответствует низким разностям температур на тарелках реакционной части. Это означает, что подача вторичного холодного этанола или флегмы в реакционную зону колонны является способом повышения конверсии изобутилена за счет регулирования температуры.

Степень превращения зависит примерно линейным образом от разности температур в области тепловых нагрузок, соответствующих максимальному превращению изобутилена. Это позволяет создать стратегии управления на основе линейных прогностических контроллеров [32].

С целью выяснить эффект разных структур было проведено исследование зависимости целевого параметра Ψ_0 от тепловой нагрузки и флегмового числа при увеличенном размере реакционной части и наличии

рецикла флегмы в реакционную часть. Исследованные структуры и их назначение приведены на рисунке 4.3.

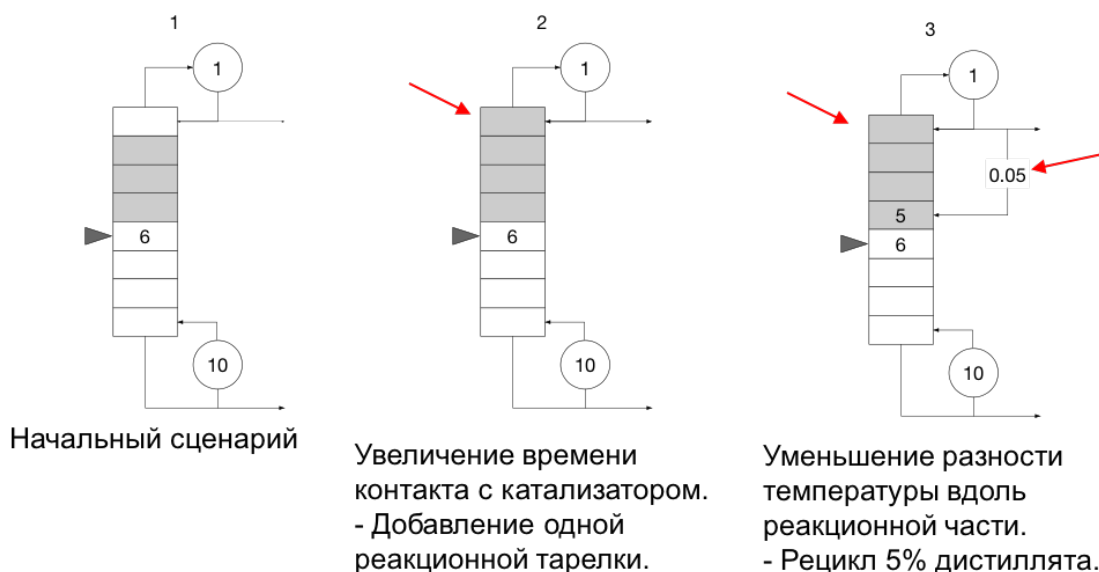


Рисунок 4.3 – Исследованные структуры реакционно-ректификационной колонны

Результаты, приведенные в приложении Б, показывают, что добавление реакционных тарелок над тарелкой питания (структура 2) и применение подачи флегмы в реакционную зону (структура 3) способны существенно повысить производительность колонны РР, так как эти структуры выдают минимальные значения параметра Ψ_0 при низких нагрузках и флегмовых числах, что относится к более экономичному ведению процесса.

В приложении Б также видно, что область минимальных значений Ψ_0 отражает линейную зависимость флегмового числа от тепловой нагрузки.

4.2 Обобщенная технологическая схема и задача оптимизации

Исходя из вышеизложенного, при проектировании реакционно-ректификационной колонны должны быть учтены одновременно не только технологические непрерывные параметры – тепловая нагрузка, флегмовое число и другие – но и структурные целочисленные переменные, такие как

размер реакционной части, наличие вторичных питаний реагентов, боковых отборов и потоков рецикла.

Если учитывать заданные требования по качеству товарного ЭТБЭ и минимально допустимой степени превращения ИБ, то проектирование реакционно-ректификационного процесса заключается в оптимизации структурных и технологических параметров для удовлетворения данных спецификаций.

В стадии проектирования критерием оптимальности служит минимизация суммы капитальных и оперативных затрат. Решение этой задачи должно быть проведено над обобщенной схемой, которая позволяет учитывать все возможные конфигурации процесса по выбранным непрерывным и целочисленным параметрам, с учетом ограничений по материально – тепловым балансам, гидравлическим соотношениям колонны и заданным требованиям.

В настоящей работе решение данной задачи проводится с помощью математической модели установки, которая создана в среде Aspen Plus; в качестве исходных данных выступает состав сырья, условия ведения процесса и допустимые пределы степени превращения ИБ и чистоты ЭТБЭ.

На основе выше показанных результатов предварительного исследования была принята обобщенная схема установки с подачей вторичного этанола в реакционную часть и рециклом бокового отбора из колонны РР в изотермический реактор для дальнейшей конверсии непрореагировавшего ИБ. Схема показана на рисунке 4.4. Задача оптимизации сформулирована в уравнении (15).

В дальнейшем выполнении задачи оптимизации, за исключением структуры и сырья принимаются такие же допущения к моделированию, приведенные в таблице 4.1.

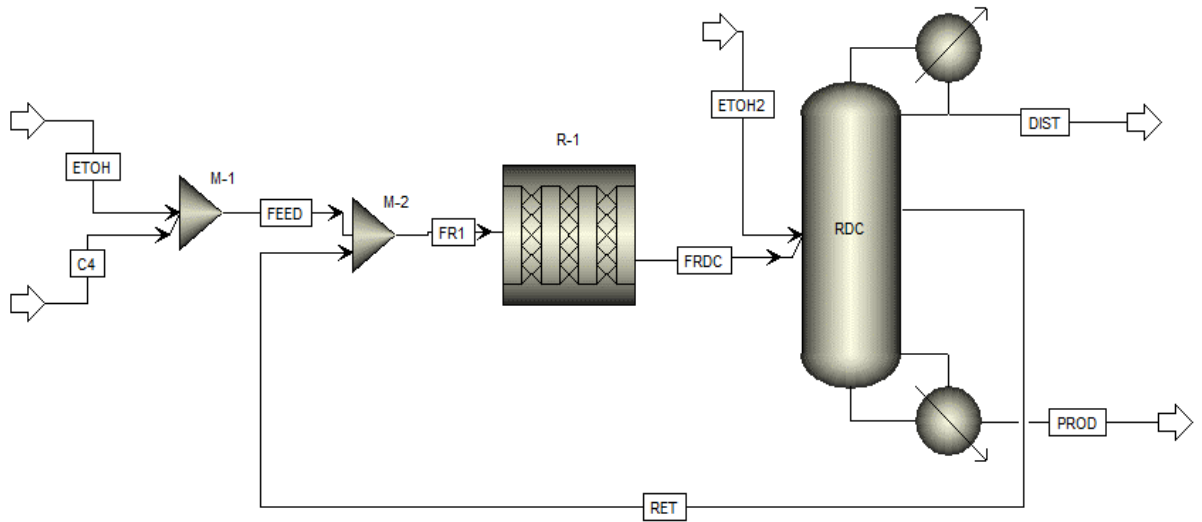


Рисунок 4.4 – Схема процесса РР, принятая для оптимизации

$$\min_X \Psi_c = \sum C_{\text{кап}} + \sum C_{\text{оп}},$$

С ограничениями:

$$F(X) = 0, \tag{15}$$

$$G(X) \leq 0,$$

$$Q(X) \leq 0,$$

$$lb \leq X \leq ub,$$

где $F(X) = 0$ – ограничения по материальному и тепловому балансам;
 $G(X) \leq 0$ – ограничения по гидравлическим и геометрическим соотношениям;
 $Q(X) \leq 0$ – ограничения по поставленным пределам на качество продукта и производительность процесса; lb и ub – вектор нижних и верхних пределов переменных X .

В таблице 4.2 приведены оптимизируемые переменные. Важно сделать замечание, что конструктивные параметры реактора R-1 не учитываются при решении задачи оптимизации, а определяются произвольно, следуя минимизации перепада давления через слой катализатора и установлению максимальной степени превращения изобутилена на его выходе.

Таблица 4.2 – Оптимизируемые переменные X

Аппарат/ поток	Описание параметра	№	Обозначение
Конструктивные и оперативные параметры			
RDC	Загрузка катализатора на тарелке, кг	1	$G_{кат}$
	Число тарелок	2	N
	Тарелка питания	3	$N_{пит}$
	Начало реакционной части	4	N_{p1}
	Конец реакционной части	5	N_{p2}
	Тепловая нагрузка кипятильника, кВт	6	QN
	Флегмовое число	7	RR
R-1	Температура изотермического реактора, °C	8	T_{R1}
RDC	Расход вторичного этанола, кг/ч	9	$Q_{ЭТОH2}$
	Тарелка подачи вторичного этанола	10	$N_{ЭТОH2}$
	Расход рецикла, кг/ч	11	Q_{RET}
	Тарелка отвода рецикла	12	N_{RET}
Геометрические параметры			
RDC	Диаметр колонны, м	13	D
	Расстояние между тарелками, м	14	s
	Диаметр отверстия тарелки, мм	15	d_h
	Высота сливной перегородки, мм	16	h_w

4.2.1 Целевая функция оптимизации

В задаче (15) стоимость $C_{кап}$ включает затраты на приобретение и ввод в действие с учетом рабочего давления, материала изготовления и изменения стоимости по времени. В настоящей работе различают три типа оборудования: 1) сосуд колонны, 2) перфорированные тарелки и 3) насадка для размещения катализатора в тарелке. Капитальные затраты реактора R-1 не учитываются.

Для расчета $C_{кап}$ применяется уравнение (16) для колонны, (17) для тарелок и (18) для насадки по методу, предложенному по источнику [33].

$$C_{\text{кап,к.}} = C_p^o (B_1 + B_2 F_P F_M) \frac{I_{t2}}{I_{t1}}, \quad (16)$$

$$C_{\text{кап,т}} = C_p^o N F_{BM} F_q \frac{I_{t2}}{I_{t1}}, \quad (17)$$

$$C_{\text{кап,н}} = C_p^o F_{BM} \frac{I_{t2}}{I_{t1}}, \quad (18)$$

где C_p^o – первоначальная стоимость оборудования, работающего под атмосферным давлением и изготовленного из углеродистой стали, в начальном периоде t_1 , \$;

B_1 и B_2 – безразмерные постоянные;

F_P – фактор, учитывающий рабочее давление, безразмерный;

F_M – фактор, учитывающий материал изготовления, безразмерный;

F_{BM} фактор материала и типа оборудования;

I_{t2} и I_{t1} – индексы стоимости в расчетном периоде стоимости $C_{\text{кап}}(t_2)$ и в начальном периоде (t_1).

Фактор F_q определяется уравнением (19). C_p^o и фактор давления F_P рассчитываются уравнениями (20) и (21).

$$\log_{10} F_q = \begin{cases} 0,4771 + 0,0851 \log_{10} N - 0,3473 [\log_{10} N]^2 & \text{при } N < 20 \\ 0 & \text{при } N \geq 20' \end{cases} \quad (19)$$

$$\log_{10} C_p^o = K_1 + K_2 \log_{10} A + K_3 [\log_{10} A]^2, \quad (20)$$

$$F_P = \frac{1}{0,0063} \left[\frac{(P + 1)D}{2[850 - 0,6(P + 1)]} \right] + 0,00315, \quad (21)$$

где K_i и C_i – регрессионные параметры, зависящие от оборудования;

A – характеризующий размер (объем, диаметр, мощность и т.д.);

P – избыточное давление, бар;

Термин $\sum C_{\text{оп}}$ является суммой затрат по расходам этанола и греющего пара, в единицах тыс. \$ / год, и определяется уравнением (22).

$$\sum C_{\text{оп}} = Q_{\text{ЭТОН2}} C_{\text{ЭТОН}} + \frac{3600 QN}{H_{\text{пар}}} C_{\text{пар}}, \quad (22)$$

где $H_{\text{пар}}$ – энтальпия пара, кДж/кг;

$C_{\text{ЭТОН}}$ и $C_{\text{пар}}$ – удельная стоимость этанола и пара соответственно, \$ / кг.

Данные по параметрам B_1 , B_2 , K_i , C_i , размерам A и факторами F_M , F_{VM} , энтальпия $H_{\text{пар}}$ и стоимости $C_{\text{ЭТОН}}$ и $C_{\text{пар}}$ приняты из источников [27], [33]. Для индексов I_{t_2} и I_{t_1} используется индекс СЕРСИ в периодах t_2 – 2017 г. и t_1 – 2001 г. Индексы СЕРСИ доступные в [12] и в журнале *Chemical Engineering*. Все данные, используемые в настоящей работе приведены в приложении В.

4.2.2 Ограничения по материальному и тепловому балансам

Материальные и тепловые балансы выступают как ограничение $F(X) = 0$ в задаче (15), так как при минимизации Ψ_c все возможные значения оптимизируемых переменных x должны соблюдать сохранения всех балансов процесса.

В настоящей работе материальные и тепловые балансы, как и расчеты теплофизических свойств, осуществляются с помощью КМС Aspen Plus; сохранения балансов при решении задачи оптимизации проверяется кодом сходимости θ , который выдается среди результатов расчета и при успешной сходимости без предупреждений принимает значение 129. С этим условием ограничение по балансам сформулированы уравнением (23).

$$\theta - 129 = 0, \quad (23)$$

4.2.3 Ограничения по геометрическим и гидравлическим соотношениям

С целью обеспечить осуществимость разработанной колонны необходимо соблюдать геометрические и гидравлические ограничения, которые описаны в задаче (15) выражением $G(X) \leq 0$.

Настоящая модель ограничений описана в работе [34] и заключается в минимальном диаметре колонны D_{min} , минимальной скорости пара через отверстия тарелок $u_{h_{min}}$ и максимальной высоте жидкости в сливной трубе h_{dc} .

При слишком высоких скоростях пара увеличивается количество уноса жидкости и наступает захлебывание тарелки. Для того, чтобы избежать этого эффекта диаметр колонны D ограничен по минимальному значению D_{min} (24). Однако, при слишком низких скоростях, жидкость стекает на нижележащую тарелку через те же отверстия, через которые проходит пар; при этом невозможно поддерживать необходимый уровень жидкости на тарелке и эффективность контакта фаз снижается. Исходя из этого, скорость пара через отверстия u_h следует ограничить по минимальному значению $u_{h_{min}}$ (25).

Последним нежелательным эффектом является наполнение сливной трубы жидкостью, которое возникает, когда высота жидкости в ней h_{dc} превышает расстояние между тарелками s и высоту сливной перегородки h_w (26). При этом высота h_{dc} ограничена половиной от суммы величин h_w и s [35].

$$D_{min} - D \leq 0, \quad (24)$$

$$u_{h_{min}} - u_h \leq 0, \quad (25)$$

$$h_{dc} - 0,5(h_w + 1000 s) \leq 0, \quad (26)$$

Эти ограничения также обеспечивают работу колонны при переходе между струйным и пенным режимами; пенный режим предпочтительнее для реакционно ректификационных колонн [36].

Исходная информация для решения ограничений состоит из расходов и теплофизических свойств потоков жидкости и пара, рассчитанных КМС Aspen Plus. Подробное описание модели ограничений приведено в приложении Г.

4.2.4 Ограничения по качеству продукта и производительность процесса

Промышленные требования к качеству товарного ЭТБЭ устанавливают минимальные степени чистоты $x_{\text{ЭТБЭ}}$ от 0,85 масс. д. (компания Lynodell) до 0,95 масс. д. (компания Chevron и Sabc) [27]. Минимальная степень превращения изобутилена принимается равна 0,98 мол. д. с учетом предварительной реакции в изотермическом реакторе.

Эти ограничения описаны выражением $Q(x) \leq 0$ в задаче (15) и представлены в уравнениях (27) – (28).

$$0,98 - \varepsilon_{\text{ИБ}} \leq 0 \quad (27)$$

$$0,95 - x_{\text{ЭТБЭ}} \leq 0 \quad (28)$$

4.3 Способ решения задачи оптимизации

В задаче оптимизации (15) как ограничения по балансам $F(X) = 0$ и требованиям $Q(X) \leq 0$ выступает отдельная КМС - Aspen Plus, которая не имеет явного аналитического выражения.

При этом возникают несколько сложностей, которые препятствуют применению методов, основанных на градиенте целевой функции [37], [38]: 1) пространство осуществимости целевой функции алгебраически неизвестно; 2) высокая вычислительная стоимость со стороны КМС; 3) целевая функция не дифференцируемая по всей области осуществимости; 4) неустойчивость КМС к нарушению пределов вектора переменных X с возникновением сбоев; 5) не-сходимость расчетов по причинам, связанным с численными методами решения КМС.

В этих случаях методы прямого поиска находят специально успешное применение [35]. Методом, выбранным в настоящей работе, является метод нелинейной оптимизации с алгоритмом прямого поиска в адаптивной сетке

MADS [39], который не только обладает достаточно высокой мощностью, но и реализован в образе подпрограммы NOMAD для Microsoft Excel. NOMAD содержится в пакете свободных методов OpenSolver [40].

Метод MADS производит сеть нескольких точек X , из которой выбирают осуществимые точки т.е. те, которые удовлетворяют всем ограничениям в задаче оптимизации. Затем, метод прямым образом оценивает целевую функцию в каждой из осуществимых точек и находит его текущее минимальное значение. Сеть точек X строится заново в окрестности текущего минимума и проверяется на осуществимость. Этот процесс повторяется до нахождения минимума, не превышающего предыдущий больше, чем на заданную погрешность [39].

Исходя из этого, не требуется производная целевой функции и, так как область осуществимости определяется до оценки целевой функции, возможно применить дополнительный код для того, чтобы предотвратить передачу нарушающих значений X , которые приводят к сбоям КМС и прекращению процесса решения.

Задача состоит из 16 оптимизируемых переменных (см. таблицу 4.2). NOMAD в Excel является ведущим элементом в схеме решения, ограничения $G(X) \leq 0$ рассчитаны в Excel и ограничения $F(X) = 0$ и $Q(X) \leq 0$ рассчитаны в Aspen Plus.

Величины, необходимые для ограничений $G(X) \leq 0$ – объемные расходы Q , плотность ρ и поверхностная натяжение жидкости σ – выданы Aspen Plus и усреднены по всей колонне. Перепад давления ΔP по тарелкам является входом к Aspen Plus и определяется среди расчетов $G(X) \leq 0$ в Excel; при этом ΔP передается к Aspen Plus только после окончания текущего итерационного цикла и делается допущение о том, что по сравнению с предыдущим циклом он меняется незначительно.

Схема решения задачи оптимизации изображена на рисунке 4.5.

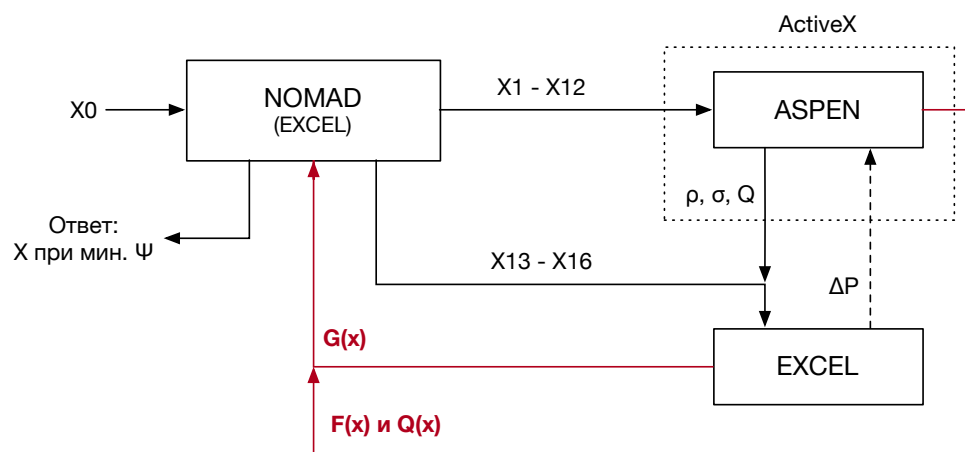


Рисунок 4.5 – Схема решения проблемы минимизации функции Ψ_C

Начальная точка X^0 находится как результат предварительной минимизации критерия суммы ошибок Ψ_0 с оптимизируемыми переменными $X_6 - X_{12}$.

4.4 Поиск множественности стационарных состояний

Полученные с предыдущей стадии структурные и оперативные параметры позволяют создать в Aspen Plus модель реакционно-ректификационного процесса, работающей при оптимальных условиях.

Для определения наличия множественности выхода и ее топологии проводится анализ параметрической чувствительности с использованием вышесказанной модели. В качестве переменной состояния выбирается степень чистоты ЭТБЭ $x_{\text{ЭТБЭ}}$, а входной технологический параметр составляет тепловая нагрузка QN . Анализ чувствительности выполняется при разных флегмовых числах RR .

Для соблюдения критерия бифуркации (13) параметр QN варьируется при шагах малого размера (1 кВт). С целью найти пределы области множественности, анализ чувствительности проводится в двух ветках: возрастающая ветка – с ростом QN , а убывающая ветка – с уменьшением QN .

Для выполнения поиска множественности была создана программа на языке Python, которая показывается в приложении Ж.

5 РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕДЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

5.1 Конструктивные и технологические параметры

Конструктивные и оперативные параметры реакционно-ректификационной колонны, получены при решении задачи оптимизации, приведены в таблице 5.1. Параметры реактора приведены в таблице 5.2.

Таблица 5.1 – Результаты проектирования установки синтеза ЭТБЭ

	Нач. точка	Результат	Пределы	
	X^0	X	lb	ub
Конструктивные и оперативные параметры				
Загрузка катализатора на тарелке $G_{кат}$, кг	18,00	9,00	0,10	20,00
Число тарелок N	51	51	40	70
Тарелка питания $N_{пит}$	49	49	2	70
Начало реакционной части N_{p1}	4	22	2	70
Конец реакционной части N_{p2}	44	42	2	70
Тепловая нагрузка кипятильника QN , МВт	4,07	4,04	0,01	50,00
Флегмовое число RR	11,29	11,08	1,00	50,00
Температура изотермического реактора T_{R1} , °С	44,36	43,30	30,00	90,00
Расход вторичного этанола $Q_{ЭТОH2}$, кг/ч	66,94	120,00	0,10	3000,00
Тарелка подачи вторичного этанола $N_{ЭТОH2}$	6	21	2	70
Расход рецикла Q_{RET} , кг/ч	690,10	715,52	0,10	3000,00
Тарелка отвода рецикла N_{RET}	47	49	2	70
Геометрические параметры				
Диаметр колонны D , м	2,00	1,65	0,30	5,00
Расстояние между тарелками s , м	1,00	0,50	0,15	1,00
Диаметр отверстия тарелки d_h , мм	4,00	4,00	3,20	25,40
Высота сливной перегородки h_w , мм	60,00	83,20	40,00	90,00
Стоимости				
Ст. колонны, тыс. \$/год	2509,58	828,87		
Ст. тарелок, тыс. \$/год	266,50	189,54		
Ст. насадки, тыс. \$/год	3,09	0,82		
Ст. катализатора, тыс. \$/год	5,68	1,46		
Ст. пара, тыс. \$/год	2991,52	2969,38		
Ст. вт. этанола, тыс. \$/год	579,93	1039,57		

Продолжение таблицы 5.1

	Нач. точка	Результат
	X^0	X
Производительность		
$x_{\text{этбэ}}$	0,973	0,958
$\varepsilon_{\text{иб}}$	0,992	0,981
Критерии оптимальности		
$\Psi_{\text{с}}$ тыс. \$/год	6356,30	5029,64
Ψ_0	$8,2 \times 10^{-4}$	$2,1 \times 10^{-3}$

Таблица 5.2 – Параметры изотермического реактора

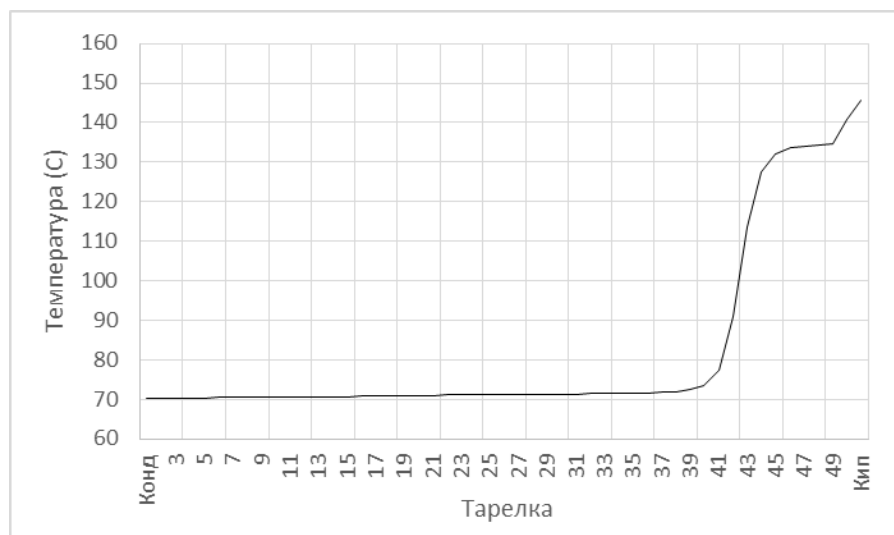
Параметр	Значение
Доля пустого пространства	0,6022
Насыпная плотность катализатора, кг/м ³	640,26
Диаметр труб, дюйм	2
Длина труб, м	10
Число труб	400

5.2 Материальный и тепловой балансы, профили колонны РР

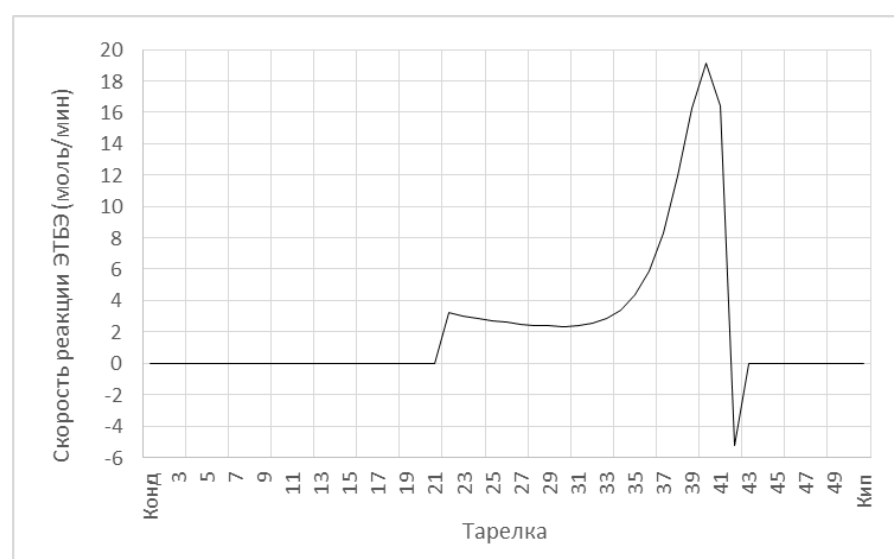
Состав основных потоков приведен в таблице 5.3. Детальный материальный и тепловой баланс показывается в приложении Д. Профили температур, скорость реакции и концентрации ЭТБЭ показаны на рисунке 5.1.

Таблица 5.3 – Состав основных потоков установки

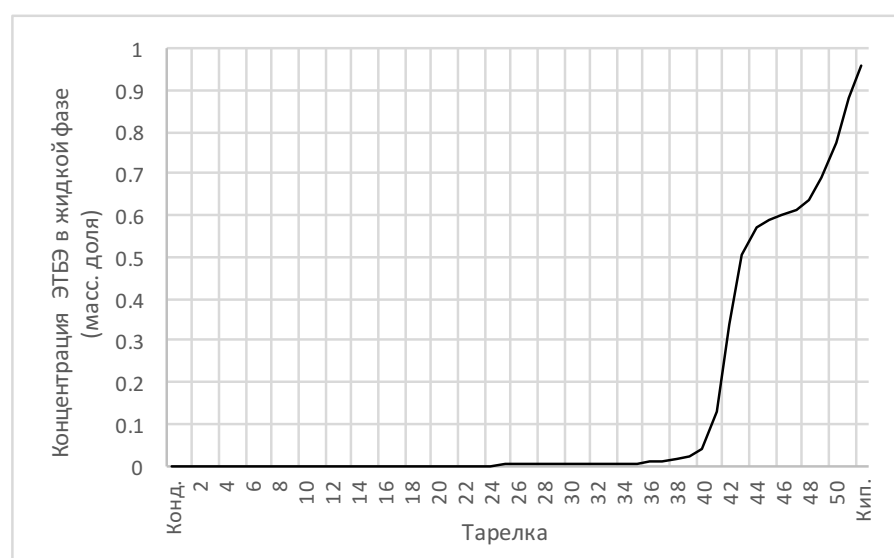
Компонент	Состав потока, масс. %		
	FEED	DIST	PROD
Этанол	27,57	0,03	3,91
Изобутилен	32,92	1,49	0,03
ЭТБЭ	0,00	0,00	95,81
1-бутен	39,51	98,48	0,23
ДИБ	0,00	0,00	0,02



А)



Б)



В)

Рисунок 5.1 – Профиль температур (А), скорости реакции (Б) и концентраций (В) ЭТБЭ вдоль реакционно-ректификационной колонны

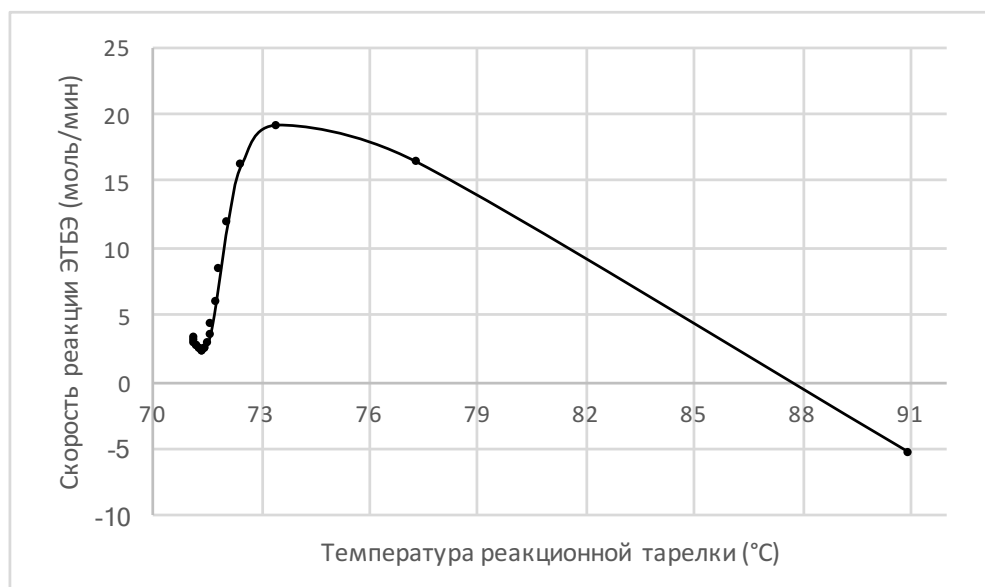


Рисунок 5.2 – Профиль скорости образования ЭТБЭ по температурам реакционных тарелок

В ходе решения задачи оптимизации были обнаружены повторные прекращения работы движка Aspen Plus, чьи причины не было возможно выяснить. Для решения этого недостатка, при возникновении прекращения процесс оптимизации был перезапущен, используя как начальные значения все данные предыдущего итеративного шага.

5.3 Множественность стационарных состояний

Результаты анализа параметрической чувствительности показывают наличие точек бифуркации и, следовательно, множественности стационарных состояний выхода.

На рисунке 5.3 приведены критерии бифуркации α , соответствующие возрастающей ветке анализа чувствительности. Точки бифуркации обозначены пиками, в которых $\alpha \rightarrow \pi/2$ и указывают значения тепловой нагрузки, приводящие к множественности при заданном флегмовом числе.

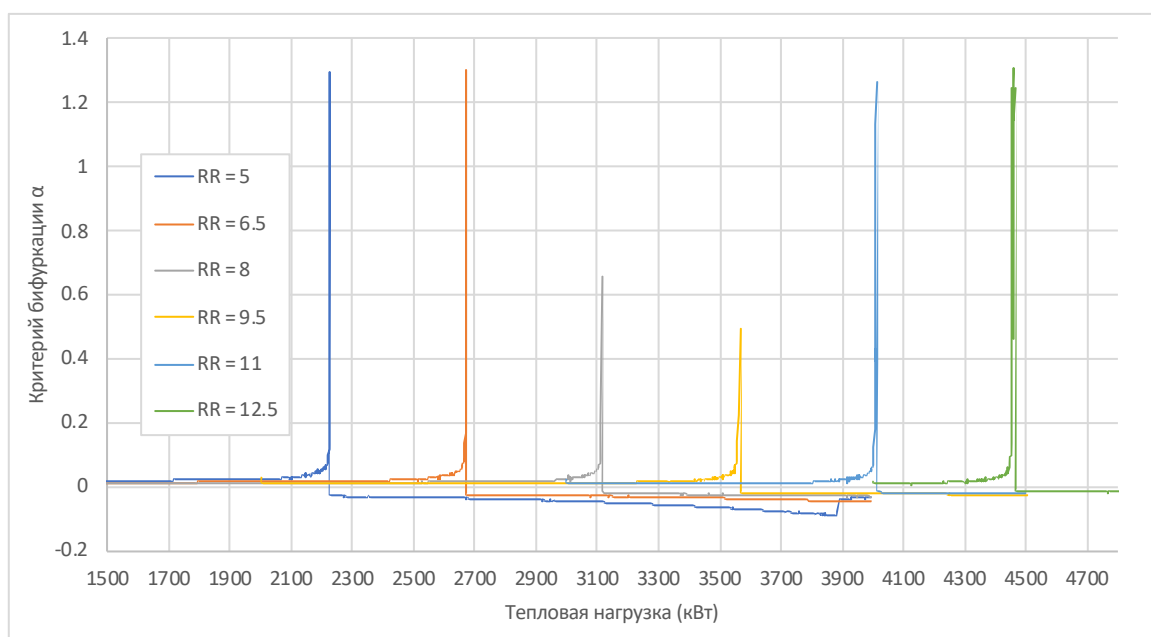


Рисунок 5.3 – Критерий бифуркации при разных RR

Точки бифуркации возрастающей и убывающей веток определяют границы области множественности. Как показано в таблице 5.4, точки бифуркации мало отличаются между ветками, так как разница между тепловыми нагрузками не превышает 9 кВт.

В следствии этого, область множественности значительная узкая и принимает форму линии, как показано на рисунке 5.4.

Таблица 5.4 – Точки бифуркации и значения степеней $\varepsilon_{иб}$ и $x_{этбэ}$

RR	Возрастающая ветка			Убывающая ветка		
	QN (кВт)	$\varepsilon_{иб}$ (% мол.)	$x_{этбэ}$ (% масс.)	QN (кВт)	$\varepsilon_{иб}$ (% мол.)	$x_{этбэ}$ (% масс.)
5	2227	98,318	95,492	2220	97,068	91,065
6,5	2670	98,572	95,786	2668	97,739	91,822
8	3118	98,450	95,838	3113	97,923	91,983
9,5	3566	98,325	95,845	3558	97,905	91,806
11	4009	98,038	95,655	4005	97,923	91,873
12,5	4460	97,885	95,543	4451	97,846	91,647

Как видно в таблице 5.4 и рисунке 5.4, область множественности проявляется в регионах желательной производительности ($\varepsilon_{иб} \geq 0,98$ и $x_{этбэ} \geq 0,95$); сама рабочая точка получена из оптимизации находится достаточно близко к области множественности.

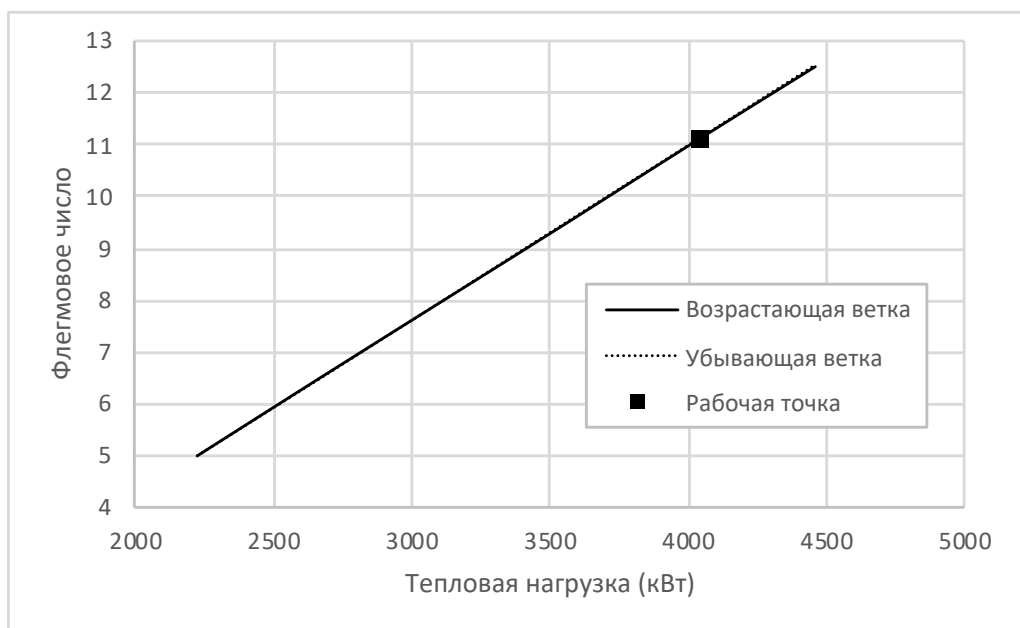


Рисунок 5.4 – Область множественности

Подробное изучение веток анализа чувствительности, приведенное на рисунке 5.5, показывает, что хотя область множественности существенно узкая, в ней возможен переход к нежелательной производительности.

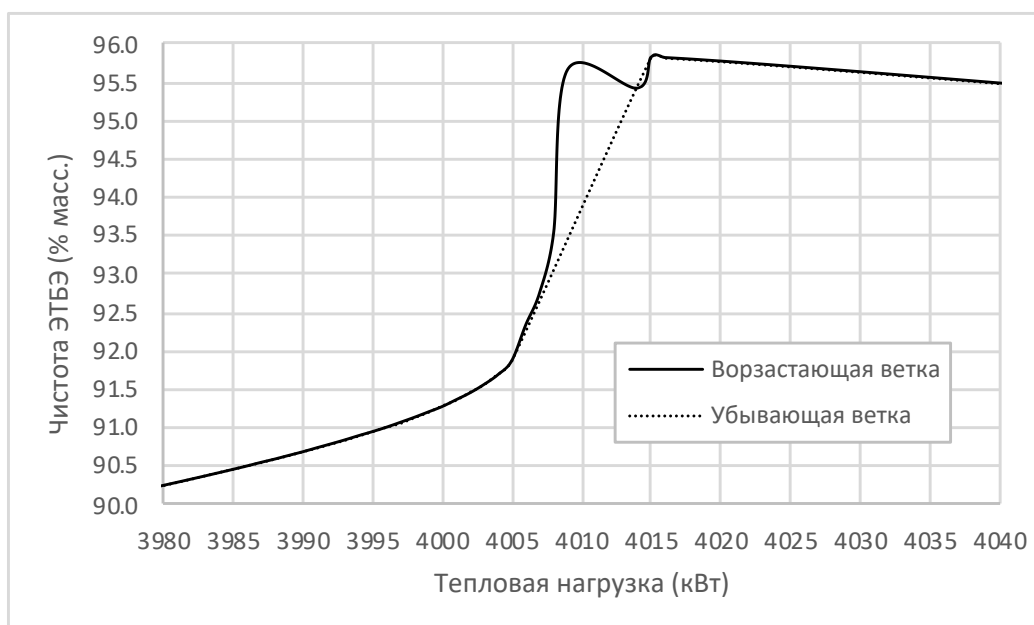


Рисунок 5.5 – Ветки анализа чувствительности при множественности, $RR = 11$

На рисунке 5.5 возрастающая ветка также показывает множественность входа, так как, возможны три различных значения тепловой нагрузки для, например, чистоты ЭТБЖ 95,5 %.

5.4 Конструктивно – механический расчет колонны РР

Результаты оптимизации конструктивных и технологических параметров, приведенные в таблице 5.1, служат основой для выполнения конструктивно – механических расчетов и проектного чертежа реакционно–ректификационной колонны.

5.4.1 Конструкция, материал изготовления, толщина обечайки

Согласно рекомендации, для колонных аппаратов диаметром 1000 – 3600 мм [21 с. 874] принимается цельносварная конструкция с фланцевым разъемом для реакционной части.

Применения жидкостной экстракции для рекуперации непрореагировавшего этанола вносит возможность присутствия воды, что приводит к образованию серной кислоты за счет десульфонации катализатора [42], При этом следует выбрать коррозионностойкую сталь.

Среди рекомендованных материалов для изготовления колонных аппаратов [21 с. 874, таб. 49.1] коррозионностойкая сталь 12Х18Н10Т – наиболее распространенная для работы в окислительных средах [43] – выбрана в настоящей работы.

Толщина обечайки s определена диаграммой 5.6 [21 с. 874, рис. 49.3] в зависимости от давления и температуры рабочей среды.

Давление кубы (+10%) = 1,1 Мпа. Температура куба (+10%) = 170,8 °С. s = 12 мм.

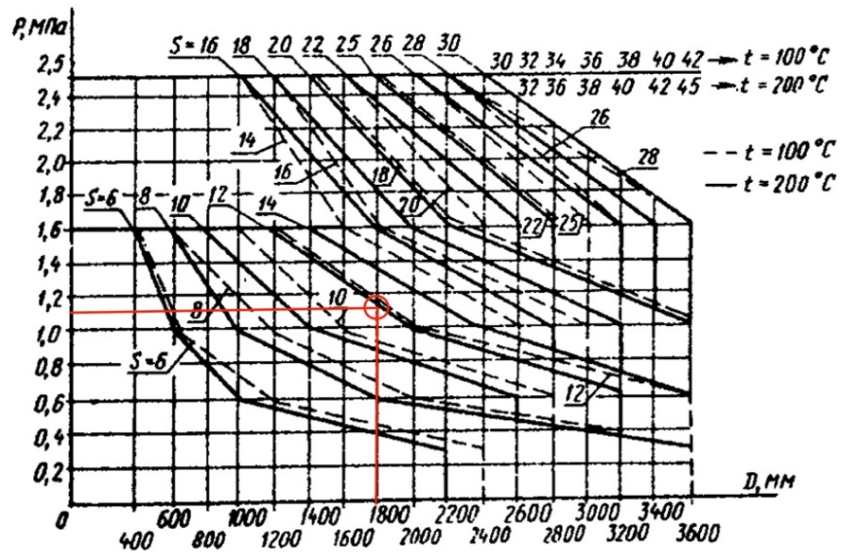


Рисунок 5.6 – Толщина обечайки s (мм). Коррозионностойкая сталь [41]

Согласно рекомендации, толщины эллиптических днища и крышки принимаются равны толщине цилиндрической обечайки аппарата.

5.4.2 Диаметр и высота аппарата

Расчетные диаметр колонны D и расстояние между тарелками s проверяются согласно с ГОСТ 21944-76, от чего следует принимать конструктивные значения:

$$D = 1800 \text{ мм. } h_p = 500 \text{ мм.}$$

Высота колонны H определена уравнением (29)

$$H = (N - 2) * (h_p + e_p) + H_B + H_K \quad (29)$$

где $N - 2$ – число тарелок,

h_p – расстояние между тарелками, мм;

e_p – толщина тарелки, 2,5 мм;

H_B – высота колонны над первой тарелкой, мм;

H_K – высота кубовой части, мм.

Согласно рекомендации, для колонн диаметром 1000 – 3600 мм [24 с. 437 – 438] $H_B = 0,5D$ и $H_K = 1,5D$, при этом $H = 29227,5$ мм и принимается:

$$H = 30000 \text{ мм} \equiv 30 \text{ м.}$$

5.4.3 Контактное устройство

Для реакционно-ректификационных аппаратов, по сравнению с насадочными устройствами однопоточные тарелки обеспечивают высокий объем жидкости на тарелке, что благоприятствует реакции [36]. Исходя из этого, как контактное устройство в настоящей работе выбирается однопоточная ситчатая тарелка.

Согласно со стандартом ОСТ 26-805-73 для колонных аппаратов диаметром 1200 – 3600 мм, работающих под давлением, следует выбрать разборную тарелку типа ТС-Р2. Основные параметры тарелки приведены в таблице 5.5.

Таблица 5.5 – Основные параметры тарелки типа ТС-Р2

Тип	Ситчатая разборная
Диаметр колонны D , мм	1800
Свободное сечение колонны, m^2	2,54
Рабочее сечение тарелки, m^2	1,64
Диаметр отверстия d_h , мм	4*
Шаг расположения отверстий p_h , мм	12*
Сечение перелива, m^2	0,45
Длина сливной перегородки w , мм	1520
Масса, кг	96,5

* Получено из расчетов.

5.4.4 Штуцеры

Подсоединение трубопроводов к сосудам и аппаратам осуществляется с помощью штуцеров. В настоящей работе принимается штуцер с приварным плоским фланцем и тонкостенным патрубком. Диаметры штуцера рассчитаны уравнением (30).

$$d = \sqrt{4Q/(\pi\rho w)}, \quad (30)$$

где d – расчетный диаметр штуцера, м;

Q – расход потока, кг/с;

ρ – плотность потока, кг/м³;

w – скорость потока, принята равна 2 м/с для жидких и 30 м/с для газовых потоков.

Таблица 5.6 – Расчет необходимых штуцеров

Поз.	Поток	Фаза	ρ , кг/м ³	G , кг/с	w , м/с	d , мм
А	Вход питания	Жид.	645,28	2,67	2	51,31
Б	Вход флегмы	Жид.	524,30	10,93	2	115,24
В	Вход пара	Пар	33,11	13,97	30	133,84
Г	Выход паров дистиллята	Пар	24,07	11,92	30	144,99
Д	Выход кубового остатка	Жид.	584,78	15,48	2	129,87
Е	Вход вторичного этанола	Жид.	792,71	0,03	2	5,18
З	Выход бокового отбора	Жид.	608,98	0,20	2	14,42

На основе расчетных диаметров принимаются условные диаметры D_y для подборки нормализованных штуцеров. В таблице 5.7 приведены основные параметры штуцеров, согласно рекомендации [25 с. 659, таб. 27.1].

Таблица 5.7 – Параметры штуцеров [45], $p_y = 1,6$ МПа

Поз.	D_y , мм	d_n , мм	H , мм	l , мм	s , мм	h , мм	масса, кг
А, Е, З	100	121	150	230	10	23	10,2
Б	125	146	180	260	10	25	14,1
В, Г, Д	150	168	180	260	10	25	16,9

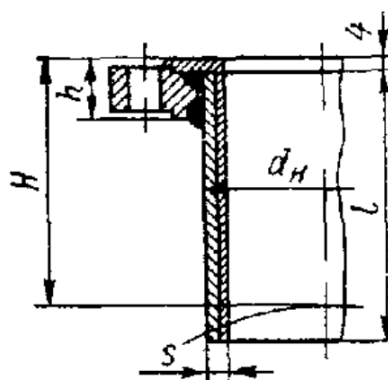


Рисунок 5.7 – Схема конструкции штуцеров [45]

Штуцеры из двухслойной стали с приварными фланцами и наплавленной уплотнительной поверхностью.

5.4.5 Люки

Согласно рекомендации [21 с. 882] принимается люк диаметром 600 мм, расположены через 12 тарелок. При этом для 51 тарелок число люков составляет 4.

Принимается исполнение 2 по стандарту ОСТ 26-2003-83. В таблице 5.8 и рисунке 5.8 приведены размеры и конструкция люков.

Таблица 5.8 – Размеры люков исполнения 2, $p_y = 1,6$ МПа

D_B , мм	D^* , мм	D_1^* , мм	H^* , мм	H_1 , мм	H_2 , мм	l , мм	s , мм	масса, кг
600	740	700	220	493	345	215	10	171,0

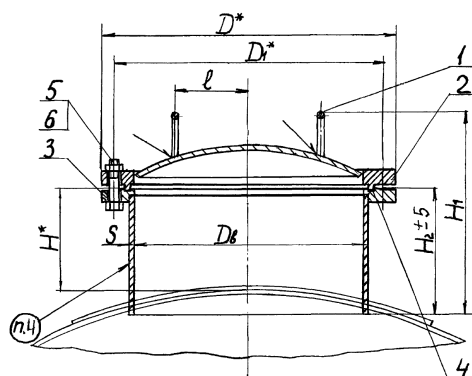


Рисунок 5.8 – Конструкция люков исполнения 2 по ОСТ 26-2003-83

На рисунке 5.8:

1. Ручка по ОСТ 26-2002-83.
2. Крышка исполнения 2 по ОСТ 26-2009-83.
3. Фланец исполнения 2 по ГОСТ 28759.2-90.
4. Прокладка исполнения 1 по ГОСТ 28759.6.
5. Болт по ОСТ 26-2037-96.
6. Гайка по ОСТ 26-2038-96.

Согласно рекомендации [24 с, 436] расстояние между тарелками на месте установки люка следует принят равно 800 мм.

5.4.6 Конструкция реакционной части

С целью обеспечения замены катализатора после окончания его срока службы предусмотрена царговая реакционная часть с фланцами для обечаек. Высота реакционной части $H_{рк}$ рассчитана уравнением (31).

$$H_{рк} = N_p(h_p + e_p), \quad (31)$$

где N_p – число реакционных тарелок.

Принимается конструкция из 2 царг, 1 из 10 тарелок и 1 из 21 тарелок. В каждой царге расположен один люк.

Высота царги из 10 тарелок: $H_{ц1} = 10 * (h_p + e_p) = 5025,0$ мм.

С учетом высота расположения люка: $H_{ц1} = 5025,0 + 300 = 5325,0$ мм.

Высота царги из 11 тарелок: $H_{ц2} = 11 * (h_p + e_p) = 5527,5$ мм.

С учетом высота расположения люка: $H_{ц2} = 5527,5 + 300 = 5827,5$ мм.

Принимается тогда:

$$H_{ц1} = 5300 \text{ мм. } H_{ц2} = 5800 \text{ мм.}$$

$$H_{рк} = H_{ц1} + H_{ц2} = 11100 \text{ мм.}$$

5.4.7 Размещение катализатора

На ситчатых тарелках катализатор может быть размещен в отдельных конвертах из тканой сетки, расположенных в направлении потока жидкости как показано на рисунке 5.9 [46]. Эти конверты полностью покрыты жидкостью, что обеспечивает достаточную степень контакта.

Также, в этом способе размещения пар проходит мимо катализатора, а не через его как в случае насадок; при этом влияние катализатора на перепад давления тарелки считается незначительным.

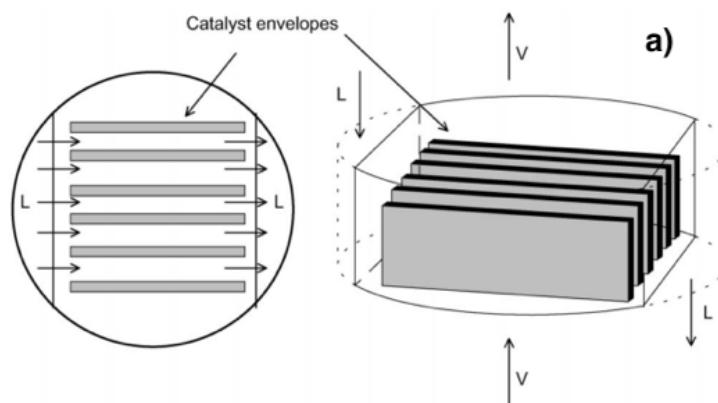


Рисунок 5.9 – Способ размещения катализатора на реакционной тарелке

Для расчета числа и объема конвертов принимается прямоугольная форма и используются следующие данные:

Расчетная масса катализатора на каждой тарелке $G_{\text{кат}} = 9 \text{ кг}$

Насыпная плотность катализатора $\rho_{\text{кат}} = 640,26 \text{ кг/м}^3$

Расчетная высота прозрачной жидкости на тарелке $h_l = 0,119 \text{ м}$

Длина прохода жидкости на тарелке $L = 1,08 \text{ м}$

При этом:

Принята длина одного конверта $L_{\text{конв}} = 0,50 \text{ м}$

Высота конверта $h_{\text{конв}} = 0,8h_l$ $h_{\text{конв}} = 0,095 \text{ м}$

Продольная площадь одного конверта $A_{\text{п,конв}} = 0,047 \text{ м}^2$

Необходимый объем катализатора на тарелке $V_{\text{кат}} = 0,014 \text{ м}^3$

Тогда число n и ширина $d_{\text{конв}}$ конвертов связаны уравнением (32),

$$V_{\text{кат}} = nd_{\text{конв}}A_{\text{п,конв}}, \quad (32)$$

Должно быть обеспечено достаточное расстояние между конвертами для прохода жидкости; с учетом длины сливной перегородки w :

$$w - nd_{\text{конв}} > 0, \quad (33)$$

Для $n = 5$ конвертов: $d_{\text{конв}} = 0,0596 \text{ м}$, от чего принимается: $d_{\text{конв}} = 6 \text{ см}$

При этом: $w - nd_{\text{конв}} = 1,22 > 0$

На рисунке 5.1 показана схема размещения и размеров конвертов.

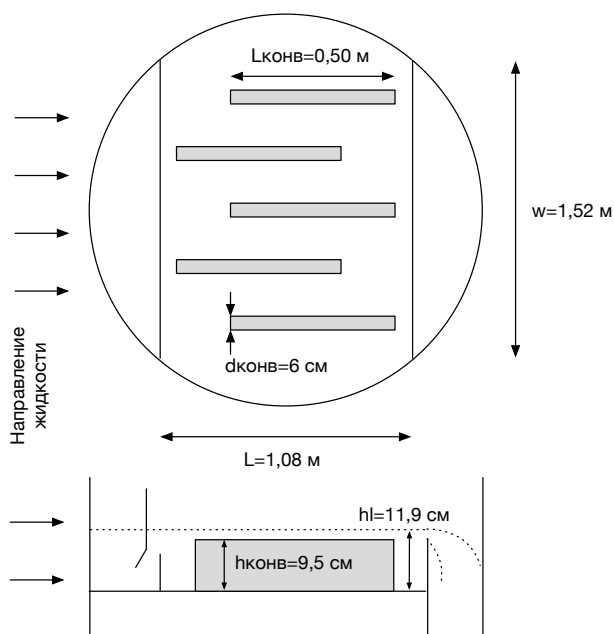


Рисунок 5.10 – Схема размещения катализатора на реакционной тарелке

5.4.8 Фланцы

Фланцы для штуцеров.

Присоединительные размеры фланцев для штуцеров заданы ГОСТ 1255-67 [25 с. 547, таб. 21.9] и приведены в таблице 5.9.

Таблица 5.9 – Техническая характеристика фланцев для, $p_y = 1,6$ МПа.

Поз,	D_y , мм	d_n , мм	D_ϕ , мм	D_δ , мм	D_1 , мм	БОЛТЫ		h , мм	масса, кг
						d_δ , мм	z		
1, 3, 6	100	108	215	180	158	M16	8	23	4,73
2	125	133	245	210	188	M16	8	25	6,38
4, 5, 7	150	159	280	240	212	M20	8	25	7,81

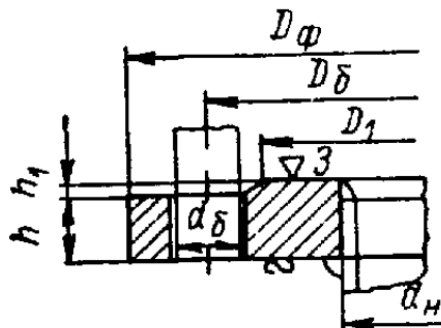


Рисунок 5.11 – Фланец по ГОСТ 1255-67

Фланцы для царг реакционной части.

Царги реакционной части присоединенные фланцами, необходимое количество которых составляет 6 для 2 царг. Согласно рекомендации [25 с, 554 таб, 21,12] принимаются фланцы для обечаек и днищ, с параметрами приведены в таблице 5.10.

Таблица 5.10. Техническая характеристика фланцев для царг реакционной части [45], $p_y = 1,6$ МПа.

D_B , мм	D_F , мм	D_6 , мм	D_T , мм	D_H , мм	S_{min} , мм	H , мм	h , мм	Болты		масса, кг	
								d_6 , мм	z	А	Б
1800	2025	1970	1902	1838	-	180	85	M30	64	581	610

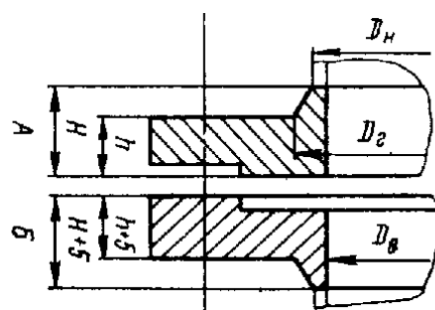


Рисунок 5.12 – Фланец для обечаек и днищ по рекомендации [45]

5.4.9 Опора

Согласно рекомендации [21 с. 877, таб. 49.4] аппараты диаметром 1000 – 3600 мм устанавливают на цилиндрические или конические опоры высотой 2000 мм если высота аппарата не превышает высоту в таблице 5.11.

Таблица 5.11 – Приведенные нагрузки колонных аппаратов [41].

Максимальная и минимальная приведенные нагрузки $\frac{Q_{max}}{Q_{min}}$, МН

Высота аппарата H , м, не более	Диаметр аппарата, мм																
	400	600	800	1000*	1200	1400	1600	1800	2000	2200	2400	2600	2800	3000	3200	3400	3600
10	$\frac{0,25}{0,2}$	$\frac{0,63}{0,32}$	$\frac{0,63}{0,5}$														
15			$\frac{0,63}{0,5}$				$\frac{1,6}{0,8}$										
20	$\frac{0,25}{1,25}$ при раскреплении колонны		$\frac{0,25}{1,25}$		$\frac{1,6}{1,32}$												
30					$\frac{2,5}{2}$	$\frac{4}{2,5}$		$\frac{4}{2}$									
40											$\frac{6,3}{4}$	$\frac{6,3}{5}$					
50											$\frac{10}{6,3}$		$\frac{10}{8}$				
* При высоте аппарата свыше 20 м и до 23 м включительно приведенные нагрузки $\frac{Q_{max}}{Q_{min}} = \frac{1,6}{1,32}$ МН.																	

Для выбора опоры, из таблицы 5.11 для $D = 1800$ мм и $H = 30$ м определяются максимальная и минимальная приведенные нагрузки:

$$Q_{max} = 4 \text{ МН}; Q_{min} = 2,5 \text{ МН}$$

Согласно со стандартом АТК 24,200,04-90 (действующий) выбирается коническая опора типа 4, размеры которой приведены в таблице 5.12.

Таблица 5.12 – Основные размеры конической опоры типа 4

D, мм	D ₁ , мм	D ₂ , мм	D ₃ , мм	D ₄ , мм	s ₁ , мм	s ₂ , мм	s ₃ , мм	d, мм	Фунд. Болт ГОСТ 24379.1-80	
									Диаметр резьбы	Кол-во.
1800	2250	2580	2720	2400	16	36	30	65	42	16

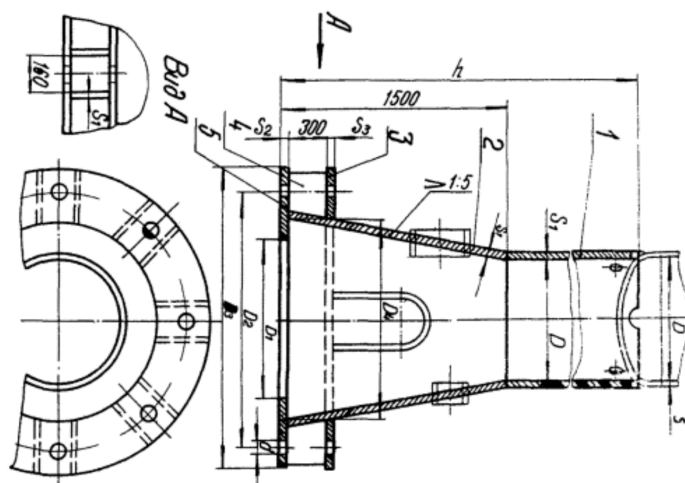


Рисунок 5.13 – Опора коническая с кольцевым опорным поясом

На рисунке 5.13:

1. Обечайка.
2. Обечайка коническая.
3. Кольцо верхнее.
4. Ребро.
5. Кольцо нижнее.

5.4.10 Тепловая изоляция

Толщина тепловой изоляции определяется равенством удельных тепловых потоков через слой изоляции от поверхности изоляции в окружающую среду [47]:

$$\alpha_B(T_{ст2} - T_B) = (\lambda_{и}/\delta_{и})(T_{ст1} - T_{ст2}), \quad (34)$$

где $\alpha_B = 9,3 + 0,058 T_{ст2}$ - коэффициент теплоотдачи от внешней поверхности изоляционного материала в окружающую среду, Вт/м²*К;

$T_{ст2}$ - температура изоляции со стороны окружающей среды, К;

$T_{ст1}$ - температура изоляции со стороны аппарата, К;

$T_{ст1} = T_{гр\ пара}$; T_B - температура окружающей среды = - 20 °С;

$\lambda_{и}$ - коэффициент теплопроводности изоляционного материала, Вт/м·К;

$\delta_{и}$ - толщина тепловой изоляции, м.

Коэффициент теплоотдачи для $T_{ст2} = 20$ °С:

$$\alpha_B = 12,2 \text{ Вт/ м}^2 \cdot \text{К}$$

В качестве материала для тепловой изоляции выбран совелит (85 % магнезии + 15 % асбеста), имеющей коэффициент теплопроводности $\lambda_{и} = 0,09$ Вт/м·К, [47],

При $T_{ст1} = 150$ °С и $T_{ст2} = 20$ °С толщина тепловой изоляции равна:

$$\delta_{и} = 0,03 \text{ м} \equiv 30 \text{ мм.}$$

Сборочный чертеж реакционно-ректификационной колонны и соответствующая спецификация приведены в приложении Е.

5.5 Автоматизация и управление процессом

Стратегия управления процессом для реакционной ректификационной колонны ориентирована на поддержание максимальной степени превращения изобутилена и чистоты ЭТБЭ. Схема автоматизации приведена на рисунке 5.14.

Постоянное измерение данных величин требует значительного объема данных. Исследованиями [8], [32] было показано, что разность температур реакционной части и температура нижней части колонны могут служить достаточно точными показателями степени превращения ИБ и чистоты ЭТБЭ, и в то же время описывать их линейным образом в окрестности их максимальных значений (рис. 4.2).

Это позволяет, несмотря на явно нелинейный характер процесса, основывать управление на простом элементе линейного прогностического контроля (MPC).

Исходной информацией к элементу MPC 11 является разность температур между началом и концом реакционной части – тарелки 22 и 42 – и температура нижней части колонны – тарелка 46 –. Регулируют расход флегмы из емкости сбора дистиллята E-2 клапаном поз. 11/2 и расход водяного пара в кипятильник T-1 клапаном поз. 11/1.

Расход оборотной охлаждающей воды в конденсатор T-2 регулируется давлением в емкости E-2 элементом PRC 15. Расход дистиллята регулируется уровнем жидкости в той же емкости элементом LRC 16. Расход и состав флегмы в колонну K-1 регистрируется элементами FR 14 и QR 15.

Для случаев крупного повышения температуры реакционной части предназначена сигнализация элементом TRSA 10 по верхнему предупредительному уровню 95 °С и с выключением расхода пара в кипятильник T-1 поз. 10 по верхнему аварийному уровню 100 °С. Перепад давления через реакционную часть регистрируется элементом PDR 17 и предназначена сигнализация по верхнему предупредительному уровню

элементом PDA 17. Температура и давление разных точек регистрируется элементами TR 12 и PR 18.

Расход питания регулируется уровнем жидкости в емкости сбора продуктов из реактора P-1 элементом LRC 1. Регистрируют его состав и расход элементами QR 18 и FR 2. Расход вторичного этанола регулируется элементом FRC 9.

Расход товарного ЭТБЭ регулируется уровнем жидкости в кубе колонны К-1 элементом LRC 3; расход и состав регистрируют элементами QR 5 и FR 4.

Состав бокового отбора регистрируют элементом QR 7 и его расход регулируется элементом FRC 8.

Подборка датчиков системы управления приведена в приложении 3.

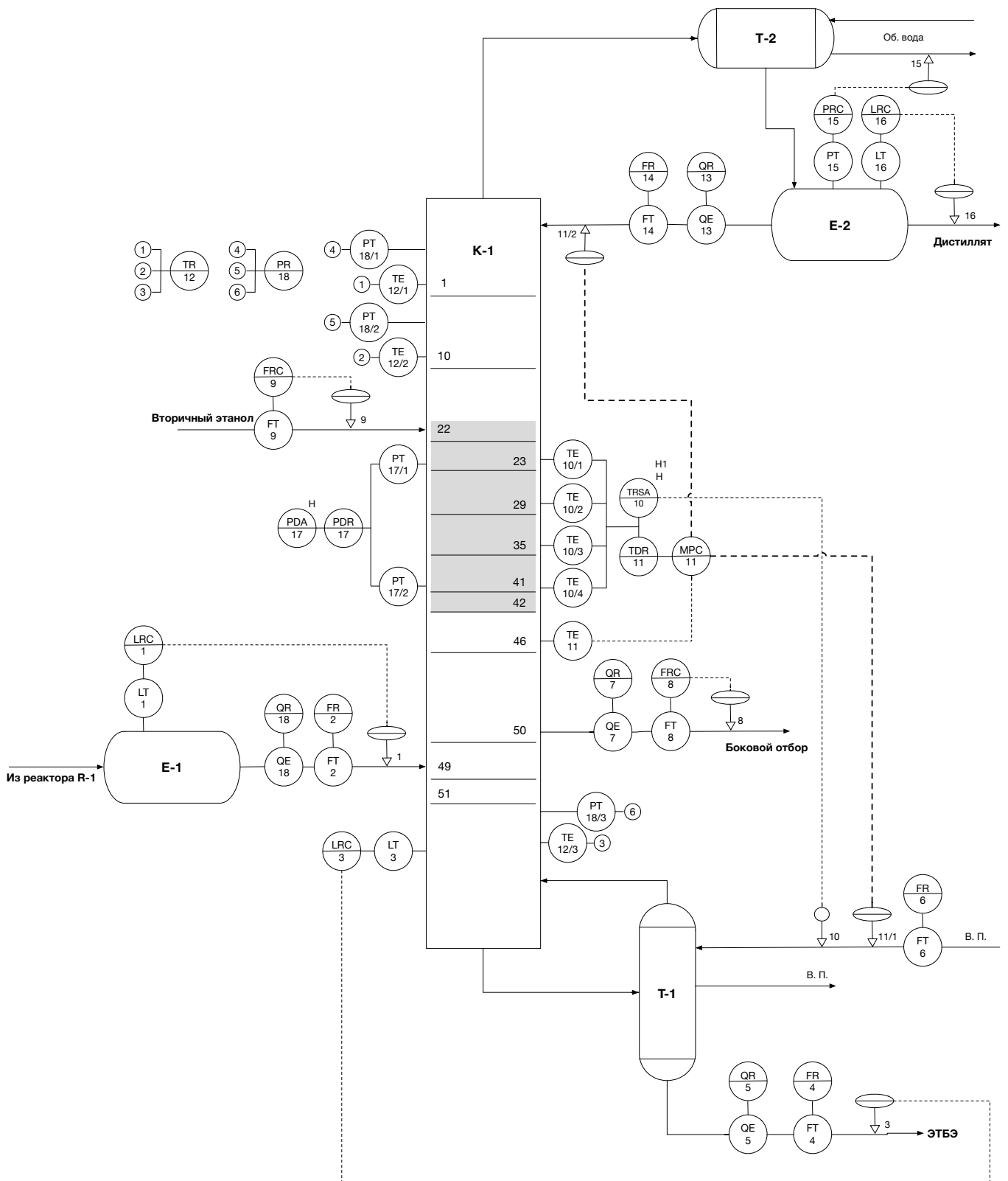


Рисунок 5.14 – Схема автоматизации и управления процессом

6 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

Данный раздел дипломной работы посвящен обоснованию целесообразности способа оптимального проектирования химико-технологических процессов, разработанного при изучении реакционно-ректификационного процесса для синтеза этил-трет-бутилового эфира (ЭТБЭ).

Выполнение выпускной квалификационной работы проводилось в Инженерной Школе Природных Ресурсов (ИШПР) Томского Политехнического Университета (ТПУ) в отделении химической инженерии.

Выпускная квалификационная работа заключалась в оптимизации технологической схемы реакционно-ректификационного процесса для синтеза ЭТБЭ и проектирование соответствующей реакционно-ректификационной колонны. В ходе работы был разработан способ оптимизации, который может быть применен в оптимизации общих химико-технологических процессов.

Работа была проведена с использованием программных продуктов Aspen Plus и Microsoft Excel. Область применения – нефтеперерабатывающая промышленность. Основными средствами для выполнения выпускной квалификационной работы являлись персональный компьютер и локальная вычислительная сеть с выходом в Интернет.

6.1 Предпроектный анализ

6.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

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

Целевой рынок – сегменты рынка, на котором будет продаваться в будущем разработка. В свою очередь, сегмент рынка – это особым образом

выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками.

Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга). Можно применять географический, демографический, поведенческий и иные критерии сегментирования рынка потребителей, возможно применение их комбинаций с использованием таких характеристик, как возраст, пол, национальность, образование, любимые занятия, стиль жизни, социальная принадлежность, профессия, уровень дохода.

Критерием сегментирования может служить вид оказываемых услуг с применением разработанного способа оптимизации.

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

Лидирующие позиции в настоящее время занимают продукты компаний SimulationSciences (SimSci), AspenTechnologies и Hysprotech. Программные продукты данных компаний: Hysys и Hysim, Pro II и ProVision, Aspen Plus и Speed UP ориентированы на моделирование процессов не только промышленной подготовки нефти и газа, но и на процессы химической 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.

На рисунке 6.1 представлена карта сегментирования рынка по виду оказываемой услуги с применением математической модели процесса реакционной ректификации для синтеза ЭТБЭ.

Потребитель	Вид услуги		
	Продажа программного продукта	Оказание услуг по мониторингу и оптимизации	Продажа тренажера
Крупные НПЗ			
Средние НПЗ			
Малые НПЗ			
Образовательные учреждения			
Проектные организации			

SimSci
 AspenTechnologies
 Hyprotech

Рисунок 6.1 – Карта сегментирования рынка услуг

6.1.2 Диаграмма Исикавы

Диаграмма причины-следствия Исикавы (Cause-and-Effect-Diagram) - это графический метод анализа и формирования причинно-следственных связей, инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления.

Область применения диаграммы:

Выявление причин возникновения проблемы;

Анализ и структурирование процессов на предприятии;

Оценка причинно-следственных связей.

Для построения диаграммы нужно обозначить проблему. Проблема синтеза ЭТБЭ заключается в том, что реакция и разделение продуктов происходят одновременно в одном и том же аппарате. Поэтому необходимо обеспечить одновременно высокую степень превращения и степень разделения целевого продукта одновременно.

Затем выявляются факторы/группы факторов, влияющие на объект анализа. В данном случае выделены следующие факторы, влияющие на проблему:

- персонал;
- оборудование;
- сырье, материалы, комплектующие;
- технология проведения работ;
- условия труда;
- дополнительные химические реагенты.

Выявленные факторы подводят к стрелкам диаграммы первого уровня. Полученная диаграмма Исикавы приведена в приложении И.

6.1.3 Методы коммерциализации результатов исследования

При коммерциализации научно-технических разработок продавец (а это, как правило, владелец соответствующих объектов интеллектуальной собственности), преследует вполне определенную цель, которая во многом зависит от того, куда в последующем он намерен направить (использовать, вложить) полученный коммерческий эффект. Это может быть получение средств для продолжения своих научных исследований и разработок (получение финансирования, оборудования, уникальных материалов, других научно-технических разработок и т.д.), одноразовое получение финансовых ресурсов для каких-либо целей или для накопления, обеспечение постоянного притока финансовых средств, а также их различные сочетания.

Для продвижения товара на рынке необходимо правильно выбрать метод коммерциализации.

Разработанный способ оптимизации позволяет:

- оптимизировать действующие технологические производства;

- снизить капитальные и эксплуатационные затраты за счет экономии отдельных аппаратов;
- усовершенствовать имеющиеся технологические производства;
- внедрить совершенно новую технологию в действующее производство.

Поэтому для данного программного продукта подходит *инжиниринг*. Он предполагает предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной, именуемой консультантом, другой стороне, именуемой заказчиком, комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг.

Такое сотрудничество позволит постоянно исследовать данную проблему и внедрять новые разработки.

6.2 Инициация проекта

Инициация проекта состоит из процессов, которые выполняются для нового проекта или новой стадии проекта. Для этого определяются начальные цели, содержание, фиксируются ресурсы. Также определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта. Заинтересованные стороны проекта отображены в таблице 6.1.

Таблица 6.1 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ, ИШПР, отделение химической инженерии	Реализация способа оптимизации с дальнейшей возможностью проведения исследований на нем

В таблице 6.2 представлена информация о целях проекта, критериях достижения целей, а также требования к результатам проекта.

Таблица 6.2 – Цели проекта

Цели проекта	Оптимизация процесса реакционной ректификации для синтеза ЭТБЭ
Ожидаемые результаты проекта	Моделирование процесса с помощью Aspen Plus. Способ оптимизации химико-технологических процессов. Проектирование реакционно-ректификационного аппарата
Критерии приемки результата проекта	Функционирующий способ оптимизации
Требования к результату проекта	Эффективность способа, возможность использования на действующем производстве и внедрение новой технологии

Рабочая группа проекта отображена в таблице 6.3.

Таблица 6.3 – Рабочая группа проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, ч
Самборская Марина Анатольевна, НИ ТПУ, доцент отделения химической инженерии ИШПР	Руководитель проекта	Консультирование, определение задач, контроль выполнения	180
Карлос Энрике Гарсия Серпас, студент гр. 2КМ61	Исполнитель по проекту	Анализ литературных источников, разработка математической модели, программирование, эксперименты	980
Креницына Зоя Васильевна, НИ ТПУ, отделение социально – гуманитарных наук ШИП, доцент	Руководитель проекта по разделу «Ресурсоэффективность и финансовый менеджмент»	Консультирует выполнение раздела «Ресурсоэффективность и финансовый менеджмент»	2
Авдеева Ирина Ивановна, ассистент	Руководитель проекта по разделу «Социальная ответственность»	Консультирует выполнение раздела «Социальная ответственность»	2
Сыскина Анна Александровна, доцент отделения иностранных языков	Руководитель проекта раздела ВКР на английском языке	Консультирует выполнение раздела ВКР на английском языке	2
Итого:			1346

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» - параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта. В таблице 6.4 приведены всевозможные ограничения научно – технического исследования.

Таблица 6.4 – Ограничения проекта

№	Фактор	Ограничения / допущения
1	Бюджет проекта	–
2	Источник финансирования	–
3	Сроки проекта	01.09.2016 – 08.06.2018 г
4	Дата утверждения плана управления проектом	01.09.2016 г
	Дата завершения проекта	08.06.2018 г

6.3 Планирование управления научно-техническим проектом

6.3.1 Разработка графика проведения научного исследования

В данном разделе составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, проведено распределение исполнителей по видам работ. Примерный порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в таблице 6.5.

Таблица 6.5 – 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	Руководитель, Магистр
	3	Календарное планирование работ по теме	Руководитель

Продолжение таблицы 6.5

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Выбор направления исследований	4	Изучение литературы: назначение процесса, исследование современных методов для реализации математической модели	Магистр
	5	Разработка математической модели	Магистр
	6	Расчет влияния основных технологических параметров на эффективность процесса	Магистр
	7	Оценка эффективности полученных результатов	Магистр
	8	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель
Обобщение и оценка результатов	9	Составление пояснительной записки	Магистр
<i>Проведение ОКР</i>			
Оформление отчета по НИР (комплекта документации по ОКР)	10	Подготовка к защите дипломной работы	Магистр
	11	Защита дипломной работы	Магистр, руководитель

6.4 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета НИИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением. В процессе формирования бюджета НИИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НИИ;
- затраты на специальное оборудование для научных работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

Расчет материальных затрат НИИ.

Данная статья включает стоимость всех материалов, используемых при разработке проекта:

- приобретаемые со стороны сырье и материалы, необходимые для создания научно-технической продукции.

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_M = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{\text{расх } i}, \quad (35)$$

где m - количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{\text{расх } i}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м² и т.д.);

C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м² и т.д.);

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы. Транспортные расходы принимаются в пределах 15-25% от стоимости материалов. Материальные затраты, необходимые для данной разработки записаны в таблице 6.6.

Таблица 6.6 – Материальные затраты

Наименование	Ед. Изм.	Количество			Цена за единицу, руб			Затраты на материалы, Z_M , руб		
		ИСП. 1	ИСП. 2	ИСП. 3	ИСП. 1	ИСП. 2	ИСП. 3	ИСП. 1	ИСП. 2	ИСП. 3
Бумага	уп	2	2	2	200	250	270	400	500	540
Карандаш	шт	1	1	1	40	50	70	40	50	70
Ручка	шт	3	3	3	30	50	70	90	150	210
Флэш – карта	шт	1	1	1	500	700	1000	500	700	1000
Итого, тыс. руб.								1030	1400	1820

Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ.

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме. При приобретении спецоборудования необходимо учесть затраты по его доставке и монтажу в размере 15% от его цены. Все расчеты по приобретению спецоборудования и оборудования, имеющегося в организации, но используемого для каждого исполнения конкретной темы, сводятся в таблицу 6.7.

Таблица 6.7 – Первоначальная стоимость спецоборудования для научных работ

Наименование	Ед. Изм.	Количество			Цена за единицу, руб			Затраты на спецоборудования, $Z_{\text{спец}}$, руб		
		ИСП. 1	ИСП. 2	ИСП. 3	ИСП. 1	ИСП. 2	ИСП. 3	ИСП.1	ИСП.2	ИСП.3
Компьютер	шт	1	1	1	30000	32000	35000	30000	32000	35000
Принтер	шт	1	1	1	7000	10000	9000	7000	10000	9000
Программное обеспечение Microsoft Office	шт	1	1	1	3399	3399	3399	3399	3399	3399
Программное обеспечение Aspen Plus	шт	1	1	1	70000	70000	70000	70000	70000	70000
Итого, тыс. руб.								110399	115399	117399

Для учета стоимости данного программного обеспечения с учетом времени использования, произведем расчет амортизационных отчислений. Учитывая, что срок полезного использования составляет 5 лет, можно рассчитать:

$$N_a = \frac{100\%}{5 \text{ лет}} = 20\% - \text{годовая норма амортизации,}$$

$N_a^r = C \cdot N_a$ – ежегодная сумма амортизации,

$N_a^m = \frac{N_a^r}{12 \text{ месяцев}}$ – ежемесячная сумма амортизации.

Стоимость по статье составит:

$$C = N_a^m \cdot n, \quad (36)$$

где n – количество месяцев, когда использовался продукт.

В данном случае $n = 19$ месяцев.

Таблица 6.8 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование	Ед. Изм.	Количество			Затраты на спецоборудования, $Z_{\text{спец}}$, руб		
		ИСП.1	ИСП.2	ИСП.3	ИСП.1	ИСП.2	ИСП.3
Компьютер	шт	1	1	1	9500	10133	11083
Принтер	шт	1	1	1	2217	3167	2850
Программное обеспечение Microsoft Office	шт	1	1	1	1076	1076	1076
Программное обеспечение Aspen Plus	шт	1	1	1	22167	22167	22167
Итого:					34960	36543	37176

Основная заработная плата исполнителей темы.

Основная заработная плата руководителя (от ТПУ) рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы:

1) оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями. Доцент - 28900 руб, магистрант – 1854 руб.

2) стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд, выполнение дополнительных обязанностей и т.д.

3) иные выплаты; районный коэффициент. 1,3.

$$Z_{\text{м}}^{\text{доцент}} = \text{Оклад} \cdot k_p = 28900 \cdot 1,3 = 37570 \text{ руб.}$$

$$Z_{\text{м}}^{\text{магистр}} = \text{Оклад} \cdot k_p = 1854 \cdot 1,3 = 2410 \text{ руб.}$$

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}}^{\text{доцент}} = \frac{Z_{\text{м}}^{\text{доцент}} \cdot M}{F_{\text{д}}} = \frac{37570 \cdot 11,2}{436} = 965 \text{ руб.};$$

$$Z_{\text{дн}}^{\text{магистр}} = \frac{Z_{\text{м}}^{\text{магистр}} \cdot M}{F_{\text{д}}} = \frac{2410 \cdot 10,4}{436} = 57,5 \text{ руб.},$$

$Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 48 раб. дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя; при отпуске в 24 раб. дней $M=11,2$ месяца, 5-дневная неделя

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 6.9).

Таблица 6.9 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Исполнитель	Руководитель
Календарное число дней	646	140
Количество нерабочих дней: выходные и праздничные дни	210	50
Потери рабочего времени -отпуск -невыходы по болезни	-	-
Действительный годовой фонд рабочего времени	436	90

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}}^{\text{доцент}} = Z_{\text{дн}}^{\text{доцент}} \cdot T_p = 965 \cdot 90 = 86850 \text{ руб.}$$

$$Z_{\text{осн}}^{\text{магистр}} = Z_{\text{дн}}^{\text{магистр}} \cdot T_p = 57,5 \cdot 436 = 25070 \text{ руб}$$

$Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (37)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата;

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12-20 % от $Z_{осн}$).

$$Z_{зп}^{доцент} = (15\% \cdot 86850) + 86850 = 13027,5 + 86850 = 99877,5 \text{ руб.}$$

$$Z_{зп}^{магистр} = (15\% \cdot 25070) + 25070 = 3760,5 + 25070 = 28830,5 \text{ руб.}$$

Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}), \quad (38)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.). 27,1%.

$$Z_{внеб}^{доцент} = 27,1\% \cdot 99877,5 = 27066,8 \text{ руб.}$$

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 6.10.

Таблица 6.10 – Расчёт бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		
	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Материальные затраты НТИ	1030	1400	1820
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	110399	115399	117399
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	86850	86850	86850
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	13027,5	13027,5	13027,5
5. Отчисления во внебюджетные фонды	27066,8	27066,8	27066,8
6. Бюджет затрат НТИ	225345,8	230715,8	233135,8

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

6.5.1 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{ИСП.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (39)$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{ИСП.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{p1} – стоимость i -го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

$$I_{\text{финр}}^{\text{ИСП.1}} = \frac{\Phi_{p1}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{225346}{233136} = 0,97;$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{ИСП.2}} = \frac{\Phi_{p2}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{230716}{233136} = 0,99;$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{ИСП.3}} = \frac{\Phi_{p3}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{233136}{233136} = 1.$$

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в разгах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в разгах (значение меньше единицы, но больше нуля).

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (40)$$

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности проводится в таблице 6.11.

Таблица 6.11 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	ИСП.1	ИСП.2	ИСП.3
1. Простота разработанного способа оптимизации	0,1	4	4	5
2. Удобство в эксплуатации	0,2	4	3	5
3. Универсальность	0,01	5	5	4
4. Унифицированность	0,24	5	5	3
5. Адекватность полученных результатов	0,25	4	4	4
6. Скорость расчетов	0,2	5	5	4
ИТОГО	1	4,45	4,25	4,06

$$I_{p.\text{исп.1}} = 0,1 \cdot 4 + 0,2 \cdot 4 + 0,01 \cdot 5 + 0,24 \cdot 5 + 0,25 \cdot 4 + 0,2 \cdot 5 = 4,45;$$

$$I_{p.\text{исп.2}} = 0,1 \cdot 4 + 0,2 \cdot 3 + 0,01 \cdot 5 + 0,24 \cdot 5 + 0,25 \cdot 4 + 0,2 \cdot 5 = 4,25;$$

$$I_{p.\text{исп.3}} = 0,1 \cdot 5 + 0,2 \cdot 5 + 0,01 \cdot 4 + 0,24 \cdot 3 + 0,25 \cdot 4 + 0,2 \cdot 4 = 4,06.$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{\text{исп.}i} = \frac{I_{p.\text{исп.}i}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}}, \quad (41)$$

$$I_{\text{исп.1}} = \frac{I_{p.\text{исп.1}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.1}}} = \frac{4,45}{0,97} = 4,59;$$

$$I_{\text{исп.2}} = \frac{I_{p.\text{исп.2}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.2}}} = \frac{4,25}{0,99} = 4,29;$$

$$I_{\text{исп.3}} = \frac{I_{p.\text{исп.3}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.3}}} = \frac{4,06}{1} = 4,06.$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (таблица 6.12) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{\text{ср}}$):

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{исп.2}}}{I_{\text{исп.1}}} = \frac{4,29}{4,59} = 0,93.$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{исп.3}}}{I_{\text{исп.2}}} = \frac{4,06}{4,29} = 0,95.$$

Таблица 6.12 – Сравнительная эффективность разработки

№	Показатели	ИСП.1	ИСП.2	ИСП.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,97	0,99	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,45	4,25	4,06
3	Интегральный показатель эффективности	4,59	4,29	4,06
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,93	0,95

В ходе выполнения данного раздела были определены финансовый показатель разработки, показатель ресурсоэффективности, интегральный показатель эффективности и, на основании сравнительной эффективности вариантов исполнения, оптимальным был выбран вариант исполнения 1.

7 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

7.1 Введение

Данный раздел дипломной работы посвящен исследованию оптимальных условий труда инженера. В качестве объекта исследования выступают рабочее место инженера – оператора и помещение, в котором оно находится.

Выполнение выпускной квалификационной работы проводилось в Инженерной школе природных ресурсов (ИШПР) Томского Политехнического Университета (ТПУ) в отделении химической инженерии. Выпускная квалификационная работа заключалась в разработке математической модели реакционно – ректификационного процесса для синтеза этил – трет – бутилового эфира. Область применения – нефтеперерабатывающая промышленность.

Основными средствами для выполнения выпускной квалификационной работы являлись персональный компьютер и локальная вычислительная сеть с выходом в Интернет.

7.2 Производственная безопасность

Производственная безопасность определяется как комплекс мероприятий по обеспечению безопасности в случае возникновения опасных факторов и включает в себя электробезопасность, безопасную эксплуатацию оборудования, безопасное протекание технологических процессов, безопасность перемещения грузов и безопасность перемещения персонала по территории предприятия.

7.3 Анализ опасных и вредных производственных факторов

Наиболее вредные производственные факторы –повышенная или пониженная температура воздуха рабочей зоны, повышенные уровни шума и вибрации на рабочем месте, недостаточная освещенность рабочих зон, взрывы, пожары и др.– могут возникнуть при обслуживании технологического процесса.

7.3.1 Вредные вещества

В результате реакционной ректификации происходит реакция, а затем разделение продуктов. В таблице 7.1 представлен перечень вредных веществ и класс опасности, а также характеристика их токсичности согласно ГОСТ 12.1.0076. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.

Таблица 7.1 – Характеристика вредных веществ

Наименование вещества	Величина ПДК в воздухе рабочей зоны, мг/м ³	Класс опасности	Характеристика токсичности
Двуокись азота	0,085	2	При высоких концентрациях бурый газ с удушливым запахом. Действует как острый раздражитель. Однако при тех концентрациях, которые присутствуют в атмосфере, NO ₂ является скорее потенциальным раздражителем и только потенциально ее можно сравнивать с хроническими легочными заболеваниями.
Оксид углерода (II)	20	4	Угарный газ очень опасен, так как не имеет запаха и вызывает отравление и даже смерть. Признаки отравления: головная боль и головокружение; одышка, учащённое сердцебиение, мерцание перед глазами, покраснение лица, общая слабость, тошнота, в тяжёлых случаях судороги, потеря сознания.

Продолжение таблицы 7.1

Наименование вещества	Величина ПДК в воздухе рабочей зоны, мг/м ³	Класс опасности	Характеристика токсичности
Оксид серы (IV)	10	2	SO ₂ очень токсичен. Симптомы при отравлении сернистым газом — насморк, кашель, охриплость, сильное першение в горле и своеобразный привкус. При вдыхании сернистого газа более высокой концентрации — удушье, расстройство речи, затруднение глотания, рвота, возможен острый отёк лёгких. При кратковременном вдыхании оказывает сильное раздражающее действие, вызывает кашель и першение в горле.
Изобутилен	100	4	изобутилен токсичен; при этом интенсивность действия зависит от индивидуальных особенностей организма и концентрации изобутилена. Начальные признаки отравления проявляются в расстройстве желудка, а несколько позднее — в головных болях и тошноте. Дальнейшая стадия характеризуется расстройством зрения и потерей сознания. Длительное пребывание в загазованном помещении может привести к смертельному исходу.

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).
- для защиты кожи рук применяют защитные рукавицы, мази и пасты по ГОСТ 12.4.068.

7.3.2 Показатели микроклимата на рабочем месте

Основными параметрами микроклимата является температура, относительная влажность и скорость воздуха. Микроклимат оказывает влияние на самочувствие человека, его трудоспособность и протекания физиологических процессов.

В ходе технологического процесса необходимо поддержание достаточно высокой температуры в колонне (температура куба колонны около 150 °С). От повышенной температуры повышается температура воздуха, следовательно, уменьшается относительная влажность в помещении.

Для оценки метеоусловий в помещениях производят измерения температуры, влажности, запыленности, скорости движения воздуха. Результаты измерения сравнивают с нормативами ГОСТ 12.1.005-88.

Выполняемая работа относится к категории Ia, для которой определены оптимальные и допустимые границы основных параметров микроклимата по ГОСТ 12.1.005, которые приведены в таблице 7.2.

Таблица 7.2 – Допустимые параметры микроклимата на рабочем месте

Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	19-21 (23)	18-22 (24)	60 - 40 (15 – 75)	0,2 (0,3)
Тёплый	20-22 (27)	19-23 (28)		

Физиологически оптимальной является относительная влажность 40–60 %. Относительная влажность менее 25 % приводит к высыханию слизистых оболочек и снижению защитной деятельности мерцательного эпителия верхних дыхательных путей, что приводит к ослаблению организма и снижается работоспособность. Рекомендуется устанавливать системы охлаждения воздуха для поддержания относительной влажности в оптимальных пределах.

7.3.3 Освещенность рабочего места

Освещённость на рабочем месте составляет 300...500 лк, для помещений, в которых эксплуатируются персональные компьютеры и видеодисплейные терминалы; для работников вычислительных центров – 750 лк. Согласно с нормативом ГОСТ Р 55710 – 2013 предусмотрены следующие ограничения по блескности от источников освещения: яркость светящихся поверхностей в поле зрения не больше 200 кд/м²; яркость бликов на экране видеодисплейных терминалов и персональных компьютеров не больше 40 кд/м²; яркость потолка, при применении системы отраженного освещения, не больше 200 кд/м².

7.3.4 Повышенный уровень производственной вибрации и шума

Основными источниками вибрации являются насосы.

Допустимые нормы вибрации при работе в насосной составляют 60 - 75 дБ. Для ослабления колебаний применяют виброгасители и виброизоляторы (СН 2.2.4/2.1.8.566).

Уровень шума соответствует ГОСТ 12.1.003 – 83; согласно с данным нормативом, для снижения шума в помещениях проводятся следующие основные мероприятия:

1. Уменьшение уровня шума в источнике его возникновения;
2. Звукопоглощение и звукоизоляция;
3. Установка глушителей шума;
4. Рациональное размещение оборудования.

Работникам рекомендуется использовать вкладыши для защиты органов слуха.

7.3.5 Механические опасности

Для того чтобы защитить себя от травм на производстве, работники обязаны строго соблюдать все инструкции по эксплуатации оборудования, все правила поведения на производственной площадке.

Во время нахождения в опасной зоне использовать защитную одежду, перчатки, очки, каску.

В случае механической опасности, работники должны как можно быстрее на нее среагировать и принять все необходимые меры для ее устранения.

7.3.6 Электробезопасность

Электробезопасность - система организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного воздействия электрического тока, электрической дуги, электромагнитного поля и статического электричества.

Факторами опасного и вредного воздействия на человека, связанными с использованием электрической энергии, являются [48]:

1. Протекание электрического тока через организм человека;
2. Воздействие электрической дуги;
3. Воздействие электростатического поля;
4. Воздействие электромагнитного излучения (ЭМИ).

Чтобы избежать негативных последствий воздействия электрического поля на организм человека, необходимо:

1. Содержать установки в работоспособном состоянии, эксплуатировать в соответствии с требованиями нормативно-технических документов.
2. Своевременно проводить техническое обслуживание, ремонт и испытания.
3. Подобрать электротехнологический персонал.

4. Обеспечить надёжность работы и безопасность эксплуатации электроустановок.

Также применяется защитное заземление - преднамеренное электрическое соединение с землей или ее эквивалентом металлических нетоковедущих частей, которые могут оказаться под напряжением вследствие замыкания на корпус и по другим причинам (индуктивное влияние, вынос потенциала и т.п.), и зануление - преднамеренное соединение металлических нетоковедущих частей электроустановок, которые могут оказаться под напряжением вследствие пробоя изоляции, с нулевым защитным проводником [49].

7.3.7 Термические опасности

Анализируя факторы рабочей зоны на предмет выявления опасных проявлений, определено, что в производстве возможно термическое травмирование от оборудования, имеющего высокую температуру – колонны и горячих трубопроводов.

Меры предосторожности – соблюдение правил техники безопасности, использование специальной защитной одежды.

7.3.8 Психофизиологические производственные факторы

Психофизиологические опасные и вредные производственные факторы по характеру действия подразделяются на физические и нервно-психические перегрузки. Физические перегрузки подразделяются на статические и динамические, а нервно-психологические — на умственное перенапряжение, перенапряжение анализаторов, монотонность труда, эмоциональные перегрузки.

Повторные проверки местных измерительных приборов и элементов ручного действия, вместе с частым принятием сложных решений по

управлению процесса являются физическими и нервно-психологическими перегрузками.

В реакционно-ректификационном процессе применены системы автоматизации и управления с использованием экспертными вычислительными элементами. Данные системы применяют дистанционную передачу данных и способны отдавать персоналу оптимизированные рекомендации по управлению процессом в случаях возникновения неполадок, что эффективно минимизирует психофизиологические перегрузки.

7.4 Мероприятия по защите от опасных и вредных факторов

Обязательными условиями ведения процесса, исключающими возможность возникновения аварий и обеспечивающими нормальные санитарно – гигиенические условия труда являются:

- эксплуатация оборудования и аппаратов в соответствии с требованиями технологического регламента,
- работа только на исправном оборудовании (технологическом, электрооборудовании, контрольно-измерительных приборах),
- строгое соблюдение правил проведения всех видов ремонтных работ,
- обеспечение герметичности всех систем трубопроводов,
- контроль за содержанием взрывоопасных газов в воздухе рабочих помещений,
- исправность системы дистанционного и автоматического регулирования, сигнальных устройств,
- теплоизоляция всех аппаратов, процесс в которых проводится при повышенных температурах, а также трубопроводов горячих паров и жидкостей.

7.5 Экологическая безопасность

Производство этил – трет – бутилового эфира не является безотходным процессом. Экология этого производства включает в себя проблемы загрязнения атмосферы, гидросферы и литосферы.

7.5.1 Анализ воздействия разработки на биосферу

Для промышленных объектов и производств, сооружений, являющихся источниками воздействия на среду обитания и здоровья человека устанавливаются следующие ориентировочные размеры санитарно – защитных зон:

- промышленный объект по переработке нефти относится к первому классу опасности - 1000 м.

7.5.2 Воздействие на атмосферу

Основные источники загрязнения – это выбросы вредных веществ в атмосферу. При сжигании топлива для получения нагревательного пара в атмосферу выбрасываются следующие загрязняющие вещества [50]:

- Диоксид азота;
- Оксид серы;
- Твердые частицы;
- Оксид углерода;
- Летучие органические вещества.

С целью охраны воздушного бассейна, выполняются следующие технологические мероприятия, обеспечивающие минимальные выбросы в атмосферу [51]:

- использовать очистку газа от токсичных веществ на абсорбционных установках;
- воздух, с компрессорных установок проходит очистку в центробежных циклонах, после чего сбрасывается в атмосферу;
- использование котлов утилизаторов для использования тепла отходящих газов с целью снижения теплового загрязнения атмосферы.

7.5.3 Воздействие на гидросферу

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

- сброс токсичных веществ в водоемы и сточные воды.

Для предотвращения попадания вредных веществ в водоемы за пределы производственной площадки, предусмотрено:

- обвалование площадок, где возможен разлив продукта;

Сточные воды канализации проходят механическую очистку и доочистку на биологических очистных сооружениях завода [52].

7.5.4 Воздействие на литосферу

На данном производстве осуществляется ежегодный плановый ремонт оборудования и чистка трубопроводов, реакторных устройств. Утилизация твердых отходов (отработанного катализатора) оказывает негативное влияние на литосферу. Для утилизации необходимо проводить захоронение на специальных полигонах для промышленных отходов. В таблице 7.3 приведены виды отходов и способы их утилизации.

Таблица 7.3 – Виды отходов и способы их утилизации

Наименование отхода	Способ хранения отхода	Способ утилизации
Лампы ртутные, ртутно-кварцевые, люминесцентные, утратившие потребительские свойства	В закрытой таре отдельно (тара завода – изготовителя)	Накопление осуществляется на месте образования на специально отведенном для этого складе. Далее отходы передают на демеркуризацию (обезвреживание)
Спецодежда из натуральных, синтетических, искусственных и шерстяных волокон, загрязненная нефтепродуктами (содержание нефтепродуктов менее 15 %)	В закрытой таре в смеси (контейнер V=0.1м ³ , 4 шт.)	По мере накопления вывозятся для захоронения на полигон ТБО
Мусор от офисных и бытовых помещений организаций несортированный (исключая крупногабаритный)	В закрытой таре в смеси (контейнер V=0.7м ³ , 3 шт.)	Накопление осуществляется в металлических контейнерах. По мере накопления вывозятся для захоронения на полигон ТБО

7.6 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

7.6.1 Анализ возможных ЧС

Мероприятия, проводимые во время чрезвычайных ситуаций (аварий, стихийных бедствий, военных конфликтов), представляют собой проведение спасательных работ и неотложных аварийно-восстановительных работ в очаге поражения [53].

При возникновении аварийной ситуации технологический персонал должен немедленно сообщают об аварийной ситуации диспетчеру, начальнику

установки и принимают 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 проводят проверку знаний работников, требований безопасности труда в соответствии с ГОСТ 12.0.004-2015.

7.6.2 Пожаровзрывоопасность

Пожарная и взрывная безопасность – это система организационных мероприятий и технических средств, направленная на профилактику и ликвидацию пожаров и взрывов на производстве.

Возникновение пожара возможно при аварийной разгерметизации оборудования, либо неправильной организации проведения огневых работ, небрежных действий персонала.

Одним из главных требований предупреждения пожаров и несчастных случаев является недопущение скопления газов, паров, жидких продуктов. Для этого используется вентиляция мест возможного их скопления и уборка разлитых продуктов [53].

Для устранения возможности пожара, выделяют следующие мероприятия:

- проведение инструктажей по пожарной безопасности;
- по окончании работы производится отключение электрооборудования, освещения и электропитания;
- использование только исправного оборудования;
- курение в строго отведенном месте;
- назначение ответственного за пожарную безопасность помещения;

- содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

К первичным средствам пожаротушения относятся: огнетушители (порошковые, углекислотные и др.), ящики с песком, асбестовое полотно, вода.

Они должны быть в исправном состоянии и окрашены в красный цвет. Эти средства позволяют своевременно ликвидировать очаг возгорания.

7.6.3 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 ГОСТ Р 22.0.01-94.

Чрезвычайные ситуации могут сложиться в результате следующих нарушений: прекращение подачи сырья; 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).

Для исключения возможности несчастных случаев должны проводиться обучение и проверка знаний работников, требований безопасности труда в соответствии с ГОСТ 12.0.004-2015.

7.7 Правовые вопросы обеспечения безопасности

В соответствии с [54] 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 [55] 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.

Правильное расположение и компоновка рабочего места, обеспечение удобной позы и свободы трудовых движений, использование оборудования, отвечающего требованиям эргономики и инженерной психологии, обеспечивают наиболее эффективный трудовой процесс, уменьшают утомляемость и предотвращают опасность возникновения профессиональных заболеваний.

При организации производственного процесса следует учитывать антропометрические и психофизиологические особенности человека, его возможности в отношении величины усилий, темпа и ритма выполняемых операций, а также анатомо-физиологические различия между мужчинами и женщинами.

7.8 Выводы

В разделе экологической безопасности рассмотрено влияние реакционно – ректификационного процесса для синтеза этил – трет – бутилового эфира на окружающую среду и персонал, а также принятие решений, направленных на

их защиту, так как в последнее время становятся актуальными вопросы, касающиеся безопасности жизнедеятельности трудящихся.

В результате исследования выявлено, что рабочее место инженера – оператора на полностью соответствует всем требованиям безопасности и гигиены.

8 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлено применение метода оптимизации прямого поиска NOMAD, с использованием доступной на рынке компьютерной моделирующей системы Aspen Plus, в проектировании промышленного аппарата реакционной ректификации для синтеза ЭТБЭ из изобутиленовой фракции и этанола. Также предложена система управления процессом, основанная на элементе линейного прогностического контроля.

Спроектированный аппарат обеспечивает степень превращения изобутилена 98% мол. и степень чистоты товарного ЭТБЭ выше 95% масс. при минимальных капитальных и оперативных затратах.

Минимизация затрат усложнена за счет включения целочисленных переменных и наличия сложностей, связанных с использованием отдельных моделирующих систем в качестве ограничения – непрерывность пространства поиска, наличие строго не-нарушаемых ограничений и высокие вычислительные затраты. Кроме того, целевая функция характеризуется множеством локальных минимумов.

В отличие от градиентных методов, выбранный метод прямого поиска способен успешно провести минимизацию затрат при вышесказанных трудностях и выдать близко к глобальному решение.

В системе управления процессом, элемент линейного прогностического контроля позволяет регулировать критические оперативные параметры с учетом функциональных закономерностей реакционной ректификации в реальном времени.

Повторное прекращение работы движка расчета Aspen Plus является недостатком настоящей работы. В целях разработки более прочного подхода к оптимальному проектированию необходимо выяснить факторы, приводящие к прекращению работы. Стратегии для избежания данных факторов должны быть учтены в интерфейсе, связывающем Aspen Plus с использованным методом оптимизации.

Проектированная колонна реакционной ректификации показывает множественность стационарных состояний при желательных степенях чистоты ЭТБЭ и превращения ИБ, с возможностью перехода к неудовлетворительной производительности.

Однако, данная множественность имеет место только в значительно узких пределах тепловых нагрузок, и ее можно избежать при работе с нагрузками немного выше верхнего предела.

При выполнении работы наблюдаются следующие основные направления для дальнейшей разработки:

1. Улучшение процесса оптимизации путем вычислительной параллелизации выбранного метода оптимизации и отдельной моделирующей системы.

2. Исследование стохастических методов оптимизации, таких как метод роя частиц и метода имитации отжига, уже применены в литературе для проектирования реакционных ректификационных колонн.

3. Разработка с учетом множественности стационарных состояний стратегии запуска и управления процессом.

9 СПИСОК ПУБЛИКАЦИИ СТУДЕНТА

Гарсия Серпас К. Э. Моделирование реакционно-ректификационной колонны синтеза этил-трет-бутилового эфира (ЭТБЭ) / К. Э. Гарсия Серпас ; науч. рук. М. А. Самборская // Химия и химическая технология в XXI веке : материалы XVIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени профессора Л.П. Кулёва, 29 мая-1 июня 2017 г., г. Томск. — Томск : Изд-во ТПУ, 2017. — [С. 289-290]. <http://earchive.tpu.ru/handle/11683/41552>

10 СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] C. J. Cleveland and C. Morris, “Dictionary of Energy (Expanded Edition).” Elsevier, 2009.
- [2] R. van Basshuysen and F. Schäfer, *Internal Combustion Engine Handbook - Basics, Components, System, and Perspectives*, 2nd Edition. Pennsylvania: SAE International, 2016.
- [3] K. F. Yee, A. R. Mohamed, and S. H. Tan, “A review on the evolution of ethyl tert-butyl ether (ETBE) and its future prospects,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 22, pp. 604–620, 2013.
- [4] Y. Le Digabel and S. Demanèche, “Ethyl tert-butyl ether (ETBE)-degrading microbial communities in enrichments from polluted environments,” *J. Hazard. Mater.*, vol. 279, pp. 502–510, 2014.
- [5] F. Fayolle-Guichard *et al.*, “Study of an aquifer contaminated by ethyl tert-butyl ether (ETBE): Site characterization and on-site bioremediation,” *J. Hazard. Mater.*, vol. 201–202, pp. 236–243, 2012.
- [6] P. Leprince, *Petroleum Refining, Volume 3 - Conversion Processes*. Editions Technip, 2001.
- [7] Без автора, “A Japanese push for bio-ETBE over bioethanol,” *Chem. Eng.*, vol. 116, no. 12, 2009.
- [8] M. G. Sneesby, M. O. Tade, R. Datta, and T. N. Smith, “ETBE synthesis via reactive distillation .1. Steady-state simulation and design aspects,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 36, no. 5, pp. 1855–1869, 1997.
- [9] E. W. de Menezes and R. Cataluña, “Optimization of the ETBE (ethyl tert-butyl ether) production process,” *Fuel Process. Technol.*, vol. 89, no. 11, pp. 1148–1152, 2008.
- [10] M. Umar, D. Patel, and B. Saha, “Kinetic studies of liquid phase ethyl tert-butyl ether (ETBE) synthesis using macroporous and gelular ion exchange resin catalysts,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, no. 21, pp. 4424–4432, 2009.
- [11] L. Domingues, C. I. C. Pinheiro, and N. M. C. Oliveira, “Optimal design of

- reactive distillation systems: Application to the production of ethyl tert-butyl ether (ETBE),” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 64, pp. 81–94, 2014.
- [12] C. Marcilly, *Acido-Basic Catalysis, Volume 2 - Application to Refining and Petrochemistry*. Editions Technip, 2006.
- [13] Y. H. Jhon and T. hee Lee, “Dynamic simulation for reactive distillation with ETBE synthesis,” *Sep. Purif. Technol.*, vol. 31, no. 3, pp. 301–317, 2003.
- [14] C. Marcilly, “9.4.2.3 ETBE Synthesis,” in *Acido-Basic Catalysis, Volume 2 - Application to Refining and Petrochemistry*, Editions Technip, 2006.
- [15] C. A. González-Ruggerio, R. Fuhrmeister, D. Sudhoff, J. Pilarczyk, and A. Górak, “Optimal design of catalytic distillation columns: A case study on synthesis of TAEE,” *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 92, no. 3, pp. 391–404, 2014.
- [16] C. P. Almeida-Rivera, P. L. J. Swinkels, and J. Grievink, “Designing reactive distillation processes: present and future,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 28, no. 10, pp. 1997–2020, 2004.
- [17] S. Giessler, R. Y. Danilov, R. Y. Pisarenko, L. A. Serafimov, S. Hasebe, and I. Hashimoto, “Systematic structure generation for reactive distillation processes,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 25, no. 1, pp. 49–60, 2001.
- [18] Ю. А. Писаренко, Л. А. Серафимов, and Н. Н. Кулов, “Основы анализа статистики реакционно-ректификационных процессов с несколькими химическими реакциями,” *Теоретические Основы Химической Технологии*, vol. 43, no. 5, pp. 491–508, 2009.
- [19] C. Thiel, K. Sundmacher, and U. Hoffmann, “Synthesis of ETBE: Residue curve maps for the heterogeneously catalysed reactive distillation process,” *Chem. Eng. J.*, vol. 66, no. 3, pp. 181–191, 1997.
- [20] C. P. Almeida-Rivera and J. Grievink, “Feasibility of equilibrium-controlled reactive distillation processes: application of residue curve mapping,” *Comput. Aided Chem. Eng.*, vol. 10, no. C, pp. 151–156, 2002.
- [21] M. Carrera-Rodríguez, J. G. Segovia-Hernández, and A. Bonilla-Petriciolet, “Short-Cut Method for the Design of Reactive Distillation Columns,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 50, no. 18, pp. 10730–10743, 2011.

- [22] M. Carrera-Rodríguez, J. G. Segovia-Hernández, H. Hernández-Escoto, S. Hernández, and A. Bonilla-Petriciolet, “A note on an extended short-cut method for the design of multicomponent reactive distillation columns,” *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 92, no. 1, pp. 1–12, 2014.
- [23] P. Li, K. Huang, and Q. Lin, “A generalized method for the synthesis and design of reactive distillation columns,” *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 90, no. 2, pp. 173–184, 2012.
- [24] H. Subawalla and J. R. Fair, “Design Guidelines for Solid-Catalyzed Reactive Distillation Systems,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 38, no. 10, pp. 3696–3709, 1999.
- [25] M. F. Malone and M. F. Doherty, “Reactive Distillation,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 39, no. 11, pp. 3953–3957, 2000.
- [26] T. Frey and J. Stichlmair, “MINLP optimization of reactive distillation columns,” *Comput. Aided Chem. Eng.*, vol. 8, pp. 115–120, 2000.
- [27] L. Domingues, C. I. C. Pinheiro, and N. M. C. Oliveira, “Economic comparison of a reactive distillation-based process with the conventional process for the production of ethyl tert-butyl ether (ETBE),” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 100, pp. 9–26, 2017.
- [28] M.-O. O. Bertran, R. Frauzem, A.-S. S. Sanchez-Arcilla, L. Zhang, J. M. Woodley, and R. Gani, “A generic methodology for processing route synthesis and design based on superstructure optimization,” *Comput. Chem. Eng.*, pp. 1–19, 2016.
- [29] U. M. Diwekar, I. E. Grossman, and E. S. Rubin, “A MINLP Process Synthesizer for a Sequential Modular Simulator.” University Libraries. Carnegie Mellon University., Pittsburgh, PA, 1990.
- [30] B. Yang, J. Wu, G. Zhao, H. Wang, and S. Lu, “Multiplicity Analysis in Reactive Distillation Column Using ASPEN PLUS,” *Chinese J. Chem. Eng.*, vol. 14, no. 3, pp. 301–308, 2006.
- [31] S. Chokshi and R. K. Malik, “Strategies for Identifying Multiplicities in Distillation Systems using Process Simulators,” *ICHEME*, vol. SYMPOSIUM,

- no. 152, pp. 858–867, 2006.
- [32] R. Khaledi and B. R. Young, “Modeling and Model Predictive Control of Composition and Conversion in an ETBE Reactive Distillation Column,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 44, no. 9, pp. 3134–3145, 2005.
- [33] R. Turton, R. C. Bailie, W. B. Whiting, J. A. Shaeiwitz, and D. Bhattacharyya, *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*, Fourth Edi. Michigan: Prentice Hall, 2012.
- [34] J. M. Gómez, J.-M. Reneaume, M. Roques, M. Meyer, and X. Meyer, “A Mixed Integer Nonlinear Programming Formulation for Optimal Design of a Catalytic Distillation Column Based on a Generic Nonequilibrium Model,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 45, no. 4, pp. 1373–1388, 2006.
- [35] G. P. Towler and R. K. Sinnott, *Chemical engineering design: principles, practice, and economics of plant and process design*, 2nd ed. Elsevier, 2013.
- [36] Z. Lei, B. Chen, and Z. Ding, *Special Distillation Processes*, First. Amsterdam: Elsevier, 2005.
- [37] D. E. Kvasov and Y. D. Sergeyev, “Deterministic approaches for solving practical black-box global optimization problems,” *Adv. Eng. Softw.*, vol. 80, no. C, pp. 58–66, 2015.
- [38] E. Martelli and E. Amaldi, “PGS-COM: A hybrid method for constrained non-smooth black-box optimization problems. Brief review, novel algorithm and comparative evaluation.,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 63, pp. 108–139, 2014.
- [39] C. Audet and J. Dennis, “Mesh Adaptive Direct Search Algorithms for Constrained Optimization,” *SIAM J. Optim.*, vol. 17, no. 1, pp. 188–217, 2006.
- [40] A. J. Mason, “OpenSolver - An Open Source Add-in to Solve Linear and Integer Programmes in Excel,” in *Operations Research Proceedings 2011: Selected Papers of the International Conference on Operations Research (OR 2011), August 30 - September 2, 2011, Zurich, Switzerland*, D. Klatte, H.-J. Lüthi, and K. Schmedders, Eds. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012, pp. 401–406.
- [41] А. С. ТИМОНИН, *Основы конструирования и расчета химико-*

- технологического и природоохранного оборудования. Справочник. Том 2, Издание 2-е. Калуга: Издательство Н. Бочкаревой, 2002.*
- [42] L. Domingues, C. I. C. Pinheiro, N. M. C. Oliveira, J. Fernandes, and A. Vilelas, “Model Development and Validation of Ethyl tert-Butyl Ether Production Reactors Using Industrial Plant Data,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 51, pp. 15018–15031, 2012.
- [43] В. Р. Бараз, М. А. Филиппов, and М. А. Гервасьев, *Назначение и выбор металлических материалов: учебное пособие*. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2016.
- [44] Ю. И. Дытнерский, *Основные процессы и аппараты химической технологии: Пособие по проектированию.*, 2-е изд. ed. М.: Химия, 1991.
- [45] А. А. Лащинский and А. Р. Толчинский, *Основы конструирования и расчета химической аппаратуры*, Издание 2-е. Ленинград: Издательство “Машиностроение,” 1970.
- [46] R. Taylor and R. Krishna, “Modelling reactive distillation,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, no. 22, pp. 5183–5229, 2000.
- [47] К. Ф. Павлов, П. Г. Романков, and А. А. Носков, *Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологий*, Издание де. Ленинград: Химия, 1987.
- [48] ГОСТ 12.1.019-2009 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
- [49] ПОТ РМ-016-2001 Межотраслевые правила по охране труда (правила безопасности) при эксплуатации электроустановок.
- [50] ГН 2.1.6.1338 – 03 Предельно-допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест.
- [51] Технологический регламент реакционно – ректификационного синтеза этил – трет – бутилового эфира.
- [52] ГОСТ 17.1.3.13–86 Охрана природы. Гидросфера. Общие требования к охране поверхностных вод от загрязнений.
- [53] ГОСТ Р 22.0.01-94 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные

положения.

- [54] Конституция Российской Федерации [Электронный ресурс]. - Режим доступа www. URL: <http://www.consultant.ru/popular/cons>.
- [55] 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.r>.
- [56] A. K. Coker and E. E. Ludwig, *Ludwig's applied process design for chemical and petrochemical plants. Volume 2*, 4th ed. Burlington: Gulf Professional, 2010.

Introduction
Literature review

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2КМ61	Гарсия Серпас К. Э.		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Самборская М. А.	к.т.н.		

Консультант-лингвист Отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сыскина А.А.	к.ф.н.		

1 INTRODUCTION

Ethers composed of at least 5 carbon atoms are often applied as oxygenated additives for gasolines, as they improve the octane number of the final blend and reduce emissions derived from incomplete combustion. Amongst the available ether additives, ethyl tert-butyl ether (ETBE) holds special importance.

The ETBE synthesis is based in the etherification of isobutene with ethanol in the presence of an acidic catalyst. This reaction is exothermic, reversible and equilibrium limited. Isobutene is available in the C4 fraction from the fluid catalytic cracking unit and ethanol is applied as pure chemical.

The traditional industrial synthesis process is carried out in two consecutive reactors followed by a distillation column, from which ETBE is obtained as a bottom product and ethanol is recovered from the distillate by water extraction and further distillation.

An intensification of this process can be achieved by a reactive distillation scheme comprising a first reaction stage followed by a reactive distillation column, where the final conversion of isobutene and separation of ETBE take place simultaneously.

This approach presents attractive advantages: the second reactor and distillation column can be substituted by a single unit, the reaction heat can be used to drive the ETBE distillation and reduce heating steam consumption, and the continuous circulation of products and reactants in each reactive stage of the column can overcome the equilibrium limit, yielding almost complete conversion rates.

However, the interaction of reaction and separation mechanisms complicates the design of reactive distillation columns, as their performance has to be assessed not only in terms of profitable ETBE purity, but also considering favorable isobutene conversion degrees.

Graphical and heuristic design approaches of varying simplicity are available in the literature; however, their application is limited to overall feasibility assessments and cannot guarantee optimality of technical and economical parameters.

Mathematical models, on the other hand, recreate the interactions between operative and constructive parameters and accurately predict the functioning of the column given a set of input conditions. When paired with numerical optimization methods, complete column designs can be obtained that fulfill optimality criteria – energy / cost minimization – and performance constraints – minimal purity and conversion allowed –.

The reactive distillation column models, needed for optimization approaches, commonly have to be made and programmed, which can greatly limit design workflow.

Several process simulation environments are available on the market that can speed up the modeling stage, as they provide compiled models ready for the end user to configure. However, the use of self-contained pieces of software conditions the application of optimization methods, as these have to be capable of handling non-linearity, convexity, integer variables and numerous constraints without a clear hand-crafted algebraic model.

Additionally, the non-linearities introduced by the interaction of chemical reaction and phase equilibrium mechanisms lead to multiple steady states, a condition in which the column can shift from a high performance steady state to an equally valid low performance one.

In the present work, an optimization-based design of a distillation column using the popular simulation package Aspen Plus is performed. Over the obtained design, a search is conducted for combinations of operative parameters – reboiler heat load and reflux ratio – leading to multiple steady states.

2 LITERATURE REVIEW

2.1 General aspects about ETBE

Fuel additives are substances that contribute in the cleaning of engine parts and improve the combustion of the application fuel. Oxygenated additives directly introduce oxygen in the fuel burning, allowing full combustion, improving octane numbers and reducing particulate matter and CO emissions [1].

Ethers composed of at least 5 carbon atoms are additives commonly applied in gasolines [2]. Ethyl-tert-butyl ether (ETBE) and methyl-tert-butyl ether (MTBE) are additives of special importance, obtained through the reaction of isobutene with ethanol and methanol respectively.

After the ban of lead-based additives, MTBE was introduced as an octane booster, and from 1990 a series of laws required the enrichment of oxygen in gasolines, which favored its application. A report on the global MTBE market showed an incremental demand of 22.0 million tons by 2002 [3].

However, MTBE carries health and environmental risks, as it has a high water solubility (42 mg/l) and low biodegradability. The International Agency for Research on Cancer (IARC) and the Environmental Protection Agency of the US (EPA) classified MTBE as a health threat in 2000. Additionally, remediation costs of underwater sources polluted with MTBE have a negative effect in the cost-benefit analysis of its application in fuel blends [3].

With this, ETBE was chosen as an alternative oxygenated additive in view of the following advantages.

The main raw material for the production of ETBE is ethanol, which can be obtained from biomass-like sources – biomass, molasses and agricultural raw materials – as opposed to methanol, which is a derivative of natural gas.

As a consequence of its low water solubility ETBE supposes a lesser environmental risk [3]. Additionally, the degradation of ETBE to biomass and CO₂ under microbial action can be complete [4], [5].

ETBE was first used in France. By 2001 the production capacity in the European Union grew by 4 million tons. To the present date the allowed use of ethers as oxygenated additives is 15% vol. with a planned increment up to 22% [2].

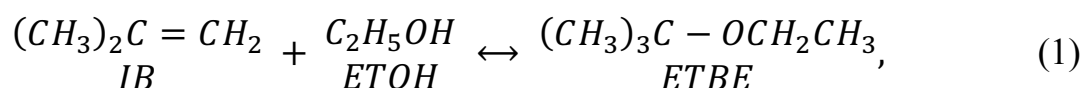
The chemical technology of MTBE and ETBE are essentially similar. Existing MTBE facilities can be used for ETBE synthesis with little modifications, which helps to reduce capital costs [6].

In 2009, Nippon Oil Corp. started production of ETBE from bioethanol by modifying a working installation.

The recent and constantly growing interest around ETBE motivates the research towards high performance synthesis processes. In this area, mathematical modeling constitutes an instrument for the understanding of chemical kinetics, process efficiency and the development of optimization strategies.

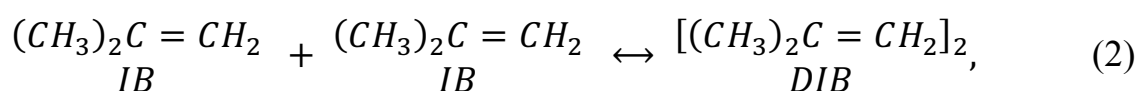
2.2 Basics of ETBE synthesis

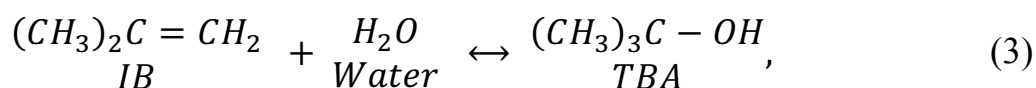
The main ETBE synthesis route is the liquid phase reaction between isobutene (IB) and ethanol (ETOH) in the presence of an acidic catalyst, as shown in equation (1) [8].



This reaction is exothermic and reversible, temperature increases therefore shift chemical equilibrium towards reactants, which reduces isobutylene conversion. Under temperatures below 61 °C the reaction is kinetically controlled, while under higher temperatures runs by thermodynamic control [9].

Alongside the IB – ETOH reaction the dimerization of isobutene to diisobutene (DIB) also takes place, and if any water is present (which is possible in raw ethanol) the hydration of isobutene to tert-butyl alcohol (TBA) is also expected. This reactions are presented in equations (2) and (3) respectively [8].





The applied catalyst is an acidic ion-exchange resin of the macro-crosslinked sulphonic type (a copolymer of polystyrene and divinylbenzene). The resin Amberlyst 15 (Rom and Haas) is the most commonly applied; its characteristics are presented in table 2.1 [10].

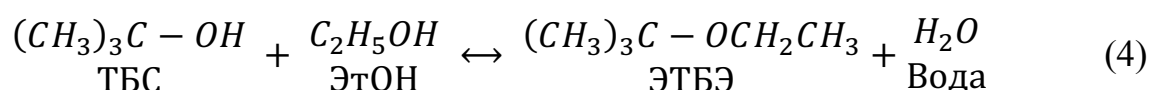
Table 2.1 – Characteristics of the Amberlyst 15 catalyst

Property	Value	Property	Value
Matrix	Macropore	Pore volume	0.26 cm ³ /g
Form	Beads	Packed bed density	640.26 kg/m ³
Diameter	475.0 μm	Porosity	60.22 %
Average pore diameter	300 Å	Ion exchange capacity	4.7 m.eq/g
Specific surface	45.87 m ² /g		

A significant disadvantage of the ion exchange resins is their low thermal stability; its application is not recommended with temperatures above 120 °C [11], besides they can release sulfuric acid under high temperature and pressure, which can reduce the catalytic activity. Zeolites can be a good alternative in view of this disadvantages [3].

The research on the application of zeolites points to ZSM-11 and ZSM-5 as the most effective variants with similar or better selectivity compared to the resins; however, they show lower catalytic activities and therefore require higher working temperatures [12].

An alternative route is the synthesis of ETBE from TBA and ethanol. TBA might be preferred over isobutene, given that its price is lower and the isobutene availability is limited by capacity of the catalytic cracking unit. The main reaction of this route is presented in equation (4), the catalyst can be β-zeolites or potassium hydrogen sulphate [10].



2.3 Reaction kinetics

In the IB-ETOH system the accepted reaction mechanism consists in the adsorption of ethanol in two catalyst centers and the adsorption of isobutene in a neighbor center. The limiting step is the reaction between the adsorbed species and the final step consists in the desorption of the reaction product. The reaction rate expression is based in a Langmuir–Hinshelwood–Hougen–Watson model. The kinetic expressions, obtained in experiments over the catalyst Amberlyst-15, are provided in the equations (5) – (8) [8], [13].

Reaction rate:

$$r_{\text{ЭТБЭ}} = m_{\text{кат}} k_{r,\text{ЭТБЭ}} \frac{a_{\text{ЭТОН}}^2 \left(a_{\text{ИБ}} - \frac{a_{\text{ЭТБЭ}}}{K_{\text{ЭТБЭ}} a_{\text{ЭТОН}}} \right)}{\left(1 + K_{A,\text{ЭТОН}} a_{\text{ЭТОН}} \right)^3}, \quad (5)$$

Reaction rate constant:

$$k_{r,\text{ETBE}} = 2,0606 \cdot 10^{12} \exp\left(-\frac{60,4 \cdot 10^3}{R T}\right), \quad (6)$$

Adsorption constant:

$$\ln K_{A,\text{EtOH}} = -1,0707 + \frac{1323,1}{T}, \quad (7)$$

Chemical equilibrium constant:

$$\begin{aligned} \ln K_{\text{ЭТБЭ}} = & 10,387 + \frac{4060,59}{T} - 2,89055 \ln T - 0,0191544T \\ & + 5,28586 \cdot 10^{-5}T^2 - 5,32977 \cdot 10^{-8}T^3, \end{aligned} \quad (8)$$

The isobutene dimerization can be considered at equilibrium under excess of ethanol. The corresponding equilibrium constant is given in the equation (9) [8].

$$K_{\text{ДИБ}} = 95,2633 + \frac{5819,8644}{T} - 17,2 \ln T - 0,00356 T, \quad (9)$$

The ETBE reaction rate equation (5) considers ethanol to be the most abundant component in the catalyst surface [8]. Under this condition the dimerization and hydration of IB are essentially avoided.

2.4 Industrial synthesis of ETBE by reactive distillation

2.4.1 Raw material

In the industrial practice, isobutene is available as a component of a hydrocarbon mixture (C4), sources of which include the liquid catalytic cracking (FCC), steam cracking or isobutene dehydration units [8]. The remaining hydrocarbons can be considered inert and similar to 1-butene in regard of thermodynamic properties. Table 2.2 presents the average composition of the isobutene industrial raw stream [9].

Table 2.2 – Average composition of the C4 industrial fraction.

Component	Concentration (% mol)	Component	Concentration (% mol)
Isobutane	1.7	1-butene	33.2
N-butane	7.6	Isobutene	36.0
Trans-butene-2	16.9	Cis-butene-2	4.6

The C4 fraction may contain a series of impurities that compromise the performance of the catalyst [14]:

Nitriles and sodium ions from the FCC unit, solvents from upstream processes, NH₃ in methanol and other hydrocarbons. Such components irreversibly neutralize the catalyst acid centers.

Oxygenated components: water in alcohols, ethers and aldehydes in ethanol and others. Such components compete with ethanol for the solvation of the acidic centers, suppress the main reaction and may favor secondary ones.

Diolefins, which polymerize and form resins, which form deposits that deactivate the catalyst.

The pre-treatment of the raw streams consists in water extraction for the C4 fraction; ethanol impurities are held in resin traps [14].

2.4.2 Synthesis process

Figure 2.1 presents the general process for ETBE synthesis via reactive distillation.

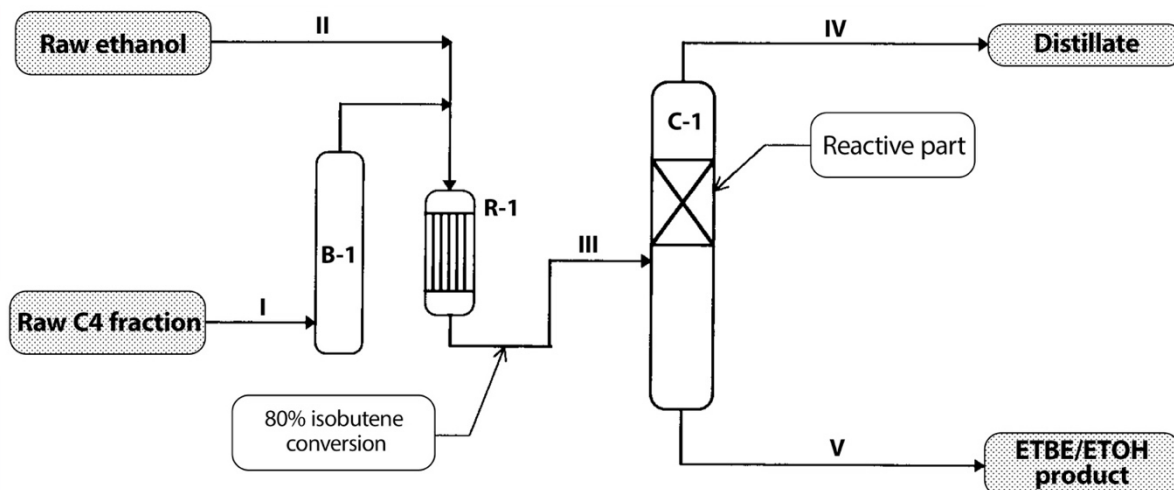


Figure 2.1 – General process flowsheet for ETBE synthesis

In figure 2.1. Units: B-1 – pre-processing stage for C4 raw fraction; R-1 – tube reactor; C-1 – reactive distillation column. Streams: I – raw C4 fraction; II – fresh ethanol; III – reaction products from reactor R-1; IV – spent hydrocarbon fraction (distillate); V – Product ETBE.

The pre-treated C4 fraction I is mixed with fresh ethanol II and enters the reactor R-1, where ETBE is generated up to an 80 – 85% isobutene conversion.

Given that the chemical equilibrium shifts towards the reactants side under temperature increments [14], in order to relieve the heat released from the reaction and promote favorable conditions to the ETBE formation, the reactor R-1 has a tube construction; the reaction takes place in the tube side while cooling water circulates in the shell side.

The products from the R-1 reactor enter the reactive distillation column C-1, where several plates are loaded with catalyst. In this unit, the final isobutene conversion and ETBE separation take place simultaneously. ETBE is obtained as bottom product V with a purity of 95% or higher; unreacted ethanol is also present in this stream.

The distillate IV contains inert hydrocarbons from the raw C4 fraction with unreacted isobutene and ethanol. From here the residual ethanol is extracted with water, distilled and returned to the reaction stage; in this process, the formation of water/ethanol azeotrope is possible. However, further ethanol recovering is optional depending on the distillate composition and the refining facility configuration [8].

In order to reach maximum isobutene conversion, the reactive part is located above the feed plate, as in this column section temperature and ETBE concentration are lower than in the inferior section.

A secondary ethanol stream or distillate recycle can be directed to the reactive distillation column above the reactive part; this allows to regulate temperature and to hold relatively high ethanol concentrations as reactant.

Also, it is possible to configure a liquid recycle from the lower section of the column C-1 to the reactor R-1, for the conversion of unreacted isobutene. The overall isobutene conversion degree in the process is about 98%.

As a consequence of high temperatures in the first reactor, the catalyst is exposed to accelerated deactivation processes and is exchanged on an annual basis. The service time of the column catalyst is about 10 years or more [11].

The physical properties of the reactants in the IB-ETOH system differ substantially and there is a high tendency to the formation of azeotropic mixtures, given the non-ideality of the liquid phase. Such non-ideality is considered in the kinetic expressions by including activities instead of concentrations.

The table 2.3 presents experimental and predicted azeotropes for ethanol [8]. Under the process conditions evaluated in this work, no azeotropes were observed.

Table 2.3 – Azeotropic mixtures in the IB-EtOH system

Mixture	% ETOH at 0 kPa	% ETOH at 950 kPa	% ETOH at 1400 kPa
Experimentally observed			
ETOH-IB	n/d	n/d	0.94%
ETOH-1B	n/d	n/d	n/d
ETOH-ETBE	37%	n/d	n/d

Mixture	% ETOH at 0 kPa	% ETOH at 950 kPa	% ETOH at 1400 kPa
UNIFAC predictions			
ETOH-IB	No azeotrope	No azeotrope	1.25%
ETOH-1B	No azeotrope	No azeotrope	1.45%
ETOH-ETBE	38%	59%	66%

n/d – no data.

2.5 Design methods for reactive distillation processes

As shown by González-Ruggerio [15] the design of reactive distillation columns consists in the determination of all dimensions, feed location and process conditions that satisfy a given set of specifications. The literature presents three main groups of design approaches: graphical, heuristics and optimization-based.

2.5.1 Graphical / topological methods

These methods are based in the graphical representation of the distillation process over the composition space of the input stream, taking into account chemical and phase equilibrium.

The static analysis method depicts, for a given equilibrium limited reaction, the regions of occurrence of the straightforward and backwards reactions, and upon them, the material balance, chemical conversion and distillation curves. This diagram is constructed out of information about phase equilibria, raw stream composition and target product purity.

With the static analysis it's possible to determine, for azeotropic systems: (a) feasibility of the reactive distillation process, (b) limit stationary states, providing the maximum output of the target product over the entire feed composition space, and (c) possible process structures together with reactive part location and number of theoretical reactive and separation plates. This structures can consist of either a single

reactive distillation column, or a succession of reactive distillation and traditional distillation [16].

The method is described by Giessler [17] and applied to the systematic generation of structures for reactive distillation process with a single reversible reaction. Pisarenko [18] offers an extension of this methods for systems with multiple chemical reactions.

Another example of important value is the method of residual curves analysis, in which the changes in liquid composition are traced in time for a simple batch distillation. This method is widely used to investigate phase equilibria of non-reacting azeotropic system and to determine possible product composition [16].

Thiel, Sundmacher and Hoffman [19] investigate the application of this method to systems with single chemical reaction, considering the ETBE synthesis as an example. Almeida-Rivera and Grievnik [20] present an extension of this method to multi-component reactive systems with multiple reactions, and apply it to the MTBE synthesis.

Almeida-Rivera, Swinkels and Grievnik [16] present a detailed review of other graphical methods. In addition, Marcelino-Carrera and others [21], [22] propose a graphical method without limits in the number of components and reactions.

2.5.2 Heuristic / evolutionary methods

Regardless of the advantages of the graphical methods, they can only provide rough design estimates, as they do not consider the geometrical characteristics of the column [15] and, given their basic assumptions, are limited only to the study of overall feasibility [11].

Heuristic methods propose a set of rules that orientates the design task on the bases of accumulated experience in the development of reactive distillation as a derivative of the regular distillation [16].

These rules are used to adjust the structure of the reactive distillation process flowsheet in order to reach the optimal combination of the reaction and separation

effects, and also for the minimization of a given cost function, with an accompanying mathematical model [23]. This way, by complementing the graphical approach heuristic methods allow for the determination of key parameters, like catalyst mass, column diameter and feed split [16].

Li [23] offers a generalized algorithm for the determination of the optimal structure of a reactive distillation column by minimization of total annual expenses. Subawalla [24] presents an application of heuristic rules to the synthesis of TAME.

However, although heuristic methods have been successfully applied to catalytic distillation [16], they are essentially limited, as no heuristic rule is capable to guarantee the optimal agreement between reaction and separation [23].

2.5.3 Optimization-based methods

As shown by Malone and Doherty [25], the key aspect in the design of reactive distillation columns is the correct combination of the reaction and separation phenomena, and moreover, Frey and Stichlmair [26] affirm that the full capabilities of the reactive distillation can only be observed in optimized processes.

Optimization-based methods operate with a combination of optimization algorithms and mathematical models, describing reactive distillation columns of varying complexity, in order to determine the minimum of a target function. With this, given methods not only overcome the limitations of the graphical methods and lack the drawbacks of heuristic rules, but also are capable to yield complete optimal designs [16].

The task of optimization of reactive distillation systems lies in the integration of structural and operative parameters in order to simultaneously maximize the reactant conversion degree, purity of the target product, and economical profits.

Such parameters take the form of integer and continuous variables, as for example, heat loads for evaporation / condensation, raw stream composition, etc. (continuous), number of reactive plates, feed plate location, presence or absence of

separate reactors (integer). From this, a given optimization problem can be considered as problem of the Mixed Integer Nonlinear Program (MINLP) type [27].

The solution of a MINLP problem consists in the minimization of a target function Ψ in fulfillment of: (a) matter and energy balances and equations describing chemical kinetics, mass transfer and hydraulics, from which the mathematical model of the process is composed, (b) target values for purity and reactant conversion, and (c) arbitrary limits for the integer and continuous variables (for example, energy and raw stream inventories and maximal number of plates allowed).

Integer variables are treated as a vector composed of 0's and 1's, where 1 means the presence of a unit (or stream) and 0 the absence of it. Therefore, this vector depicts the structure of the reactive distillation process.

A coefficient is assigned to each vector element, which represent some ponderation value addressed by the function Ψ (for example, money expenses for the acquisition of a unit or a fixed resource consumption rate for its operation). These coefficients form a matrix, by which the integer vector is multiplied.

On the other hand, continuous variables are treated directly and the corresponding ponderation values are calculated by mathematical functions. The equations (10) – (12) present the mathematical formulation of a MINLP problem, as presented by Beltran [28].

$$\min_{\omega, y} \Psi = c^T y + p(\omega), \quad (10)$$

With the constraints:

$$r(\omega) = 0, \quad (11)$$

$$s(\omega) + By \leq 0, \quad (12)$$

$$\text{with } \omega \in R^n, y \in \{0; 1\},$$

where Ψ – target function,

ω – vector of continuous variables,

y – vector of integer variables,

$p(\omega)$ – ponderation function associated with continuous variables,

c – coefficient matrix associated to integer variables,

$r(\omega)$ – vector of equality constraints,

$s(\omega)$ – vector of inequality constraints,

B – coefficient matrix for integer variables.

In the works of Gómez [12] and Durruty [36], on the MINLP optimization of a reactive distillation column for the synthesis of ETBE, equations (10) – (12) are treated in the following manner.

The target function Ψ is the sum of capital and operation costs. As seen in equation (10) these costs depend jointly on structural and operative parameters, and with this, the matrixes c , B and function $p(\omega)$ represent monetary expenses.

The equation (11) represents the set of material and energy balances and complementary equations of the process (e.g. the mathematical model of the reactive distillation process). The equation (12) includes all the arbitrarily given constraints. Here it's possible to define limiting values for purity and conversion.

As shown by Diwekar and Grossman [29], the analysis of all the possible binary vectors y leads to the formation of a generalized structure, which includes all possible alternatives of the final design, and over which a search is carried out for the optimal combination of integer and continuous variables.

2.6 Steady states multiplicity

The combination of phase equilibria and chemical reaction leads to the possibility of occurrence of several possible solutions to the mathematical model of the reactive distillation process, where each solution conforms a stationary state.

Such multiplicity of states has two types: input multiplicity – which relates to the existence of equal states under different sets input parameters; and output multiplicity – in which different states are observed under the same set of input parameters.

Yang and others [30] present the analysis of parametrical sensitivity as a practical way to find multiple states. The figure 2.2 describes an often-observed

behavior of a state variable y (for example product purity or conversion degree) as a function of an input parameter λ (heat load or reflux ratio) in a system that shows output multiplicity.

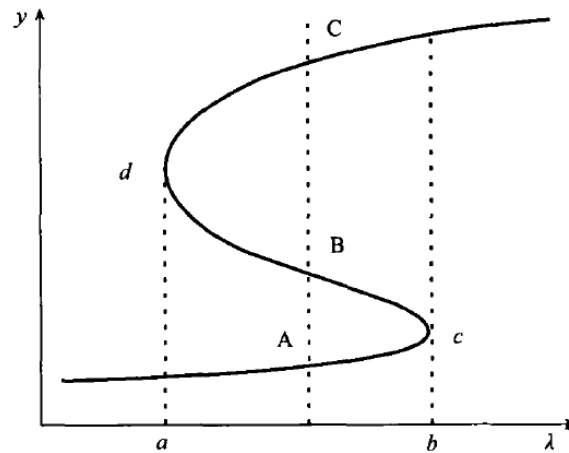


Figure 2.2 – Typical behavior of a state variable in output multiplicity

In the sensitivity analysis, the parameter λ is gradually varied in small $\Delta\lambda$ steps, and the changes in y , Δy , are traced accordingly. Stationary states are represented by segments with uniform $\Delta y/\Delta\lambda$, shown in figure 2.2 as A , B and C .

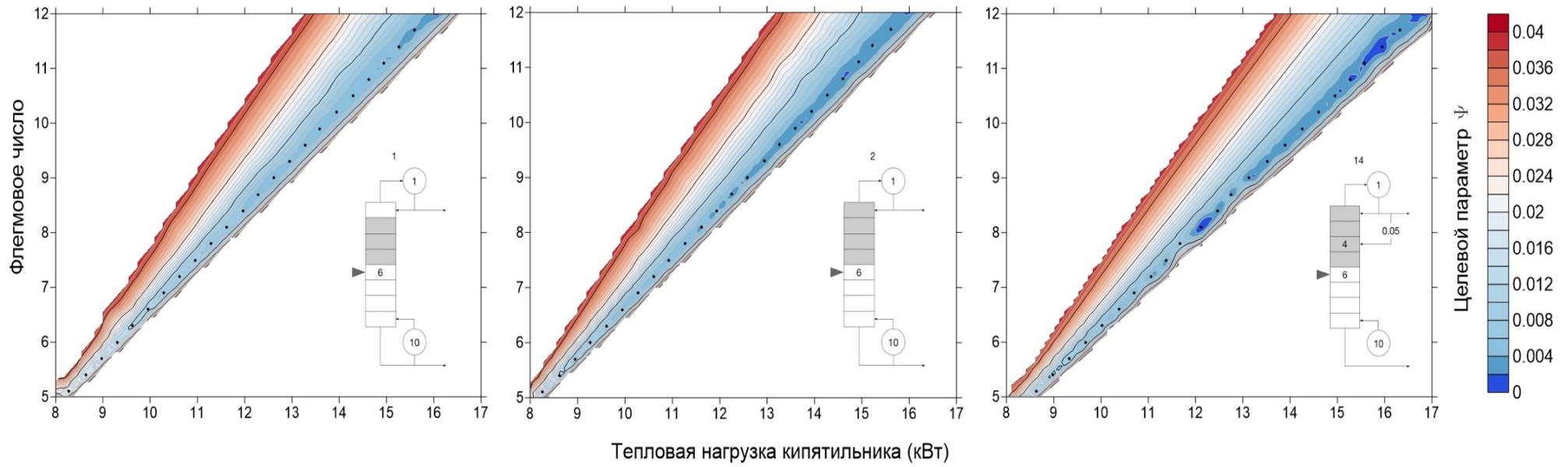
At a given point, the $\Delta y/\Delta\lambda$ quantity changes rapidly and afterwards can take a different sign, which indicates that the current state has been abandoned and a new one has been reached. Such points are denominated bifurcation points and are shown in figure 2.2 as the points c and d , which correspond to the limit λ values of a and b .

The segment $a - b$ forms the area of multiplicity, in which the states exist simultaneously: A and B as extreme states, and C as intermediate. The a value corresponds to the downward branch of the sensibility analysis (gradual decrement of λ) and the b value corresponds to the upwards branch (gradual increment of λ).

In the present work, for the determination of the area of multiplicity a sensitivity analysis is conducted using as input parameters of the reboiler heat load QN and reflux ratio RR ; the chosen state variable is the ETBE purity x_{ETBE} . The bifurcation points are identified using the criterion presented in equation (13) [31].

$$\lim_{\Delta\lambda \rightarrow 0} \tan^{-1} \left(\frac{\Delta y}{\Delta\lambda} \right) \rightarrow \frac{\pi}{2} \quad (13)$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Б



ПРИЛОЖЕНИЕ В

Данные для расчета $\sum C_{\text{кап}}$ и $\sum C_{\text{оп}}$

Начальная стоимость, С0						
	K1	K2	K3	A	мин	макс
Колонна	3,4974	0,4485	0,1074	Объем, м3	0,3	520
Тарелка, Пер,	2,9949	0,4465	0,3961	Площадь, м2	0,07	12,3
Насадка	2,4493	0,9744	0,0055	Объем, м3	0,03	628
Фактор материала, Fm						
	Материал	Fm				
Колонна	Нерж, сталь	3,1				
Факторы B1 и B2						
	B1	B2				
Колонна	2,25	1,82				
Фактор Fbm						
	Материал	Fbm				
Тарелка, Пер,	нерж, сталь	1,8				
Насадка	Метал 304SS	6,8				
СЕРСИ (2001)		397,00				
СЕРСИ (2017)		558,30				
Энтальпия пара, кДж/кг		1886				
Стоимость пара, \$/тон		53,48				
Стоимость ЭТОН, \$/тон		1002,67				

Геометрические и гидравлические ограничения

Обозначения

D	Диаметр колонны, м.
Q	Объемный расход, м ³ /с.
ρ	Плотность, кг/м ³ .
d_h	Диаметр отверстия тарелки, м.
σ	Поверхностное натяжение, Н/м.
s	Расстояние между тарелками, м.
h_{cl}	Высота прозрачной жидкости на переходе режимов пена – спрей, м.
τ	Фракционная площадь отверстий, безразмерное.
w	Длина сливной перегородки, м.
p_h	Расстояние между отверстиями тарелки, м.
ΔP	Перепад давления пара, Па.
ΔP_q	Перепад давления вдоль сливной трубы, Па.
A_h	Площадь отверстий, м ² .
A_a	Активная площадь тарелки, м ² .
A_t	Площадь поперечного сечения колонны, м ² .
A_{da}	Площадь тарелки над сливной трубой, м ² .
h_{dc}	Высота жидкости в сливной трубе, м.
h_l	Высота прозрачной жидкости, м.
h_w	Высота сливной перегородки, м.
h_{ow}	Высота жидкости над водосливом, м.
h_{ap}	Высота фартука над тарелкой, м.
ΔP_s	Перепад давления сквозь тарелки, Па.
ΔP_σ	Перепад давления из-за поверхностного натяжения, Па.
ΔP_L	Перепад давления из-за жидкости, Па.
u_h	Скорость пара через отверстия, м/с.

Субиндексы

<i>min</i>	Минимальное допустимое значение.
<i>v</i>	Пар.
<i>l</i>	Жидкость.

Геометрические соотношения – определение D_{min}

$$D_{min} = \left[\frac{4 Q_v}{0,7 \pi C_{cap} \sqrt{\rho_l / \rho_v - 1}} \right]^{1/2}, \quad (42)$$

где C_{cap} – коэффициент способности тарелки, задан уравнением (43),

$$C_{cap} = 0,37 \left[\frac{d_h^2 \sigma}{\rho_l} \right]^{0,125} \left[\frac{\rho_v}{\rho_l} \right]^{0,1} \left[\frac{s}{h_{cl}} \right]^{0,5}, \quad (43)$$

$$h_{cl} = \frac{0,157 d_h^{0,833} \tau^{-0,791}}{1 + 1,04 * 10^{-4} \left(\frac{Q_l}{w} \right)^{-0,59} \tau^{-1,791}} \left[\frac{996}{\rho_l} \right]^{0,5 \left(1 - 0,91 \frac{d_h}{\tau} \right)}, \quad (44)$$

$$w = 0,8D, \quad (45)$$

$$\tau = \frac{A_h}{A_a}, \quad (46)$$

$$A_h = 0,907 A_a \left[\frac{d_h}{p_h} \right]^2, \quad (47)$$

$$A_a = A_t - 2A_{da}, \quad (48)$$

$$A_{da} = 0,5 \left(\frac{D}{2} \right)^2 [\beta - \sin(\beta)], \quad (49)$$

$$\beta = 2 \arcsin \left(\frac{w}{D} \right). \quad (50)$$

Гидравлические соотношения – определение h_{dc} и $u_{h,min}$

$$h_{dc} = \frac{\Delta P - \Delta P_q}{g(\rho_l - \rho_v)} + h_l, \quad (51)$$

$$h_l = h_w + h_{ow}, \quad (52)$$

$$h_{ow} = 0,6 \left(\frac{Q_l}{w} \right)^{2/3}. \quad (53)$$

Перепад давления сливной трубы ΔP_q и пара ΔP в уравнении (51) рассчитываются уравнениями (54) – (56),

$$\Delta P_q = 1,62\rho_l \left(\frac{Q_l}{h_{ap}w} \right)^2, \quad (54)$$

Высота h_{ap} обычно применяется 5 – 10 мм под высотой водослива [35], при этом:

$$h_{ap} = h_w - 5 * 10^{-3} \text{ м} \quad (55)$$

$$\Delta P = \Delta P_s + \Delta P_\sigma + \Delta P_L, \quad (56)$$

Перепад давления через тарелки ΔP_s :

$$\Delta P_s = \frac{1}{2C_0^2} \left(\frac{Q_v}{A_h} \right)^2 \rho_v (1 - \tau^2), \quad (57)$$

где C_0 :

$$C_0 = \left[880,6 - 67,7 \left(\frac{d_h}{e_p} \right) + 7,32 \left(\frac{d_h}{e_p} \right)^2 - 0,338 \left(\frac{d_h}{e_p} \right)^3 \right] * 10^{-3}, \quad (58)$$

Перепад давления из-за поверхностного натяжения ΔP_σ :

$$\Delta P_\sigma = \frac{4\sigma}{d_h}, \quad (59)$$

Перепад давления из-за жидкости ΔP_L :

$$\Delta P_L = f_a \rho_l g h_l, \quad (60)$$

Фактора f_a рассчитывается уравнением (61),

$$f_a \begin{cases} 0,981e^{(-0,411F_a)} & \text{если } F_a \leq 1 \\ 0,718e^{(-0,079F_a)} & \text{если } F_a > 1 \end{cases} \quad (61)$$

где F_a :

$$F_a = \frac{Q_v}{A_a} \sqrt{\rho_v}, \quad (62)$$

Скорость пара через отверстия и минимальное ее значение определяются уравнениями (63) – (64),

$$u_h = \frac{Q_v}{A_h}, \quad (63)$$

$$u_{h,min} = \frac{0,68 \pm 0,12}{\sqrt{\rho_v / \Delta P_L}}, \quad (64)$$

Толщина тарелки – $e_p = 2,5$ мм [35],

Диаметр отверстия обычно принимает значения в пределах 3,2 – 25,4 мм [56], расстояние между тарелками варьируется в пределах 0,15 – 1 м и шаг отверстия задается в пределах 2,5 – 4,0 от диаметра отверстия [35], Отсюда задают выражения (66) – (67) как пределы поиска.

$$d_h = [3,2 \dots 25,4] \times 10^{-3} \quad (65)$$

$$s = [0,15 \dots 1] \quad (66)$$

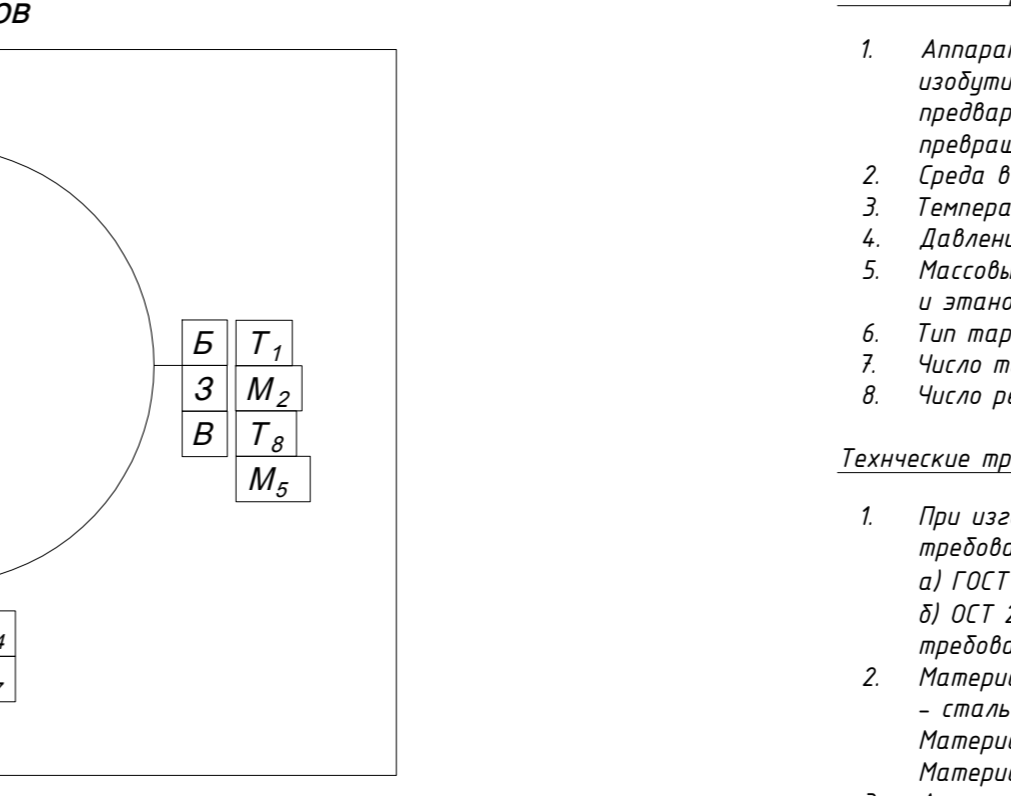
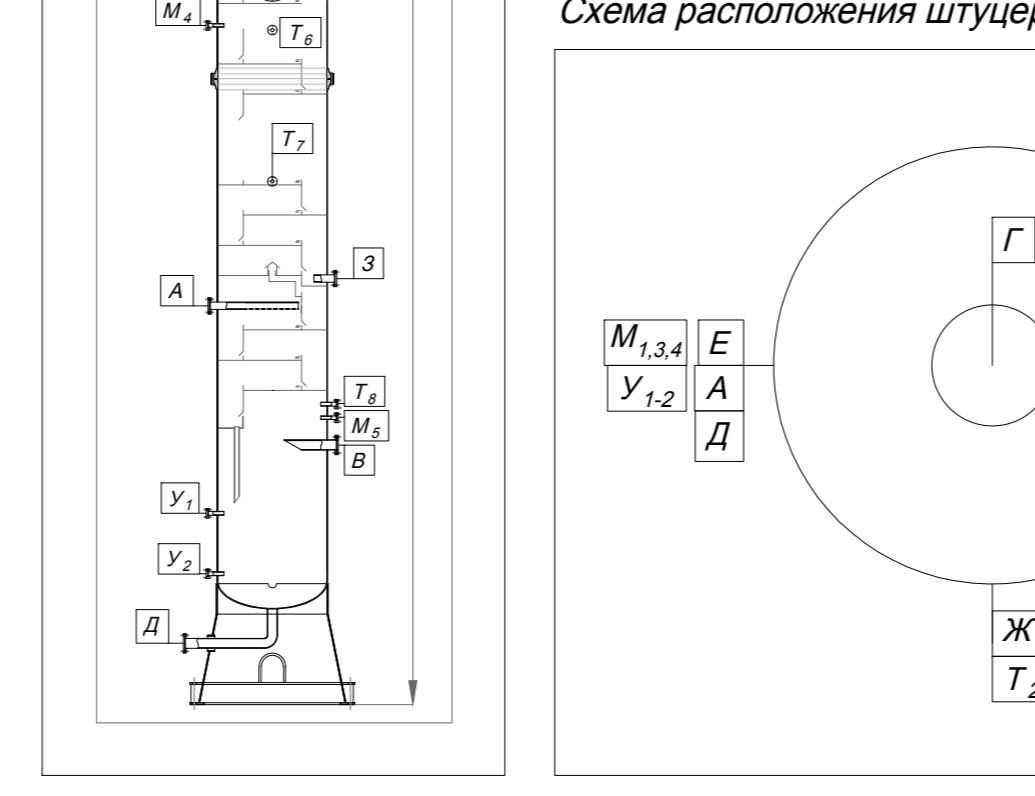
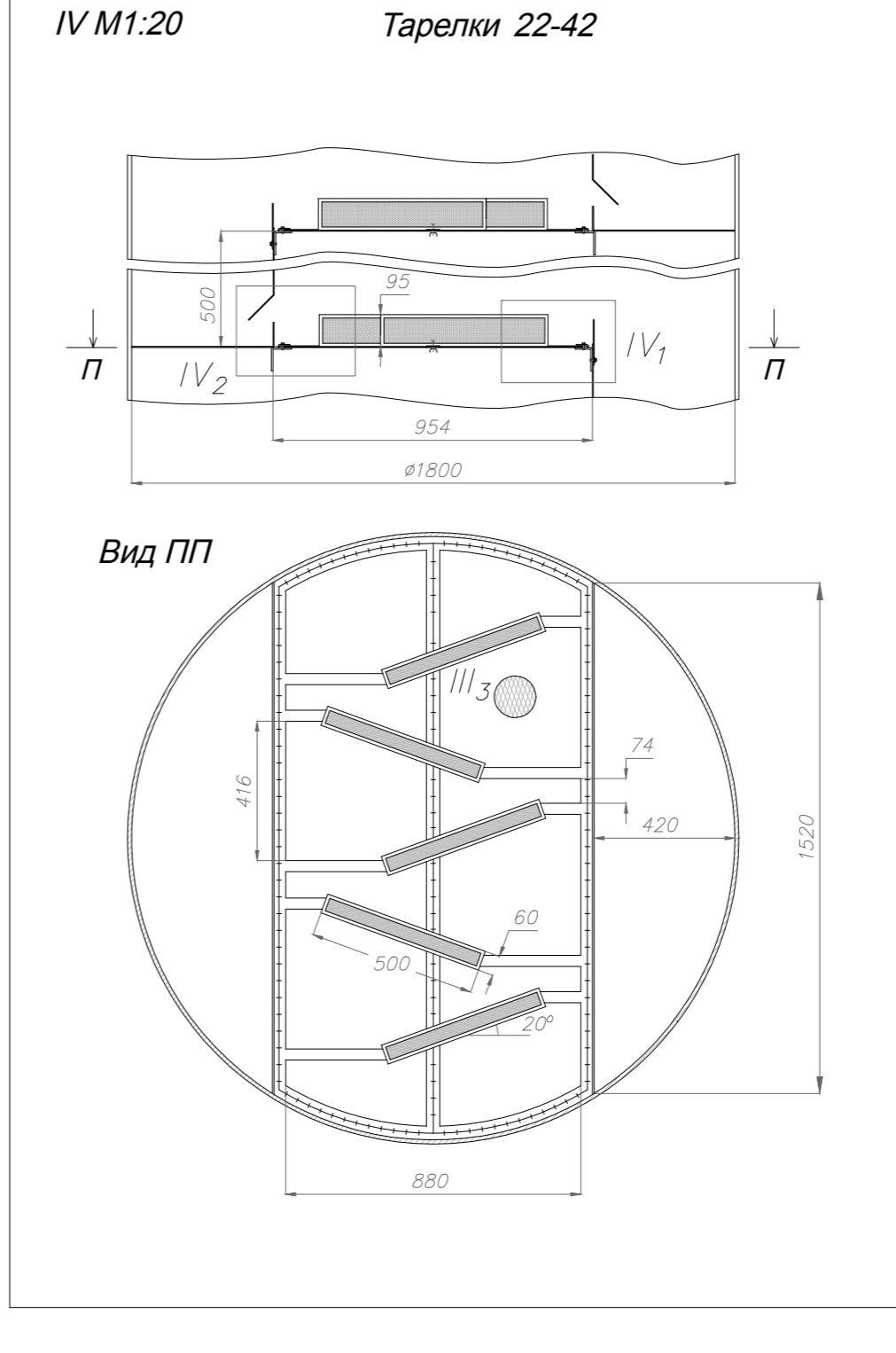
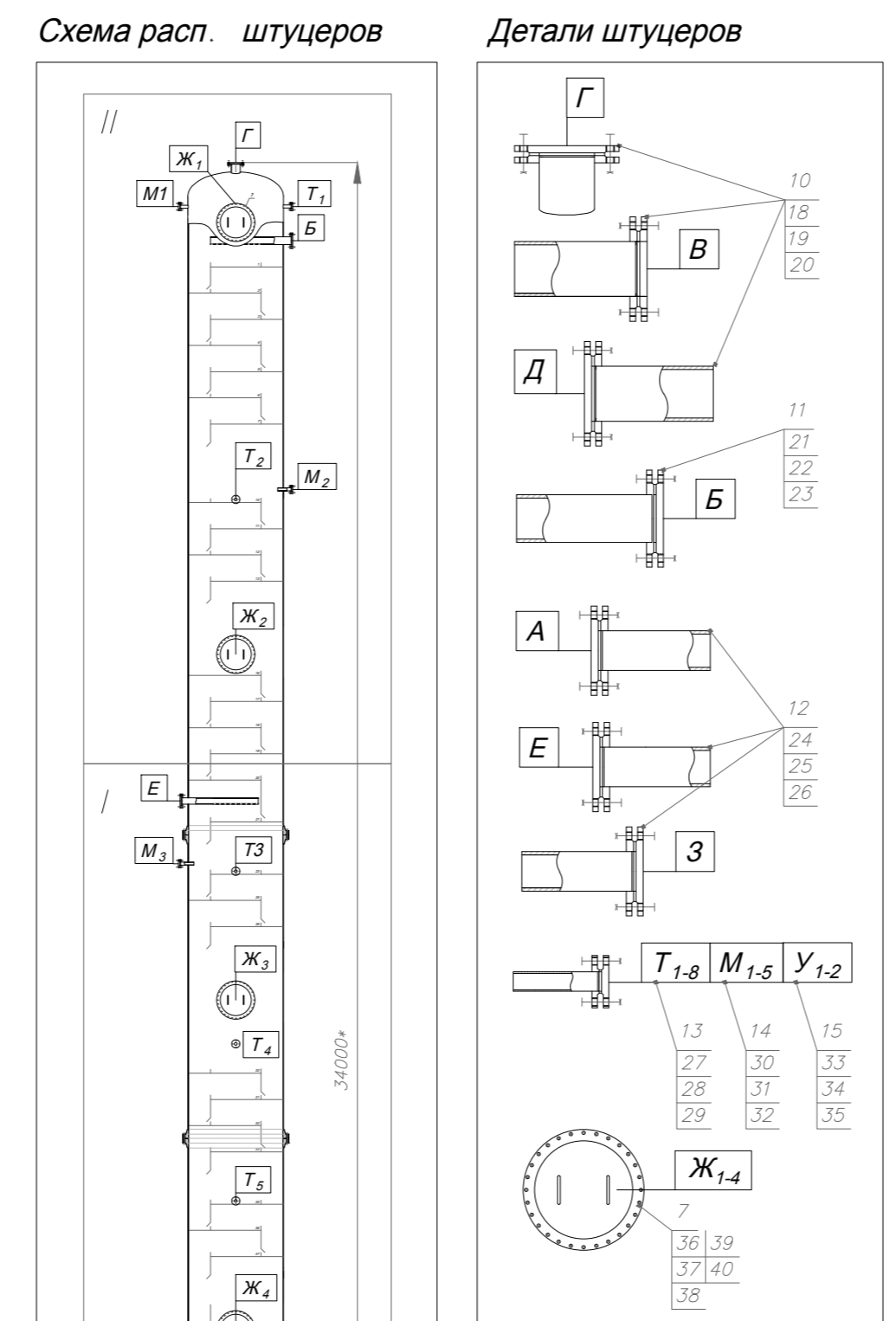
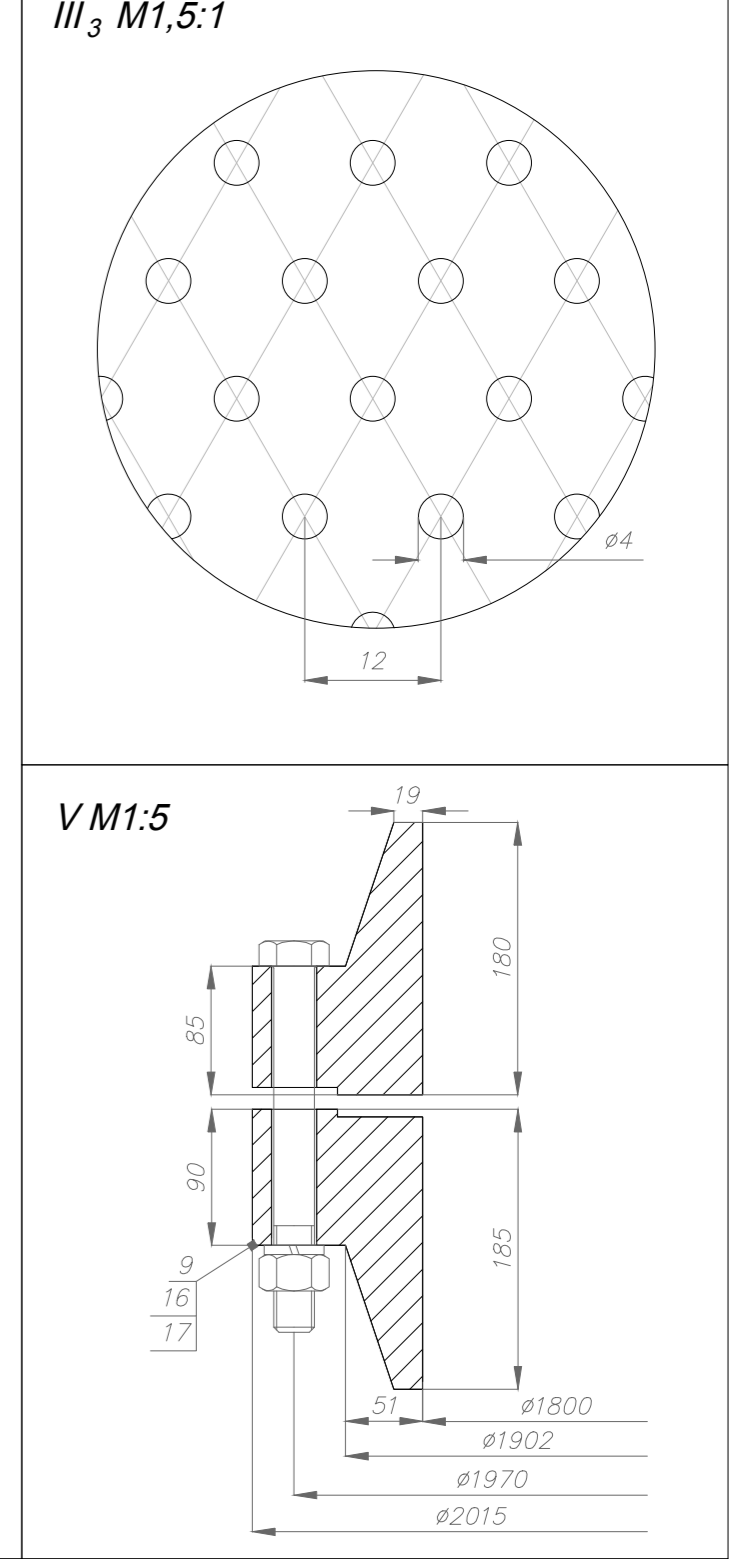
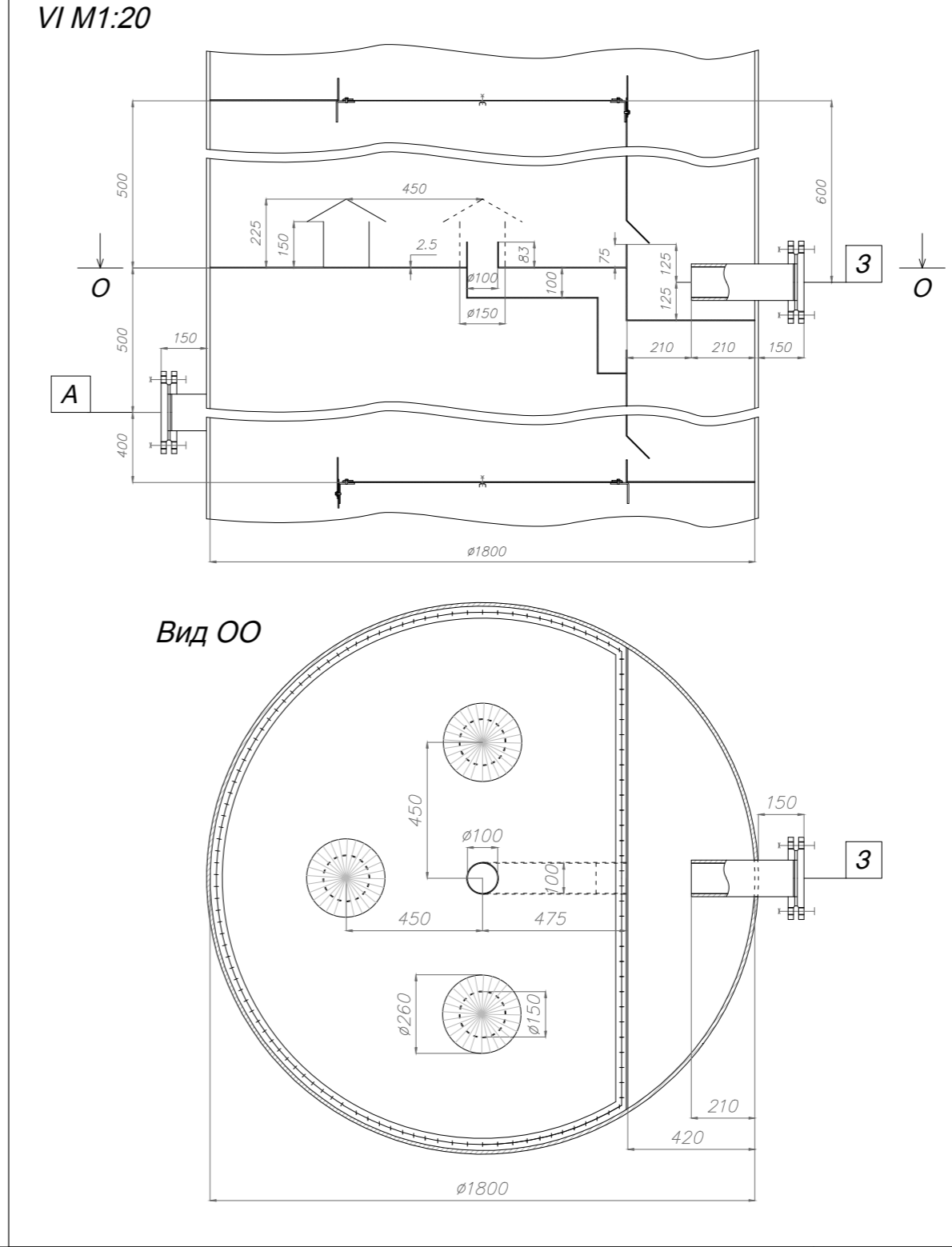
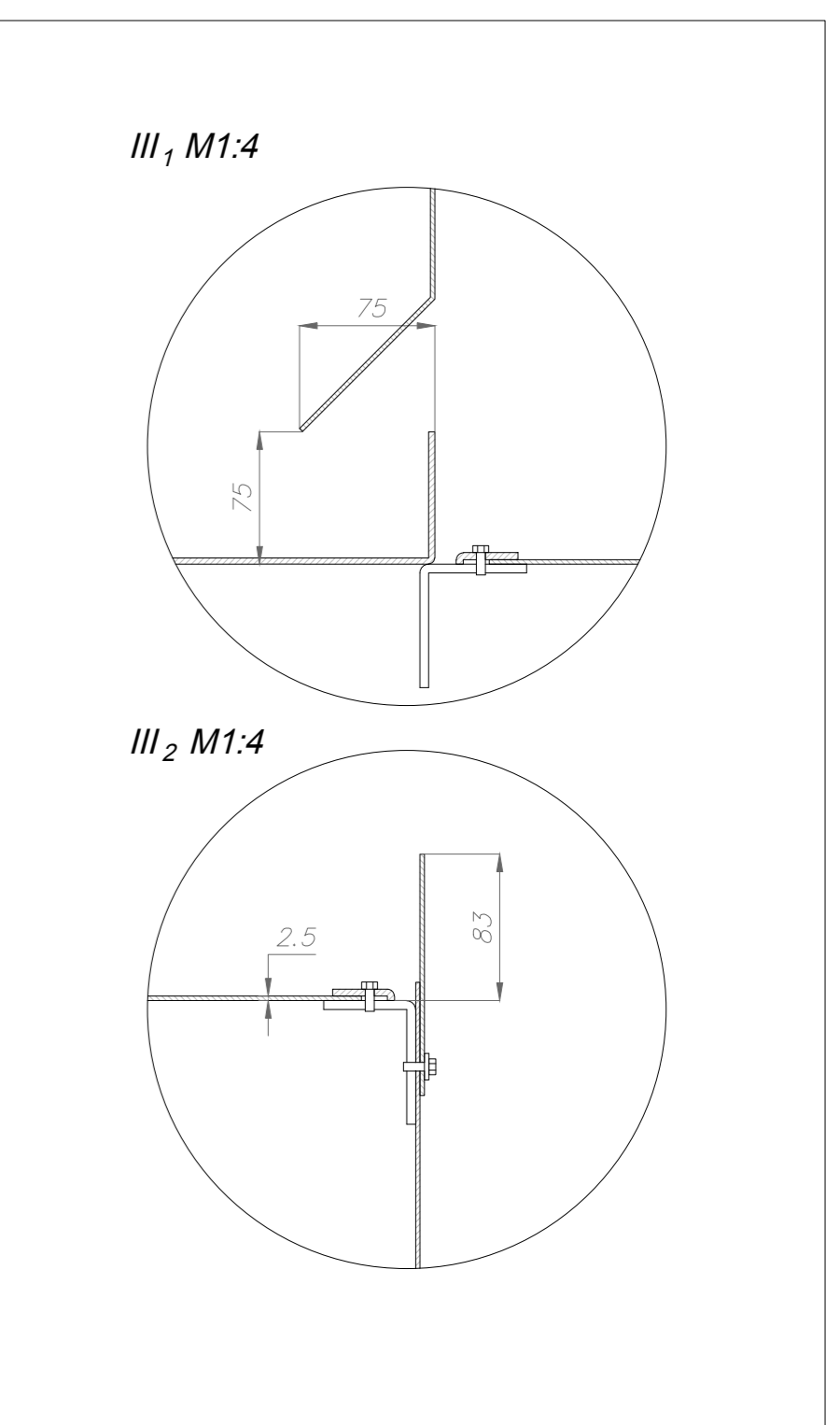
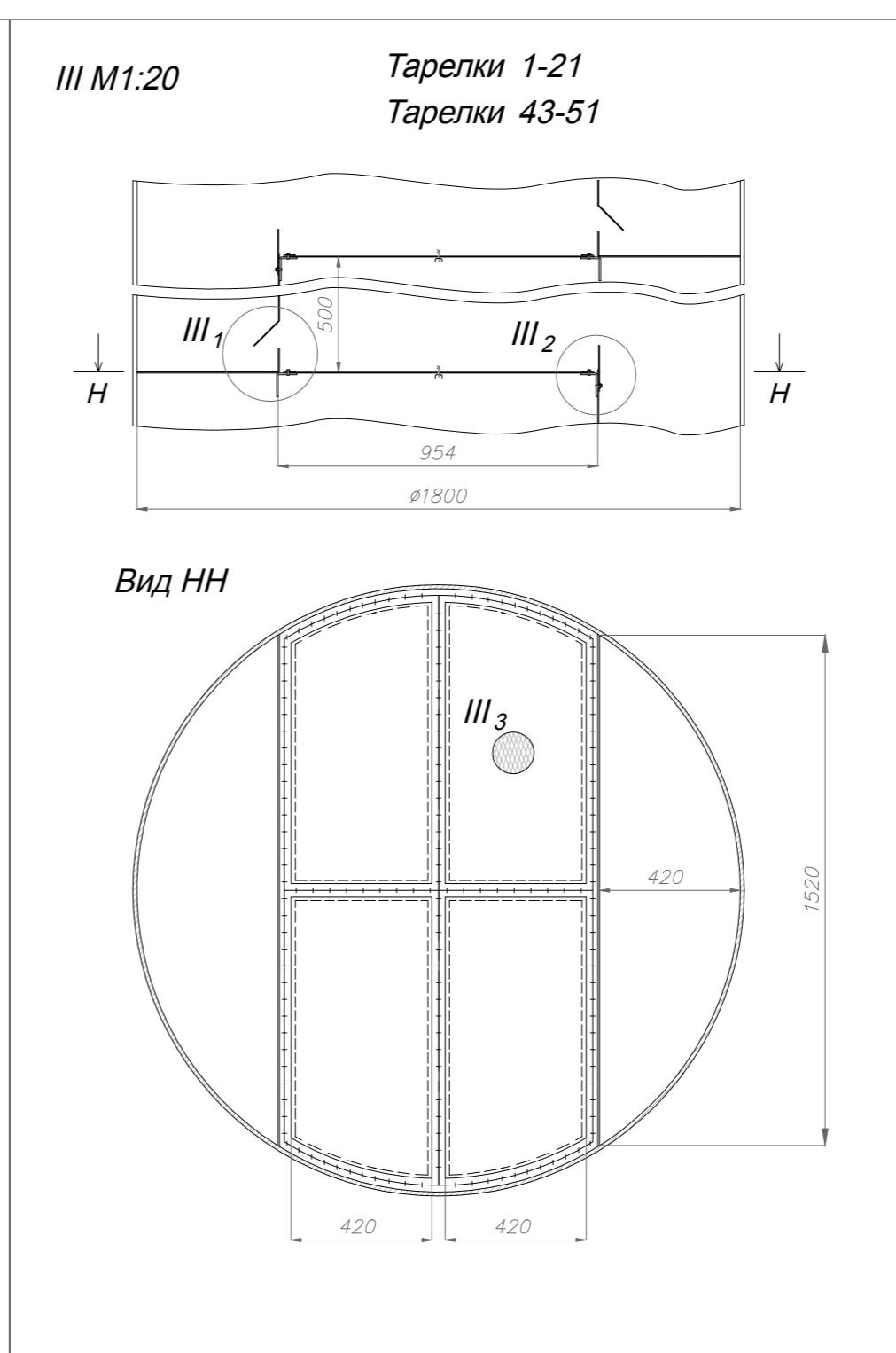
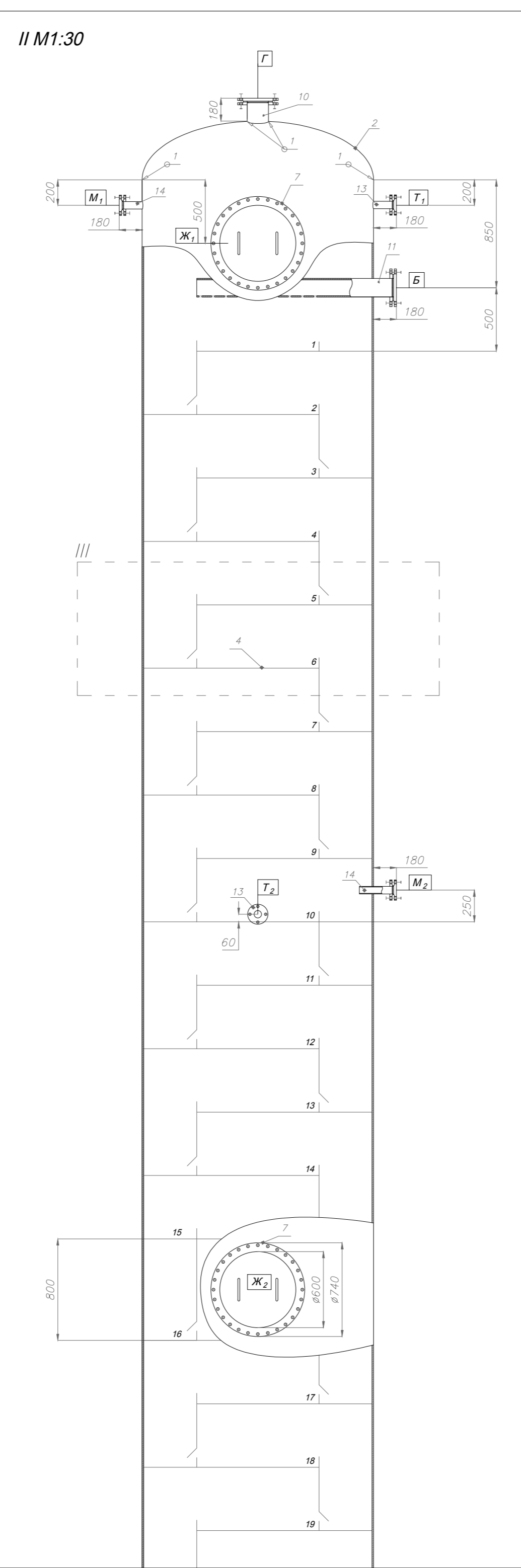
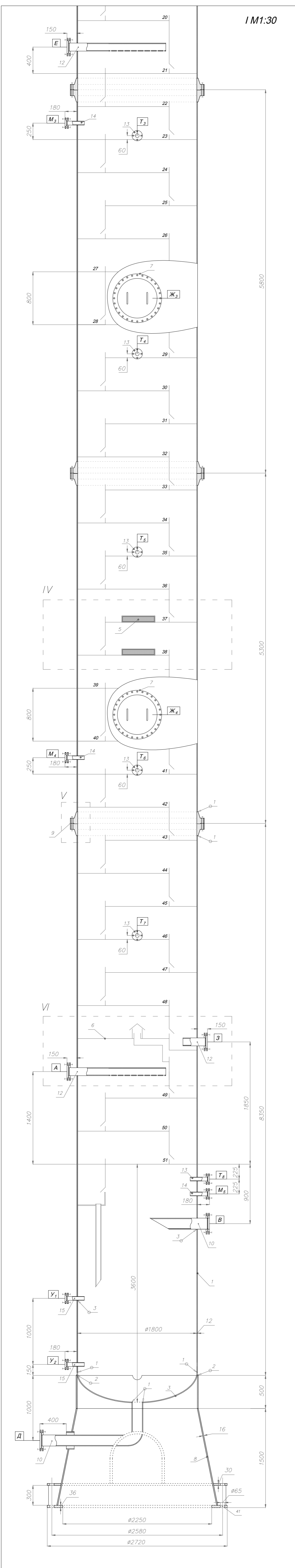
$$p_h = 2 d_h \quad (67)$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Д

Детальный материальный и тепловой баланс при оптимизированных условиях.

Поток	C4	ЕТОН	FEED	RET	FR1	FRDC	ЕТОН2	PROD	DIST
Куда	M-1	M-1	M-2	M-2	R-1	RDC	RDC		
Откуда			M-1	RDC	M-2	R-1		RDC	RDC
Покомп-ный. расход, кмоль/ч									
Этанол	0,00	53,18	53,18	4,92	58,10	13,71	2,60	4,63	0,02
Изобутилен	52,13	0,00	52,13	0,06	52,19	7,80	0,00	0,03	0,95
ЭТБЭ	0,00	0,00	0,00	4,46	4,46	48,84	0,00	51,13	0,00
1-бутен	62,56	0,00	62,56	0,53	63,09	63,09	0,00	0,22	62,34
ДИБ	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00
Молярный расход, кмоль/ч	114,69	53,18	167,87	9,97	177,84	133,46	2,60	56,02	63,31
Массовый расход, кг/ч	6434,97	2449,95	8884,92	715,52	9600,44	9600,44	120,00	5453,20	3551,73
Температура, К	315,15	315,15	309,88	407,41	317,57	316,45	303,15	428,40	343,45
Давление, МПа	1,50	1,50	1,50	1,03	1,03	1,03	1,50	1,03	1,00
Доля пара	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Энтальпия, кДж/кмоль	-26387,0	-275380,0	-105270,0	-271590,0	-114590,0	-164190,0	-276860,0	-307900,0	-15031,0
Энтальпия, кДж/кг	-470,29	-5977,50	-1988,90	-3786,10	-2122,80	-2282,40	-6009,80	-3163,30	-267,91
Плотность, кмоль/м3	10,08	16,90	11,87	8,49	11,58	8,97	17,21	5,79	9,35
Плотность, кг/м3	565,60	778,57	628,18	608,98	625,37	645,28	792,71	563,74	524,31
Молярная масса	56,11	46,07	52,93	71,73	53,98	71,94	46,07	97,34	56,10
Степень превращения ИБ после реактора R-1, % мол.			85,03						
Степень превращения ИБ после колонны RDC, % мол.			98,14						
Степень чистоты ЭТБЭ в потоке PROD, % мол.			91,27						
Степень чистоты ЭТБЭ в потоке PROD, % масс.			95,81						

Формат	Зона	Поз.	Обозначение	Наименование	Кол-во	Примечание	
A1			ФЮРА. 066212. 000 СБ	<u>Документация</u> Сборочный чертеж	1		
				<u>Сборочные единицы</u>			
		1	ФЮРА. 066212. 001	Корпус	1	s=12 мм	
		2	ФЮРА. 066212. 002	Крышка верхняя цельносварная	1	s=12 мм	
		3	ФЮРА. 066212. 003	Днище цельносварное	1	s=12 мм	
		4	ФЮРА. 066212. 004	Тарелка ситчатая ОСТ 26-805-73	51	ТС-Р2 d=4 мм D _б =1800 мм t=12 мм	
		5	ФЮРА. 066212. 005	Рама для катализатора	21		
		6	ФЮРА. 066212. 006	Полуглухая тарелка	1		
		7	ФЮРА. 066212. 007	Люк ОСТ 26-2003-83	4	Исп. 2 p _y =1,6 МПа D _б =600 мм	
		8	ФЮРА. 066212. 008	Опора АТК 24.200.04-90	1	Туп 4 D=1800 мм Q _{max} /Q _{min} =4/2,5 МН	
				<u>Детали</u>			
		9	ФЮРА. 066212. 001. 09	Фланец для обечаек	3	p _y =1,6 МПа D _б =1800 мм D _в =2025 мм	
		10	ФЮРА. 066212. 002. 10	Патрубок	3	D _y =150 мм d _н =168 мм	
		11	ФЮРА. 066212. 001. 11	Патрубок	1	D _y =125 мм d _н =146 мм	
		12	ФЮРА. 066212. 001. 12	Патрубок	3	D _y =100 мм d _н =121 мм	
		13	ФЮРА. 066212. 001. 13	Патрубок - Изм. температуры	8	D _y =50 мм d _н =57 мм	
		14	ФЮРА. 066212. 001. 14	Патрубок - Изм. давления	5	D _y =50 мм d _н =57 мм	
		15	ФЮРА. 066212. 001. 15	Патрубок - Изм. уровня	2	D _y =50 мм d _н =57 мм	
				<u>Стандартные детали</u>			
		16	ФЮРА. 066212. 001. 09. 16	Болт ОСТ 26-2037-96	192	64x3 М30	
		17	ФЮРА. 066212. 001. 09. 17	Гайка ОСТ 26-2038-96	192	64x3 М30	
		18	ФЮРА. 066212. 002. 10. 18	Фланец ГОСТ 1255-67	6	2x3 p _y =1,6 МПа D _y =150 мм d _н =168 мм	
		19	ФЮРА. 066212. 002. 10. 19	Болт ОСТ 26-2037-96	24	8x3 М20	
		20	ФЮРА. 066212. 002. 10. 20	Гайка ОСТ 26-2038-96	24	8x3 М20	
		21	ФЮРА. 066212. 001. 11. 21	Фланец ГОСТ 1255-67	2	2x1 p _y =1,6 МПа D _y =125 мм d _н =133 мм	
		22	ФЮРА. 066212. 001. 11. 22	Болт ОСТ 26-2037-96	8	8x1 М16	
		23	ФЮРА. 066212. 001. 11. 23	Гайка ОСТ 26-2038-96	8	8x1 М16	
		24	ФЮРА. 066212. 001. 12. 24	Фланец ГОСТ 1255-67	6	2x3 p _y =1,6 МПа D _y =100 мм d _н =108 мм	
		25	ФЮРА. 066212. 001. 12. 25	Болт ОСТ 26-2037-96	24	8x3 М16	
		26	ФЮРА. 066212. 001. 12. 26	Гайка ОСТ 26-2038-96	24	8x3 М16	
ФЮРА. 066212. 000							
				Реакционно- ректификационная колонна для синтеза ЭТБЭ	Лист.	Масса	Масштаб
				Спецификация	Лист	1	Листов
							2
				ТПУ. Группа 2КМ61 Приложение Е. с. 132			
Изм. Лист № документа Подпись Дата							
Разраб. Гарсия К. Э.							
Пров. Самборская М. А.							
Т. контр.							
Н. контр.							
Утв.							



Характеристики сварки

Об-ние	ГОСТ	Наименование сварки
1	ГОСТ 5264-80	С8
2	ГОСТ 5264-80	Н2
3	ГОСТ 5264-80	Т6

Таблица штуцеров

Об-ние	Наименование	Кол-во	Проход условный D, мм	Давление условное P, МПа
A	Вход питания	1	100	1,6
Б	Вход флегмы	1	125	1,6
В	Вход пара	1	150	1,6
Г	Выход паров дистиллята	1	150	1,6
Д	Выход кубового остатка	1	150	1,6
Е	Вход втор-ого этанола	1	100	1,6
Ж1,4	Лок	4	600	1,6
З	Выход бокового отбора	1	100	1,6
Т1,8	Термометр	8	50	1,6
М1,5	Выход бокового отбора	5	50	1,6
У1,2	Выход бокового отбора	2	50	1,6

ИЗМ. Лист № документа
Разраб. Гарсия К. Э.
Пров. Самборская М. А.
Т. контр.
Н. контр. Чтв.

Подпись Дата

Имя И. Подп.

Взам. инв. № Инв. № Дубл.

Подп. и дата

ФЮРА. 066212. 000 СБ

Реакционно-ректификационная колонна для синтеза ЭТБЗ

Сборочный чертеж

Лист	Масса	Масштаб
1		1:30

Лист 1 Листов 1

ТПУ. Группа 2КМ61
Приложение Е. с. 134

Программа на языке Python для выполнения анализа чувствительности при поиске множественности стационарных состояний.

```

import numpy as np
import win32com.client as win32

aspen = win32.Dispatch('Apwn.Document')
aspen.InitFromFile2('C:\ETBE\ETBE_down.apw')
aspen.Visible = False

QNF, RRF = 3000, 5
QN0, RR0 = 4500, 11
DQN, DRR = 1, 1.5

QN, RR = QN0, RR0
POINT = np.zeros(7)
OUT = np.zeros(7)

while RR >= RRF:
    while QN >= QNF:
        aspen.Tree.FindNode("\Data\Blocks\RDC\Input\QN").Value = QN
        aspen.Tree.FindNode("\Data\Blocks\RDC\Input\BASIS_RR").Value =
RR
        aspen.Engine.Run2()
        STAT = aspen.Tree.FindNode("\Data\Results Summary\Run-
Status").AttributeValue(12)
        QN1, CONV1, XETBE1 = POINT[0], POINT[2], POINT[3]
        IBF =
aspen.Tree.FindNode("\Data\Streams\FEED\Output\MOLEFLOW\MIXED\ISOBU-
01").Value
        IBD =
aspen.Tree.FindNode("\Data\Streams\DIST\Output\MOLEFLOW\MIXED\ISOBU-
01").Value
        IBP =
aspen.Tree.FindNode("\Data\Streams\PROD\Output\MOLEFLOW\MIXED\ISOBU-
01").Value
        CONV = (IBF-(IBD+IBP))/IBF*100
        XETBE =
aspen.Tree.FindNode("\Data\Streams\PROD\Output\MASSFLOW3\TERT--
01").Value/ \

aspen.Tree.FindNode("\Data\Streams\PROD\Output\MASSFLMX_LIQ").Value*100
        DCONV = np.arctan((CONV-CONV1)/(QN-QN1))
        DXETBE = np.arctan((XETBE-XETBE1)/(QN-QN1))
        POINT = np.array([QN, RR, CONV, XETBE, DCONV, DXETBE, STAT])
        print("%8.6f %8.6f %8.6f %8.6f %8.6f %8.6f %3i" % (POINT[0],
POINT[1], POINT[2], \
        POINT[3], POINT[4], POINT[5], POINT[6]))
        OUT = np.vstack((OUT,POINT))
        if len(OUT) == 21:
            OUT = OUT[1:len(OUT),:]

```

```

        with open('track_RR11.txt','a+') as file:
            for i in range(len(OUT)):
                file.write("%8.6f %8.6f %8.6f %8.6f %8.6f %8.6f
%3i\n" % (OUT[i,0], OUT[i,1], \
OUT[i,2], OUT[i,3], OUT[i,4], OUT[i,5],
OUT[i,6]))
                file.close()
            OUT = np.zeros(7)
            QN = QN - DQN
            QN = QN0
            RR = RR - DRR
    aspen.Close()

```


Приборы измерения установлены по месту

Тип	Тип измерения	Определение местного прибора	Характеристики
P1	Измерение расхода по величине переменного перепада давления на сужающем устройстве трубопровода.	Метран-100-ДД. Модель 1450 МП	Рабочий диапазон давления: 0,1 - 2,5 Мпа Шкала измерения расхода: 0 - 2,5 кг/мин Тип выходного сигнала: 4 - 20 мА Степень защиты: IP65 Материал мембраны: сплав 36НХТЮ Материал деталей полостей, контактирующих с рабочей средой: углеродная сталь с покрытием Нейтральные и агрессивные среды
M1	Измерение избыточного давления.	Метран-100-ДИ. Модель 1152 МП	Рабочий диапазон давления: 0,1 - 2,5 Мпа Шкала измерения давления: 0 - 16 кгс/см ² Тип выходного сигнала: 4 - 20 мА Степень защиты: IP54 Материал мембраны: сплав 36НХТЮ Материал деталей полостей, контактирующих с рабочей средой: 12Х18Н10Т Нейтральные и агрессивные среды
У1	Измерение уровня	УБ-ЭМ. Модель 2620	Максимальное допустимое избыточное давление: 4 Мпа Рабочий диапазон уровня: 0,25 - 10 м Шкала измерения уровня: 0 - 100% Тип выходного сигнала: 4 - 20 мА Степень защиты: IP65 Материал мембраны: сплав 36НХТЮ Материал буйка: 12Х18Н10Т Материал корпусных деталей: сталь 20 Нейтральные и агрессивные среды
T1	Измерение температуры	Метран-281	Тип первичного преобразователя: ТХА (К) (термоэлектрический) Диапазон измеряемых температур: -50...1000 °С

Тип	Тип измерения	Определение местного прибора	Характеристики
			Шкала измерения температуры: -50 - +150 °С Тип выходного сигнала: 4 - 20 мА Диапазон длин монтажной части: 30 - 3150 мм Степень защиты: IP65 Материал защитной арматуры: 12Х18Н10Т Нейтральные и агрессивные среды

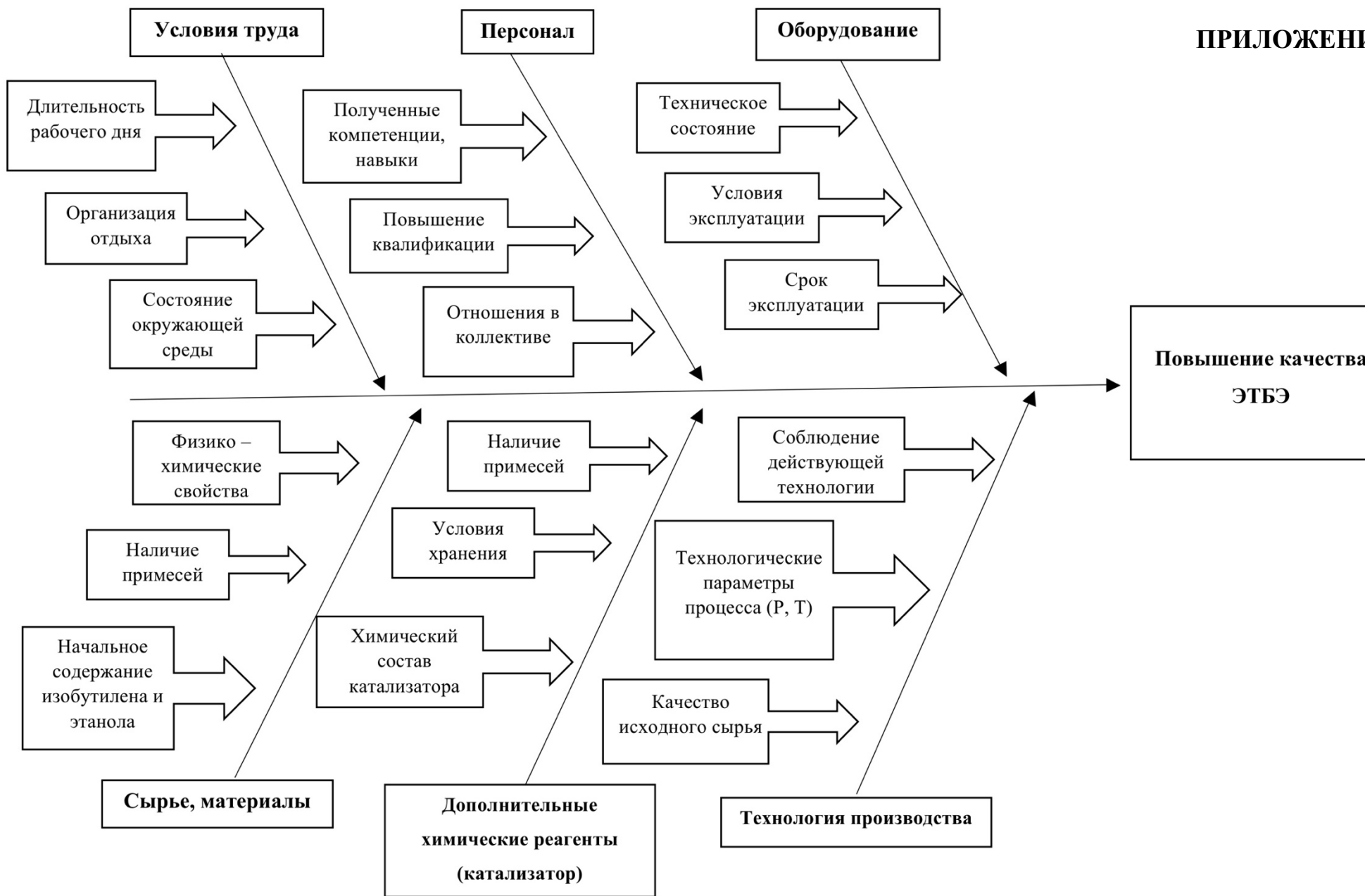
Определение местных приборов

Описание измерения	Обозначение местного прибора (прибора на щите)	Назначение местного прибора	Определение местного прибора	Тип	Кол-во местных приоб.
Уровень в емкости Е-1	LT 1 (LRC 1)	Буйковый прибор для преобразования и передачи уровня. Без индикаторного устройства. Установка преобразователя на выносной камере через теплоотводящий патрубок.	УБ-ЭМ. Модель 2620	У1	1
Расход питания из емкости Е-1	FT 2 (FR 2)	Прибор для преобразования и передачи расхода по величине переменного перепада давления на сужающем устройстве трубопровода	Метран-100-ДД Модель 1450 МП	Р1 0 - 12,5 кг/с	1
Состав питания из емкости Е-1	QE 18 (QR 18)	Циркуляционная петля для отборов - сбросов на хроматограф	-	-	1
Расход вторичного этанола в колонну К-1	FT 9 (FRC 9)	Прибор для преобразования и передачи расхода по величине переменного перепада давления на сужающем устройстве трубопровода. Без индикаторного устройства.	Метран-100-ДД Модель 1450 МП	Р1 0 - 3,3 кг/мин	1
Температура верха колонны К-1	TE 12/1-2 (TR 12)	Измерительный преобразователь температуры. Термоэлектрические. Норма и технический показатель: 70 °С.	Метран-281	Т1	2

Описание измерения	Обозначение местного прибора (прибора на щите)	Назначение местного прибора	Определение местного прибора	Тип	Кол-во местных приоб.
		Точность: 1,0. Без индикаторного устройства. Монтаж в соединительной головке.			
Давление верха колонны К-1	РТ 18/1-2 (PR 18)	Прибор для преобразования и передачи избыточного давления. Без индикаторного устройства.	Метран-100-ДИ Модель 1152 МП	ИД1	2
Температура реакционных тарелок колонны К-1 Разность температур реакционной части колонны К-1	ТЕ 10/1-4 (TRSA 10 Н Н1) (TDR 11) (MPC 11)	Измерительный преобразователь температуры. Термоэлектрические. Н: Т = 95 °С; Н1: Т = 100 °С. Требуемая точность: 1,0. Без индикаторного устройства. Монтаж в соединительной головке.	Метран-281	Т1	4
Перепад давления через реакционную часть колонны К-1	РТ 17/1-2 (PDR 17) (PDA 17)	Прибор для преобразования и передачи избыточного давления. Норма: Н - ΔР = 12 кПа Без индикаторного устройства.	Метран-100-ДИ. Модель 1152 МП	ИД1	2
Температура нижней части колонны К-1	ТЕ 11 (MPC 11)	Измерительный преобразователь температуры. Термоэлектрические. Норма: 133 °С. Точность: 1,0. Без индикаторного устройства. Монтаж в соединительной головке.	Метран-281	Т1	1
Температура куба колонны К-1	ТЕ 12/3 (TR 12)	Измерительный преобразователь температуры. Термоэлектрические. Норма: 155 °С. Точность: 1,0. Без индикаторного устройства. Монтаж в соединительной головке.	Метран-281	Т1	1

Описание измерения	Обозначение местного прибора (прибора на щите)	Назначение местного прибора	Определение местного прибора	Тип	Кол-во местных приоб.
Давление куба колонны К-1	PT 18/3 (PR 18)	Прибор для преобразования и передачи избыточного давления. Без индикаторного устройства.	Метран-100-ДИ Модель 1152 МП	ИД1	1
Уровень в кубе колонны К-1	LT 3 (LRC 3)	Буйковый прибор для преобразования и передачи уровня. Без индикаторного устройства. Установка преобразователя на выносной камере через теплоотводящий патрубок.	УБ-ЭМ. Модель 2620	У1	1
Давление в емкости Е-2	PT 15 (PRC 15)	Прибор для преобразования и передачи избыточного давления. Без индикаторного устройства.	Метран-100-ДИ Модель 1152 МП	ИД1	1
Уровень в емкости Е-2	LT 16 (LRC 16)	Буйковый прибор для преобразования и передачи уровня. Без индикаторного устройства. Установка преобразователя на выносной камере через теплоотводящий патрубок.	УБ-ЭМ. Модель 2620	У1	1
Расход флегмы из емкости Е-2	FT 14 (FR 14)	Прибор для преобразования и передачи расхода по величине переменного перепада давления на сужающем устройстве трубопровода	Метран-100-ДД Модель 1450 МП	Р1 0 - 12,5 кг/с	1
Состав флегмы из емкости Е-2	QE 13 (QR 13)	Циркуляционная петель для отборов - сбросов на хроматограф	-	-	1
Расход бокового отбора из колонны К-1	FT 8 (FRC 8)	Прибор для преобразования и передачи расхода по величине переменного перепада давления на сужающем устройстве трубопровода	Метран-100-ДД Модель 1450 МП	Р1 0 - 12,5 кг/с	1
Состав бокового отбора из колонны К-1	QE 7 (QR 7)	Циркуляционная петель для отборов - сбросов на хроматограф	-	-	1
Расход водяного	FT 6	Прибор для преобразования и передачи	Метран-100-ДД	Р1	1

Описание измерения	Обозначение местного прибора (прибора на щите)	Назначение местного прибора	Определение местного прибора	Тип	Кол-во местных приб.
пара в кипятильник Т-1	(FR 6)	расхода по величине переменного перепада давления на сужающем устройстве трубопровода	Модель 1450 МП	0 - 12,5 кг/с	
Расход товарного ЭТБЭ	FT 4 (FR 4)	Прибор для преобразования и передачи расхода по величине переменного перепада давления на сужающем устройстве трубопровода	Метран-100-ДД Модель 1450 МП	P1 0 - 12,5 кг/с	1
Состав товарного ЭТБЭ	QE 5 (QR 5)	Циркуляционная петель для отборов - сбросов на хроматограф	-	-	1
Итого					27



ПРИЛОЖЕНИЕ К

№	Название	Продолжительность выполнения работ																			
		2016				2017								2018							
		сентябрь	октябрь	ноябрь	декабрь	январь	февраль	март	апрель	май	сентябрь	октябрь	ноябрь	декабрь	январь	февраль	март	апрель	май	июнь	
1.	Составление и утверждение технического задания	■																			
2.	Выбор направления исследований		■	■																	
3.	Календарное планирование работ по теме				■																
4.	Изучение литературы: назначение процесса, исследование современных методов для реализации математической модели					■	■	■	■	■	■	■	■								
5.	Разработка математической модели и способа оптимизации													■	■						
6.	Расчет влияния основных технологических параметров на эффективность процесса															■	■				

