

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 18.04.01 Химическая технология
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Повышение эффективности процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами

УДК 661.716.1.4.095.253

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Вакалова Снежана Евгеньевна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Чузлов Вячеслав Алексеевич	К.Т.Н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	К.Э.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сечин Андрей Александрович	К.Т.Н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ивашкина Елена Николаевна	Д.Т.Н.		

Томск – 2022 г.

**Запланированные результаты обучения по образовательной программе
«Химическая технология топлива и газа»
(направление подготовки 18.04.01 «Химическая технология»)**

Код компетенции СУОС	Наименование компетенции СУОС (самостоятельно устанавливаемого образовательного стандарта)
Общекультурные (универсальные) компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий
УК(У)-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способен организовать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(-ых) языке(-ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности
ОПК(У)-2	Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОПК(У)-3	Способность к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки
ОПК(У)-4	Готовность к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез
ОПК(У)-5	Готовность к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности

Код компетенции СУОС	Наименование компетенции СУОС (самостоятельно устанавливаемого образовательного стандарта)
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способность организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей
ПК(У)-2	Готовность к поиску, обработке, анализу, систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик, средств решения задачи
ПК(У)-3	Способность использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
Дополнительные профессиональные компетенции (профессиональные компетенции, установленные университетом)	
ДПК(У)-1	Готовность к решению профессиональных производственных задач – контролю технологического процесса, разработке параметров проведения технологического процесса, разработке технологических расходных коэффициентов сырья и материалов, энергоресурсов, к выбору основного и вспомогательного оборудования
ДПК(У)-2	Способность использовать математические модели и пакеты прикладных программ для описания и прогнозирования различных явлений
ДПК(У)-3	Способность проводить технологические и технические расчеты по проектам, технико-экономический анализ проекта
ДПК(У)-4	Способность разрабатывать учебно-методической документации для реализации образовательных программ

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 18.04.01 Химическая технология
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

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

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

<i>Магистерской диссертации</i>

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ02	Вакалова Снежана Евгеньевна

Тема работы:

Повышение эффективности процесса серноокислотного алкилирования изобутана олефинами	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	28.01.2022 № 28-93/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе (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.).</p>	<p>Объект исследования – установка серноокислотного алкилирования изобутана олефинами.</p> <p>Технология предназначена для получения экологически чистых высокооктановых компонентов товарного бензина.</p>
---	---

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов (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).</p>	<p>Введение 1 Литературный обзор 1.1 Катализаторы процесса алкилирования изобутана олефинами 1.2 Технологии алкилирования изобутана бутиленом 1.3 Основные подходы к моделированию процесса алкилирования изобутана бутиленом 2 Объект и методы исследования 2.1 Характеристика объекта исследования 2.2 Химизм процесса алкилирования изобутана бутиленом 2.3 Кинетическая модель процесса сернокислотного алкилирования 2.4 Проверка кинетической модели на адекватность 2.5 Моделирование блока ректификации 2.6 Проверка адекватности модели ректификации 3 Экспериментальная часть 3.1 Анализ сырья 3.2 Анализ работы промышленной установки 3.3 Результаты исследования 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 5 Социальная ответственность</p>
<p>Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)</p>	

<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)</p>	
<p>Раздел</p>	<p>Консультант</p>
<p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p>	<p>Рыжакина Татьяна Гавриловна</p>
<p>Социальная ответственность</p>	<p>Сечин Андрей Александрович</p>

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	
--	--

Задание выдал руководитель:

<p>Должность</p>	<p>ФИО</p>	<p>Ученая степень, звание</p>	<p>Подпись</p>	<p>Дата</p>
<p>Доцент</p>	<p>Чузлов Вячеслав Алексеевич</p>	<p>к. т. н.</p>		

Задание принял к исполнению студент:

<p>Группа</p>	<p>ФИО</p>	<p>Подпись</p>	<p>Дата</p>
<p>2ДМ02</p>	<p>Вакалова Снежана Евгеньевна</p>		

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
Профиль «Химическая технология топлива и газа»
Уровень образования магистратура
Период выполнения весенний семестр 2021/2022 учебного года

Форма представления работы:

<i>Магистерская диссертация</i>
(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
11.03.2022 г.	Введение	10
25.03.2022 г.	Технология процесса жидкофазного алкилирования. Процесс алкилирования на твердом катализаторе. Сравнение технологий алкилирования. Химизм процесса. Гетерогенные кислотные катализаторы процесса алкилирования.	10
08.04.2022 г.	Цель и задачи исследования. Функционирование установки сернокислотного алкилирования. Характеристика объекта исследования. Кинетическая модель алкилирования. Моделирование блока ректификации.	20
29.04.2022 г.	Результаты проведенного исследования. Анализ лабораторных данных. Анализ экспериментальных данных технологического режима. Расчет потоков при действующем технологическом режиме. Оценка влияния мольного соотношения изобутан / олефины. Рекомендации по ведению технологического режима. Рекомендации по режиму ректификации для повышения качества продуктового алкилата.	50
25.05.2022 г.	Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». Раздел «Социальная ответственность». Заключение.	10

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Чузлов Вячеслав Алексеевич	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Вакалова Снежана Евгеньевна		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ивашкина Елена Николаевна	Д.Т.Н.		

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ02	Вакалова Снежана Евгеньевна

Школа	ИШПР	Отделение	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление	18.04.01 Химическая технология

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:	
1. Стоимость ресурсов научного исследования: материальных, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	<i>Работа с научной литературой, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах</i>
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив разработки проекта с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	<i>Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта</i>
2. Планирование и формирование бюджета разработки	<i>Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение бюджета научного исследования</i>
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности разработки	<i>Проведение оценки экономической эффективности, ресурсоэффективности и сравнительной эффективности различных вариантов исполнения исследования</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):	
1. Оценка конкурентоспособности технических решений	
2. Матрица SWOT	
3. График проведения и бюджет проекта	
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности разработки	

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	31.01.2022
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	к.э.н.		31.01.2022

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Вакалова Снежана Евгеньевна		31.01.2022

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа		ФИО	
2ДМ02		Вакалова Снежана Евгеньевна	
Школа	ИШПР	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление	18.04.01 Химическая технология

Тема ВКР:

Повышение эффективности процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
Введение Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения.	Объект исследования – процесс сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом Область применения – нефтехимическая промышленность Работа выполнялась по адресу г. Томск, пр-кт. Ленина, д.43-А. Учебный корпус № 2. Этаж. 1, 133 аудитория
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при разработке проектного решения: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	– Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019) – ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. – ГОСТ 12.4.011-89 (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация
2. Производственная безопасность при разработке проектного решения: – Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов – Расчет уровня опасного или вредного производственного фактора	– Отклонение показателей микроклимата; – Повышенный уровень шума; – Недостаточная освещенность рабочей зоны; – Электрический ток; – Пожарная безопасность;
3. Экологическая безопасность при разработке проектного решения:	Воздействие на литосферу оказывают отходы, образующиеся при разработке проекта: бумага, пластик, отработанные люминесцентные лампы и т.д. Основной задачей предотвращения влияния является подбор способов их утилизации. Воздействие на гидросферу и атмосферу в процессе разработки проектного решения – минимально.

4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при разработке проектного решения:

Возможной и наиболее типичной ЧС является возникновение пожара на рабочем месте

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сечин Андрей Александрович	К.Т.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Вакалова Снежана Евгеньевна		

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 121 страницу, 27 рисунков, 42 таблицы, 33 источника, 3 приложения.

Ключевые слова: алкилирование, изобутан, олефины, бутилены, модель, ректификационная колонна.

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

Объектом исследования является технология процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленами.

Цель работы – создание математической модели технологии сернокислотного алкилирования изобутана олефинами для повышения эффективности данного процесса.

В ходе выполнения работы проведен анализ сырьевых потоков, анализ работы промышленной установки; для нового набора исходных данных адаптирована ранее созданная модель реакторного блока; смоделирован блок разделения; оптимизировано мольное соотношение изобутан:олефины и подобраны технологические режимы для колонны-дебутанизатора, позволяющие минимизировать содержание н-бутана в потоке продуктового алкилата. Также была рассчитана экономическая эффективность и изучена социальная ответственность.

Содержание

Введение.....	15
1 Литературный обзор	16
1.1 Катализаторы процесса алкилирования изобутана олефинами	16
1.1.1 Гомогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами	17
1.1.2 Гетерогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами	18
1.2 Технологии алкилирования изобутана бутиленами	19
1.2.1 Технология алкилирования Haldor Topsøe A/S.....	19
1.2.2 Технология алкилирования ExSact компании Exelus.....	20
1.2.3 Технология алкилирования AlkyClean.....	21
1.2.4 Технология фтороводородного алкилирования Phillips Petroleum	22
1.2.5 Технология сернокислотного алкилирования STRATCO	23
1.2.6 Технология сернокислотного алкилирования ExxonMobil	24
1.2.7 Технология сернокислотного алкилирования ГК РАН.....	25
1.2 Основные подходы к моделированию процесса алкилирования изобутана бутиленом.....	26
2 Объект и методы исследования	28
2.1 Характеристика объекта исследования.....	28
2.2 Химизм процесса алкилирования изобутана олефинами	30
2.3 Кинетическая модель процесса сернокислотного алкилирования	33
2.4 Проверка кинетической модели на адекватность	35
2.5 Моделирование блока ректификационных колонн	37
2.6 Проверка адекватности моделей ректификационных колонн.....	40
3 Экспериментальная часть.....	42
3.1 Анализ сырья	42

3.1.1 Анализ состава бутан-бутиленовой фракции.....	42
3.1.2 Анализ состава изобутановой фракции и фракции изобутана-хладагента.....	45
3.2 Анализ работы промышленной установки.....	46
3.3 Результаты исследования	50
3.3.1 Оптимизация мольного соотношения изобутан:олефины.....	50
3.3.2 Снижение содержания н-бутана в составе алкилата.....	53
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение...	57
4.1 Предпроектный анализ	57
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	57
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	58
4.1.3 SWOT-анализ.....	60
4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	64
4.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования.....	65
4.2 Инициация проекта	65
4.3 Планирование управления научно-техническим проектом.....	67
4.3.2 План проект	67
4.4 Бюджет научного исследования	69
4.4.1 Организационная структура проекта	75
4.4.2 План управления коммуникациями проекта	75
4.4.3 Реестр рисков проекта	76
4.5 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности	76
4.5.1 Оценка абсолютной эффективности исследования.....	76

4.5.2 Оценка сравнительной эффективности исследования	82
5 Социальная ответственность	86
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	86
5.2 Производственная безопасность.....	87
5.2.1 Отклонение показателей микроклимата	89
5.2.2 Повышенный уровень шума	89
5.2.3 Недостаточная освещенность рабочей зоны	90
5.2.3.1 Расчет искусственного освещения	91
5.2.4 Электрический ток	93
5.2.5 Пожарная безопасность	93
5.3 Экологическая безопасность.....	94
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	95
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	97
Список использованных источников	98
Приложение А	102
Приложение Б	105
Приложение В.....	109

Введение

Сернокислотное алкилирование изобутана олефинами – один из основных способов получения высокооктановых компонентов бензина. Оптимизация энерго- и ресурсоэффективности работы установок сернокислотного алкилирования – актуальная задача нефтеперерабатывающей промышленности.

Применение математического моделирования значительно упрощает решение данной задачи за счет прогнозирующей способности моделей, разработанных с учетом термодинамических и кинетических закономерностей процесса.

Таким образом, **целью работы** является создание математической модели технологии сернокислотного алкилирования изобутана олефинами для повышения эффективности данного процесса.

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

1. Изучение и обработка данных хроматографического анализа сырья и продуктов процесса сернокислотного алкилирования.
2. Адаптация модели реакторного блока.
3. Создание модели блока разделения.
4. Оптимизация мольного соотношения изобутан:олефины.
5. Снижение содержания н-бутана в составе продуктового алкилата.

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

- Практическая значимость:
- Разработана модель блока разделения.
- Оптимизировано мольное соотношение изобутан:олефины.
- Подобраны технологические режимы для колонны-дебутанизатора, позволяющие снизить содержание н-бутана в потоке продуктового алкилата.

Научная новизна: установлены кинетические параметры промышленного процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.

1 Литературный обзор

Алкилирование – обобщенное название процессов, в ходе которых в молекулы веществ внедряется интермедиат, т.е. алкил, представляющий собой частицу алкана со свободным электроном. В нефтяной промышленности алкилирование относят к каталитическим процессам: катализатор необходим для переноса водорода и получения карбкатиона.

Целевым продуктом процесса алкилирования является высокооктановый алкилат [1], состоящий преимущественно из более высококипящих парафиновых углеводородов. В промышленности алкилат используют для улучшения свойств бензинов.

К наиболее перспективным направлениям исследований в нефтеперерабатывающей промышленности относится исследование процесса алкилирования изобутана олефинами. Данный вид алкилирования служит основным источником получения высокооктановых бензиновых фракций с улучшенной детонационной стойкостью [2].

В магистерской диссертации в основе исследования процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами лежит метод математического моделирования, наиболее точно позволяющий прогнозировать работу промышленной установки.

1.1 Катализаторы процесса алкилирования изобутана олефинами

К основным типам катализаторов алкилирования изобутана олефинами относят гомогенные и гетерогенные катализаторы. В данном подразделе приведены их основные характеристики.

1.1.1 Гомогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами

Плавиковая и серная кислоты – основные жидкофазные катализаторы промышленного процесса алкилирования. Основные свойства кислот-катализаторов приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Физико-химические свойства катализаторов [3]

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

При применении плавиковой кислоты в качестве катализатора скорость реакций выше, чем при применении серной – это вызвано тем, что плавиковая кислота растворяет больше изобутана на 1-2 порядка [4].

Являясь сильными, и фтороводородная, и серная кислоты обладают высокой коррозионной активностью и токсичностью. Полученный в ходе алкилирования продукт необходимо выделять и нейтрализовать, а отработанные кислоты требуют утилизации. Помимо вышеперечисленного к недостаткам относится опасное воздействие на организм человека и природу.

1.1.2 Гетерогенные катализаторы алкилирования изобутана олефинами

Исследования гетерогенных катализаторов процесса алкилирования ведутся более 35 лет, начиная с $AlCl_3$, представляющего собой твердую кислоту Льюиса, и углубляясь в разработки различных модификаций ионообменных смол.

Применение гетерогенных катализаторов процесса алкилирования имеет ряд преимуществ:

- снижает коррозию;
- повышает селективность процесса;
- облегчает процесс отделения продукта – алкилата;
- упрощает регенерацию катализатора.

В настоящее время гетерогенные катализаторы процесса алкилирования – это каталитические системы, в основе которых носители – цеолиты, оксиды, катиониты, промотированные катионами металлов: рутений, платина, никель, палладий. Промышленное применение данных катализаторов затруднено, т.к. ведет к значительному удорожанию продукта. Для минимизации затрат при применении гетерогенных катализаторов активно исследуют медьсодержащие носители и их эффективность.

Для медных катализаторов носителем служат синтетические цеолиты типа модернит и фожазит NaY [5], пропитку осуществляют раствором хлорида меди (II).

В качестве альтернативы по отношению к гетерогенным и гомогенным катализаторам в процессе алкилирования изобутана олефинами выступает применение ионных жидкостей: проведены исследования ионной жидкости состава 1-метил-3-бутилимидазолий хлорид ($[BMIM]Cl$) – хлорид алюминия [6].

1.2 Технологии алкилирования изобутана бутиленами

В данном разделе рассмотрены наиболее распространенные технологии алкилирования изобутана олефинами.

1.2.1 Технология алкилирования Haldor Topsøe A/S

В технологии алкилирования компании Haldor Topsøe A/S в качестве катализатора выступает сверхкислота, адсорбированная на твердом носителе. Реакции осуществляются в реакторе с неподвижным слоем катализатора.

Принципиальная схема алкилирования по технологии Haldor Topsøe A/S приведена на рисунке 1.

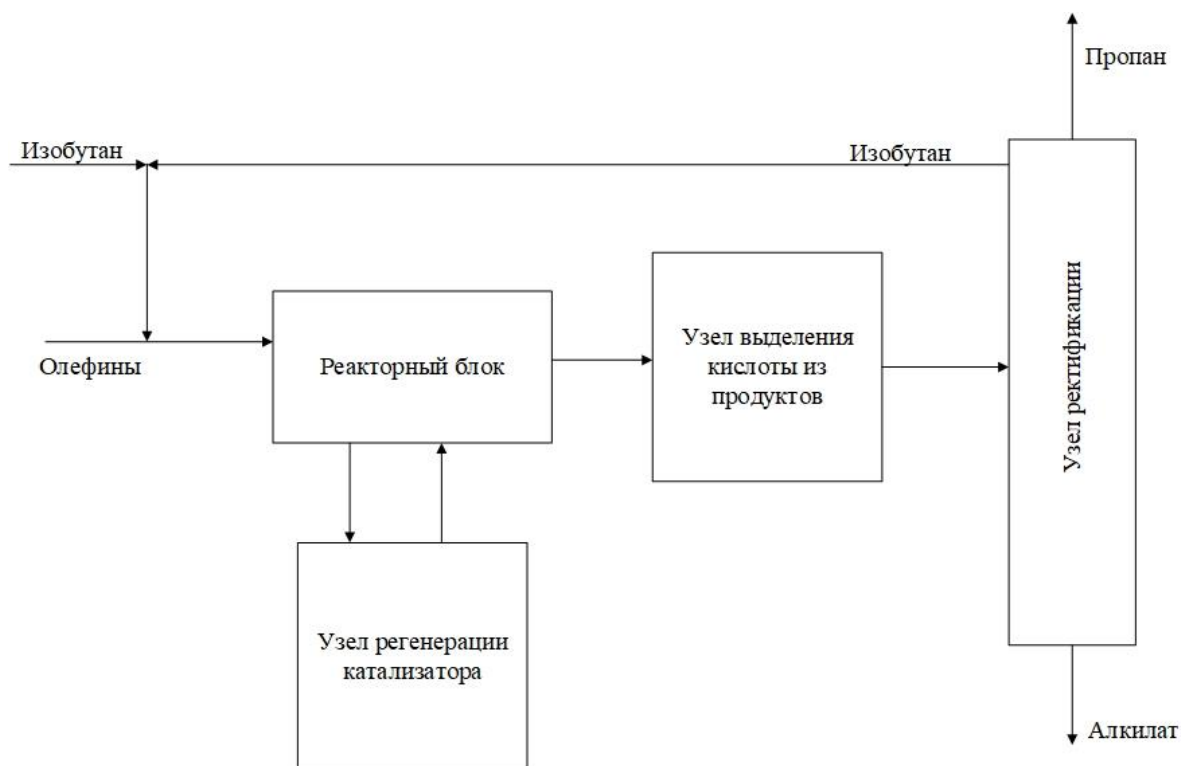


Рисунок 1 – Принципиальная схема алкилирования по технологии фирмы Haldor Topsøe A/S [7]

Сырьевой поток изобутана и поток изобутана – рециркулята смешиваются с олефинами и поступают в реакторный блок. Далее продуктовый поток, пройдя узел выделения кислоты из продуктов, направляется в узел ректификации, в котором осуществляется выделение фракций C₃, i-C₄, C₄ и алкилата.

Алкилат, полученный по технологии компании Haldor Topsøe A/S является пригодным для компаундирования, т.к. содержание серы и давление насыщенных паров соответствует требованиям, предъявляемым к качеству автомобильных бензинов.

1.2.2 Технология алкилирования ExSact компании Exelus

Технология алкилирования ExSact отличается непрерывностью ведения процесса за счет наличия реактора – регенератора для твердого катализатора.

На рисунке 2 приведена принципиальная схема процесса алкилирования компании Exelus

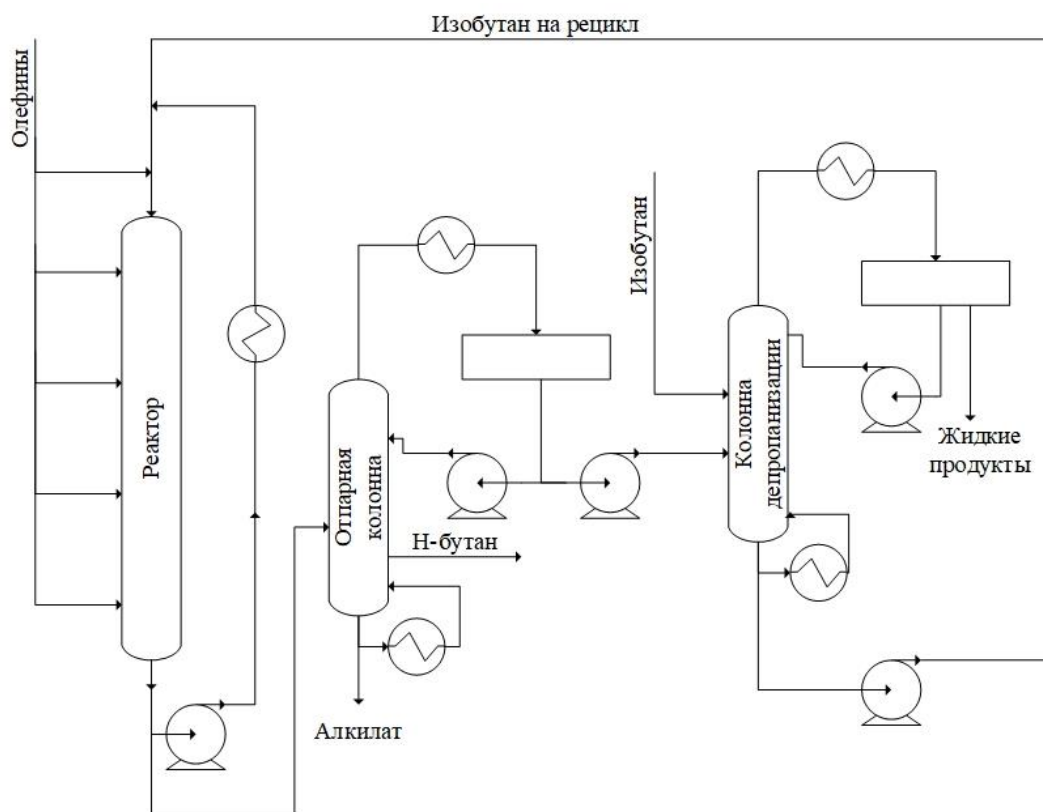


Рисунок 2 – Принципиальная схема процесса ExSact [8]

Олефиновое сырье параллельными потоками подается в слои катализатора. На входе в реактор олефиновое сырье смешивается с изобутаном, поступающим из блока фракционирования и реакционным изобутаном. Отпарная колонна служит для отделения продуктового потока алкилата. Поток, идущий головным погоном колонны, направляется в депропанизатор.

1.2.3 Технология алкилирования AlkyClean

В технологии алкилирования AlkyClean применяется твердокислотный цеолитный катализатор, активные центры которого образованы без нанесения кислот на поверхность цеолита. На рисунке 3 представлена упрощенная блок-схема процесса AlkyClean.

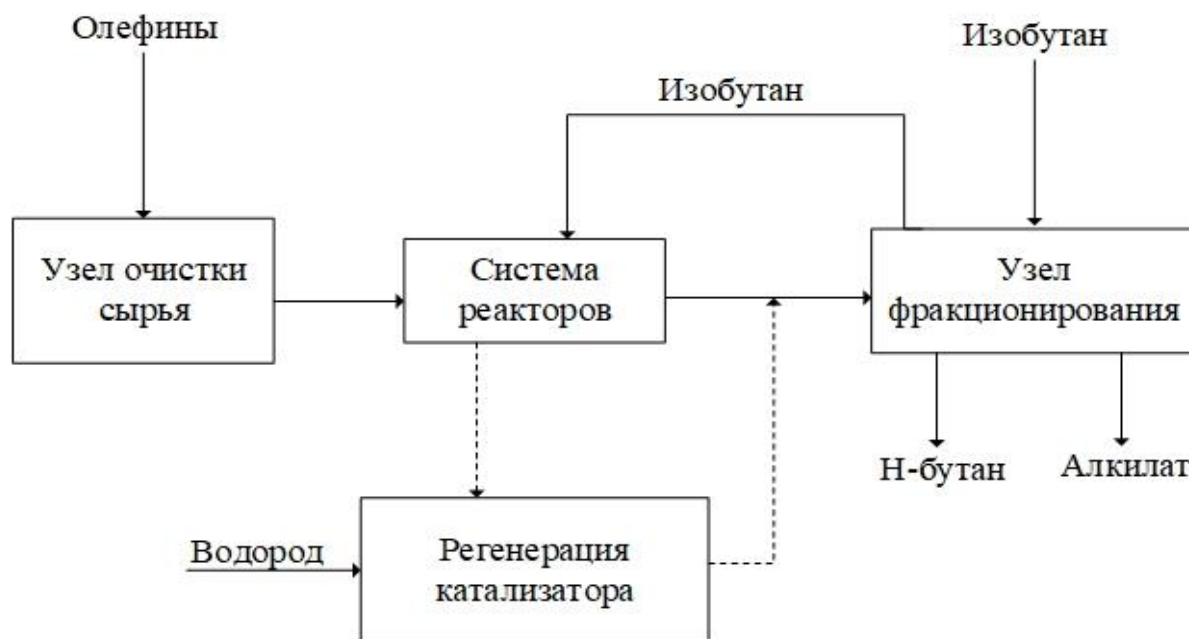


Рисунок 3 – Блок – схема процесса AlkyClean [9]

Согласно рисунку 3, технология алкилирования состоит из четырех блоков. Изначально олефины подаются в узел очистки сырья, далее они направляются в систему реакторов, в которую также подается изобутан, извлекаемый в узле фракционирования. В технологической схеме предусмотрена регенерация катализатора, которая осуществляется в среде водорода.

К основным преимуществам технологии, помимо низкой коррозионной активности катализатора и его устойчивости к примесям в сырье, можно отнести также высокую эффективность производства, низкие производственные затраты и высокую окупаемость технологии.

1.2.4 Технология фтороводородного алкилирования Phillips Petroleum

В технологии алкилирования Phillips Petroleum в качестве катализатора применяется плавиковая кислота.

Типовая схема технологии изображена на рисунке 4.

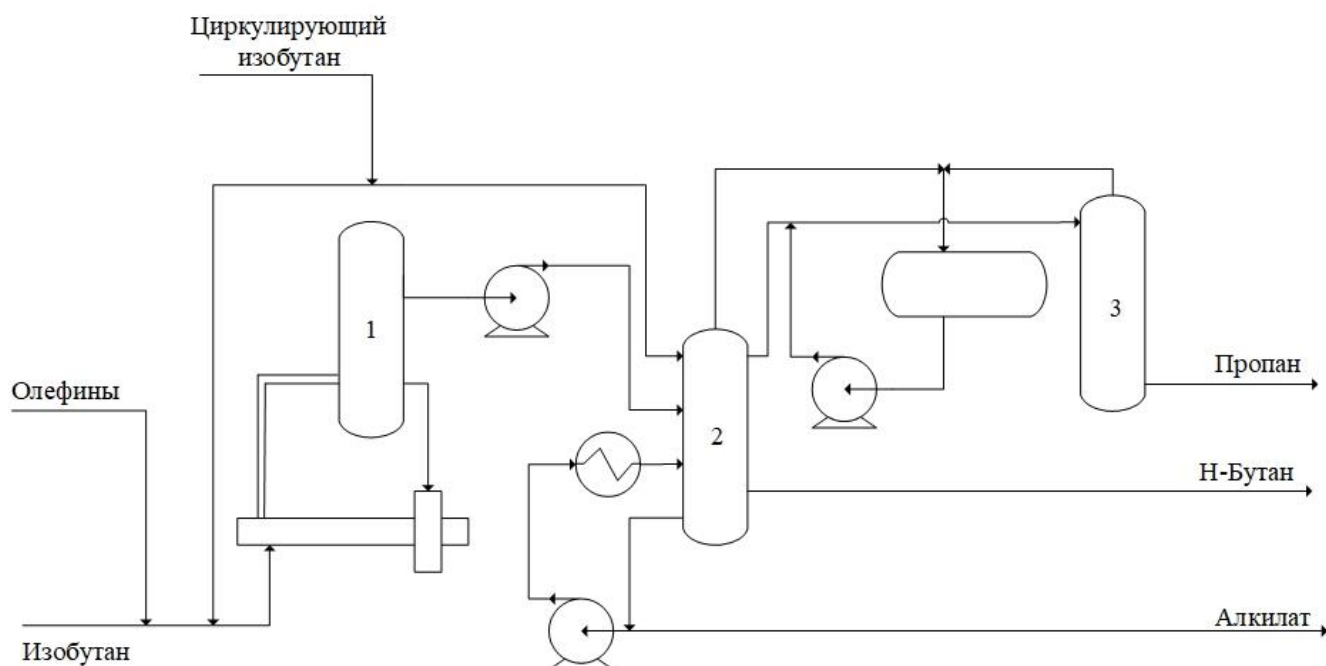


Рисунок 4 – Принципиальная схема установки фтористоводородного алкилирования по технологии фирмы «Phillips Petroleum»:

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

В реакторе 1 протекают химические реакции в следствие взаимодействия фтороводородной кислоты, сырьевого потока олефинов и изобутана. Продукты, выходящие из реактора, поступают в колонну фракционирования 2, где происходит разделение на фракции C_3 , $i-C_4$, C_4 и алкилат. Целевые продукты также подвергают щелочной очистке [10,11].

1.2.5 Технология сернокислотного алкилирования STRATCO

В качестве катализатора алкилирования в технологии STRATCO применяют серную кислоту.

Принципиальная схема установки изображена на рисунке 5.

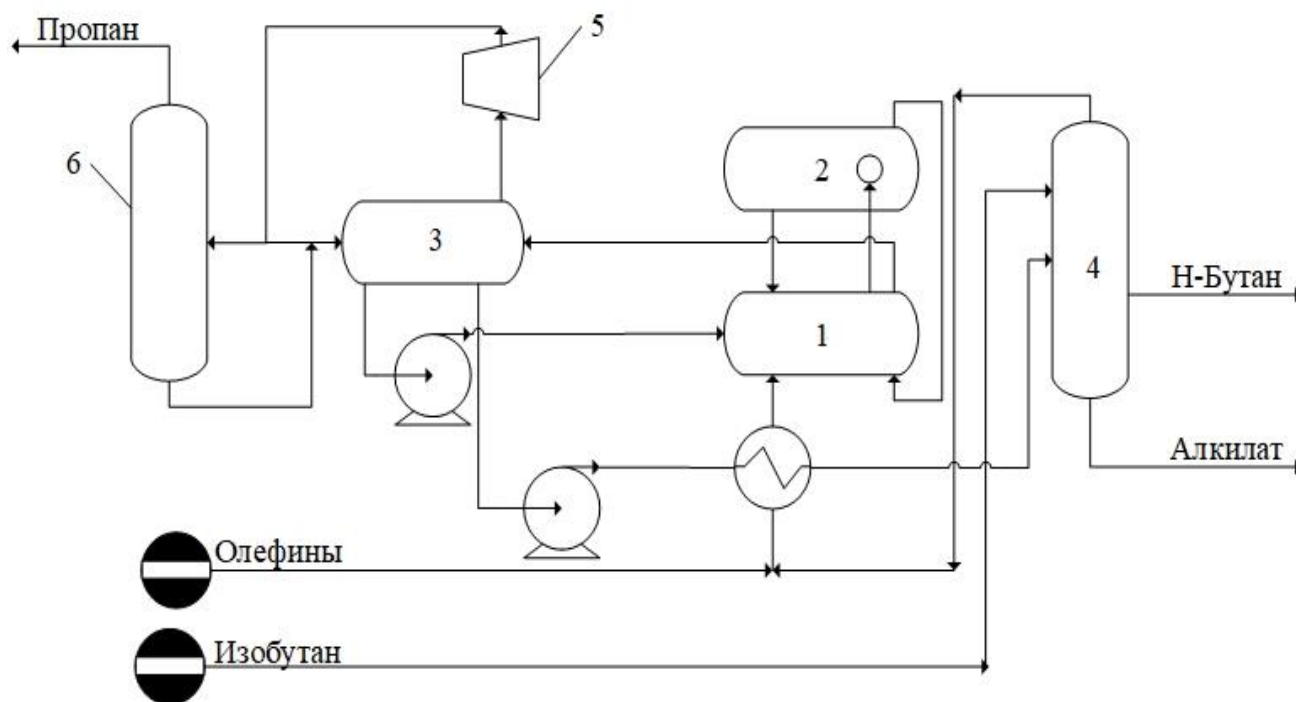


Рисунок 5 – Схема установки сернокислотного алкилирования по технологии STRATCO [12]:

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

В реактор-контактор 1 осуществляется подача олефинов, паров изобутана и серной кислоты. Продукты алкилирования, пройдя отстойник 2 поступают в изобутановую колонну, пройдя через сепаратор 3. В колонне происходит выделение бутановой и изобутановой фракций, а также алкилата. При этом, изобутан, полученный в качестве головного погона, возвращают в реактор-контактор.

1.2.6 Технология сернокислотного алкилирования ExxonMobil

На рисунке 6, представлена принципиальная схема установки алкилирования компании ExxonMobil.

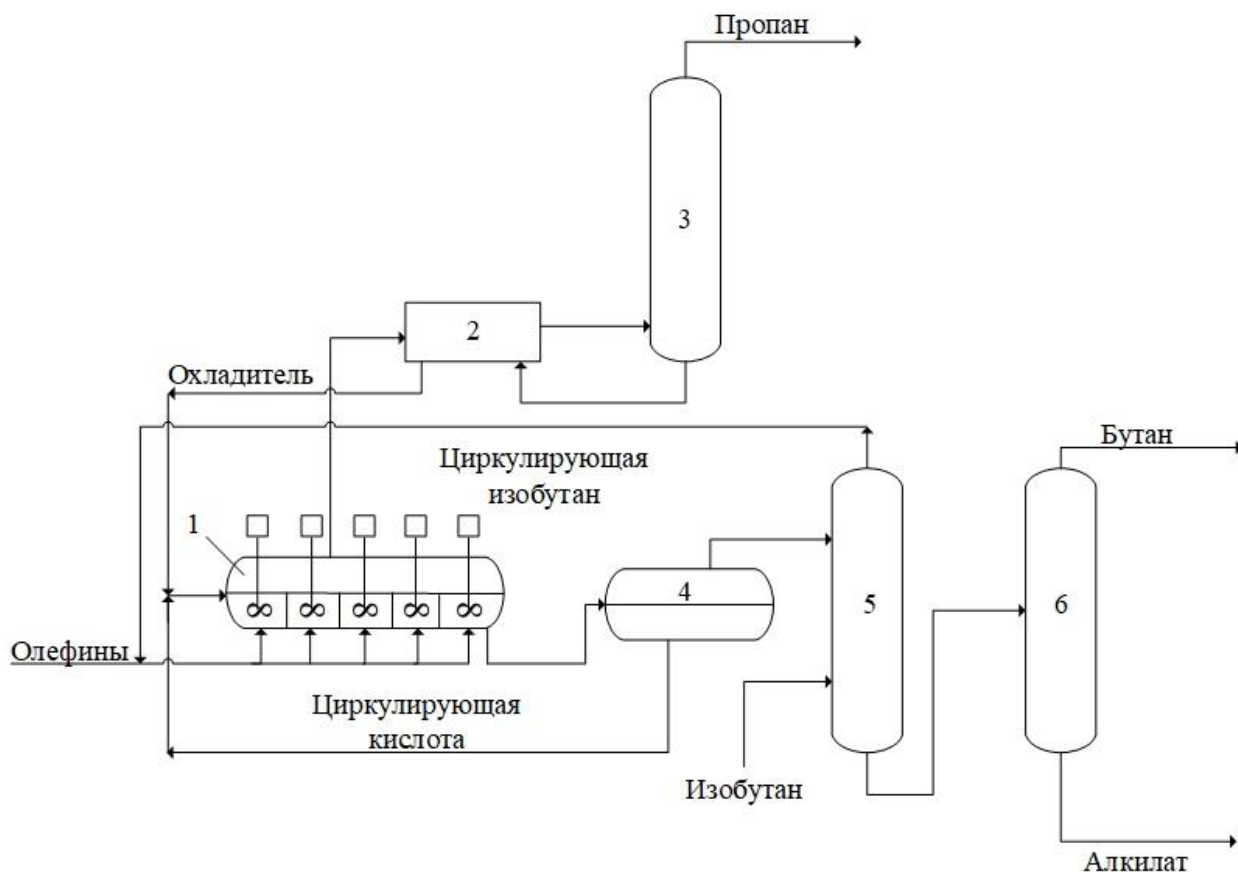


Рисунок 6 – Схема установки сернокислотного алкилирования по технологии ExxonMobil [13]:

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

Реактор 1 оснащен механическими мешалками, позволяющими увеличить контакт между сырьевым потоком и серной кислотой. Целевые реакции алкилирования экзотермичны, поэтому в технологии предусмотрено автоохлаждение: поток испаряющихся углеводородов компримируется в компрессоре 2, сконденсировавшаяся часть потока направляется обратно в реактор, компримированный газ направляется в колонну выделения пропана. Продукты реакции аналогично, пройдя отстойник, направляются на разделение – деизобутанизатор и дебутанизатор.

1.2.7 Технология сернокислотного алкилирования ГК РАН

Принципиальная схема установки сернокислотного алкилирования ГК РАН приведена на рисунке 7.

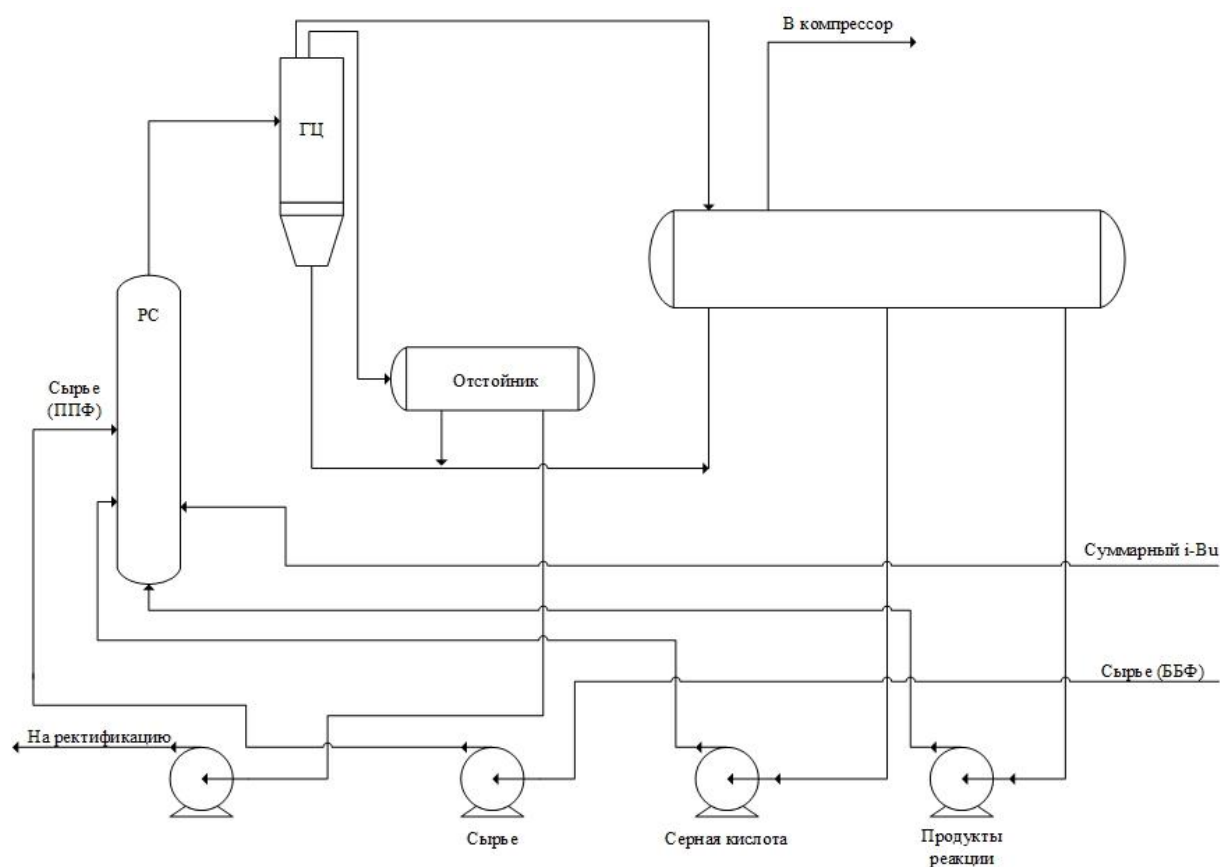


Рисунок 7 – Схема установки сернокислотного алкилирования по технологии ГК РАН [14]

Для эффективного смешения в данной технологии применяется струйный реактор (РС). Для разделения эмульгированных систем применяется гидроциклон (ГЦ) [15].

Помимо высоких показателей качества алкилбензина (таблица 2), технология сернокислотного алкилирования ГК РАН обладает рядом значительных преимуществ, к которым можно отнести удобство в обслуживании и низкие эксплуатационные и капитальные расходы.

Таблица 2 – Сравнительные характеристики технологий сернокислотного алкилирования [14]

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

Технологии сернокислотного алкилирования, рассмотренные в данном разделе имеют ряд общих недостатков:

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

1.2 Основные подходы к моделированию процесса алкилирования изобутана бутиленом

Процесс сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом получил широкое распространение среди исследовательских проектов и научных работ. В основе изучения данного процесса лежит метод математического моделирования.

Применение математических моделей процесса сернокислотного алкилирования базируется на следующих подходах [16]:

- Выделяют несколько основных этапов моделирования: оценка термодинамических параметров процесса, определение кинетических параметров, составление модели реактора и проверка модели на адекватность.
- Математическая модель – это совокупность уравнений материального и теплового балансов и их функциональных связей.

- Математическая модель должна учитывать физико-химическую сущность процессов, протекающих в ходе сернокислотного алкилирования: в данном случае, важен учет стадии образования карбокатионов и учет дезактивации катализатора.

- Математическая модель должна учитывать конструкционные особенности технологических элементов и аппаратов, а также связи между ними.

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

- Поиск кинетических параметров осуществляется путем решения обратной кинетической задачи.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

В настоящее время перспективность научного исследования определяется не столько масштабом открытия, оценить которое на первых этапах жизненного цикла высокотехнологического и ресурсоэффективного продукта бывает достаточно трудно, сколько коммерческой ценностью разработки. Оценка коммерческой ценности разработки является необходимым условием при поиске источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов.

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение перспективности и успешности научно-технического исследования, оценка его эффективности, уровня возможных рисков, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации.

Для достижения обозначенной цели необходимо решить следующие задачи:

- организовать работы по научному исследованию;
- осуществить планирование этапов выполнения исследования;
- оценить коммерческий потенциал и перспективность проведения научного исследования;
- рассчитать бюджет проводимого научно-технического исследования;
- произвести оценку социальной и экономической эффективности исследования.

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование [22,23].

Продуктом данного проекта является математическая модель процесса серноокислотного аликилирования изобутана бутиленом.

В данном проекте сегментами рынка являются нефтеперерабатывающие заводы, которым необходим инструмент для управления промышленным процессом сернокислотного алкилирования.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения [24].

В данном научном исследовании осуществляется разработка математической модели процесса сернокислотного алкилирования, необходимой для регуляции, прогнозирования и контроля производства.

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

В таблице 15 приведена оценка конкурентов, где Ф – разрабатываемый проект, к1 – программное обеспечение AspenTechnologies, к2 – программное обеспечение SimulationSciences.

Таблица 15 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

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

Критерии оценки подбираются, исходя из выбранных объектов сравнения с учетом их технических и экономических особенностей разработки, создания и эксплуатации.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i$$

где: K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

Основываясь на проведенном анализе конкурентов, можно сказать что проект превосходит конкурентные исследования, что связано с ценой разрабатываемого проекта, и простотой его эксплуатации. Однако уязвимость разрабатываемого проекта заключается в ограниченной функциональности: программные продукты конкурентов позволяют моделировать большую совокупность процессов.

4.1.3 SWOT-анализ

SWOT – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Результаты первого этапа представлены в таблице 16

Таблица 16 – Матрица SWOT-анализа

<p>Сильные стороны (С): С1. Высокая точность математической модели. С2. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки. С3. Наличие бюджетного финансирования. С4. Чувствительность модели к изменению ее параметров и состава сырья. С5. Заявленная экономичность технологии.</p>	<p>Слабые стороны (Сл): Сл1. Отсутствие учета диффузии при создании модели. Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров для работы с моделью процесса. Сл3. Использование в качестве исходных данных экспериментальных данных одной установки. Сл4. Не разработан бизнес-план коммерциализации разработки.</p>
<p>Возможности (В): В1. Внедрение разработанной модели на предприятия нефтепереработки для оптимизации процесса производства бензина высокого качества. В2. Внедрение разработанной модели процесса в образовательные программы профессиональных переподготовок сотрудников. В3. Внедрение разработанной модели в образовательные программы университетов.</p>	<p>Угрозы (У): У1. Отсутствие спроса со стороны предприятий, вызванное низкой распространенностью процесса алкилирования. У2. Развитая конкуренция со стороны других систем моделирования</p>

Второй этап состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды.

Интерактивная матрица проекта представлена в таблице 17.

Таблица 17 – Интерактивная матрица проекта

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

В рамках третьего этапа SWOT-анализа была составлена итоговая матрица SWOT-анализа, представленная в таблице 18.

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

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

Таблица 18 –Итоговая матрица SWOT-анализа

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

4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На какой бы стадии жизненного цикла не находилась научная разработка полезно оценить степень ее готовности к коммерциализации и выяснить уровень собственных знаний для ее проведения (или завершения). Для этого заполнена специальную форма, содержащая показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта (таблица 19).

Таблица 19 – Оценка степени готовности проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1	Определен имеющийся научно-технический задел	5	5
2	Определены перспективные направления коммерциализации	4	4
3	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	4
4	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	5
5	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	3
6	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	2
7	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	3	2
8	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	2
9	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	3
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	5	5
11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	2
12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	5	5
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	5	4
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	3	3
15	Проработан механизм реализации научного проекта	3	2
ИТОГО БАЛЛОВ		56	51

Оценка готовности научного проекта к коммерциализации (или уровень имеющихся знаний у разработчика) определяется по формуле:

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

где: $B_{\text{сум}}$ – суммарное количество баллов по каждому направлению;

B_i – балл по i -му показателю.

Исходя из полученных значение $B_{\text{сум}}$, разработка является перспективной, а уровень имеющихся знаний у разработчика выше среднего.

4.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Для коммерциализации результатов, проведенного исследования оптимальным методом является торговля патентными лицензиями, т.е. передача третьим лицам права использования объектов интеллектуальной собственности на лицензионной основе.

4.2 Инициация проекта

В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в Уставе проекта.

В таблице 20 представлена информация о заинтересованных сторонах проекта и их ожиданиях.

Таблица 20 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ	Выпуск высококвалифицированных специалистов
НПЗ	Получение инструмента для управления промышленным процессом алкилирования

В таблице 21 представлена иерархия целей проекта и критерии достижения целей.

Таблица 21 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Создание математической модели жидкофазного процесса сернокислотного алкилирования
Ожидаемые результаты проекта:	Математическая модель процесса алкилирования изобутана бутиленом
Критерии приемки результата проекта:	Математическая модель должна быть чувствительной к изменению технологических параметров и должна адекватно прогнозировать результаты промышленных испытаний
Требования к результату проекта:	Требование:
	Анализ промышленных данных установки сернокислотного алкилирования
	Подбор кинетики процесса
	Расчет пробега установки
	Оценка точности и адекватности разработанной модели
	Исследование влияния технологических параметров на качество алкилата

В таблице 22 представлена организационная структура проекта (роль каждого участника, их функции, трудозатраты).

Таблица 22 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, час.
1.	Чузлов В.А., НИ ТПУ, доцент ОХИ ИШПР	Руководитель проекта	Консультирование, координация деятельности, определение задач, контроль выполнения.	600
2.	Вакалова С.Е., магистрант ОХИ ИШПР	Исполнитель по проекту	Анализ литературных источников, обработка исходных данных, создание математической модели, исследование влияния технологических параметров на качество алкилата, анализ полученных результатов, написание работы	1600
ИТОГО:				2200

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 (таблица 23).

Таблица 23 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
Бюджет проекта	1251969,4
Источник финансирования	НИ ТПУ
Сроки проекта:	01.09.2021-31.05.2022
Дата утверждения плана управления проектом	15.09.2021
Дата завершения проекта	31.05.2022

4.3 Планирование управления научно-техническим проектом

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

4.3.2 План проект

В рамках планирования научного проекта построены календарный график проекта (таблицы 24 и 25).

Таблица 24 – Календарный план проекта

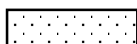
Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Утверждение темы магистерской диссертации	7	01.09.21	07.09.21	Чузлов В.А.
Согласование плана работ	7	08.09.21	15.09.21	Чузлов В.А. Вакалова С.Е.
Литературный обзор	107	16.09.21	31.12.21	Вакалова С.Е.
Создание математической модели	59	01.01.22	28.02.22	Чузлов В.А. Вакалова С.Е.
Расчет пробега установки	2	01.03.22	03.03.22	Вакалова С.Е.
Проверка адекватности математической модели	1	04.03.22	05.03.22	Вакалова С.Е.
Исследование влияния технологических параметров на качество алкилата	12	06.03.22	18.03.22	Вакалова С.Е.
Написание отчета	75	18.03.22	31.05.22	Вакалова С.Е.
Итого:	270			

Таблица 25 – Календарный план график проведения НИОКР по теме

Наименование этапа	Т, дней	2021				2022				
		Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май
Утверждение темы магистерской диссертации	7									
Согласование плана работ	7									
Литературный обзор	107									
Создание математической модели	59									
Расчет пробега установки	2									
Проверка адекватности математической модели	1									
Исследование влияния технологических параметров на качество алкилата	12									
Написание отчета	75									



– Вакалова С.Е.



– Чузлов В.А.



– Вакалова С.Е., Чузлов В.А.

4.4 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения.

В процессе формирования бюджета, планируемые затраты сгруппированы по статьям.

Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты (за вычетом отходов). В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме (таблица 26).

Таблица 26 – Расчет затрат по статье «Сырье и материалы»

Наименование	Количество, шт	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Тетрадь	2	45,0	90,0
Ручка шариковая	3	31,0	93,0
Печать	150	2	300,0
Всего за материалы			483
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)			24,15
Итого по статье			507,15

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ. В данную статью включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования, необходимого для проведения работ по теме НИР (таблица 27).

Таблица 27 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1	Компьютер	1	60000,0	30000,0
2	Программное обеспечение MicrosoftOffice	1	5990,0	5990,0
3	Borland Delphi 10	1	15000,0	15000,0
Итого, руб.:				50990

Расчет основной заработной платы. В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме:

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}$$

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

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата.

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

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб}$$

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

$T_{раб}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;

$Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Расчет заработной платы научно – производственного и прочего персонала проекта проводили с учетом работы 2-х человек – научного руководителя и исполнителя. Баланс рабочего времени исполнителей представлен в таблице 28.

Таблица 28 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистрант
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней	99	99
- выходные дни	14	14
- праздничные дни		
Потери рабочего времени	24	24
- отпуск	14	14
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	212	212

Месячный должностной оклад работника:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}},$$

где $З_{\text{б}}$ – базовый оклад, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент (определяется Положением об оплате труда);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок;

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

При расчете заработной платы научно-производственного и прочего персонала проекта учитывались месячные должностные оклады работников, которые рассчитывались по формуле:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{б}} \cdot K_{\text{р}},$$

где $З_{\text{б}}$ – базовый оклад, руб.;

$K_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Согласно информации сайта Томского политехнического университета, должностной оклад (ППС) доцента кандидата наук в 2022 году без учета РК составил 33664 руб., поскольку руководитель работает на 0,5 ставки, то оклад равен 16832. Расчет основной заработной платы приведен в таблице 29.

Таблица 29 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$З_{\text{б}}$, руб.	$k_{\text{пр}}$	$k_{\text{д}}$	$k_{\text{р}}$	$З_{\text{м}}$, руб.	$З_{\text{дн}}$, руб.	$T_{\text{р}}$, раб. дн.	$З_{\text{осн}}$, руб.
Руководитель	33664	1	0,02	1,3	43761,9	2311,9	212	490122,8
Магистрант	2500	-	-	1,3	3250	171,7	212	36400,4

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала. В данную статью включается сумма выплат, предусмотренных законодательством о труде, например, оплата очередных и дополнительных отпусков; оплата времени, связанного с выполнением государственных и общественных обязанностей; выплата вознаграждения за выслугу лет и т.п. (в среднем – 12 % от суммы основной заработной платы).

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10-15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$Z_{\text{доп}} = Z_{\text{осн}} \cdot k_{\text{доп}},$$

где $Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.;

$k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты;

$Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

В таблице 30 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 30 – Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Магистрант
Основная зарплата	490122,8	36400,4
Дополнительная зарплата	49012,3	3640,0
Итого по статье $C_{\text{зп}}$	539135,1	40040,4

Отчисления на социальные нужды. Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

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

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчисления на уплату во внебюджетные фонды.

В соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%.

Отчисления на социальные нужды составляют:

$$C_{\text{внеб}} = 0,3 \cdot (539135,1 + 40040,4) = 173752,65 \text{ рублей}$$

Накладные расходы. Расчет накладных расходов провели по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = 0,8 \cdot (539135,1 + 40040,4) = 463340,4$$

где $K_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов принят 0,8.

Таким образом, затраты проекта составляет 1251969,4, которые приведены в таблице 31.

Таблица 31 – Затраты научно-исследовательской работы

Вид исследования	Затраты по статьям									
	Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных работ	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Научные и производственные командировки	Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями	Прочие прямые расходы	Накладные расходы	Итого плановая себестоимость
Данное исследование	507,15	50990	526523,2	52652,3	157956,9	–	–	–	463340,4	<u>1251969,4</u>
Аналог 1	507,15	10000000	526523,2	52652,3	157956,9	–	100000	–	463340,4	11300979,4
Аналог 2	507,15	1000000	526523,2	52652,3	157956,9	–	100000	–	463340,4	2300979,4

4.4.1 Организационная структура проекта

Данный проект представлен в виде проектной организационной структуры. Проектная организационная структура проекта представлена на рисунке 26.

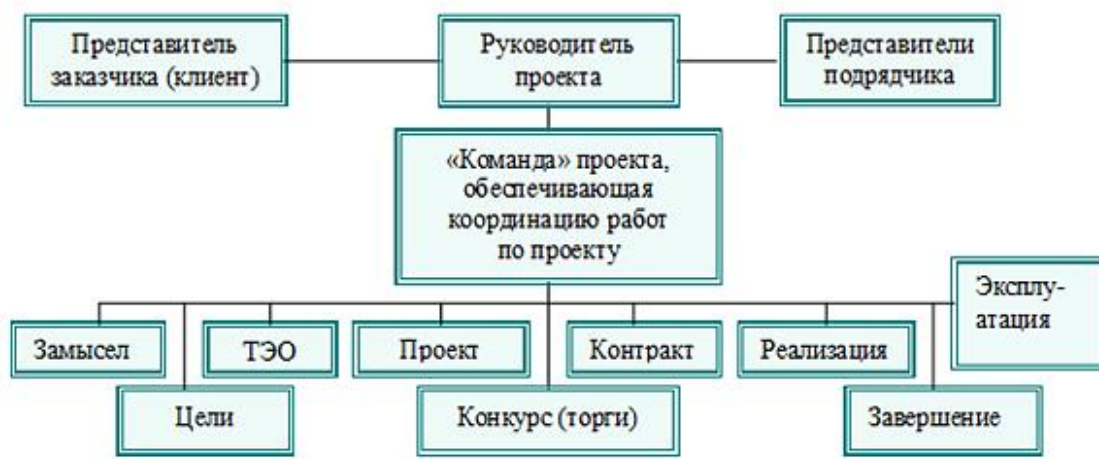


Рисунок 26 – Проектная структура проекта

4.4.2 План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта (таблица 32).

Таблица 32 – План управления коммуникациями

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

4.4.3 Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты.

Информация по возможным рискам сведена в таблицу 33

Таблица 33 – Реестр рисков

№	Риск	Вероятность наступления	Влияние риска	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Снижение спроса на продукцию установки сернокислотного алкилирования	2	4	Низкий	Применение математической модели для удешевления продукта	Снижение спроса на автомобильные бензины
2	Создание конкурентной математической модели	4	4	Высокий	Оптимизация времени реализации проекта, калибровка модели	Высокий спрос на модель процесса
3	Погрешность модели	2	5	Низкий	Детальный подбор кинетики, учет теплообмена	Большое количество допущений

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

4.5.1 Оценка абсолютной эффективности исследования

В основе проектного подхода к инвестиционной деятельности предприятия лежит принцип денежных потоков. Особенностью является его прогнозный и долгосрочный характер, поэтому в применяемом подходе к анализу учитываются фактор времени и фактор риска.

Для оценки общей экономической эффективности используются следующие основные показатели:

- чистая текущая стоимость (NPV);
- индекс доходности (PI);
- внутренняя ставка доходности (IRR);
- срок окупаемости (DPP).

Чистая текущая стоимость (NPV) – это показатель экономической эффективности инвестиционного проекта, который рассчитывается путём дисконтирования (приведения к текущей стоимости, т.е. на момент инвестирования) ожидаемых денежных потоков (как доходов, так и расходов).

Расчёт NPV осуществляется по следующей формуле:

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{опt}}{(1+i)^t} - I_0$$

где ЧДП_{опt} – чистые денежные поступления от операционной деятельности;

I_0 – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году;

t – номер шага расчета ($t= 0, 1, 2 \dots n$)

n – горизонт расчета;

i – ставка дисконтирования (желаемый уровень доходности инвестируемых средств).

Расчёт NPV позволяет судить о целесообразности инвестирования денежных средств. Если $NPV > 0$, то проект оказывается эффективным.

Расчет чистой текущей стоимости представлен в таблице 34.

При расчете рентабельность проекта составляла 50 %, т.к. проект относится к работам, связанным с математическим моделированием. Норма амортизации - 10 %.

Таблица 34 – Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб.	0	1877954,1	1877954,1	1877954,1	1877954,1
2	Итого приток, руб.	0	1877954,1	1877954,1	1877954,1	1877954,1
3	Инвестиционные издержки, руб.	-1251969,4	0	0	0	0
4	Операционные затраты, руб.	0	438189,3	438189,3	438189,3	438189,3
5	Налогооблагаемая прибыль, руб.	0	1439764,8	1439764,8	1439764,8	1439764,8
6	Налоги 20 %, руб.	0	287953	287953	287953	287953
7	Чистая прибыль, руб.	0	1151811,8	1151811,8	1151811,8	1151811,8
8	Чистый денежный поток (ЧДП), руб.	-1251969,4	1277008,7	1277008,7	1277008,7	1277008,7
9	Коэффициент дисконтирования при $i=20\%$ (КД)	1	<u>0,833</u>	<u>0,694</u>	<u>0,578</u>	<u>0,482</u>
10	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб.	-1251969,4	1063748,3	886244	738111	615518
11	\sum ЧДД	3303621,3 руб.				
12	Итого NPV, руб.	2051651,9 руб.				

Коэффициент дисконтирования рассчитан по формуле:

$$КД = \frac{1}{(1 + i)^t}$$

где: i – ставка дисконтирования, 20 %;

t – шаг расчета.

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 2051651,9 рублей, что позволяет судить об его эффективности.

Индекс доходности (PI) – показатель эффективности инвестиции, представляющий собой отношение дисконтированных доходов к размеру инвестиционного капитала. Данный показатель позволяет определить инвестиционную эффективность вложений в данный проект. Индекс доходности рассчитывается по формуле:

$$PI = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_t}{(1+i)^t} / I_0 > 1$$

где: ЧДД - чистый денежный поток, руб.;

I_0 – начальный инвестиционный капитал, руб.

Таким образом PI для данного проекта составляет:

$$PI = \frac{3303621,3}{1251969,4} = 2,64$$

Так как $PI > 1$, то проект является эффективным.

Внутренняя ставка доходности (IRR). Значение ставки, при которой обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или IRR. Формальное определение «внутренней ставки доходности» заключается в том, что это та ставка дисконтирования, при которой суммы дисконтированных притоков денежных средств равны сумме дисконтированных оттоков или =0. По разности между IRR и ставкой дисконтирования i можно судить о запасе экономической прочности инвестиционного проекта. Чем ближе IRR к ставке дисконтирования i , тем больше риск от инвестирования в данный проект.

Между чистой текущей стоимостью (NPV) и ставкой дисконтирования (i) существует обратная зависимость. Эта зависимость представлена в таблице 35 и на рисунке 27.

Таблица 35 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№	Наименование показателя	0	1	2	3	4	NPV, руб.
1	Чистые денежные потоки, руб.	-1251969,4	1277009	1277008,7	1277008,7	1277008,7	
2	Коэффициент дисконтирования						
	0,1	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	0,2	1	0,833	0,694	0,578	0,482	
	0,3	1	0,769	0,592	0,455	0,35	
	0,4	1	0,714	0,51	0,364	0,26	
	0,5	1	0,667	0,444	0,295	0,198	
	0,6	1	0,625	0,39	0,244	0,153	
	0,7	1	0,588	0,335	0,203	0,112	
	0,8	1	0,556	0,309	0,171	0,095	
	0,9	1	0,526	0,277	0,146	0,077	
	1	1	0,5	0,25	0,125	0,062	
3	Дисконтированный денежный поток, руб.						
	0,1	-1251969,4	1160801	1054809,2	959033,5	872196,9	2794871,2
	0,2	-1251969,4	1063748	886244,0	738111,0	615518,2	2051652,1
	0,3	-1251969,4	982020	755989,2	581039,0	446953,0	1514031,4
	0,4	-1251969,4	911784	651274,4	464831,2	332022,3	1107942,7
	0,5	-1251969,4	851765	566991,9	376717,6	252847,7	796352,6
	0,6	-1251969,4	798130	498033,4	311590,1	195382,3	551166,9
	0,7	-1251969,4	750881	427797,9	259232,8	143025,0	328967,4
	0,8	-1251969,4	710017	394595,7	218368,5	121315,8	192327,4
	0,9	-1251969,4	671707	353731,4	186443,3	98329,7	58241,5
	1	-1251969,4	638504	319252,2	159626,1	79174,5	-55412,2

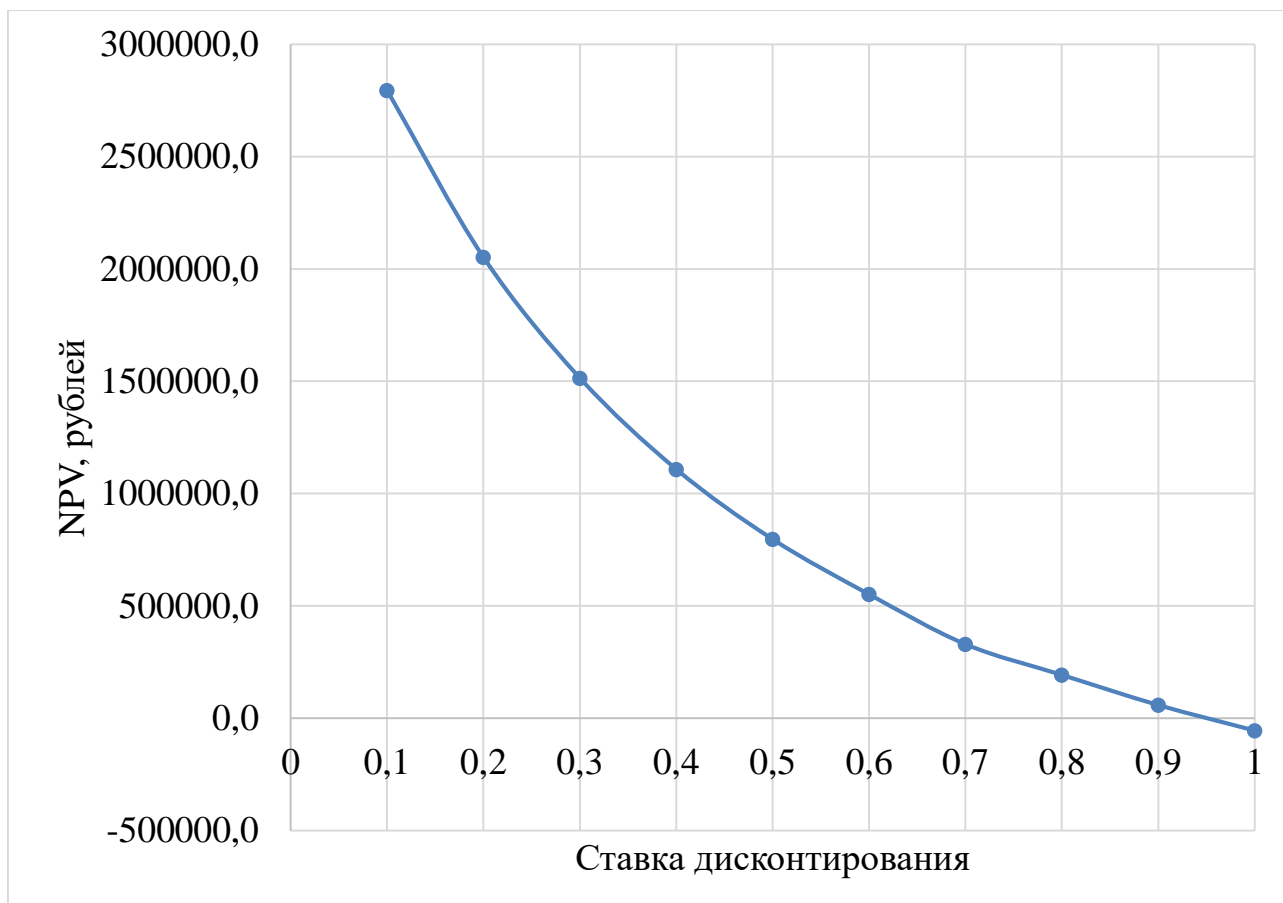


Рисунок 27 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Из таблицы и графика следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Значение ставки, при которой NPV обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или «внутренней нормы прибыли». Из графика получаем, что IRR составляет 0,95.

$IRR > i$, проект эффективен.

Запас экономической прочности проекта: $95\% - 20\% = 75\%$

Дисконтированный срок окупаемости. Как отмечалось ранее, одним из недостатков показателя простого срока окупаемости является игнорирование в процессе его расчета разной ценности денег во времени.

Этот недостаток устраняется путем определения дисконтированного срока окупаемости. То есть это время, за которое денежные средства должны совершить оборот.

Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (таблица 36).

Таблица 36 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток ($i = 0,20$), руб.	-1251969,4	1063748,3	886244	738111	615518
2	То же нарастающим итогом, руб.	-1251969,4	-188221,1	698022,9	1436133,9	2051651,9
3	Дисконтированный срок окупаемости	$DP_{дск} = 1 + (188221,1 / 886244) = 1,2$ года				

Социальная эффективность научного проекта учитывает социально-экономические последствия осуществления научного проекта для общества в целом или отдельных категорий населения или групп лиц, в том числе как непосредственные результаты проекта, так и «внешние» результаты в смежных секторах экономики: социальные, экологические и иные внеэкономические эффекты (таблица 37).

Таблица 37 – Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Проведение дорогостоящих и опасных опытных пробегов на действующих установках	Проведение расчетов на математической модели
Ненормированный расход серной кислоты	Подбор оптимального расхода кислоты

4.5.2 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 (или более)

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 по следующей формуле:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}$$

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

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

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

При расчетах получаем:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}p} = \frac{1251969,4}{11300979,4} = 0,11$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}A1} = \frac{11300979,4}{11300979,4} = 1$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}A2} = \frac{2300979,4}{11300979,4} = 0,2$$

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить по следующей формуле:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i$$

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

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i^a, b_i^p – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблицы (таблице 38).

Таблица 38 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

ПО Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Высокая степень чувствительности к изменению технологических параметров	0,25	5	5	4
2. Удобство интерфейса программы	0,20	5	3	3
3. Простота эксплуатации	0,15	4	4	4
4. Защита данных	0,15	4	3	4
5. Набор функциональных операций	0,25	5	4	5
Итого	1	23	19	20

$$I_m^p = 5 \cdot 0,25 + 5 \cdot 0,20 + 4 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,25 = 4,7$$

$$I_1^A = 5 \cdot 0,25 + 3 \cdot 0,20 + 4 \cdot 0,15 + 3 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,25 = 3,9$$

$$I_2^A = 4 \cdot 0,25 + 3 \cdot 0,20 + 4 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,25 = 4,1$$

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

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p} = \frac{4,7}{0,11} = 42,73$$

$$I_{финр}^{a.1} = \frac{I_m^a}{I_\phi^a} = \frac{3,9}{1} = 3,9$$

$$I_{финр}^{a.2} = \frac{I_m^a}{I_\phi^a} = \frac{4,1}{0,2} = 20,5$$

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

Сравнительная эффективность проекта определяется по формуле:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^a}$$

где: $\mathcal{E}_{\text{ср}}$ – сравнительная эффективность проекта;

$I_{\text{финр}}^p$ – интегральный показатель разработки;

$I_{\text{финр}}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Сравнительная эффективность разработки по сравнению с аналогами представлена в таблице 39.

Таблица 39 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,11	1	0,2
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,7	3,9	4,1
3	Интегральный показатель эффективности	42,73	3,9	20,5
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	2,08	0,09	0,5

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет понять, что разработанный вариант проведения проекта является наиболее эффективным при решении поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

В ходе выполнения раздела финансового менеджмента определена чистая текущая стоимость, (NPV), равная 2051651,9 руб.; индекс доходности $PI=2,64$, внутренняя ставка доходности $IRR=95\%$, срок окупаемости $PP_{\text{дск}}=1,2$ года.

Таким образом мы имеем ресурсоэффективный проект с высоким запасом финансовой прочности и коротким сроком окупаемости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были проведены расчеты кинетических и термодинамических параметров реакций, протекающих в процессе сернокислотного алкилирования изобутана олефинами. На основе результатов анализа была усовершенствована кинетическая модель процесса.

Также в ходе выполнения работы была создана модель блока разделения, состоящая из колонн: деизобутанизатора и дебутанизатора.

Полученные модели были использованы для оптимизации мольного соотношения изобутан:олефины путем подбора расхода подпиточного изобутана, идущего в колонну-деизобутанизатор. И я для оптимизации технологического режима колонны-дебутанизатора с целью минимизации содержания н-бутана в потоке продуктового алкилата.

Результаты:

- Определено, что оптимальным соотношением является соотношение 10:1 – оно позволяет повысить выход алкилата более чем на 110 т/ч, не снижая его качества.

- Исследовано влияние мольного соотношения изобутан : олефины на протекание побочных реакций полимеризации: при увеличении мольного соотношения выход полимеров снизился в среднем на 1,75 % мольн.

- Оптимальная температура низа колонны лежит в интервале 150-156 °С. При данных значениях, содержание н-бутана составляет менее 0,1 % масс.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

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

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

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

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

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

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

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

14. Технология серноокислотного алкилирования [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://rangroup.ru/areas/newdevelopment/ska/> (дата обращения 01.01.2022).

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

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

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

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

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

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

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

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

22. Маркетинг: целевые рынки [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.e-biblio.ru/xbook/new/xbook307/book/part-004/page.htm> (дата обращения 22.03.2022).

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

24. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / И.Г. Видяев, Г.Н. Сери, Н.А. Гаврикова, Н.В. Шаповалова, Л.Р.Тухватулина, З.В. Криницына; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014 – 36 с.

25. Федеральный закон от 17.07.1999 N 181-ФЗ «Об основах охраны труда в Российской Федерации» [Электронный ресурс] / http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_1983/ (дата обращения 30.04.2022)
26. «Трудовой кодекс Российской Федерации» от 30.12.2001 N 197-ФЗ [Электронный ресурс] / http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_34683/ (дата обращения 30.04.2022)
27. ГОСТ 12.2.032-78 «Система стандартов безопасности труда»
28. ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация»
29. СанПиН 1.2.3685-21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания». Шум. Общие требования безопасности. – М.: Стандартинформ, 2008. – 13 с.
30. ГОСТ Р 55710-2013 «Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений»
31. Методическое указание «Расчет искусственного освещения» [Электронный ресурс]. (дата обращения: 30.04.2022 г)
32. ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
33. Постановление Правительства РФ от 3 сентября 2010 г. N 681 "Об утверждении Правил обращения с отходами производства и потребления в части осветительных устройств, электрических ламп, ненадлежащие сбор, накопление, использование, обезвреживание, транспортирование и размещение которых может повлечь причинение вреда жизни, здоровью граждан, вреда животным, растениям и окружающей среде" [Электронный ресурс] http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_104420/ (дата обращения 28.04.2020)

Приложение А

(справочное)

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

Компоненты	Номер пробы										
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
	% масс.										
Пропан	0,64	0,96	1,04	0,68	0,16	0,58	0,33	0,52	0,47	0,45	0,26
Пропилен	0,23	0,07	0,07	0,07	0,26	0,07	0,03	0,36	0,24	0,03	0,02
Изобутан	43,77	44,31	41,01	39,66	38,15	44,45	42,23	42,00	40,93	43,50	41,27
н-Бутан	9,03	9,94	8,74	9,42	9,44	6,69	8,40	8,55	8,53	9,73	9,20
Бутилен	15,71	15,71	14,74	15,50	15,33	15,92	16,21	15,79	15,69	15,58	16,41
Изобутилен	3,84	3,48	7,58	4,94	5,19	4,67	5,55	5,85	6,15	3,38	5,18
транс-Бутилен	16,24	15,28	15,78	17,09	18,15	16,17	16,19	15,77	16,16	15,82	16,04
цис-Бутилен	9,89	9,59	10,68	11,65	12,44	10,63	10,40	10,34	11,14	10,86	10,90
Бутадиен-1,3	0,25	0,49	0,22	0,56	0,63	0,60	0,32	0,56	0,55	0,50	0,70
Сумма C ₅₊	0,41	0,16	0,14	0,43	0,26	0,23	0,35	0,27	0,16	0,14	0,02

Таблица А.2 – Состав циркулирующего изобутана процесса сернокислотного алкилирования

Компоненты	Номер потока										
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
	% масс.										
Пропан	2,32	1,80	2,08	1,53	1,86	2,15	1,95	1,47	0,82	1,84	2,00
Пропилен	0,00	0,33	0,20	0,00	0,33	0,33	0,33	0,00	0,00	0,20	0,00
Изобутан	85,31	87,46	87,94	86,70	86,25	85,02	84,97	87,60	95,86	86,45	86,80
н-Бутан	11,62	10,02	9,48	11,13	10,99	11,97	12,16	10,18	3,08	11,04	10,51
Бутилен	0,25	0,00	0,06	0,20	0,33	0,00	0,00	0,33	0,20	0,01	0,00
Изобутилен	0,25	0,20	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	0,05	0,00	0,33
Сумма C ₅₊	0,25	0,19	0,24	0,44	0,24	0,53	0,58	0,23	0,00	0,46	0,37

Таблица А.3 – Состав изобутана хладагента процесса сернокислотного алкилирования

Компоненты	Номер потока										
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
	% масс.										
Пропан	0,56	4,83	4,31	4,55	8,36	8,45	5,03	5,33	5,35	4,57	5,49
Пропилен	0,33	0,33	0,20	0,00	0,00	0,00	0,25	0,00	0,00	0,00	0,25
Изобутан	84,08	83,89	85,66	85,52	77,36	77,41	81,02	82,80	82,87	78,62	84,14
н-бутан	12,87	9,56	9,40	9,06	12,63	12,68	11,90	10,19	8,25	9,61	8,96
Бутилен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,33	0,00	0,00	0,00	0,25	0,00
Изобутилен	0,00	0,20	0,00	0,20	0,33	0,00	0,00	0,00	0,33	0,00	0,20
Сумма C ₅₊	2,16	1,20	0,43	0,68	1,33	1,13	1,80	1,68	3,20	6,96	0,96

Таблица А.4 – Технологический режим процесса сернокислотного алкилирования

Наименование параметра	Сутки										
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Подача ББФ на установку, м ³ /ч	64,65	60,5	63,9	49,5	51,4	64,6	60,55	66,63	38,5	33,95	50,3
Подача циркулирующего изобутана на установку, м ³ /ч	148,2	149,133	150,15	145,4	119,4	110,9	114	127,3	108,4	85,4	119,15
Подача хладагента в 1 контактор, м ³ /ч	33,25	32	34	27	37,33	37	33	35,2	22,33	38	27,25
Подача хладагента в 2 контактор, м ³ /ч	32,75	33,33	33,2	28,2	36	36	33	35	22,75	39,33	27,33
Подача хладагента в 3 контактор, м ³ /ч	34,2	33,2	34,25	29,25	32	30,33	34	35	23	37	27
Подача хладагента в 4 контактор, м ³ /ч	34,2	33,2	34	29	32,2	30	34	35,1	23	37	26,25
Температура на входе в 1 контактор, °С	1,50	-6,00	-8,00	-7,80	-2,00	-4,00	-3,00	-5,00	0,00	5,00	1,50
Температура на входе во 2 контактор, °С	3,20	1,80	2,20	0,20	1,80	2,00	2,25	2,15	1,90	4,50	1,80
Температура на входе в 3 контактор, °С	2,25	1,9	2,1	1,33	2,1	2,13	3	2	2,5	-1,67	1,9
Температура на входе в 4 контактор, °С	2,25	0,43	0,1	-0,1	8,25	1	2,2	1,5	2	2	2,25

Приложение Б

(справочное)

Таблица Б.1 – Исходные данные для исследования влияния мольного соотношения изобутан:олефины

Параметр	1	2	3	4
25_12_BBF_Density	0,581	0,581	0,58	0,583
25_12_BBF_Metan	0	0	0	0
25_12_BBF_Etan	0	0	0	0
25_12_BBF_Etylen	0	0	0	0
25_12_BBF_SumC2	0	0	0	0
25_12_BBF_Propane	0,4	0,4	0,97	0,69
25_12_BBF_Propilen	0,03	0,03	0,07	0,07
25_12_BBF_SumPropan+Propylene	0,43	0,43	1,04	0,76
25_12_BBF_Isobutan	44,31	44,31	44,79	40,27
25_12_BBF_Nbutan	8,94	8,94	9,8	9,57
25_12_BBF_Butilen	15,9	15,9	15,63	15,74
25_12_BBF_Isobutilen	3,89	3,89	3,52	4,77
25_12_BBF_Transbutilen	16,19	16,19	15,45	17,02
25_12_BBF_Cisbutilen	10,01	10,01	9,44	11,5
25_12_BBF_Butadien	0,25	0,25	0,25	0,32
25_12_BBF_SumButilen	45,99	45,99	44,04	49,03
25_12_BBF_Isopentan	0	0	0	0
25_12_BBF_Npentan	0	0	0	0
25_12_BBF_SumC6	0,08	0,08	0,08	0,05
25_12_BBF_SumC5	0,08	0,08	0,08	0,05
25_12_BBF_H2S+RSH	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
25_12_Isobutan_refregirant_Metan	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_Etan	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_Etylen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_SumC2	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_Propane	0,56	0,56	4,64	4,33
25_12_Isobutan_refregirant_Propylene	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_SumPropan+Propylene	0,56	0,56	4,64	4,33
25_12_Isobutan_refregirant_Isobutan	84,57	84,57	84,92	86,12
25_12_Isobutan_refregirant_Butan	12,7	12,7	9,48	9,12
25_12_Isobutan_refregirant_Butilen	0	0	0	0

Продолжение таблицы Б.1

25_12_Isobutan_refregirant_Isobutilen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_Transbutilen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_Cisbutilen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_SumButilen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_Isopentan	0,97	0,97	0,43	0,43
25_12_Isobutan_refregirant_Npentan	0	0	0	0
25_12_Isobutan_refregirant_SumC5	0,97	0,97	0,43	0,43
25_12_Isobutan_refregirant_SumC6+	1,2	1,2	0,53	0
25_12_Isobutan_E334_Metan	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_Etan	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_Etylen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_SumC2	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_Propane	2,33	2,33	1,81	1,55
25_12_Isobutan_E334_Propylene	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_SumPropan+Propylene	2,33	2,33	1,81	1,55
25_12_Isobutan_E334_Isobutan	85,74	85,74	88,15	87,29
25_12_Isobutan_E334_Butan	11,68	11,68	9,85	10,92
25_12_Isobutan_E334_Isobutilen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_Butilen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_Transbutilen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_Cisbutilen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_SumButilen	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_Isopentan	0,25	0,25	0,19	0,24
25_12_Isobutan_E334_Npentan	0	0	0	0
25_12_Isobutan_E334_SumC5	0,25	0,25	0,19	0,24
ББФ на установку	62,364	62,364	60,255	49,479
цирк. И-С4	147,97	160	148,78	145,42
хлад R-311А	33,647	33,647	32,706	28,953
хлад R-311В	33,674	33,674	32,704	28,963
хлад R-311С	33,679	33,679	32,713	28,968
хлад R-311D	33,689	33,689	32,73	28,984
Т R-311А	1,0441	1,0441	-5,732	-7,435
Т R-311В	2,7191	2,7191	1,5691	0,4486
Т R-311С	2,2782	2,2782	1,536	0,6953
Т R-311D	2,5769	2,5769	0,7574	-0,265
Давление перед реакт	0,425	0,425	0,4251	0,435
Выход и-С4	5,2304	5,2304	5,2304	5,2304
конц.кислоты	99	99	98,7	98,7

Продолжение таблицы Б.1

Сырой алкилат	81,89	81,89	81,89	81,89
Сырой алкилат	81,775	81,775	81,775	81,775
Сырой алкилат	89,465	89,465	89,465	89,465
Сырой алкилат	89,405	89,405	89,405	89,405
Свеж.кислота 1	6,998	6,998	2,998	2,35
Свеж.кислота 2	4,249	4,249	2,0499	1,9

Таблица Б.2 – Результаты расчета состава сырого алкилата

Компонент	Содержание, % масс.			
	1	2	3	4
Бутен-1	0,0097	0,0097	0,0206	0,0204
Бутен-2	0,0041	0,0042	0,0150	0,0178
Изобутен	0,0202	0,0194	0,0079	0,0076
Изобутан	0,7488	0,7533	0,8110	0,8144
nC4H10	0,1392	0,1382	0,1080	0,1101
224ТМС5	0,0251	0,0241	0,0115	0,0095
233ТМС5	0,0140	0,0137	0,0073	0,0060
234ТМС5	0,0122	0,0118	0,0054	0,0044
25ДМС6	0,0026	0,0025	0,0011	0,0007
24ДМС6	0,0022	0,0020	0,0006	0,0004
23ДМС6	0,0027	0,0025	0,0008	0,0005
C3H6	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
24ДМС5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
223ТМС4	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
2МС6	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
23ДМС5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
3МС6	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
I8	0,0028	0,0028	0,0033	0,0031
I9	0,0003	0,0003	0,0002	0,0001
C3H8	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
iC5H12	0,0051	0,0050	0,0027	0,0029
23ДМС4	0,0045	0,0042	0,0012	0,0009
22ДМС4	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
2МС5	0,0045	0,0044	0,0021	0,0001
3МС5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
I10	0,0013	0,0013	0,0007	0,0003
I11	0,0005	0,0005	0,0006	0,0005

Таблица Б.3 – Состав сырого алкилата по данным газовой хроматографии

Компонент	Содержание, % масс.			
	№ состава			
	1	2	3	4
Бутен-1	0	0	0	0
Бутен-2	0	0	0	0
Изобутен	0	0	0	0
H(+)	0	0	0	0
Изобутан	0	0	0	0
iC4H9(+)	0	0	0	0
nC4H10	0,05388	0,06548	0,06115	0,04322
TMC5(+)	0	0	0	0
224TMC5	0,30914	0,2895	0,27805	0,2957
233TMC5	0,17012	0,1654	0,15948	0,1711
234TMC5	0,14049	0,14495	0,14429	0,15126
DMC6(+)	0	0	0	0
25DMC6	0,03378	0,03513	0,03647	0,03521
24DMC6	0,0286	0,02853	0,02873	0,0284
23DMC6	0,02605	0,02663	0,02698	0,02732
C3H6	0	0	0	0
24DMC5	0,02554	0,02641	0,02782	0,02673
223TMC4	0,00154	0,00165	0,00181	0,00169
2MC6	0,0015	0,0015	0,00156	0,00142
23DMC5	0,01381	0,01394	0,01501	0,01418
3MC6	0,00108	0,00109	0,00114	0,00104
I7	0,002	0,002	0,002	0,00178
I8	0,0256	0,02393	0,02325	0,02407
C5H10	0	0	0	0
I9	0,025	0,02548	0,03051	0,02468
C3H8	0	0	0	0
iC5H12	0,04709	0,0505	0,05387	0,05023
23DMC4	0,03456	0,03748	0,04039	0,03843
22DMC4	0,00098	0,00095	0,00117	0,001
2MC5	0,00794	0,00841	0,00886	0,00833
3MC5	0,00377	0,00408	0,0043	0,00405
iC12H25(+)	0	0	0	0
iC12H26	0	0	0	0
I10	0,00754	0,00762	0,00299	0,00823
I11	0,04011	0,03939	0,0498	0,04174
C2H6	0,00046	0,00047	0,00055	0,00046

Приложение В

Literary review

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Вакалова Снежана Евгеньевна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Чузлов Вячеслав Алексеевич	К.Т.Н.		

Консультант-лингвист

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Надеина Луиза Васильевна	к.филол.н.		

Introduction

Alkylation is a generic name for chemical processes during which an intermediate is introduced into the molecules of substances, i.e. an alkyl, which is an alkane particle with a free electron. In the petroleum industry, alkylation is referred to as a catalytic process: a catalyst is necessary for the transfer of hydrogen and the production of carbocation.

High-octane alkylate is the goal product of alkylation process. In the manufacturing of gasoline, alkylate is used to improve the properties.

Among the various types of alkylation, the most promising is the alkylation of isobutane with butylene.

In this master's thesis, mathematical modeling is used to study the process of sulfuric acid alkylation of isobutane with butylene. The use of a mathematical model makes it possible to predict the operation of a real installation in various technological modes.

1.1 Catalysts of the isobutane alkylation process with olefins

1.1.1 Homogeneous isobutane alkylation catalysts with olefins

The most common catalysts of the alkylation processes are sulfuric and hydrofluoric acids.

Table 1 presents the main physical and chemical properties of acid catalysts.

Table 1

Main physical and chemical properties of acid catalysts

Name of the property	H ₂ SO ₄ (98%)	HF (50%)
Density at 20 °C, g/cm ³	1,8356	1,155
Viscosity, mPa·s	24,5 (at 25 °C)	0,53 (at 0 °C)
Dielectric constant	114 (at 25 °C)	86 (at 0 °C)
Acid dissociation constant	2 st: $1,15 \cdot 10^{-2}$	0,62
Melting Point, °C	0,1	-83,4
Boiling Point, °C	332,4	19,4
Isobutane Solubility, %	0,070 (at 25 °C)	1,44 (at 13 °C)

The major distinction in utilizing either corrosive lies in isobutane's solubility: iC₄ is poorly soluble in H₂SO₄, but sustainably solvent in HF acid.

Sulfuric acid and hydrofluoric acid have significant disadvantages, which include high corrosion activity and toxicity. For that reason, it is essential for the product of the alkylation process to be further subjected to alkaline purification when using these catalysts. The spent catalyst must be disposed of in a special way.

In addition to the facts stated above, these acids have a detrimental effect on the environment and on humans. Consequently, they need to be used with utmost caution: personal protective equipment should be worn at all times.

1.1.2 Heterogeneous catalysts for alkylation of isobutane with olefins

Studies of heterogeneous catalysts of the alkylation process have been being conducted for more than 35 years, starting with Aluminium Chloride, which is a solid Lewis acid. In the course of time, the primary focus of these studies has shifted onto the development of various modifications of ion-exchange resins.

The use of heterogeneous catalysts of the alkylation process has a number of advantages:

- reduces corrosion;
- increases the selectivity of the process;
- facilitates the process of separating the alkylate product;
- simplifies catalyst regeneration.

Currently, heterogeneous catalysts for alkylation of isobutane with olefins are represented by catalytic systems based on carriers – zeolites, oxides, cationites promoted by metal cations in the eighth group of Mendeleev periodic table, such as ruthenium, platinum, nickel, palladium. Industrial application of these catalysts is challenging due to the fact that it leads to a significant increase in the cost of the end-product. To minimize costs when using heterogeneous catalysts, copper-containing carriers and their effectiveness are actively investigated as a potential alternative.

For copper catalysts, synthetic zeolites such as modernite and fojazite NaY serve as carriers, solution of copper (II) chloride is used as an active substance.

Another alternative to heterogeneous and homogeneous catalysts in the process of alkylation of isobutane with olefins is the use of ionic liquids. Scientific research of an ionic liquid of the composition 1-methyl-3-butylimidazolium chloride ([BMIM]Cl) – aluminum chloride has been conducted.

1.2 Technologies of alkylation of isobutane with butylene

In this subsection, the most common technologies of alkylation of isobutane with olefins are considered.

1.2.1 Alkylation technology Haldor Topsøe A/S

In Haldor Topsøe A/S alkylation technology, a superacid adsorbed on a solid carrier acts as a catalyst. The reactions are carried out in a reactor with a fixed catalyst layer.

The schematic diagram of alkylation is shown in Figure 1.

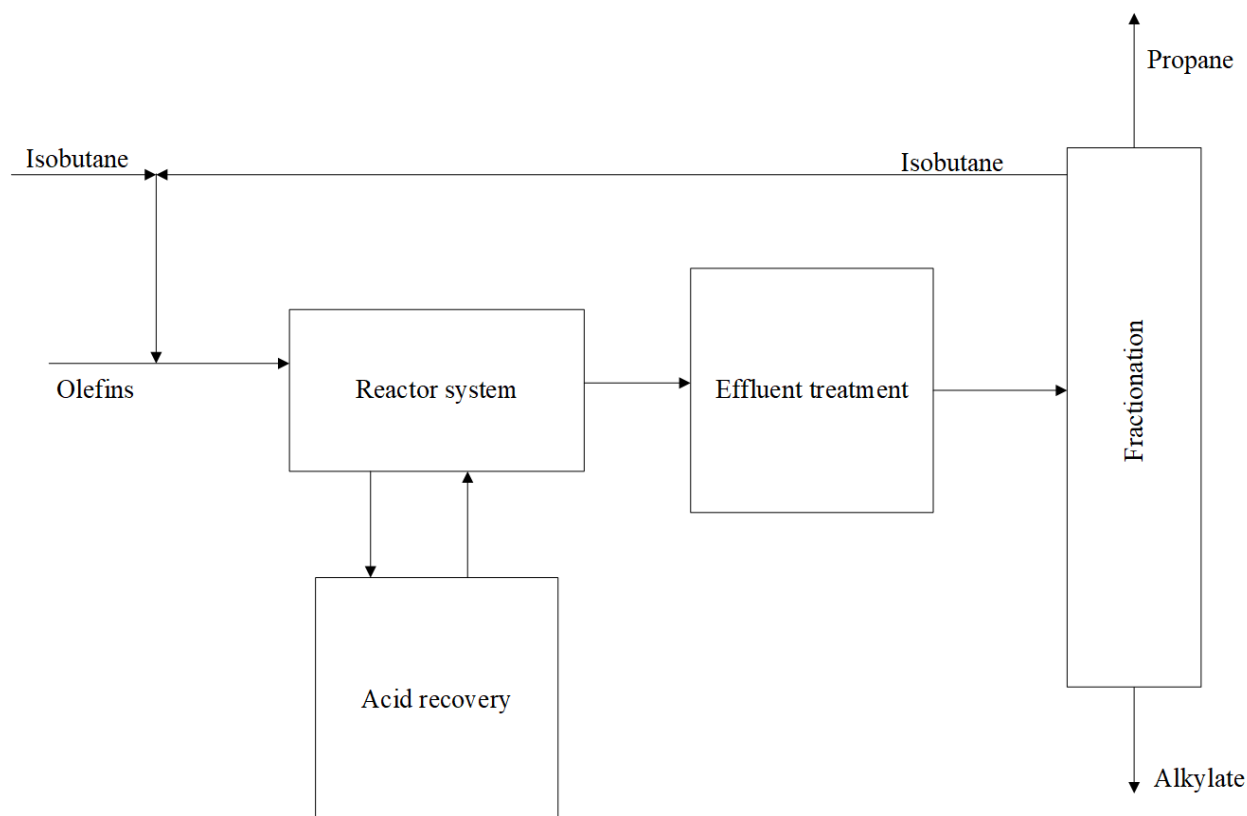


Fig 1 Schematic diagram of alkylation using Haldor Topsøe A/S technology

The make-up isobutane and the recycle isobutane get mixed with olefins and enter the reactor system. The next stage of alkylation starts when the product stream passes the effluent treatment unit, where the acid is separated from the product stream. Then, the raw alkylate is directed to the fractionation unit, where the isolation of fractions of propane, isobutane, n-butane and alkylate take place.

Alkylate obtained by Haldor Topsøe A/S technology is suitable for compounding. The grounds for this suitability is the fact that the sulfur content and saturated vapor pressure meet the requirements for the quality of gasoline.

1.2.2 Exelus ExSact Alkylation Technology

The ExSact alkylation technology is characterized by the continuity of the process due to the presence of a regenerator reactor for a solid catalyst. Figure 2 shows a schematic diagram of the Exelus alkylation process.

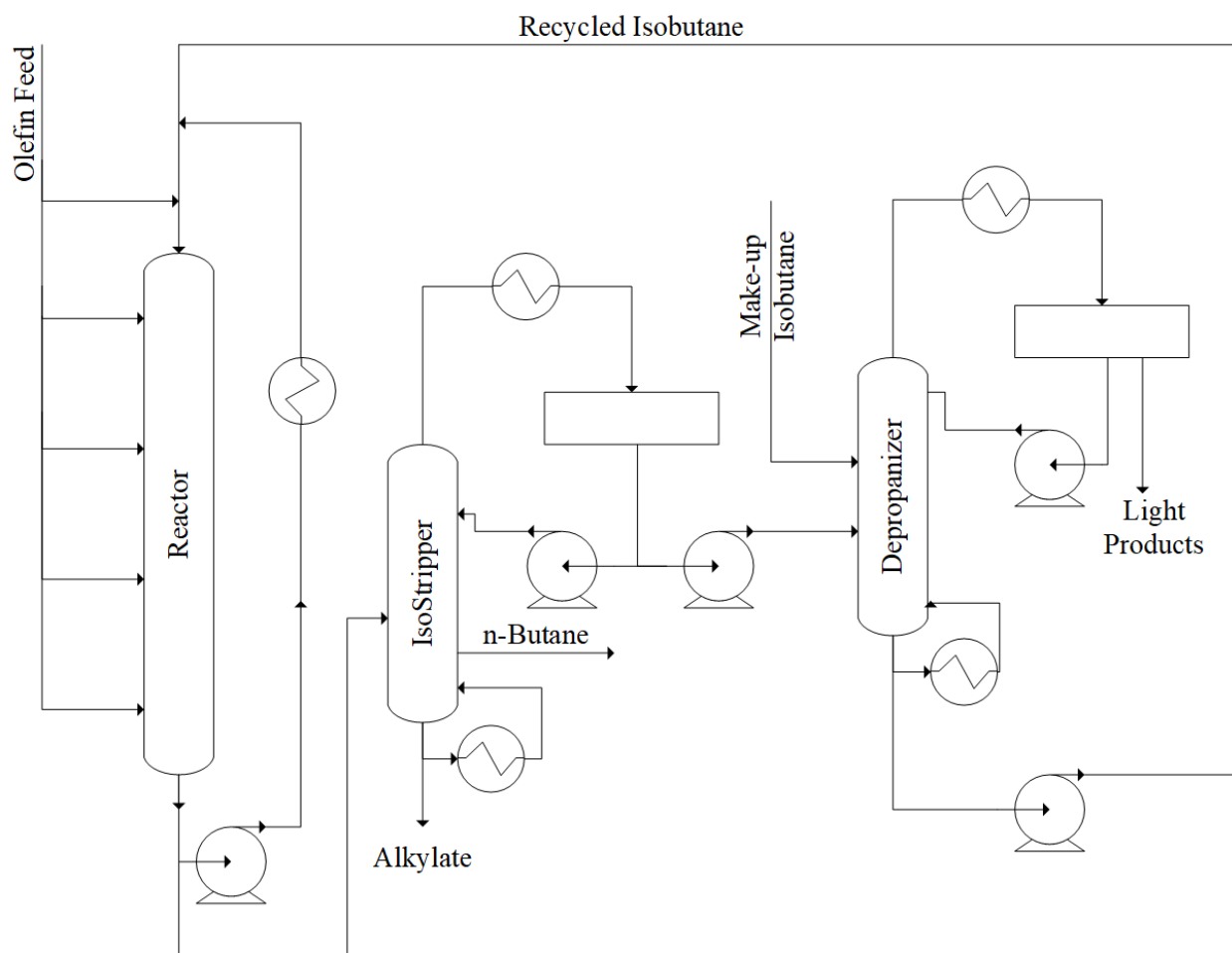


Fig 2 Schematic diagram of the ExSact process

Olefin raw materials are fed in parallel streams into the catalyst layers. At the entrance to the reactor, olefin raw materials are mixed with isobutane coming from the fractionation unit and reaction isobutane. The IsoStripper column serves to separate the product flow of alkylate. The side-cut distillate of the stripping column enters the depropanizer column.

1.2.3 AlkyClean Alkylation Technology

AlkyClean alkylation technology uses a solid-acid zeolite catalyst, the acid centers of which are formed without applying acids to the zeolite surface. Thus, the products obtained by this technology do not require any special post-refinement.

Figure 3 shows a simplified flowchart of the AlkyClean process.

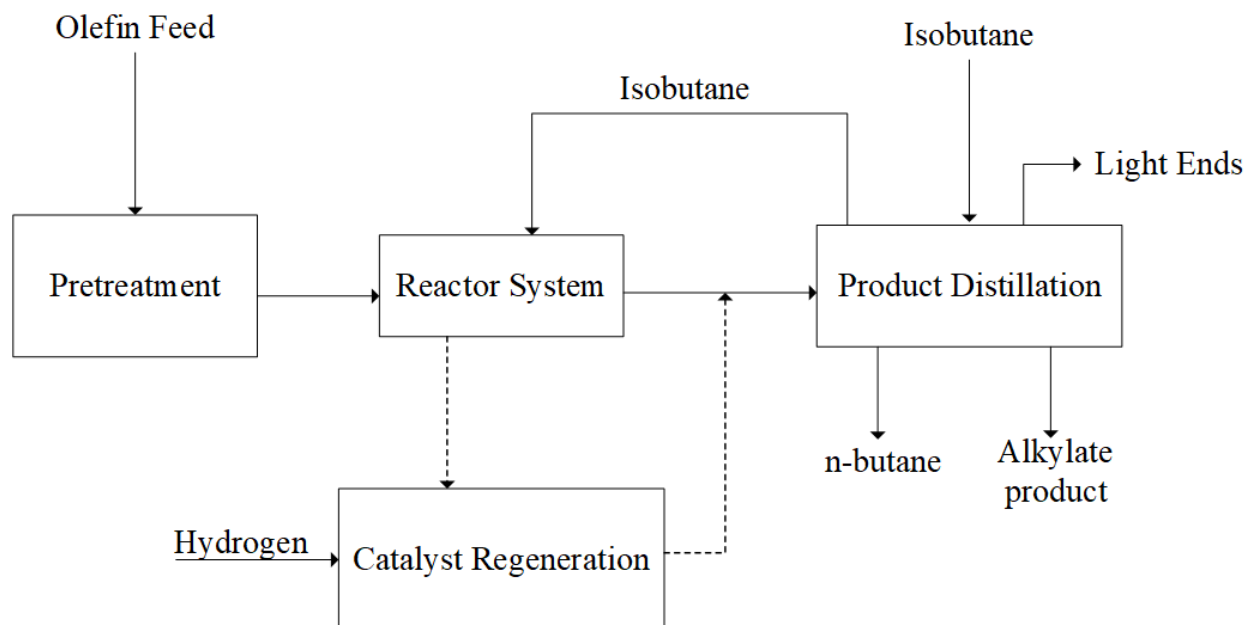


Fig 3 Simplified flowchart of AlkyClean process

According to the Figure 3, the alkylation technology consists of four main blocks. Initially, olefins are fed into the pretreatment unit, where raw materials are purified. After the purification, olefins are sent to the reactor system, which is also fed with isobutane extracted in the fractionation unit. A catalyst regeneration unit in a hydrogen environment is provided.

The main advantages of the technology, in addition to the low corrosion activity of the catalyst and its resistance to impurities in raw materials, can also encompass high production efficiency, competitive production costs and high rates of return of the technology.

1.2.4 Hydrogen Fluoride Alkylation Technology Phillips Petroleum

A feature of Philips Petroleum alkylation technology is the use of hydrofluoric acid as a catalyst.

A typical scheme of the technology is shown in Figure 4.

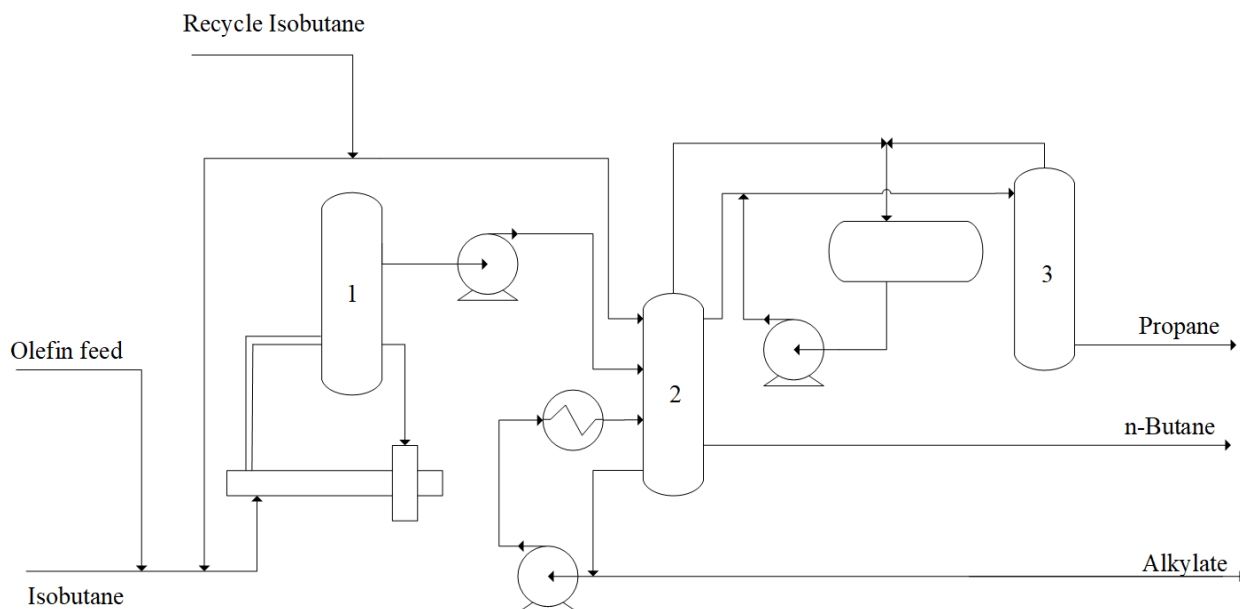


Fig 4 Schematic diagram of a hydrogen fluoride alkylation plant using Phillips Petroleum technology:

1 – reactor; 2 – fractionation column; 3 – steam column

Chemical reactions occur in reactor 1 as a result of the interaction of hydrofluoric acid, the feed stream of olefins and isobutane. Upon leaving the reactor, the products enter the fractionation column 2, where they are divided into fractions of propane, isobutane, n-butane, and alkylate. The target products are also subjected to alkaline purification.

1.2.5 STRATCO Sulfuric acid alkylation technology

Sulfuric acid is used as an alkylation catalyst in STRATCO technology.

The schematic diagram of the installation is shown in Figure 6.

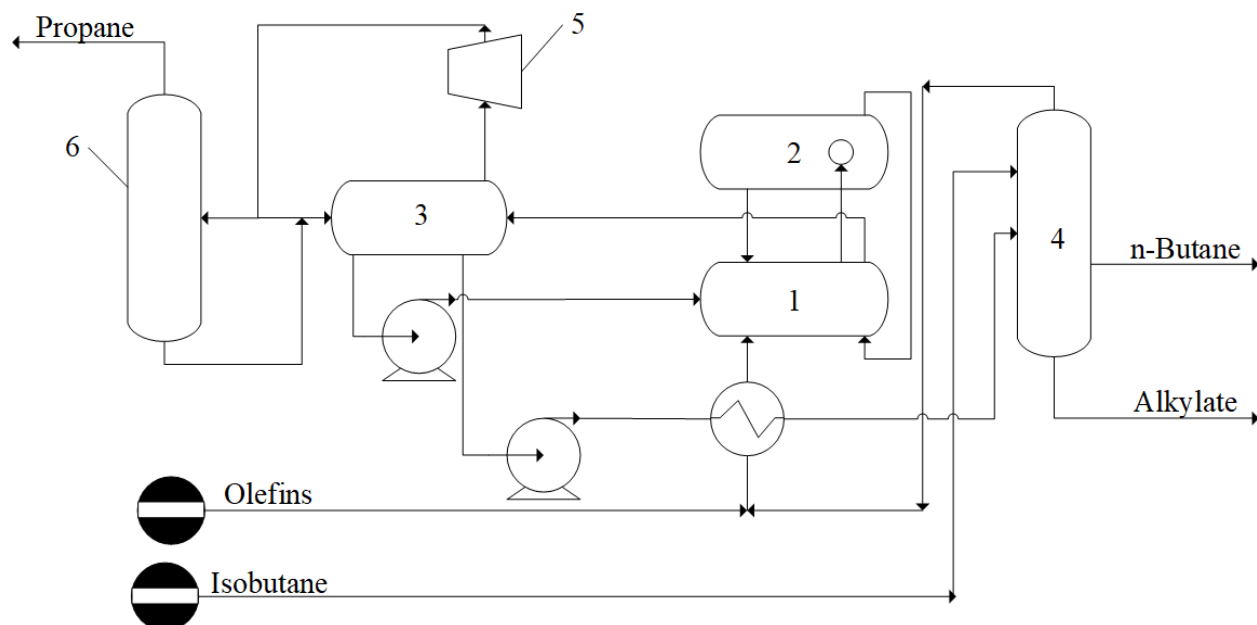


Fig 6 Diagram of a sulfuric acid alkylation plant using STRATCO technology:

1 – reactor-contactor, 2 – catcher, 3 – separator, 4 – deisobutanizer, 5 – compressor,
6 – propane column

Olefins, isobutane and sulfuric acid vapors are supplied to the contactor reactor 1. The alkylation products, after passing the catcher 2, enter the isobutane column, passing through the separator 3. Butane and isobutane fractions, as well as alkylate, are isolated in the column. At the same time, the isobutane obtained as a head strap is returned to the contactor reactor.

1.2.6 ExxonMobil Sulfuric Acid Alkylation Technology

Figure 7 shows a schematic diagram of an ExxonMobil alkylation plant.

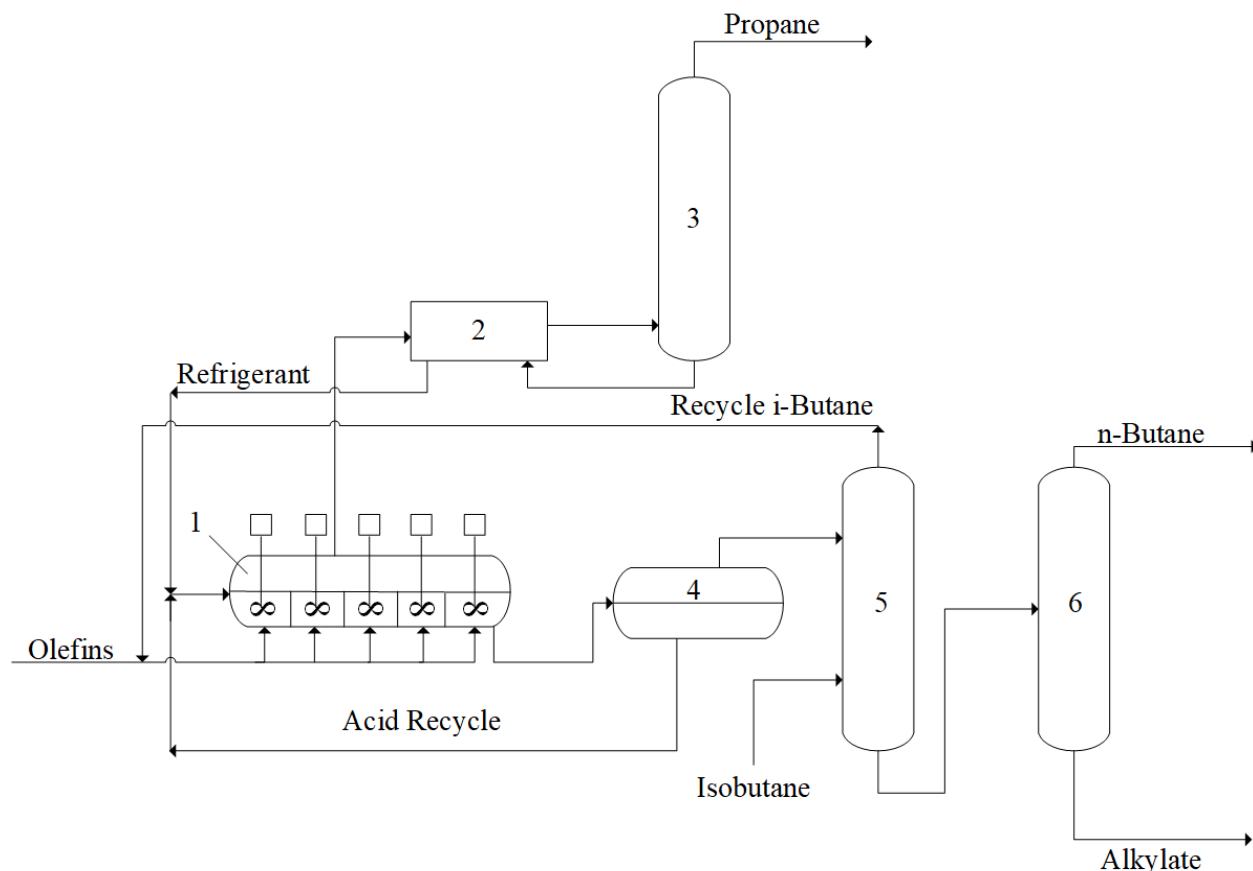


Fig 7 Diagram of an ExxonMobil sulfuric acid alkylation plant:

- 1 – reactor, 2 – cooling compressor, 3 – depropanizer, 4 – catcher,
5 – deisobutanizer, 6 – butane column

Reactor 1 is equipped with mechanical agitators that allow increasing the contact between the feed stream and sulfuric acid. The target alkylation reactions are exothermic, therefore, auto-cooling is provided in the technology: the flow of evaporating hydrocarbons is compressed in cooling compressor 2, the condensed part of the flow is sent back to the reactor, the compressed gas is sent to the propane extraction column. Similarly, the reaction products are sent to separation after passing the sump, that happens in deisobutanizer and debutanizer.

1.2.7 Technology of sulfuric acid alkylation of RAN COMPLETE

The schematic diagram of the sulfuric acid alkylation unit of the RAN COMPLETE is shown in Figure 8.

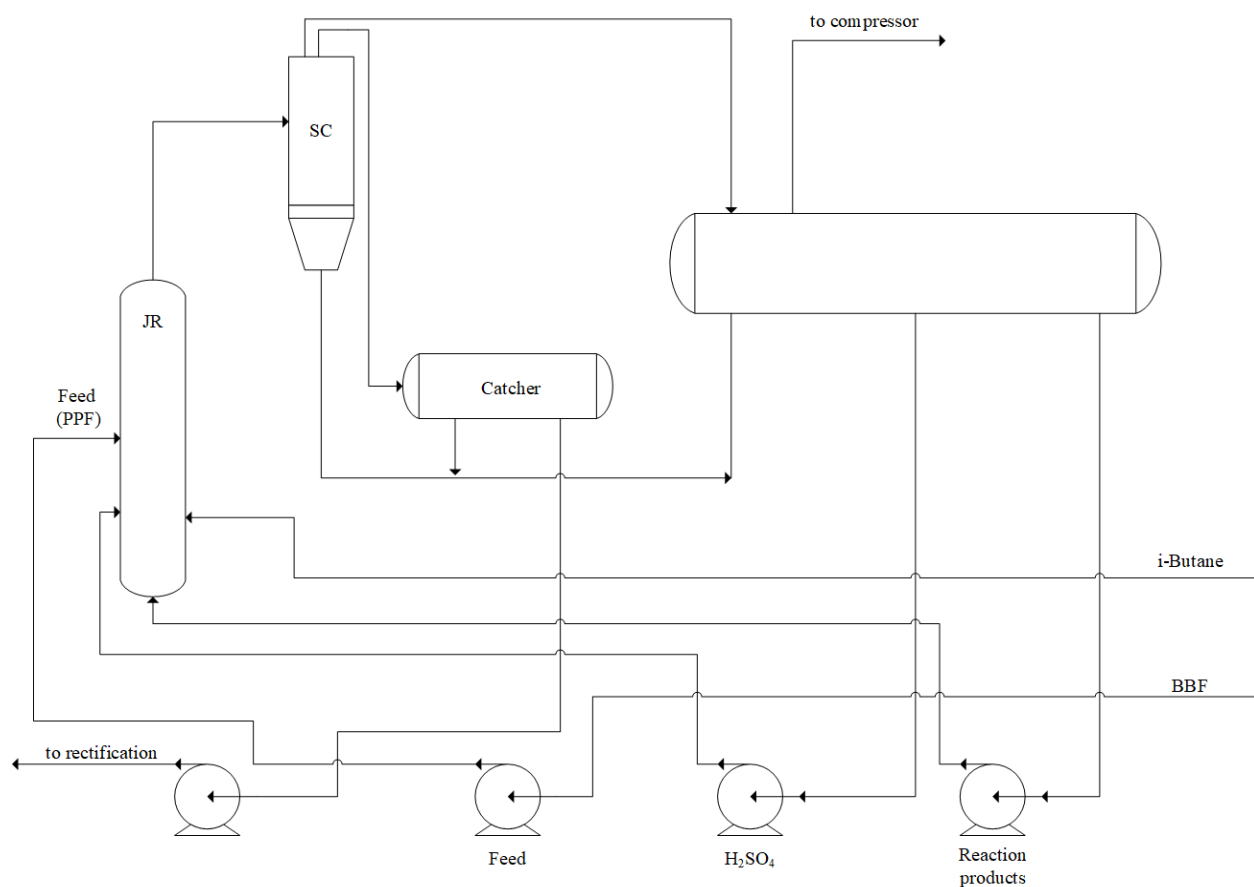


Fig 8 Diagram of the sulfuric acid alkylation unit according to the RAN COMPLETE technology

For effective mixing, this technology uses a jet reactor (JR). A separator cone (SC) is used to separate emulsified systems.

In addition to the high quality indicators of alkylbenzine (Table 2), the sulfuric acid alkylation technology of the RAN COMPLETE has a number of significant advantages, which include ease of maintenance and low operating and capital expenditure.

Comparative characteristics of sulfuric acid alkylation technologies

Characteristic	ExxonMobil	Stratco	Ran Group
Operating temperature, °C max	9	9	15
Volume of alkylate production t/day	850	850	850
Octane number	96.3 RON	96.3 RON	96.3 RON
Number of reactors	1	4	4
Number of settling tanks	1	4	5

The sulfuric acid alkylation technologies discussed in this subsection have a number of common disadvantages:

- relatively low selectivity of the process;
- high consumption of alkaline reagents caused by high acidity of alkylate;
- increased content of volatile hydrocarbons released into the environment in the product alkylate;

1.3 Basic approaches to modeling the process of alkylation of isobutane with butylene

The process of sulfuric acid alkylation of isobutane with butylene has become widespread among research projects and scientific papers. The study of this process is largely based on the method of mathematical modeling.

The application of mathematical models of the sulfuric acid alkylation process is based on the following approaches:

- There are several main stages of modeling:
 - assessment of thermodynamic parameters of the process;
 - determination of kinetic parameters;
 - drawing up a reactor model;
 - checking the model for adequacy.

- A mathematical model is a set of equations of material and thermal balances and their functional relationships.
- The mathematical model should take into account the physical and chemical nature of the processes occurring during sulfuric acid alkylation: in this case, it is important to take into account the stage of formation of carbocations and the deactivation of the catalyst.
- The mathematical model should also take into account the structural features of technological elements and devices used, as well as the connections between them.
- To ensure the functionality of the sulfuric acid alkylation process model – its adequacy and predictive ability – it is necessary to select kinetic parameters that ensure the correctness of calculations with different raw material composition. As undefined kinetic parameters, pre-exponential multipliers are taken in terms of the rates of chemical reactions.
- The search for kinetic parameters is carried out by solving the inverse kinetic problem.