

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
 федеральное государственное автономное  
 образовательное учреждение высшего образования  
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа природных ресурсов  
 Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология  
 ООП Химическая технология топлива и газа  
 Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

### ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРАНТА

Тема работы
<b>Моделирование процесса алкилирования изобутана олефинами</b>

УДК 661.716.1.4.095.253

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ12	Жигало Ирина Владимировна		

Руководитель ВКР

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

### КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООД ШБИП	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

### ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП/ОПОП, должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОХИ ИШПР	Ивашкина Елена Николаевна	д.т.н.		

**ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП**  
**«Химическая технология топлива и газа»**  
**(направление подготовки 18.04.01 «Химическая технология»)**

Код компетенции	Наименование компетенции
<b>Универсальные компетенции</b>	
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 организовывать 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 определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
<b>Общепрофессиональные компетенции</b>	
ОПК(У)-1	Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок
ОПК(У)-2	Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
ОПК(У)-3	Способен разрабатывать нормы выработки, технологические нормативы на расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии, контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку
ОПК(У)-4	Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты
<b>Профессиональные компетенции</b>	
ПК(У)-1	Способен к совершенствованию технологического процесса — разработке мероприятий по комплексному использованию сырья, по замене дефицитных материалов и изысканию способов утилизации отходов производства
ПК(У)-2	Способен оценивать эффективность новых технологий, модернизировать существующие технологии и внедрять технические решения в производство
ПК(У)-3	Способен осуществлять экспертный анализ технологий и управление технологическими процессами промышленной подготовки и переработки нефти и газа
ПК(У)-4	Способен проводить аналитический и метрологический контроль производства для обеспечения качества и безопасности выпускаемой продукции, хода технологического процесса, охраны окружающей среды
ПК(У)-5	Способен осуществлять выбор и эксплуатацию технологического оборудования для подготовки и переработки нефти и газа
ПК(У)-6	Способен использовать пакеты прикладных программ при мониторинге действующего процесса, выполнении проектных и/или исследовательских работ



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа природных ресурсов  
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология  
ООП Химическая технология топлива и газа  
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:  
Руководитель ООП

Ивашкина Е.Н.  
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

### ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Выпускной квалификационной работы магистра  
(ВКР бакалавра/ ВКР специалиста/ ВКР магистра)

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ12	Жигало Ирине Владимировне

Тема работы:

Моделирование процесса алкилирования изобутана олефинами	
Утверждена приказом директора ИШПР (дата, номер)	от 30.01.2023 г. № 30-97/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01.06.2023 г.
--	---------------

#### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<b>Исходные данные к работе</b>	Объект исследования – процесс алкилирования изобутана олефинами. Технология предназначена для получения высокооктанового компонента автомобильных бензинов – алкилата.
<b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b>	1 Литературный обзор 1.1 Теоретические основы процесса алкилирования изобутана олефинами 1.1.1 Назначение процесса 1.1.2 Сырье и продукты 1.1.3 Технологическое оформление 1.1.3.1 Технологическая схема сернокислотного алкилирования 1.1.3.2 Технологическая схема твердофазного алкилирования 1.1.4 Основные управляющие параметры жидкофазного процесса 1.1.4.1 Давление 1.1.4.2 Температура

	<ul style="list-style-type: none"> <li>1.1.4.3 Концентрация кислоты</li> <li>1.1.4.4 Соотношение изобутан : олефины</li> <li>1.1.4.5 Соотношение катализатор : сырье</li> <li>1.1.4.6 Продолжительность реакции</li> <li>1.1.5 Основные управляющие параметры твердофазного процесса <ul style="list-style-type: none"> <li>1.1.5.1 Температура</li> <li>1.1.5.2 Соотношение изобутан : олефины</li> <li>1.1.5.3 Состав сырьевого потока олефинов</li> <li>1.1.5.4 Продолжительность реакции</li> </ul> </li> <li>1.2 Катализаторы процесса алкилирования <ul style="list-style-type: none"> <li>1.2.1 Жидкофазные катализаторы</li> <li>1.2.2 Твердофазные катализаторы</li> </ul> </li> <li>1.3 Современные технологии алкилирования изобутана олефинами <ul style="list-style-type: none"> <li>1.3.1 Технология алкилирования Alky-Clean</li> <li>1.3.2 Технология алкилирования FBA</li> <li>1.3.3 Технология алкилирования ExSact</li> <li>1.3.4 Технология алкилирования Alkylene</li> <li>1.3.5 Технология фтористоводородного алкилирования</li> <li>1.3.6 Технология алкилирования СКА</li> <li>1.3.7 Технология алкилирования STRATCO</li> </ul> </li> <li>1.4 Существующие подходы к математическому моделированию процесса твердофазного алкилирования изобутана олефинами</li> <li>2 Объект и метод исследования <ul style="list-style-type: none"> <li>2.1 Описание объекта исследования</li> <li>2.2 Математическая модель процесса твердофазного алкилирования</li> </ul> </li> <li>3 Экспериментальная часть <ul style="list-style-type: none"> <li>3.1 Исследование влияния основных управляющих параметров процесса на состав и свойства алкилата <ul style="list-style-type: none"> <li>3.1.1 Влияние температуры</li> <li>3.1.2 Влияние давления</li> <li>3.1.3 Влияние состава олефиновой фракции</li> <li>3.1.4 Влияние соотношения изобутан : олефины</li> <li>3.1.5 Влияние количества секций в реакторе</li> </ul> </li> <li>3.2 Сравнение жидкофазной и твердофазной технологий алкилирования</li> </ul> </li> <li>4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</li> <li>5 Социальная ответственность</li> </ul>
<b>Перечень графического материала</b>	Нет

<b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b>	
<b>Раздел</b>	<b>Консультант</b>
«Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	к.т.н., доцент ОСГН ШБИП Криницына З.В.
«Социальная ответственность»	к.т.н., доцент ООД ШБИП Сечин А.А.
<b>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</b>	
<b>Alkylation of isobutane with butenes on a solid catalyst</b>	

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	<b>01.02.2023 г.</b>
---	----------------------

**Задание выдал руководитель:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Доцент ОХИ ИШПР	Чузлов В.А.	к.т.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
2ДМ12	Жигало Ирина Владимировна		

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
 федеральное государственное автономное  
 образовательное учреждение высшего образования  
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

Уровень образования Магистратура

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

Период выполнения 2022/2023 учебный год

Форма представления работы:

**Выпускная квалификационная работа магистра**  
 (ВКР бакалавра/ ВКР специалиста/ ВКР магистра)

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

Обучающегося:

Группа	ФИО
2ДМ12	Жигало Ирины Владимировны

Тема работы:

**Моделирование процесса алкилирования изобутана олефинами**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01.06.2023 г.
--	---------------

Дата Контроля	Название раздела (модуля)/ вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2023 г.	Введение	10
15.03.2023 г.	Литературный обзор: теоретические основы процессы (назначение; сырье и продукты; технологическое оформление сернокислотного и твердофазного процесса; основные управляющие параметры (давление; температура; концентрация кислоты; соотношение изобутан : олефины; соотношение катализатор : сырье; продолжительность реакции)); катализаторы процесса (жидкофазные и твердофазные); современные технологии алкилирования (Alky-Clean; FBA; ExSact; Alkylene; фтористоводородное алкилирование; СКА; STRATCO); существующие подходы к математическому моделированию процесса твердофазного алкилирования.	15
01.04.2023 г.	Объекты и методы исследования: описание объекта исследования (схема реактора твердофазного алкилирования); математическая модель процесса твердофазного алкилирования (формализованная схема превращений; расчет кинетических параметров; оценка адекватности модели).	15
15.04.2023 г.	Экспериментальная часть: исследование влияния основных управляющих параметров процесса на состав и свойства алкилата (температура; давление; состав олефиновой	40

	фракции; соотношение изобутан : олефины; количество секций в реакторе); сравнение жидкофазной и твердофазной технологий алкилирования.	
20.05.2023 г.	Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». Раздел «Социальная ответственность».	10
01.06.2023 г.	Выводы	10

**СОСТАВИЛ:**

**Руководитель ВКР**

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

**СОГЛАСОВАНО:**

**Руководитель ООП**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОХИ ИШПР	Ивашкина Елена Николаевна	Д.Т.Н.		

**Обучающийся**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ12	Жигало Ирина Владимировна		

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

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
2ДМ12	Жигало Ирина Владимировна

<b>Школа</b>	<b>Инженерная школа природных ресурсов</b>	<b>Отделение школы (НОЦ)</b>	<b>Отделение химической инженерии</b>
<b>Уровень образования</b>	магистратура	<b>Направление/специальность</b>	18.04.01 Химическая технология топлива и газа

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Бюджет проекта – не более 611374,54 руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 341059,32 руб.</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Значение показателя интегральной ресурсоэффективности – не менее 4,6.</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Районный коэффициент – 1,3; Коэффициент дополнительной заработной платы – 0,1; Норма амортизации 10 %; Отчисления во внебюджетные фонды – 30 %.</i>

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	<i>Анализ потенциальных потребителей, анализ конкурентных технических решений, оценка готовности проекта к коммерциализации.</i>
2. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	<i>Определение затрат на проектирование (смета затрат).</i>
3. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	<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. *Диаграмма Исикавы*
3. *График проведения и бюджет НТИ*
4. *Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ*

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

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
доцент ОСГН ШБИП	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
2ДМ12	Жигало Ирина Владимировна		

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

<b>Группа</b> 2ДМ12		<b>ФИО</b> Жигало Ирина Владимировна	
<b>Школа</b>	Инженерная школа природных ресурсов	<b>Отделение (НОЦ)</b>	Отделение химической инженерии
<b>Уровень образования</b>	магистратура	<b>Направление/специальность</b>	18.04.01 Химическая технология топлива и газа

Тема ВКР:

Моделирование процесса алкилирования изобутана олефинами

### Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

#### Введение

- Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения.
- Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации

*Объект исследования:* процесс алкилирования изобутана олефинами.  
*Область применения:* нефтехимическая промышленность  
*Рабочая зона:* компьютерный класс.  
*Количество и наименование оборудования рабочей зоны:* персональный компьютер.  
*Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне:* разработка математической модели процесса.

### 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 27.12.2018);  
 ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.  
 ГОСТ 22269-76. Система «человек-машина». Рабочее место оператора. Взаимное расположение элементов рабочего места. Общие эргономические требования.  
 ГОСТ Р 50923-96. Дисплей. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.  
 СанПиН 1.2.3685-21 "Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания".

#### **2. Производственная безопасность при разработке проектного решения:**

- Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов
- Расчет уровня опасного или вредного производственного фактора

#### **Анализ вредных и опасных факторов:**

- вещества, обладающие острой токсичностью по воздействию на организм;
- повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может пройти через тело человека;
- отклонение показателей микроклимата;
- превышение уровня шума;
- недостаточная освещенность рабочей зоны.

#### **Средства защиты:**

- размещение электрооборудования с учетом защиты персонала от случайных прикосновений к токоведущим частям;
- аварийное отключение электрооборудования при возникновении аварийных ситуаций в результате нарушения технологического процесса;
- спецодежда;
- соблюдение техники безопасности.

#### **Расчет уровня вредного производственного фактора:**

- расчет системы искусственного освещения.

<b>3. Экологическая безопасность <u>при разработке проектного решения</u></b>	<p><b>Воздействие на литосферу</b> оказывают отходы, образующиеся при разработке проекта: бумага, пластик, отработанные люминесцентные лампы и т.д. Основной задачей предотвращения влияния является подбор оптимальных способов их утилизации.</p> <p><b>Воздействие на гидросферу и атмосферу</b> в процессе разработки проектного решения – минимально.</p>
<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях <u>при разработке проектного решения</u></b>	<p><b>Возможные ЧС:</b>          Природные катастрофы (наводнения, ураган и т.д.);          Геологические воздействия (землетрясения, обвалы и т.д.);          Техногенные воздействия (пожар, взрыв, обрушение здания и др.);</p> <p><b>Наиболее типичная ЧС:</b> пожар.</p>
<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	

**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
2ДМ12	Жигало Ирина Владимировна		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 127 страниц, 39 рисунков, 36 таблиц, 66 источников, 1 приложение.

Ключевые слова: алкилирование, изобутан, олефины, моделирование, твердофазные катализаторы, цеолитсодержащие катализаторы, кинетическая модель.

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

Объектом исследования является процесс алкилирования изобутана олефинами.

Цель работы – создание модели для тестирования и управления процессом.

В ходе работы была создана математическая модель твердофазного алкилирования изобутана олефинами; исследовано влияние основных технологических параметров на выход и качество продукции установки; проведено сравнение технологии жидкофазного и твердофазного алкилирования; рассчитана экономическая эффективность.

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	16
1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР .....	19
1.1 Теоретические основы процесса алкилирования изобутана олефинами .....	19
1.1.1 Назначение процесса.....	19
1.1.2 Сырье и продукты .....	21
1.1.3 Технологическое оформление .....	23
1.1.3.1 Технологическая схема сернокислотного алкилирования .....	23
1.1.3.2 Технологическая схема твердофазного алкилирования .....	25
1.1.4 Основные управляющие параметры жидкофазного процесса .....	25
1.1.4.1 Давление .....	26
1.1.4.2 Температура.....	26
1.1.4.3 Концентрация кислоты.....	27
1.1.4.4 Соотношение изобутан : олефины .....	28
1.1.4.5 Соотношение катализатор : сырье .....	28
1.1.4.6 Продолжительность реакции.....	28
1.1.5 Основные управляющие параметры твердофазного процесса.....	29
1.1.5.1 Температура.....	29
1.1.5.2 Соотношение изобутан : олефины .....	29
1.1.5.3 Состав сырьевого потока олефинов.....	30
1.1.5.4 Продолжительность реакции.....	30
1.2 Катализаторы процесса алкилирования .....	31
1.2.1 Жидкофазные катализаторы .....	32

1.2.2 Твердофазные катализаторы .....	32
1.3 Современные технологии алкилирования изобутана олефинами .....	36
1.3.1 Технология алкилирования Alky-Clean .....	36
1.3.2 Технология алкилирования FBA .....	37
1.3.3 Технология алкилирования ExSact.....	38
1.3.4 Технология алкилирования Alkylene .....	39
1.3.5 Технология фтористоводородного алкилирования .....	40
1.3.6 Технология алкилирования СКА .....	41
1.3.7 Технология алкилирования STRATCO .....	42
1.4 Существующие подходы к математическому моделированию процесса твердофазного алкилирования изобутана олефинами .....	43
2 ОБЪЕКТ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ .....	49
2.1 Описание объекта исследования .....	49
2.2 Математическая модель процесса твердофазного алкилирования .....	51
3 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ .....	56
3.1 Исследование влияния основных управляющих параметров процесса на состав и свойства алкилата .....	56
3.1.1 Влияние температуры .....	56
3.1.2 Влияние давления.....	58
3.1.3 Влияние состава олефиновой фракции .....	61
3.1.4 Влияние соотношения изобутан : олефины .....	63
3.1.5 Влияние количества секций в реакторе .....	65
3.2 Сравнение жидкофазной и твердофазной технологий алкилирования.....	68

4	ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.....	71
4.1	Предпроектный анализ .....	71
4.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования .....	71
4.1.2	Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	72
4.1.3	Диаграмма Исикавы.....	74
4.1.4	Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	75
4.1.5	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования.....	77
4.2	Инициация проекта .....	78
4.3	Планирование управления научно-техническим проектом.....	80
4.3.1	Иерархическая структура работ проекта .....	80
4.3.2	План проекта.....	81
4.3.3	Бюджет научного исследования .....	84
4.4	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования..	87
4.4.1	Оценка абсолютной эффективности исследования.....	87
4.4.2	Оценка сравнительной эффективности исследования .....	92
5	СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕСТВЕННОСТЬ .....	94
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....	94
5.2	Производственная безопасность .....	97
5.2.1	Отклонение показателей микроклимата .....	98
5.2.2	Поражение электрическим током.....	100
5.2.3	Недостаточная освещенность рабочей зоны .....	100

5.2.4 Пожаровзрывобезопасность на объектах .....	101
5.2.5 Повышенный уровень шума .....	102
5.2.6 Расчет искусственного освещения .....	103
5.3 Экологическая безопасность .....	105
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....	106
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	108
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	109
Приложение А .....	116

## ВВЕДЕНИЕ

Россия занимает третье место в мире после США и Китая по производству нефтепродуктов и около половины всего произведенного топлива поставляет за границу.

В 2022 году на фоне усиления санкций переработка нефти в России снизилась с 285 млн т нефти (за 2021 год) до 272 млн т. Однако при этом наблюдался рост производства топлив, среди которых можно выделить бензин, поскольку примерно 90 % (36 млн т) бензина потребляется на внутреннем рынке России [1].

Анализируя рынок потребления топлив в России (Рисунок 1), можно сделать вывод о том, что наиболее распространенным топливом среди российских автовладельцев считает бензин АИ-95 и АИ-92.

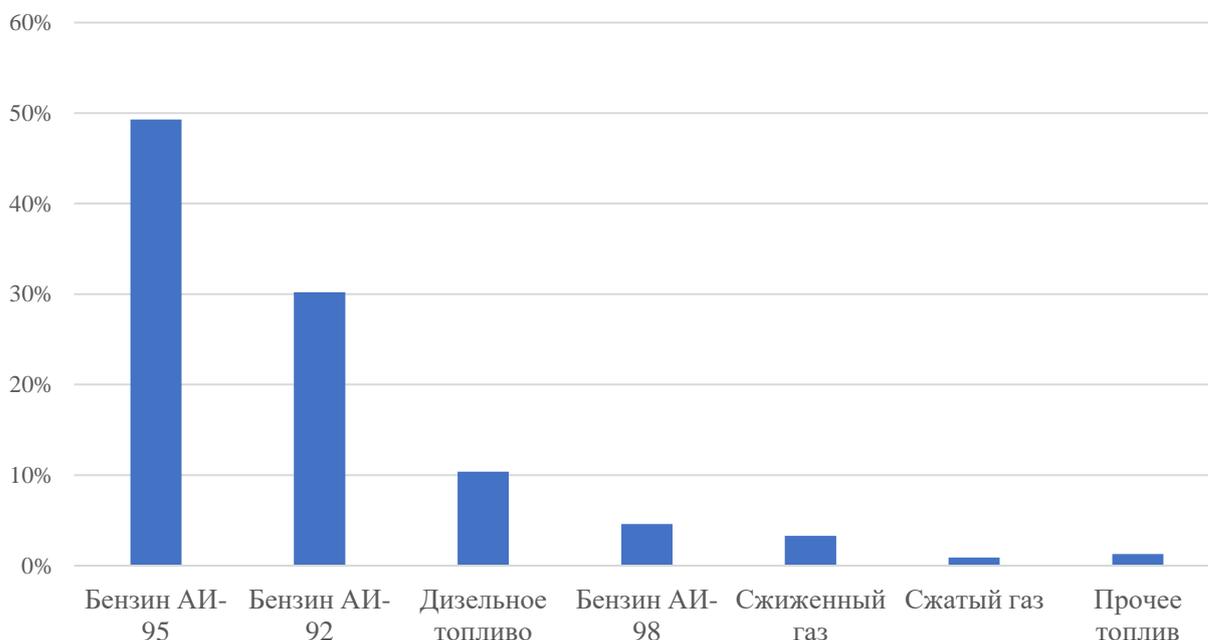


Рисунок 1 – Топливный рынок России [2]

Однако автомобильный транспорт в силу увеличения его доли с каждым годом стал основным источником загрязнения атмосферы Земли. Следует отметить, что каждый год происходят миллионы тонн выбросов различных

токсичных веществ и соединений, которые губительно сказываются на людей и экологическую обстановку. Среди многообразия состава выхлопных газов выделяют порядка 300 токсичных и вредных соединений, причем было выявлено, что около 60 % всех выбросов в атмосферу приходится именно на долю автомобилей [3].

Поэтому использование высокооктановых бензинов, исключая из своего состава ароматику, олефины и серу, является наиболее удачным решением данной проблемы, учитывая, что с каждым годом ужесточаются требования к качеству автомобильных бензинов.

Среди процессов, направленных на облагораживание нефтяных дистиллятов, можно выделить процесс алкилирование изобутана олефинами, так как получаемый в ходе него продукт – алкилат – полностью отвечает данным требованиям.

Тем не менее сам процесс включает в себя использование жидких кислот-катализаторов, которые отличаются высокой летучестью и токсичностью, что негативно сказывается на окружающей среде и человеке. В связи с этим, появляется необходимость замены их на более экологичную альтернативу – твердофазные катализаторы.

Таким образом, **целью работы** является создание модели для тестирования и управления процессом.

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

1. Поиск исходных данных для моделирования процесса (составы сырья и продуктов; технологические параметры процесса; конструкция реакторного оборудования);
2. Составление всевозможных реакций процесса с участием бутена-1 и бутена-2;
3. Составление формализованной схемы превращений;
4. Расчет кинетических параметров составленных реакций;
5. Разработка модели процесса алкилирования изобутана олефинами на твердом катализаторе;

6. Исследование влияния основных технологических параметров на состав и свойства получаемого алкилата;

7. Сравнение технологий жидкофазного и твердофазного алкилирования.

**Объектом исследования** в данной работе является процесс алкилирования изобутана олефинами.

**Научная новизна** состоит в установлении кинетических закономерностей процесса алкилирования изобутана олефинами.

**Практическая значимость** – разработанная модель является основой для цифровых решений, направленных на эффективное управление промышленным процессом алкилирования, а также проведение оценки эффективности внедрения данного процесса в состав нефтеперерабатывающего предприятия.

# 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

## 1.1 Теоретические основы процесса алкилирования изобутана олефинами

Открытие алкилирования изобутана олефинами произошло в 1932 году в ходе ряда экспериментов, проведенных В. Ипатьевым и Г. Пайнсом. Они обнаружили, что олефины способны присоединять изоалканы в среде сильных кислот при сравнительно низких температурах.

Однако в промышленности данный процесс занял свое место лишь спустя 6 лет во время Второй мировой войны, найдя применение в качестве добавки для высокооктанового авиационного топлива [4]. А уже через более 10 лет алкилаты использовали для повышения детонационной стойкости автомобильных бензинов.

В России с 1 января 2016 года автомобильные бензины не должны быть ниже экологического класса Евро-5 [5], который сильно ограничивает содержание таких вредных веществ, как сера, бензол, ароматические углеводороды, олефины, метанол, этанол и т.д. Это, в свою очередь, регулирует состав компаундированных бензинов, уменьшая содержание фракций риформата, спиртов, катализата и т.д.

Именно поэтому алкилат или так называемый «безлимитный» компонент лишен этих ограничений. Однако стоит отметить, что себестоимость алкилата в 3 раза выше, чем себестоимость изомеризата пентан-гексановой фракции.

### 1.1.1 Назначение процесса

Алкилирование изобутана олефинами направлено на получение высокоценной в нефтеперерабатывающей промышленности добавки к автомобильным бензинам – алкилата, который повышает октановое число топлив. В основном алкилат состоит из изооктанов, которые обеспечивают

требуемые эксплуатационные свойства топлив без вреда для окружающей среды.

Получаемый алкилат отличается высоким значение детонационной стойкости, порядка  $90 \div 96$  ОЧМ [5], а также имеет достаточно низкое давление насыщенных паров, поэтому лишь незначительная его доля способна испариться в условиях транспортировки, а также хранения.

На рисунке 2 представлено распределение доли алкилата в составе товарных бензинов.

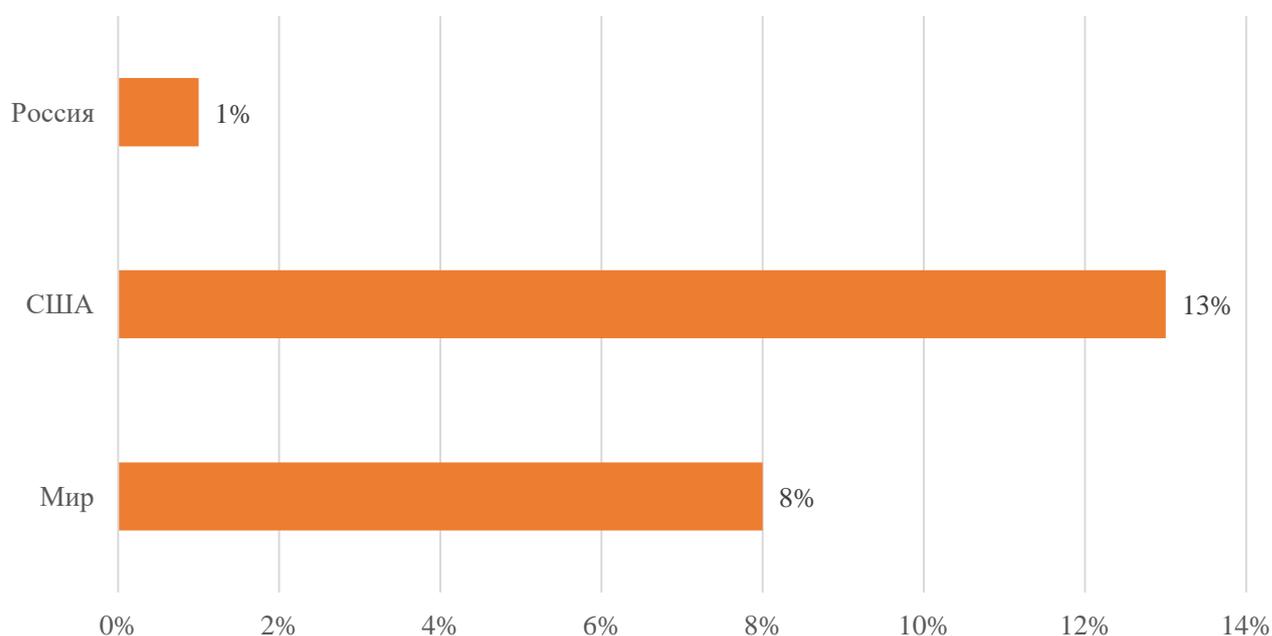


Рисунок 2 – Востребованность алкилата в мире [6]

Исходя из данных, представленных на рисунке 2, можно сделать вывод о малой вовлеченности алкилата в процесс компаундирования товарных бензинов. Это, в первую очередь, связано с низкой распространенностью данного процесса в нашей стране.

По данным статьи [7] на 2019 год в России эксплуатируется порядка 9 установок алкилирования изобутана олефинами (Таблица 1).

Таблица 1 – Обзор процесса алкилирования в России

Город	Фирма, год	Катализатор	Кол-во	Производительность, тыс. т/год
Уфа	–	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	2	110
Самара				50
Ярославль			1	100
Омск				300
Рязань				400
Уфа	С 2013	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> , технология STRATCO	1	–
Кстово	ООО «ЛУКОЙЛ- Нижегород- нефтеоргсинтез»	HF		367 [8]

### 1.1.2 Сырье и продукты

Реакция алкилирования возможна с участием изопарафинов как малой молекулярной массой, так и высокой. Однако для производства компонента бензинов с большим значением октанового числа следует использовать углеводороды ряда C<sub>2</sub> ÷ C<sub>5</sub> [9].

Необходимо подчеркнуть, что во взаимодействие вступают те изоалканы, которые имеют в своем составе третичный атом углерода – изобутан и изопентан. Но вовлекают в этот процесс лишь изобутан, поскольку изопентан допустимо смешивать с бензином в силу его низкого давления насыщенных паров и высокого значения детонационной стойкости [10].

Как правило, в качестве сырья процесса алкилирования используют бутан-бутиленовую фракцию, состоящую на 80 % из углеводородов C<sub>4</sub>, а остальную массу данной фракции составляют углеводороды C<sub>3</sub> и C<sub>5</sub> [11]. Благодаря процессу алкилирования появляется возможность рационально утилизировать получаемые с установок пиролиза, коксования и каталитического крекинга отходящие углеводородные газы.

Такие компоненты, как бутан и пропан, считаются балластными в составе сырьевой фракции, потому что не вступают в основное взаимодействие, но занимают определенную долю реакционного объема и, как итог, снижают содержание целевого изобутана.

К нежелательным компонентам также стоит отнести линейные алканы из-за их негативного влияния на условия синтеза [12]. Для этих целей на этапе предварительной подготовки сырья бутан-бутиленовая фракция проходит селективное разделение на колоннах ректификации – бутановой и пропановой.

Присутствие в сырье влаги также влечет к дополнительным технологическим операциям, а именно защелачиванию с последующим ее удалением.

Наличие в сырье этилена и бутадиена способствует протеканию побочных реакций и, как следствие, увеличению доли побочных продуктов, которые в дальнейшем способны снижать концентрацию катализатора – серной кислоты.

Не менее важным считается содержание олефинов в бутан-бутиленовой фракции. В ходе процесса алкилирования наличие низших олефинов способствует повышению расхода кислоты и снижению детонационной стойкости получаемого алкилата. Однако присутствие высших олефинов равным образом способствует снижению октанового числа в силу их склонности к полимеризации.

Следует отметить, что сырье должно содержать некоторый избыток изоалканов, чем олефинов, в связи с тем, что изобутан будет испытывать потери при рециркуляции.

Продукт процесса алкилирования – алкилат или алкилбензин [13] – относят к важнейшим компонентам высококачественных бензинов. Преимущественно алкилат состоит из разветвленных алканов, поэтому обладает малой чувствительностью к методу определения октанового числа, порядка 2 ÷ 4 пункта, а также незначительным нагарообразованием.

По данным [14] при использовании бутилена наблюдаются значительно лучшие результаты данного процесса. Но вследствие ограниченности сырьевых потоков требуется прибегать к использованию пропиленов и малой доли амиленов. При использовании сырья, содержащего около 97 % пропилена), возможно добиться получения алкилата с октановым числом по исследовательскому методу порядка 88,6, но это приводит к изменению таких технологических параметров, как температура, концентрация серной кислоты и ее расход.

### 1.1.3 Технологическое оформление

Рассмотрим основные блоки технологических схем на примере процессов с участием серной кислоты, а также цеолитсодержащего катализатора.

#### 1.1.3.1 Технологическая схема сернокислотного алкилирования

Процесс алкилирования в присутствии серной кислоты проводится при сравнительно низких температурах  $4 \div 10$  °С в реакторах смешения. Упрощенная блок-схема данного процесса представлена на рисунке 3.

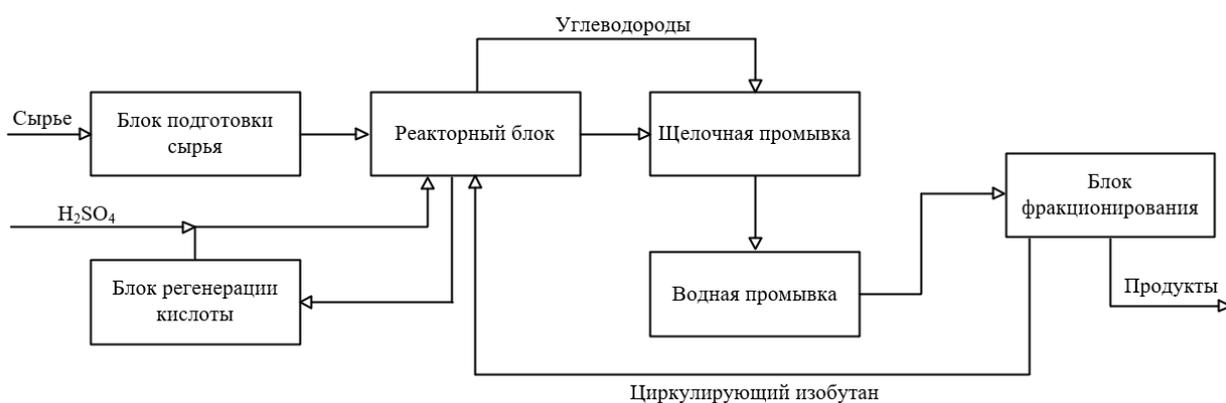


Рисунок 3 – Упрощенная блок-схема процесса алкилирования в присутствии серной кислоты [15]

Бутан-бутиленовая фракция поступает с установок каталитического крекинга, замедленного коксования и др., а изобутановая – установок газодифракционирования. Катализатор, представленный серной кислотой с концентрацией 96 ÷ 98 %, получают непосредственно с производства данной кислоты.

Как правило, суммарная реакция алкилирования протекает с выделением тепла, поэтому основной реактор должен иметь возможность теплоотвода. Выделяют следующие виды охлаждения реакционной зоны [16]:

- 1) охлаждение при помощи различных хладагентов, реализуемое через теплообменную поверхность – пучки труб;
- 2) охлаждение за счет испарения изобутана, который находится в избытке относительно олефинов.

Блок подготовки сырья предназначен для осушения бутан-бутиленовой фракции. Осуществляется это за счет охлаждения до 4 °С с последующей очисткой в коалесцирующем аппарате.

Затем очищенное сырье направляется в реакторный блок, где происходит химическое превращение. Получаемый на данном этапе алкилат содержит в своем составе серную кислоту, которая удаляется при помощи разделения в емкости-отстойнике [17].

В блоке регенерации серной кислоты происходит удаление побочных продуктов процесса из состава отработанной кислоты. Затем очищенный катализатор смешивается с потоком свежей кислоты и снова подается в реактор.

Алкилат, обедненный катализатором, направляется на щелочную и водную промывку для нейтрализации остаточной доли кислоты.

В блоке фракционирования производится последовательное разделение, с целью получения товарного алкилата, а также побочных газообразных продуктов процесса. Непрореагировавший изобутан частично выводится с установки, другая же часть возвращается обратно в реакторный блок, образуя поток рециркуляции.

### 1.1.3.2 Технологическая схема твердофазного алкилирования

Алкилирование изобутана олефинами в присутствии цеолитсодержащих катализаторов имеет схожую схему с жидкофазным процессом (Рисунок 4). Однако главное отличие заключается в значении отдельных блоков.



Рисунок 4 – Технологическая схема твердофазного алкилирования [18]

Блок подготовки сырья предназначен для удаления веществ, способных привести к быстрой дезактивации твердого катализатора. Среди них выделяют такие соединения, как сера, диолефины и кислородсодержащие соединения. В дополнение в данном блоке изомеризуется бутен-1 в бутен-2 с целью увеличения содержания высокооктановых соединений в получаемом алкилате [19].

Реакторный блок состоит из основного реактора, в котором происходит реакция алкилирования, а также снабжен регенератором, в котором восстановление активности катализатора достигается путем реакции гидрирования.

В блоке ректификации производится разделение получаемых в ходе процесса газообразных продуктов.

### 1.1.4 Основные управляющие параметры жидкофазного процесса

Параметры процесса алкилирования имеют большое влияние как на выход алкилата, так и на его качество. Рассмотрим наиболее важные.

#### **1.1.4.1 Давление**

Следует отметить, что давление не оказывает существенное влияние на данный процесс. Тем не менее, для обеспечения протекания реакции преимущественно в жидкой фазе необходимо поддерживать перепад давления между реакционной средой и сырьевыми потоками.

Немаловажным фактором, который связан с давлением, является система захлаживания в реакторе. В случае, когда охлаждение производится путем частичного испарения избытка изобутана, увеличение давления воспрепятствует процессу испарения и, как следствие, не обеспечит должного отвода выделяющегося тепла [20]. Повышение давления оправдано для реактора, реализующего систему охлаждения через теплообменную поверхность, если необходимо передавливать углеводороды в дальнейшие узлы установки алкилирования.

#### **1.1.4.2 Температура**

Влияние температуры на процесс алкилирования имеет двоякий эффект. Повышение температуры позволяет достичь благоприятные условия для смешения углеводородной фазы и кислоты за счет снижения их вязкости. Однако с ростом температуры интенсифицируется протекание побочных реакций, которые снижают производительность продукта.

Понижение температуры позволяет повысить избирательность реакции и, как следствие, увеличивается качество и выход продуктов. Несмотря на это, проведение процесса невозможно при очень малых температурах, потому что происходит увеличение вязкости катализатора, что осложняет процесс смешения фаз.

На рисунке 5 представлена зависимость выхода алкилата от температуры для различного сырья в присутствии 98 % серной кислоты.

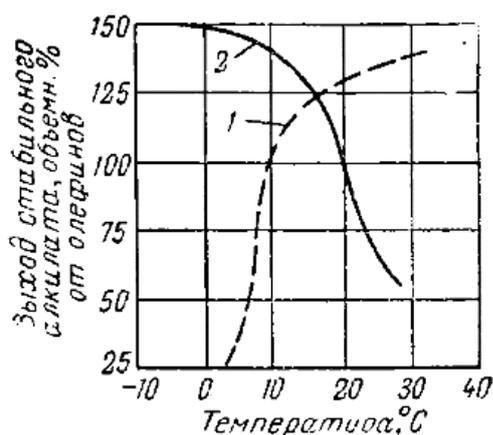


Рисунок 5 – Влияние температуры на выход алкилата:

1 –  $C_3H_6$ ; 2 –  $C_4H_8$  [21]

Таким образом, оптимальная температура, когда в качестве сырья используется бутилен, составляет от 5 до 13 °C, а при использовании пропилена – от 10 до 22 °C.

#### 1.1.4.3 Концентрация кислоты

В процессе алкилирования в качестве катализатора используют серную кислоту, концентрация которой составляет 88 ÷ 98 %. При увеличении концентрации в этих рамках наблюдается улучшение детонационной стойкости получаемого алкилата.

В то же время, при эксплуатации кислоты с концентрацией свыше 100 % происходит усиление таких побочных реакций, как сульфирование [17].

Использование концентрации серной кислоты ниже 88 % препятствует образованию эмульсии углеводородов с серной кислотой, так как более малая концентрация сопровождается более высокой вязкостью. Также стоит отметить, что в таких условиях преобладают реакции образования сложноразветвленных полимерных структур. При этом снижение концентрации кислоты может происходить при эксплуатации, но только в том случае, если сырье не подвергалось предварительной осушке.

#### **1.1.4.4 Соотношение изобутан : олефины**

Олефины, характеризующиеся наличием двойной связи, представляют собой химически активные соединения, которые способны вступать в такие нежелательные реакции, как полимеризация.

Для подавления побочных реакций необходимо поддерживать некоторый избыток изобутана в отношении олефинов. С целью получения алкилата для нужд авиации следует придерживаться соотношения  $6 \div 10 : 1$ , для автомобилей –  $4 : 1$  [22].

При повышении соотношения свыше  $10 : 1$  не является целесообразным, так как не дает значительного отклика в качестве получаемого продукта, а также приводит к наибольшим эксплуатационным затратам.

#### **1.1.4.5 Соотношение катализатор : сырье**

Считается, что оптимальное соотношение между катализатором и сырьем процесса алкилирования должно составлять  $1 \div 1,6 : 1$ . Такие условия благоприятны для образования однородной эмульсии между ними.

Повышение расхода кислоты способно увеличить вязкость реакционной смеси и, соответственно, вызывает дополнительные затраты на перемешивание [11].

Увеличение же расхода углеводородной фазы способно привести к образованию обратной эмульсии – кислоты в углеводородах, что приведет к более низкому качеству получаемого продукта.

#### **1.1.4.6 Продолжительность реакции**

Время, которое необходимо для протекания основной реакции алкилирования, зависит от множества других параметров и выбирается исключительно исходя из них.

Тем не менее, для большинства промышленных процессов данное время составляет порядка  $20 \div 30$  минут [9].

### **1.1.5 Основные управляющие параметры твердофазного процесса**

Рассмотрим основные параметры процесса алкилирования, катализируемого твердокислотным катализатором, на примере технологии SAC (solid acid catalyst), разработанной ABB и Akzo Nobel.

#### **1.1.5.1 Температура**

Рабочая температура реакторов алкилирования зависит от потребности в избытке изопарафина (например, изобутана) в реакционной секции. При более высоких температурах и при меньшем избытке изоалкана октановое число алкилата снижается.

Для процессов с использованием гетерогенного катализатора оптимальная температура реакционной зоны составляет  $40 \div 90$  °C. Исходя из этого, использование твердокислотного катализатора исключает необходимость в дорогостоящих системах охлаждения, которые требуются для реакторов сернокислотного алкилирования [18].

#### **1.1.5.2 Соотношение изобутан : олефины**

Для получения высокооктанового алкилата одновременно со снижением образования побочных продуктов из тяжелых углеводородов в процессах сернокислотного алкилирования обычно используют соотношение  $8 \div 10 : 1$ .

Для сравнения, без какого-либо снижения октанового числа алкилата соотношение изобутана к олефинам в процессе твердофазного алкилирования находится в пределах, сопоставимых с процессом в среде серной кислоты, который работает при значительно более низкой температуре.

Кроме того, в процессе SAC не образуются побочные продукты в виде сложно разветвленных полимеров, в то время как традиционные жидкофазные катализаторы HF и H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> образуют с ними кислоторастворимые масла (ASOs), которые требуют дополнительной обработки с целью извлечения растворенных комплексных кислот.

### 1.1.5.3 Состав сырьевого потока олефинов

Также стоит отметить влияние различных примесей и изменение состава сырьевого потока олефинов (например, различные изомеры бутена-1) на производительность процесса и качество получаемого продукта (Таблица 2).

Таблица 2 – Влияние состава сырьевого потока олефинов на октановое число алкилата [23]

Состав сырьевого потока	SAC	HF	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
100 % бутен-2	x	x	x
100 % бутен-1	x	x – 6	x
35 % изобутена	x – 0,5	x – 2	x – 7

Исходя из данных, представленных в таблице 2, технология с использованием твердокислотного катализатора менее чувствительна к изменению состава исходных олефинов, чем оба жидкофазных катализатора, что, в свою очередь, требует менее строгой предварительной обработки.

Из всех изомеров бутена из бутена-2 получается алкилат с самым высоким октановым числом. Для SAC и H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> увеличение бутена-1 относительно бутена-2 не оказывает измеримого влияния на октановое число получаемого алкилата. Это свидетельствует о том, что бутен-1 изомеризуется до бутена-2. В технологии с использованием HF происходит аналогичный процесс, но только в ограниченной степени.

### 1.1.5.4 Продолжительность реакции

На рисунке 6 представлена зависимость конверсия бутиленов от времени в потоке.

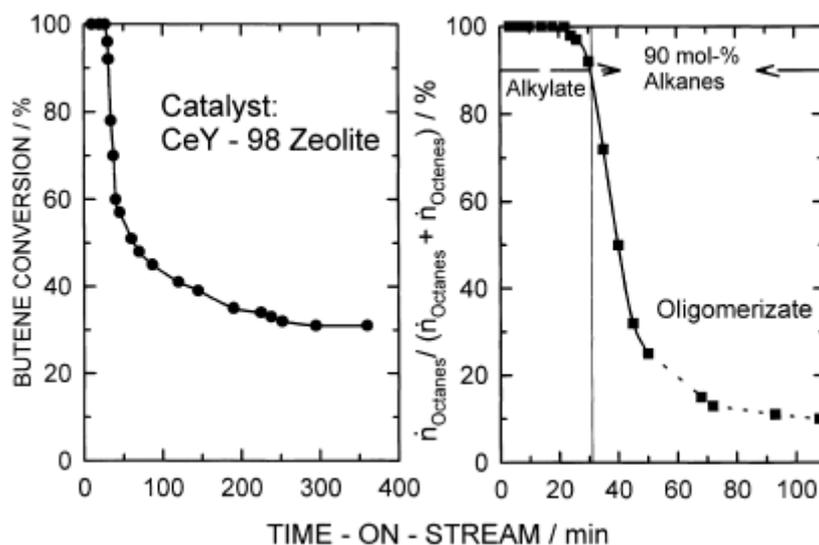


Рисунок 6 – Конверсия жидкой смеси изобутан / бутен-1 на цеолите CeY-98 в реакторе с неподвижным слоем [24]

Исходя из данных, представленных на рисунке 6, алкен полностью превращается в начале эксперимента, т.е. пока катализатор еще свежий. После определенного промежутка времени (около 30 минут) конверсия бутена начинает падать и, в конечном итоге, стабилизируется на достаточном низком уровне (на уровне 30 %). Поэтому время контакта не должно превышать получаса.

## 1.2 Катализаторы процесса алкилирования

С момента введения процесса алкилирования изобутана в промышленные масштабы катализаторы претерпели большие метаморфозы.

Как известно, ранее в качестве катализатора использовали хлорид алюминия ( $AlCl_3$ ), однако из-за интенсификации побочных реакций, а также повышенной коррозии оборудования произошел постепенный отказ от него [25].

На его смену пришли жидкие катализаторы, представляющие собой серную и фтороводородную кислоту. Тем не менее, наибольшую перспективу в настоящее время имеют твердые суперкислоты и ионные жидкости.

Рассмотрим более подробно традиционные жидкофазные и твердофазные катализаторы алкилирования.

### **1.2.1 Жидкофазные катализаторы**

Серная и фтороводородная кислота приобрели высокую популярность в качестве катализаторов алкилирования в связи с тем, что они обладают удовлетворительной растворимостью в них сырьевых фракций (0,1 и 3,1 % масс. соответственно) и, как следствие, способствуют быстрому протеканию реакции образования изооктанов.

Растворимость изобутана в HF в 310 раз выше, чем в H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. Вдобавок к этому фтороводородная кислота имеет более высокую избирательную способность и, соответственно, высокую селективность, а также не требует сложноорганизованных систем охлаждения реакционной зоны [26].

Тем не менее, фтороводородная кислота имеет меньшее распространение. Это связано с ее низкой температурой кипения, равной 19,4 °С, что вызывает достаточно высокую летучесть данного катализатора. Особую опасность данного катализатора составляет его токсичность, которая объясняется наличием галогена в его составе. При разгерметизации установки высока вероятность образования аэрозолей, которые при инспирации приводят к мгновенной смерти [27].

Поэтому все вышеприведенные недостатки диктуют переход на более безопасные для человека и окружающую среду твердофазные катализаторы.

### **1.2.2 Твердофазные катализаторы**

В настоящее время большое количество организаций и научных групп занимаются разработкой катализаторов твердофазного алкилирования. Среди них есть компании, занимающиеся, непосредственно, данным процессом в промышленности (Таблица 3). Часть из них имеют патентные документации.

Таблица 3 – Технологические разработки алкилирования изобутана олефинами на твердых катализаторах [24]

№	Разработчик/лицензиар	Катализатор	Тип реактора	Производительность, кг/сут
1	Haldor Topsøe A / S	Трифторметансульфоновая кислота на пористой основе	Неподвижный слой, кислота движется по слою, запатентованный процесс регенерации кислоты	55
2	Calytica, Neste Oy, Conoco	Собственная разработка	Неизвестно, с переработкой и регенерацией катализатора	780
3	Chemical Research & Licensing, Chevron	Пентафторид сурьмы на промытом кислотой диоксиде кремния	Шламовый реактор	1110
4	UOP	Собственная разработка, напоминает традиционные катализаторы конверсии углеводородов	Неизвестно, с непрерывной регенерацией катализатора с использованием водорода	—

Исследования в области гетерогенных катализаторов алкилирования направлены на поиск систем, работающих в температурном интервале от 20 до 120 °С, не содержащих токсических компонентов, стабильность действия которых была бы сопоставима с традиционными жидкими катализаторами.

Наиболее перспективными на данный момент считаются цеолиты типа фожазит (X, Y), поскольку они обладают редкой микропористой структурой [28 – 34]. Также стоит отметить, что твердофазные катализаторы способны составить конкуренцию жидкофазным катализаторам, так как их технико-экономические показатели сопоставимы.

Большинство каталитических производств в России занимается выпуском цеолитов типа фожазит в натриевой форме, однако они непригодны для применения в качестве катализаторов, потому что находятся в неактивной форме. Для перевода в каталитически активную форму необходимо производить практически полную замену натрия на более активные металлы, например на катионы кальция или редкоземельных металлов [35 – 39].

Как правило, для этого проводят гидротермальную обработку, которая воздействует на гидратные оболочки замещающих катионов *in situ* [40]. Благодаря данному процессу отсутствует необходимость в дальнейшей сушке и прокаливании катализатора.

Немаловажной характеристикой цеолитсодержащих катализаторов является соотношение Si/Al. При снижении соотношения, которое характерно для типа X, происходит увеличение селективности по целевым продуктам реакции, которое достигается за счет ускорения переноса водорода.

В России производят цеолиты типа NaX следующие компании [41]:

- ЗАО «Нижегородские Сорбенты»;
- ООО «Стерлитамакский завод катализаторов»;
- ООО «Ишимбайский специализированный химический завод катализаторов»;
- ООО «Салаватский катализаторный завод».

Тем не менее, твердофазные катализаторы не лишены некоторых недостатков, которые ограничивают их массовое внедрение в промышленность.

При переходе с жидкофазных катализаторов к твердокислотным можно наблюдать значительное уменьшение количества доступных кислотных центров: 1 грамм  $H_2SO_4$  содержит примерно  $20 \cdot 10^{-3}$  моль кислотных центров, в то время, как твердофазный катализатор (например, цеолит или промотированный диоксид циркония) имеет не более  $10^{-3}$  кислотных

центров, из которых только 20 ÷ 30 % достаточно сильны, чтобы ускорить реакцию алкилирования (Рисунок 7).

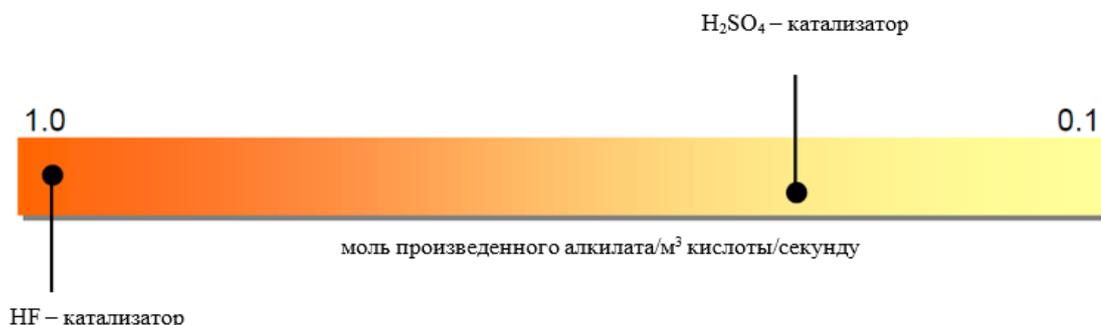


Рисунок 7 – Скорости реакций промышленных процессов алкилирования

Другими словами, в одном грамме жидкой кислоты в 100 раз больше активных кислотных центров по сравнению с граммом твердокислотного катализатора. Это относится к твердым кислотным катализаторам, имеющим очень большую площадь поверхности и, как следствие, малые поры [42]. Очевидно, что число активных центров меньше у катализаторов, имеющих меньшую площадь поверхности и более крупные поры.

Можно использовать большой избыток катализатора, чтобы скомпенсировать более низкую плотность кислотных центров для твердокислотных катализаторов, но это значительно снизит выход продукта за один проход в единицу времени. Это одна из основных причин, по которой замена жидких кислот твердокислотными катализаторами является невыгодной.

Кроме того, в ходе реакции образуются сложноразветвленные парафины, которые в дальнейшем необратимо адсорбируются на активных центрах катализатора [43]. Также условиях жидкофазного алкилирования присутствует ограничение, связанное с внутренней диффузией в порах катализатора, что также увеличивает скорость дезактивации.

### 1.3 Современные технологии алкилирования изобутана олефинами

Нефтеперерабатывающие компании ведут постоянный поиск все более безопасных и экономически оправданных способов производства высокооктановых компонентов бензинов. Рассмотрим наиболее известные.

#### 1.3.1 Технология алкилирования Alky-Clean

Технология Alky-Clean является разработкой компаний Companu Limited by Guarantee (США) и Akzo Nobel (Голландия). Технологическая схема данного процесса представлена на рисунке 8.

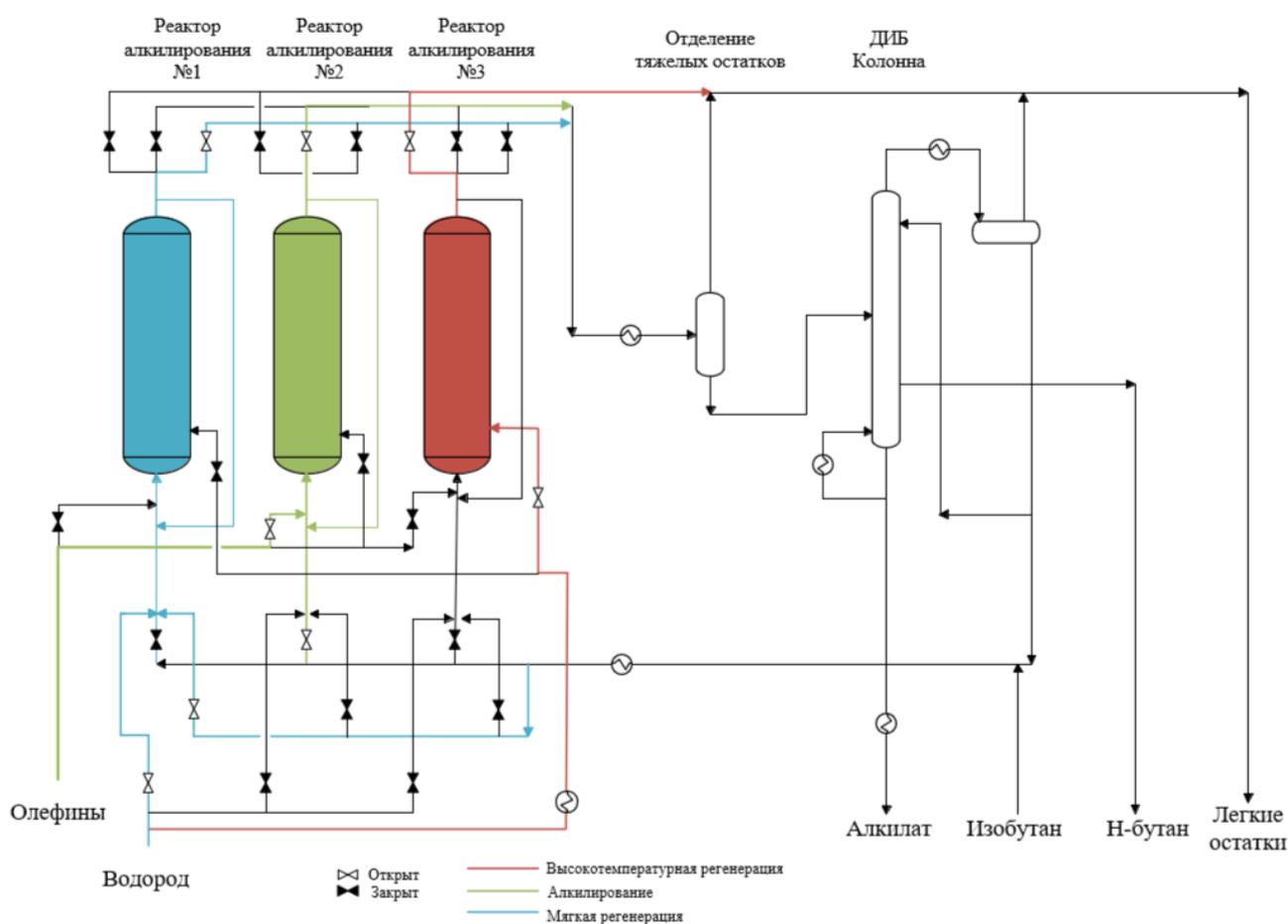


Рисунок 8 – Схема установки процесса Alky-Clean [44]

Данная технология отличается новым катализатором, который состоит из твердой кислоты, отличающийся своей безопасностью для окружающей

среды. Вдобавок он не образует кислоторастворимые масла, отягчающие дальнейшую вторичную переработку и утилизацию [45].

В реакторах поддерживается температура в пределах от 50 до 90 °С, поэтому нет необходимости в дорогостоящих системах отвода тепла. Наличие трех реакторов способно поддерживать непрерывность всего процесса. Получаемый алкилат обладает высокой детонационной стойкостью, порядка 96 ОЧИМ, а также исключает в своем составе опасных для окружающей среды соединений.

### 1.3.2 Технология алкилирования FBA

На некоторых производствах алкилата в мире внедрена технология FixedBed alkylation фирмы Haldor Topsøe A/S (Дания). Технологическая схема представлена на рисунке 9.

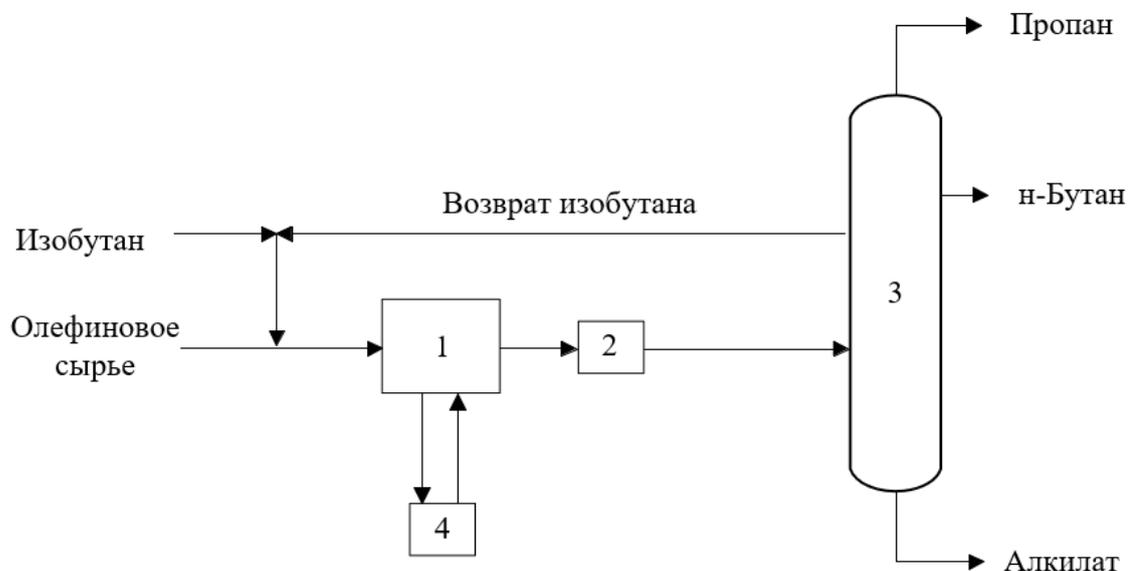


Рисунок 9 – Упрощенная блок-схема процесса алкилирования компании Haldor Topsøe A/S [19]: 1 – реакторный блок; 2 – блок очистки; 3 – блок ректификации; 4 – блок регенерации катализатора

В данной технологии катализатор представляет собой сверхкислоту, которая адсорбирована на пористом носителе. Основная составляющая

реакторного блока – это комбинация реакторов с неподвижным слоем катализатора. Благодаря этому получают алкилат высокого качества при малых затратах на реализацию самого процесса [46].

Стоит отметить, что для проведения процесса сопровождается малым расходом катализатора. А за счет наличия блока регенерации катализатора возможно своевременное восстановление каталитической активности без особых потерь.

### 1.3.3 Технология алкилирования ExSact

Разработка технологии ExSact принадлежит компании Exelus (США). Технологическая схема данного процесса представлена на рисунке 10.

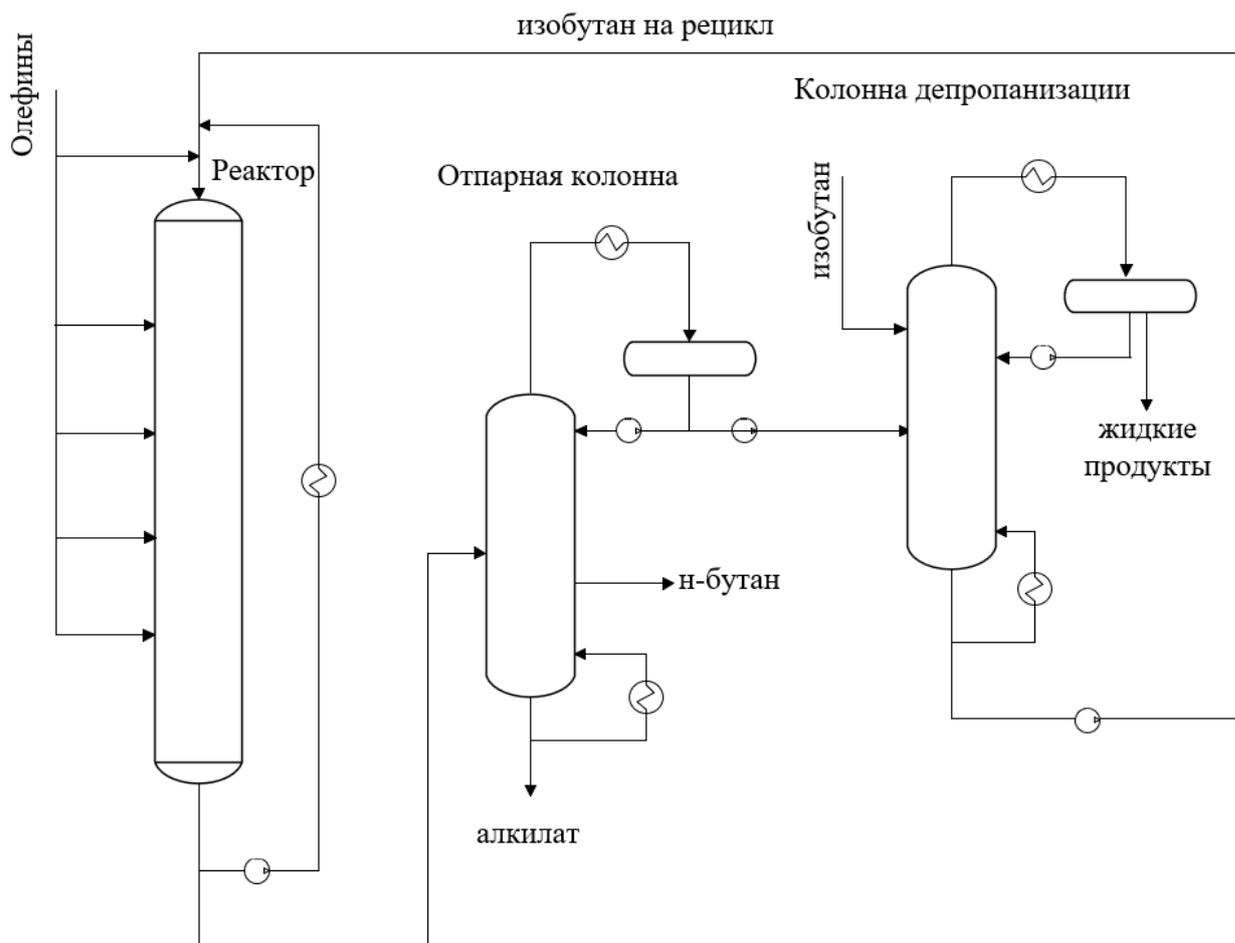


Рисунок 10 – Технологическая схема процесса ExSact [47]

Процесс реализуется в двух многопоточных реакторах с неподвижным слоем катализатора. При этом работа одного реактора направлена на конверсию алкилата, длительностью порядка  $12 \div 24$  часа, а другого – на регенерацию отработанного катализатора (примерно 2 часа).

Кроме того, данная технология предусматривает использование специального твердо-кислотного катализатора, отличающегося одновременным наличием макро- и микропор [42]. При этом сочетании достигается сравнительно большое время работы катализатора до дезактивации, которое составляет  $15 \div 25$  часов.

### 1.3.4 Технология алкилирования Alkylene

Процесс Alkylene был разработан компанией United Oil Products (США). Упрощенная блок-схема процесса представлена на рисунке 11.

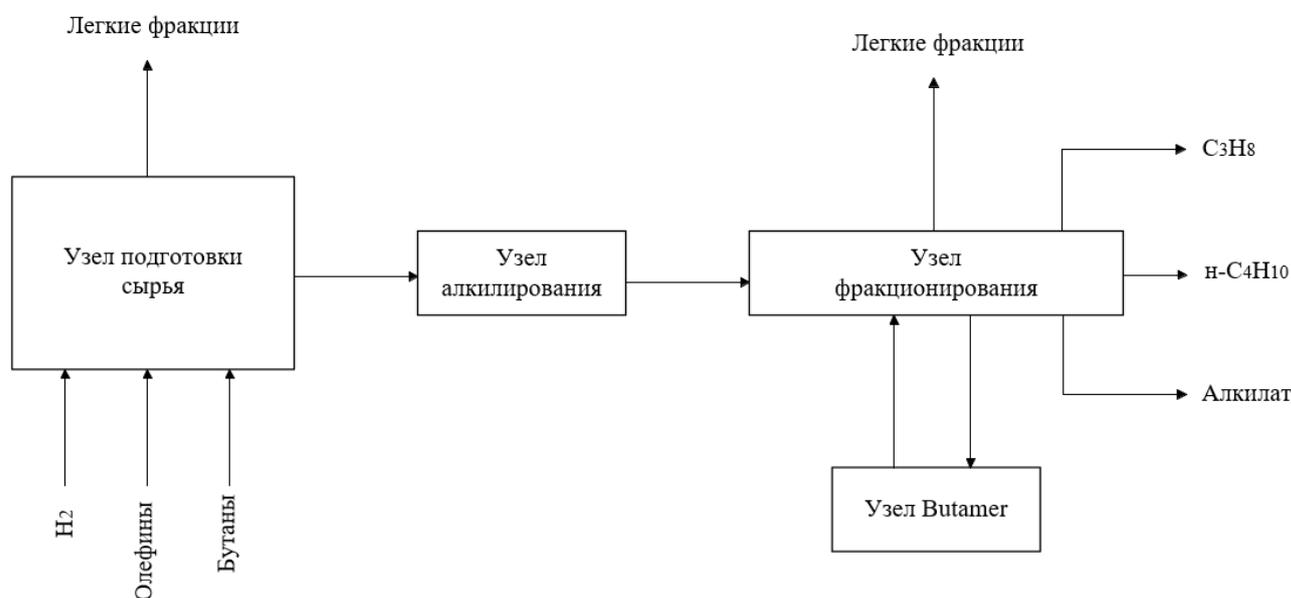


Рисунок 11 – Упрощенная блок-схема процесса Alkylene [48]

Особенность данной технологии заключена в разработанном катализаторе HAL-100, отличающемся высокой кислотностью. Благодаря наличию в его составе таких металлов, как Pt, Pd и Ni происходит гидрирование образующихся сложноразветвленных полимеров, тем самым

исключая стадию отжига кокса в процессе регенерации катализатора. Сама реакция алкилирования проходит в лифт-реакторе при температуре от 10 до 40 °С.

Было отмечено, что в течение 9 месяцев непрерывной работы катализатор в движущемся слое сохраняет свою активность, при этом получаемый алкилат обладает высоким значением детонационной стойкости, порядка 96 ÷ 97 ОЧИМ.

Как правило, данный процесс очень часто совмещают с процессом получения изобутана, реализующийся путем изомеризации получаемого на выходе из установки алкилирования бутана.

### 1.3.5 Технология фтористоводородного алкилирования

Технология алкилирования с использованием в качестве катализатора HF была разработана компанией «Philips Petroleum» (США). Технологическая схема процесса представлена на рисунке 12.

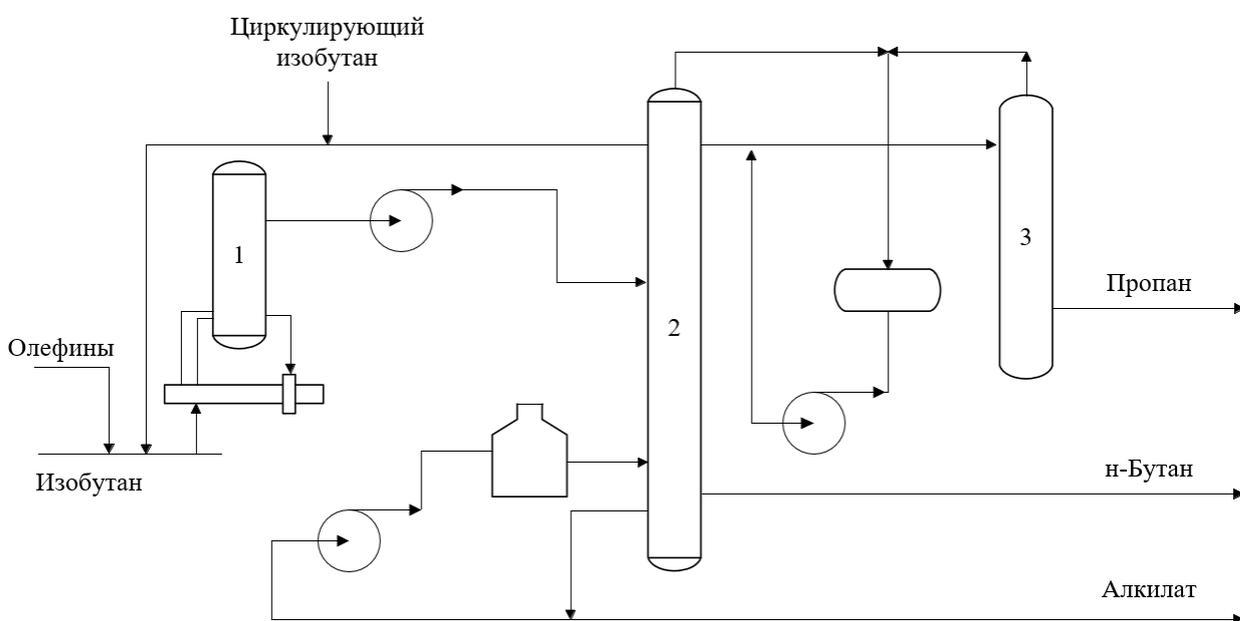


Рисунок 12 – Технологическая схема процесса фтористоводородного алкилирования [26]: 1 - реактор; 2 - фракционирующая колонна; 3 - отпарная колонна

В реакторе происходит основная реакция алкилирования с участием предварительно осушенного сырья и плавиковой кислоты. Получаемый алкилат накапливается в верхней части реактора и затем направляется на разделение во фракционирующую колонну.

В нижней части реактора происходит постепенное накопление гидрофторида, который снова направляется в реактор.

Отпарная колонна предназначена для удаления HF из продуктового пропана.

### 1.3.6 Технология алкилирования СКА

Процесс сернокислотного алкилирования является разработкой ГК РАН (Россия). Технологическая схема представлена на рисунке 13.

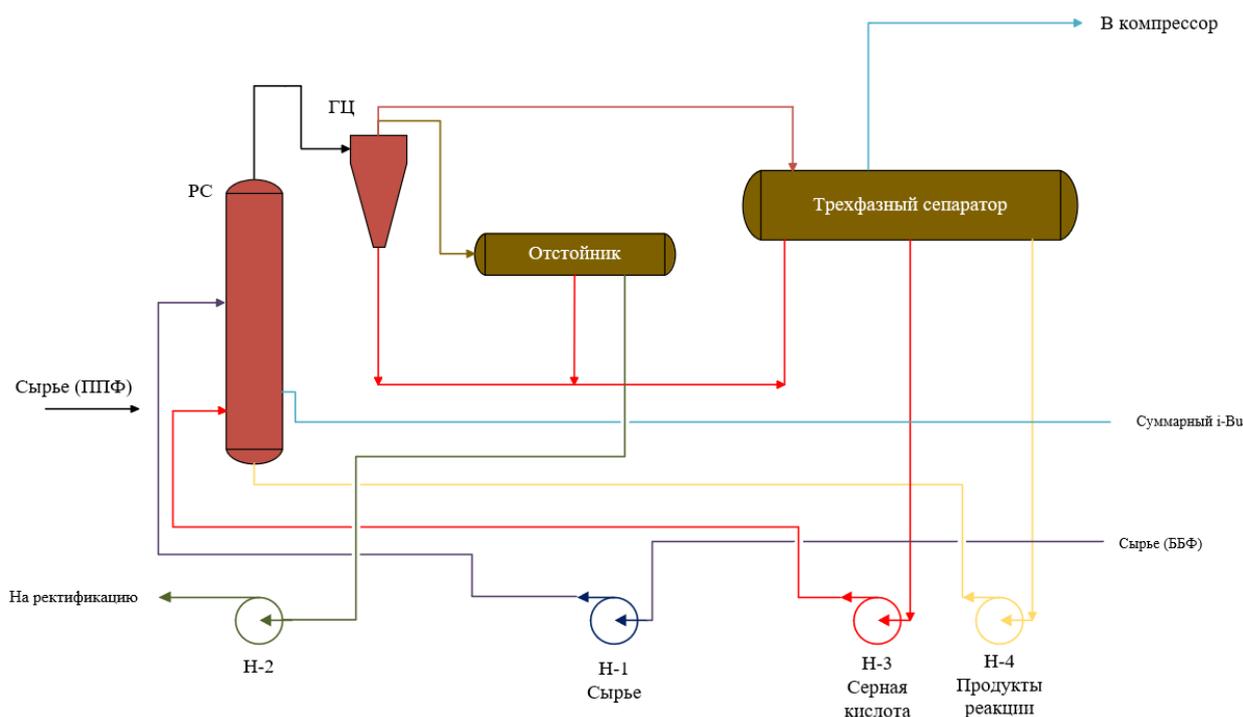


Рисунок 13 – Технологическая схема процесса СКА [49]

Отечественная технология алкилирования в присутствии серной кислоты отличается конструкцией своего струйного реактора. Благодаря такой организации подачи сырьевых потоков в реактор повышается надежность установки, поскольку отсутствует необходимость во встроенных мешалках.

К тому же такая конструкция реактора отличается своей компактностью и, как следствие, обладает улучшенными показателями промышленной безопасности одновременно с низкими капитальными затратами.

### 1.3.7 Технология алкилирования STRATCO

В технологии STRATCO, созданной компанией Du Point (США), в качестве катализатора используется серная кислота. Технологическая схема процесса представлена на рисунке 14.

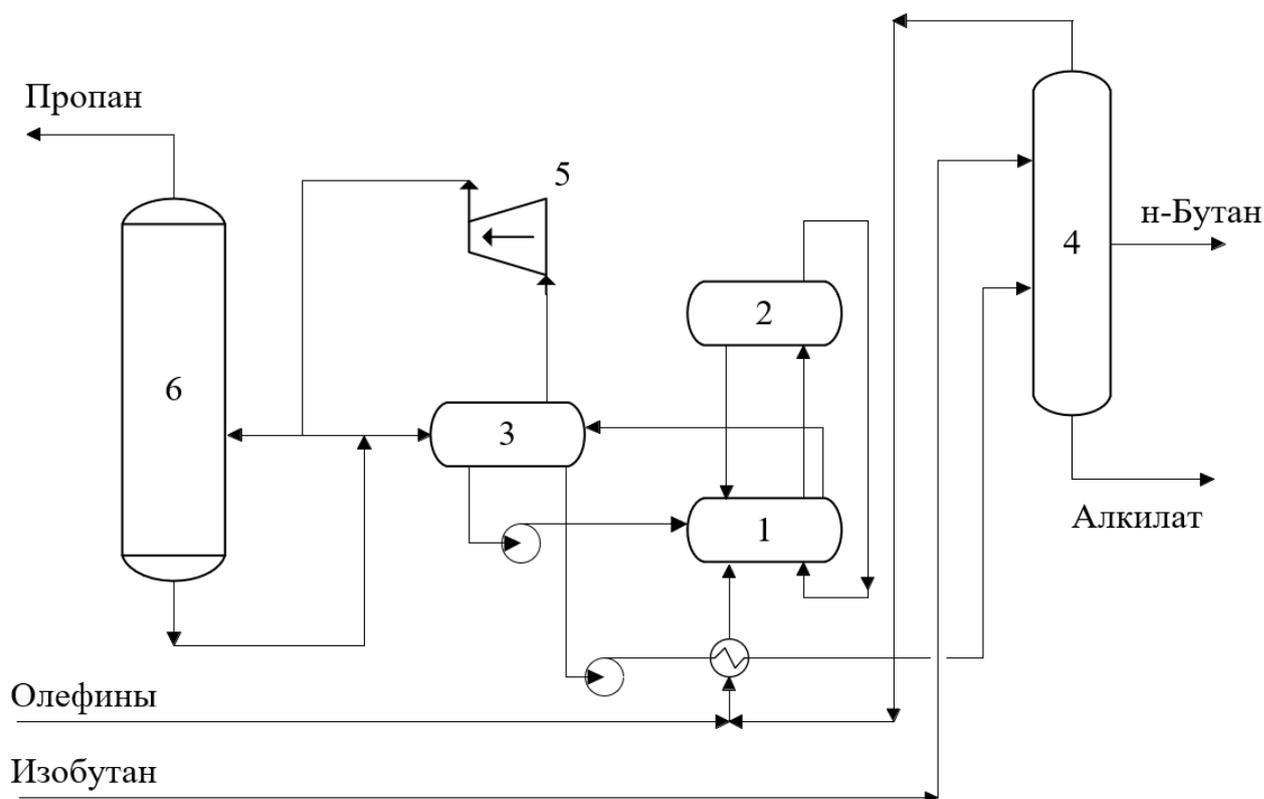


Рисунок 14 – Технологическая схема процесса STRATCO [50]: 1 – реактор-контактор; 2 – отстойник; 3 – сепаратор; 4 – деизобутанизатор; 5 – компрессор; 6 – пропановая колонна

Смешение сырьевых потоков с  $H_2SO_4$  производится в реакторе-контакторе, оборудованном трубным пучком для организации циркуляции хладагента, а также лопастной мешалкой.

Отстойник предназначен для удаления кислоты от полученной в ходе реакции углеводородной фазы. Благодаря наличию деизобутанизатора и пропановой колонны на данной установке (помимо алкилата) также получают пропан и н-бутан.

Получаемый алкилат обладает высоким значением октанового числа, которое составляет  $92 \div 96$  ОЧИМ. Если же в качестве олефина направлять чистый поток бутенов, то можно достигнуть значения 98 ОЧИМ.

#### **1.4 Существующие подходы к математическому моделированию процесса твердофазного алкилирования изобутана олефинами**

Авторы работы [51] представили кинетическую модель, которая охватывает ключевые реакции алкилирования, катализируемые цеолитами. Она представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка и является основой для построения последовательной моделирующей системы.

По результатам хроматографического, хромато-масс-спектрометрического и термодинамического анализов состава потока исходного сырья опытной установки каталитического крекинга было установлено, что основным направлением реакции алкилирования на твердых катализаторах является образование триметилпентанов (ТМП) и диметилгексанов (ДМГ). Схема превращений представлена на рисунке 15.

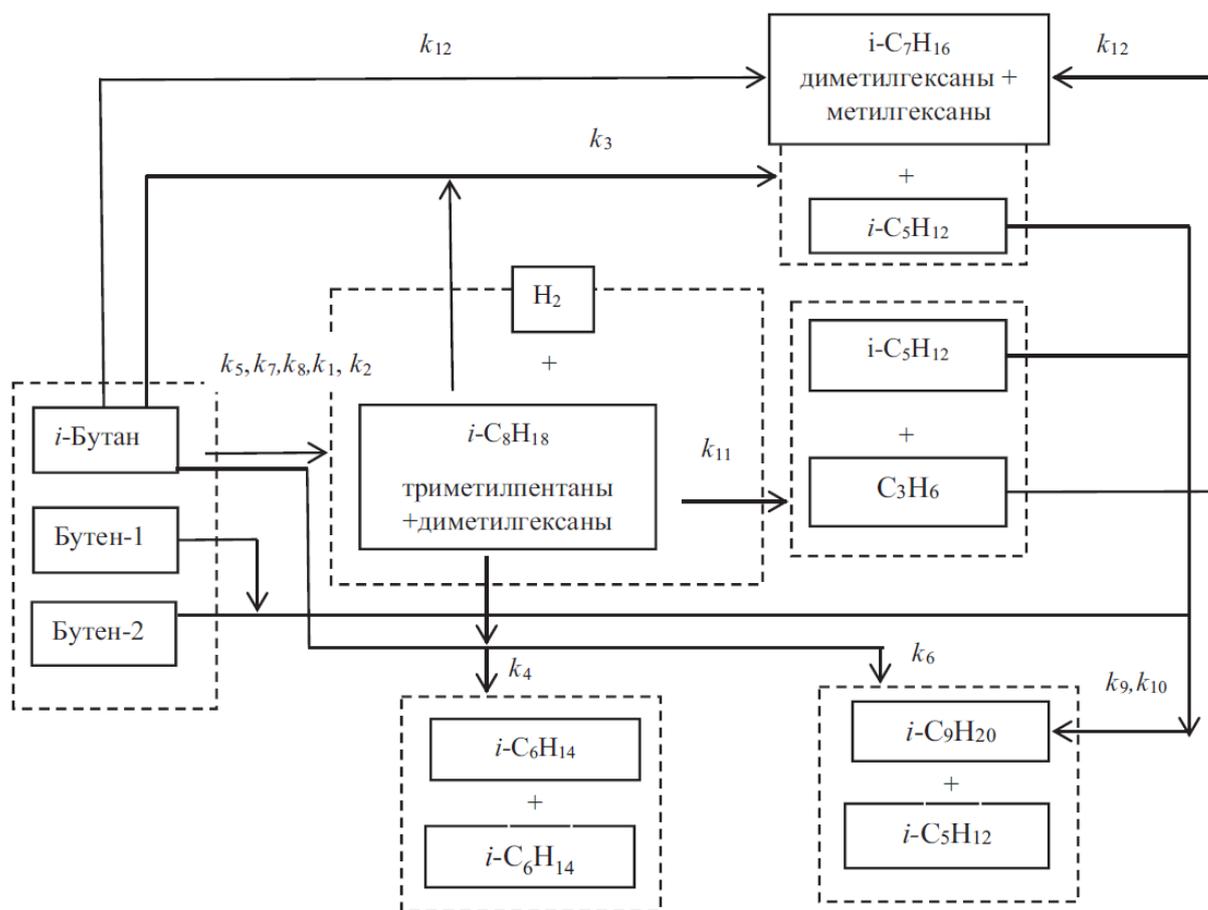


Рисунок 15 – Схема превращений углеводородов в процессе алкилирования изобутана олефинами на цеолитсодержащих катализаторах ( $k_i$  – константа скорости соответствующей реакции)

На основе представленной выше схемы превращений были составлены дифференциальные уравнения, описывающие скорости химических реакций для каждого вещества:

$$\begin{aligned}
dC_{b1} &= C_{b1} + (-k_1 C_{b1} - 2k_7 C_{b1} - k_9 C_5)dt, \\
dC_{b2} &= C_{b2} + (-k_2 C_{b2} - 2k_8 C_{b2} - k_{10} C_5)dt, \\
dC_{ib} &= C_{ib} + (-k_1 C_{b1} - k_2 C_{b2} - k_3 C_8 - k_4 C_8 - \\
&\quad - 2k_5 C_{ib} - 0,6k_6 C_8)dt, \\
dC_8 &= C_8 + (k_1 C_{b1} + k_2 C_{b2} + k_7 C_{b1} + k_8 C_{b2} + k_5 C_{ib} - \\
&\quad - (k_3 + k_4 + k_6 + k_{11})C_8)dt, \\
dC_7 &= C_7 + (k_3 C_8 + k_{12} C_3)dt, \\
dC_6 &= C_6 + 2k_4 C_8 dt, \\
dC_9 &= C_9 + (0,6k_6 C_8 + k_9 C_5 + k_{10} C_5)dt, \\
dC_5 &= C_5 + (k_3 C_8 + k_6 C_8 - k_9 C_5 - k_{10} C_5 + k_{11} C_8)dt, \\
dC_3 &= C_3 + (k_{11} C_8 - k_{13} C_3)dt,
\end{aligned}$$

где  $k_1 - k_{12}$  – наблюдаемые константы скорости химической реакции;  $C_i$  – начальная концентрация соответствующего компонента реакционной смеси;  $dC_i$  – текущая концентрация соответствующего компонента;  $dt$  – шаг интегрирования.

Константы скорости реакции определялись при помощи решения обратной кинетической задачи путем минимизации отклонений между расчетными и экспериментальными значениями концентраций углеводородов, присутствующих в смеси продуктов [52].

Исходными данными для решения обратной кинетической задачи также являлись состав продуктов процесса алкилирования и технологический режим работы опытной установки, представленный в таблице 4.

Таблица 4 – Режим работы опытной установки алкилирования

Технологический параметр	Значение
Время работы катализатора, ч	1 ÷ 100
Продолжительность процесса в реакторе, ч	1
Массовый расход сырья, см <sup>3</sup> /ч	0,5
Рабочая температура, °С	40 ÷ 120
Рабочее давление, МПа	2
Содержание бутенов в исходном сырье, % масс.	0,2 ÷ 10

Полученная система уравнений была решена методом Эйлера, причем константы скорости реакций были определены для каждой стадии реакции алкилирования таким образом, чтобы они были положительными и не выходили за пределы установленного диапазона.

В результате расчетов были рассчитаны константы скорости реакции процесса алкилирования для 94 экспериментов, в которых варьировались 7 значений исходных параметров. Для некоторых экспериментов в крайних точках процесса, которые не представляют интереса для промышленной реализации процесса, ошибка была неприменима, и результаты впоследствии не использовались.

Таким образом, можно заключить, что рассмотренная модель процесса алкилирования изобутана олефинами включает общие уравнения материального баланса, поскольку невозможно составить покомпонентные реакции. Это связано с недостаточной информацией обо всех предполагаемых реакциях и значительным превышением числа неизвестных параметров модели над количеством доступных экспериментальных данных.

Авторы другой работы [53] представили шестикомпонентную кинетическую модель, которая учитывает ключевые реакции процесса алкилирования, катализируемого цеолитом. Влияние различных реакций и стадий ограничения скорости на производительность реактора исследовались путем составления соответствующей модели реактора, которая учитывает

перемешивание в масштабе аппарата. Также данная модель учитывает влияние частиц катализатора, а именно диффузионные процессы внутри пор цеолита, протекающую в них реакцию алкилирования, а также последующую дезактивацию катализатора.

На рисунке 16 представлена упрощенная схема реакций.

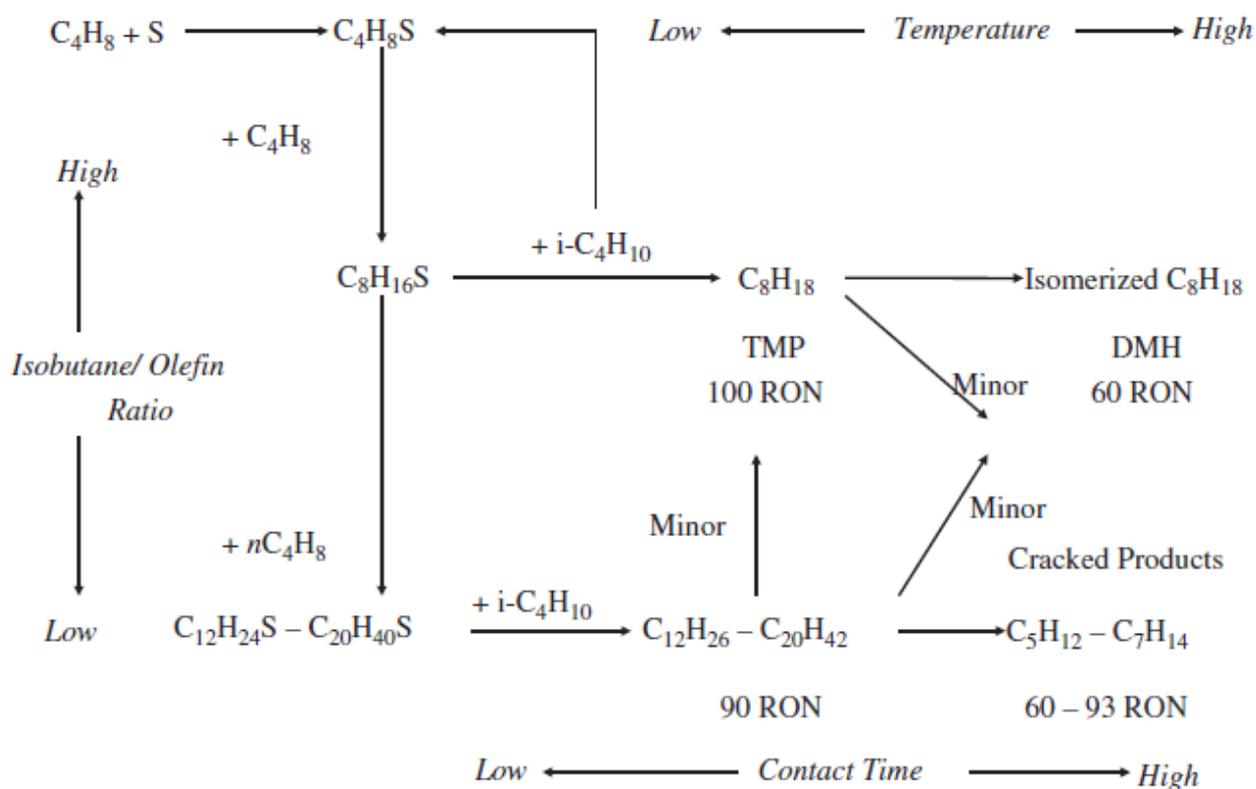


Рисунок 16 – Упрощенный механизм процесса алкилирования

На основании механизма, приведенного на рисунке 6, была составлена математическая модель процесса:

$$R_{C_4H_{10}} = -(k_2[C_4H_{10}][C_8H_{16}] + k_3[C_4H_8][C_4H_{10}])[S_0]\xi,$$

$$R_{C_4H_8} = -(k_1[C_4H_8]^2 + k_3[C_4H_8][C_4H_{10}] + k_4[C_4H_8][C_8H_{16}] + k_5[C_4H_8][C_8H_{18}] - k_2[C_4H_{10}][C_8H_{16}])[S_0]\xi,$$

$$R_{C_8H_{18}} = -(k_5[C_4H_8][C_8H_{18}] - k_2[C_4H_{10}][C_8H_{16}] - k_3[C_4H_8][C_4H_{10}])[S_0]\xi, \text{ and}$$

$$R_{C_8H_{16}} = -\left(k_2[C_4H_{10}][C_8H_{16}] + k_4[C_4H_8][C_8H_{16}] + k_6[C_8H_{16}] - \frac{k_1[C_4H_8]^2}{2}\right)[S_0]\xi.$$

где  $k_1 - k_6$  – константы скорости химической реакции;  $R$  – скорость образования веществ;  $S_0$  – первоначальная концентрация растворенных кислот в частице цеолита;  $\xi$  – активность цеолитного катализатора.

Расчеты по представленной модели сравнивали с результатами проведенных ранее экспериментов, которые приводят к выводам, что реакции переноса гидридов и олигомеризации являются ключевыми кинетическими стадиями, влияющими на общую производительность процессов алкилирования в присутствии цеолита [54].

Авторами было выдвинуто предположение, что более высокий выход алкилата и более длительная активность цеолита достигаются за счет увеличения собственной скорости переноса гидрида и отношения концентрации исходного изобутана к концентрации н-бутена.

Таким образом, можно заключить, что рассмотренная модель процесса алкилирования изобутана олефинами является более полной по сравнению с ранее изученной, поскольку включает в себя модель реактора смешения, а также учитывает влияние диффузионных явлений в порах катализатора, что, в свою очередь, приближает данную модель к действующим промышленным процессам.

## 4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

### 4.1 Предпроектный анализ

#### 4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

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

Целевой рынок – сегмент рынка, на котором в будущем будет разработана. В свою очередь, сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками.

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

В данной работе целесообразно рассмотреть критерий сегментирования в виде возможных оказываемых услуг, основанных на использовании математической модели процесса алкилирования изобутана:

- внедрение и реализация программного обеспечения (ПО) в исследовательских институтах при крупных нефтеперерабатывающих организациях;
- предоставление услуг по контролю проведения процесса с последующей оптимизацией основных управляющих параметров процесса;

Предлагаемая математическая модель процесса имеет достаточно высокий коммерческий потенциал и является ресурсосберегающей технологией. Целевым рынком для данной разработки являются: нефтеперерабатывающие заводы и образовательные учреждения.

В настоящий момент можно выделить основные компании-конкуренты, которые занимают лидирующие позиции на рынке моделирования нефтехимических процессов. Это SimulationSciences (SimSci), AspenTechnologies и Huprotech. Основным недостатком продуктов данных

компаний является отсутствие возможности расчета различных параметров с целью их оптимизации в реальном процессе.

В таблице 10 представлена карта сегментирования рынка услуг.

Таблица 10 – Карта сегментирования рынка услуг

Категория потребителей	Вид услуги		
	Внедрение ПО	Услуги по мониторингу и оптимизации процесса	Внедрение обучающих тренажеров
Крупные НПЗ	■		■ ■
Средние НПЗ	■ ■		■ ■
Мелкие НПЗ			
Проектно-исследовательские организации	■ ■		
Учебные центры	■ ■		■ ■



SimSci



AspenTecnologi



Huprotech

Анализируя данные таблицы 10, можно утверждать, что основным сегментом и направлением для исследований являются услуги по мониторингу и оптимизации процесса.

Основным ограничивающим фактором внедрения ПО является количество действующих предприятий, в состав которых входит блок алкилирования изобутана олефинами.

#### 4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное

исследование, чтобы успешнее противостоять своим соперникам. Важно реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

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

Для проведения сравнительного анализа существующих программ необходимо проанализировать их возможности. Рассмотрим такие программы, как Hysys и HysimPro и ProVision, AspenPlus и SpeedUP, которые позволяют смоделировать процесс нефтепереработки, однако, как было сказано ранее, не способны находить оптимальные значения основных управляющих параметров процесса.

В таблице 11 представлена оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок.

Таблица 11 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>
1	2	3	4	5	6	7	8
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>							
Возможность варьирования параметров	0,17	3	3	3	0,5	0,5	0,5
Удобство в эксплуатации	0,1	4	4	3	0,4	0,4	0,3
Вывод полученных результатов в Excel	0,07	3	4	4	0,2	0,3	0,3
Энергоэкономичность	0,07	4	3	3	0,3	0,2	0,2
Надежность	0,1	3	5	4	0,3	0,5	0,4
Графическое представление результатов	0,08	5	3	3	0,4	0,2	0,2
Работа с несколькими процессами одновременно	0,1	3	4	4	0,3	0,4	0,4
Простота эксплуатации	0,08	5	4	3	0,4	0,3	0,2
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>							
Цена	0,09	3	2	2	0,3	0,2	0,2
Срок выхода на рынок	0,07	3	4	4	0,2	0,3	0,3
Наличие сертификации разработки	0,07	3	4	4	0,2	0,3	0,3
<b>Итого</b>	<b>1</b>	<b>39</b>	<b>40</b>	<b>37</b>	<b>3,5</b>	<b>3,6</b>	<b>3,3</b>

$B_{\phi}$  и  $K_{\phi}$  – баллы и конкурентоспособность научной разработки;  $B_{k1}$  и  $K_{k1}$  – баллы и конкурентоспособность SimSci;  $B_{k2}$  и  $K_{k2}$  – баллы и конкурентоспособность AspenTechnologies.

Анализируя оценочную карту, можно судить о конкурентоспособности разрабатываемой модели среди уже существующих программ. Однако, стоит отметить, что настоящая модель предназначена для расчета только процесса алкилирования, в то время как другие программы обладают более широким спектром реализуемых процессов.

Таким образом, научная разработка имеет достаточное конкурентное преимущество на рынке существующих разработок. Основная уязвимость уже существующих продуктов заключается в их энергоэкономичности, потребности ресурсах памяти, простоте эксплуатации, а также в цене. Именно это дает возможность занять данную нишу.

#### **4.1.3 Диаграмма Исикавы**

Диаграмма причины-следствия Исикавы – это графический метод анализа и формирования причинно-следственных связей, инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления.

На рисунке 37 представлена диаграмма Исикавы.

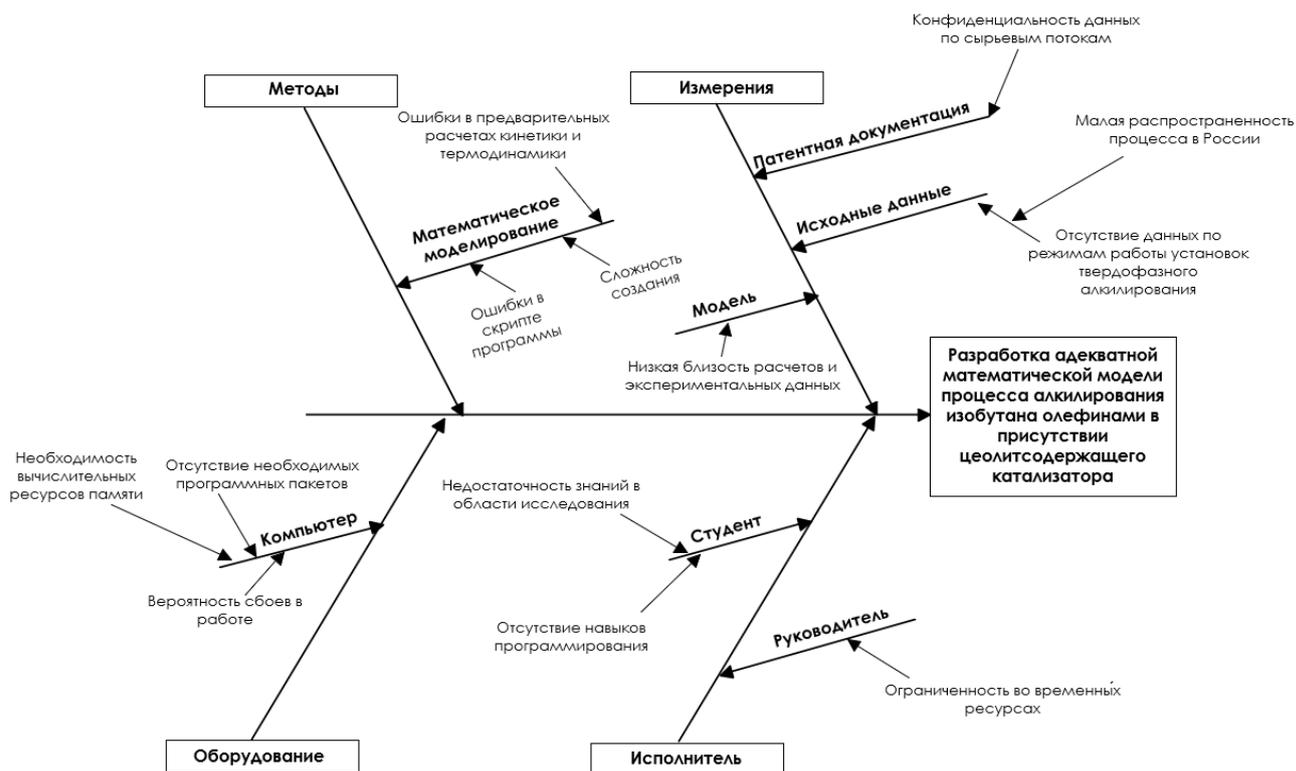


Рисунок 37 – Причинно-следственная диаграмма

#### 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. Для этого необходимо заполнить специальную форму, содержащую показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта (Таблица 12).

При проведении анализа по таблице, по каждому показателю ставится оценка по пятибалльной шкале. При оценке степени проработанности научного проекта 1 балл означает не проработанность проекта, 2 балла – слабую проработанность, 3 балла – выполнено, но в качестве не уверен, 4 балла – выполнено качественно, 5 баллов – имеется положительное заключение независимого эксперта. Для оценки уровня имеющихся знаний у разработчика система баллов принимает следующий вид: 1 означает не знаком или мало знаю, 2 – в объеме теоретических знаний, 3 – знаю теорию и

практические примеры применения, 4 – знаю теорию и самостоятельно выполняю, 5 – знаю теорию, выполняю и могу консультировать.

Таблица 12 – Оценка 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 научно-технического задела	5	4
3	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	5
4	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	4
5	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	5
6	Проведена оценка стоимости интеллектуальной стоимости	4	5
7	Проведены маркетинговые исследования рынка сбыта	4	4
8	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	3
9	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	3
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	3

11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	3
12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктур поддержки, получения льгот	2	2
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	2	3
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	2	4
15	Проработан механизм реализации научного проекта	3	4
	<b>ИТОГО БАЛЛОВ</b>	51	57

Исходя из данных, представленных в таблице 12, можно судить о перспективности разрабатываемого решения.

#### **4.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования**

Для осуществления коммерциализации разработанной модели процесса алкилирования будут использоваться следующие методы: инжиниринг и передача интеллектуальной собственности.

Инжиниринг будет предполагать предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной, именуемой консультантом, другой стороне, именуемой заказчиком, комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг, связанных с проектированием, строительством и вводом объекта в эксплуатацию, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика.

Передача интеллектуальной собственности будет производиться в уставной капитал предприятия или государства.

Данные методы коммерциализации будут наиболее продуктивными в отношении данного проекта.

## 4.2 Инициация проекта

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или новой фазы существующего. 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 (Таблица 13).

Таблица 13 – Заинтересованные стороны проекта

<b>Заинтересованные стороны проекта</b>	<b>Ожидания заинтересованных сторон</b>
Томский политехнический университет	Выпуск высококвалифицированных специалистов
Нефтеперерабатывающие предприятия	Разработка рекомендаций по наиболее эффективному ведению процесса алкилирования

В таблице 14 представлена иерархия целей проекта и критерии их достижения.

Таблица 14 – Цели и результат проекта

<b>Цели проекта:</b>	Создание математической модели процесса алкилирования изобутана олефинами в присутствии цеолитсодержащего катализатора
<b>Ожидаемые результаты проекта:</b>	Получение инструмента для исследования влияния различных технологических параметров на выход и качество продукта
<b>Критерии приемки результата проекта:</b>	Адекватность полученной математической модели (минимальное расхождение между расчетными и экспериментальными значениями) должна составлять не менее 90%

	Требование:
	<b>Требования к результату проекта:</b>

В таблице 15 представлена организационная структура проекта (роль каждого участника, их функции и трудозатраты).

Таблица 15 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, ч
1	Чузлов В.А., НИ ТПУ, доцент ОХИ ИШПР	Руководитель проекта	Консультирование, координация деятельности, определение задач, контроль выполнения	600
2	Жигало И.В., магистрант ОХИ ИШПР	Исполнитель по проекту	Выполнение задач по проекту, написание проекта и оформление полученных результатов	1600
<b>ИТОГО:</b>				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 16).

Таблица 16 – Ограничения проекта

<b>Фактор</b>	<b>Ограничения / допущения</b>
3.1 Бюджет проекта	611374,54
3.1.1 Источник финансирования	НИ ТПУ
3.2 Сроки проекта:	
3.2.1 Дата утверждения плана управления проектом	01.09.2022
3.2.2 Дата завершения проекта	31.05.2023

### **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.

#### **4.3.1 Иерархическая структура работ проекта**

Группа процессов планирования состоит из процессов, осуществляемых для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательности действий, требуемых для достижения данных целей. Иерархическая структура проекта разработки математической модели процесса алкилирования представлена на рисунке 38.



Рисунок 38 – Иерархическая структура работ по проекту

### 4.3.2 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный график проекта (Таблица 17).

Таблица 17 – Календарный план проекта

Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Утверждение темы магистерской диссертации	7	01.09.22	07.09.22	Чузлов В.А.
Согласование плана работ	7	08.09.22	14.09.22	Чузлов В.А., Жигало И.В.
Литературный обзор	108	15.09.22	31.12.22	Жигало И.В.
Создание математической модели процесса	59	01.01.23	28.02.23	Чузлов В.А., Жигало И.В.
Апробация полученной модели	2	01.03.23	02.03.23	Жигало И.В.
Проверка адекватности математической модели	1	03.03.23	03.03.23	Жигало И.В.
Исследование влияния технологических параметров	15	04.03.23	18.03.23	Жигало И.В.
Сравнение модели жидкофазного и твердофазного алкилирования	15	19.03.23	02.04.23	Жигало И.В.
Написание отчета	59	03.04.23	31.05.23	Жигало И.В.
<b>Итого:</b>	273			

Диаграмма Ганта – это тип столбчатых диаграмм (гистограмм), который используется для иллюстрации календарного плана проекта, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ (Таблица 18).

Таблица 18 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№ п/п	Вид работ	Исполнители	Т, дни	Продолжительность выполнения работ													
				2022				2023									
				сен	окт	ноя	дек	янв	фев	мар	апр	май					
1	Утверждение темы магистерской диссертации	Чузлов В.А.	7	■													
2	Согласование плана работ	Чузлов В.А., Жигало И.В.	7	■													
3	Литературный обзор	Жигало И.В.	108		■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
4	Создание математической модели процесса	Чузлов В.А., Жигало И.В.	59					■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
5	Апробация полученной модели	Жигало И.В.	2									■	■				
6	Проверка адекватности математической модели	Жигало И.В.	1									■	■				
7	Исследование влияния технологических параметров	Жигало И.В.	15									■	■	■	■	■	■
8	Сравнение модели жидкофазного и твердофазного алкилирования	Жигало И.В.	15									■	■	■	■	■	■
9	Написание отчета	Жигало И.В.	59												■	■	■
	Итого:	Чузлов В.А.	73														
		Жигало И.В.	266														



– Жигало И.В.



– Чузлов В.А.



– Жигало И.В., Чузлов В.А.

### 4.3.3 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.

Материальные затраты, необходимые для разработки модели алкилирования, отражены в таблице 19.

Таблица 19 – Материальный затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, руб
Бумага А4	листов	100	1,5	180
Чернила для лазерного принтера	мл	100	1,1	110
Блокнот	шт.	3	75	225
Шариковая ручка	шт.	2	35	70
Карандаш простой	шт.	2	10	20
Всего за материалы				605
Транспортно-заготовительные расходы (5 %)				30,25
Итого по статье С <sub>м</sub>				635,25

Для выполнения исследовательского проекта требуется приобрести персональный компьютер, ПО MicrosoftOffice 365 для работы с документами, Все расчеты по приобретению спецоборудования, включая 15% на затраты по доставке и монтажу, отображены в таблице 20.

Таблица 20 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования

№ п/п	Наименование оборудования	Количество единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
1	ПО MicrosoftOffice	1	5	5
3	Персональный компьютер	1	50	50
4	Лазерный принтер	1	8	8
Итого:				63

В расчет основной заработной платы включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда.

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 21.

Таблица 21 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Научный руководитель проекта	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные	44	48
- праздничные	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	56	28
- невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	275

Расчет действительных рабочих дней представлен в таблице 22.

Таблица 22 – Планирование работ

	Количество календарных дней	Количество рабочих дней
Руководитель	73	45
Инженер	266	176

Согласно полученным данным количество рабочих дней для инженера составляет 176 дней, для руководителя – 45 дней.

Установим, что на 2023 год должностной оклад (ППС) доцента кандидата наук без учета РК составляет около 39200 рублей. Расчет основной заработной платы представлен в таблице 23.

Таблица 23 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	З <sub>б</sub> , руб	к <sub>пр</sub>	к <sub>д</sub>	к <sub>р</sub>	З <sub>м</sub> , руб	З <sub>дн</sub> , руб	Т <sub>р</sub> , раб. дн.	З <sub>осн</sub> , руб
Руководитель	39200	1	0,02	1,3	51979,2	2153,72	45	96917,4
Студент	26200	–	–	1,3	34060	1387,17	176	244141,92
Итого:								341059,32

В дополнительную заработную плату научно-производственного персонала 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 выполнение темы.

В таблице 24 представлен расчет основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 24 – Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Студент
Основная зарплата	96917,4	244141,92
Дополнительная зарплата	9691,74	24414,19
Зарплата исполнителя	106609,14	268556,1
Итого по статье С <sub>зп</sub>	375165,25	

Отчисления на социальные нужды включает в себя отчисления во внебюджетные фонды:

- отчисления на социальные нужды:

$$C_{\text{внеб}} = 0,3 \cdot 375165,25 = 112549,6 \text{ рублей};$$

- накладные расходы:

$$C_{\text{накл}} = 0,16 \cdot 375165,25 = 60026,44 \text{ рублей};$$

На основании полученных данных по отдельным статьям затрат составляем калькуляцию плановой себестоимости НТИ (Таблица 25).

Таблица 25 – Группировка затрат по статьям

Сырье, материалы	Специальное оборудование	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Накладные расходы	Итого плановая себестоимость
635,25	63000	341059,32	34105,93	112549,6	60026,44	611374,54

#### **4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования**

##### **4.4.1 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.

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 позволяет судить о целесообразности инвестирования денежных средств. Если  $NPV > 0$ , то проект оказывается эффективным. Расчет чистой текущей стоимости представлен в таблице 26. При расчете рентабельность проекта составляла 50 %, т.к. проект относится к работам, связанным с математическим моделированием. Норма амортизации – 10 %.

Себестоимость = 611374,54 руб;

Выручка = себестоимость \* 1,5 = 917064,81рублей;

Таблица 26 – Расчет чистой текущей стоимости

№	Наименование показателей	Номер шага расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб.	0	917064,81	917064,81	917064,81	917064,81
2	Итого приток, руб.	0	917064,81	917064,81	917064,81	917064,81
3	Инвестиционные издержки, руб.	-611374,54	0	0	0	0
4	Операционные затраты, руб.	0	213981,1	213981,1	213981,1	213981,1
5	Налогооблагаемая прибыль (1-4)	0	703080,7	703080,7	703080,7	703080,7
6	Налоги 20%, руб. (5*20%)	0	140616,1	140616,1	140616,1	140616,1
7	Чистая прибыль, руб. (5-6)	0	562464,6	562464,6	562464,6	562464,6
8	Чистый денежный поток (ЧДП), руб. (чистая прибыль + амортизация)	-611374,54	623602,03	623602,03	623602,03	623602,03
9	<b>Коэффициент дисконтирования <math>i=20\%</math> (КД)</b>	<b>1</b>	<b>0,833</b>	<b>0,694</b>	<b>0,579</b>	<b>0,482</b>
10	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб. (9*10)	-611374,54	519668,36	433057	360880,8	300734
11	$\Sigma$ ЧДД		<b>1614340,13</b>			
12	<b>Итого NPV, руб.</b>		<b>1002965,6</b>			

Поскольку чистая текущая стоимость по проекту составляет 1002965,6 рублей, то разрабатываемое проектное решение можно считать эффективным.

Индекс доходности (ИД) позволяет судить об эффективности инвестиций и представляет собой отношение дисконтированных доходов к размеру инвестиционного капитала:

$$\text{ИД} = \frac{1614340,13}{611374,54} = 2,64;$$

Так как ИД = 2,64 > 1, то проект можно считать эффективным для инвестиций.

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.

Таблица 27 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№	Наименование показателя	0	1	2	3	4	NPV, руб.
1	Чистые денежные потоки, руб.	- 611374,54	623602,03	623602,03	623602,03	623602,03	
2	Коэффициент дисконтирования						
	0,1	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	0,2	1	0,833	0,694	0,579	0,482	
	0,3	1	0,769	0,592	0,455	0,350	
	0,4	1	0,714	0,510	0,364	0,260	
	0,5	1	0,667	0,444	0,296	0,198	
	0,6	1	0,625	0,391	0,244	0,153	
	0,7	1	0,588	0,346	0,204	0,120	
	0,8	1	0,556	0,309	0,171	0,095	
	0,9	1	0,526	0,277	0,146	0,077	
	1,0	1	0,500	0,250	0,125	0,063	

3	Дисконтированный денежный поток, руб						
	0,1	-611374,5	566910,9	515373,6	468521,4	425928,6	1365360,0
	0,2	-611374,5	519668,4	433057,0	360880,8	300734,0	1002965,6
	0,3	-611374,5	479693,9	368995,3	283842,5	218340,4	739497,5
	0,4	-611374,5	445430,0	318164,3	227260,2	162328,7	541808,7
	0,5	-611374,5	415734,7	277156,5	184771,0	123180,6	389468,2
	0,6	-611374,5	389751,3	243594,5	152246,6	95154,1	269372,0
	0,7	-611374,5	366824,7	215779,2	126929,0	74664,1	172822,5
	0,8	-611374,5	346445,6	192469,8	106927,6	59404,2	93872,7
	0,9	-611374,5	328211,6	172742,9	90917,3	47851,2	28348,6
	1,0	-611374,5	311801,0	155900,5	77950,3	38975,1	-26747,6

По данным таблицы 27 построим зависимость NPV от ставки дисконтирования (Рисунок 39).

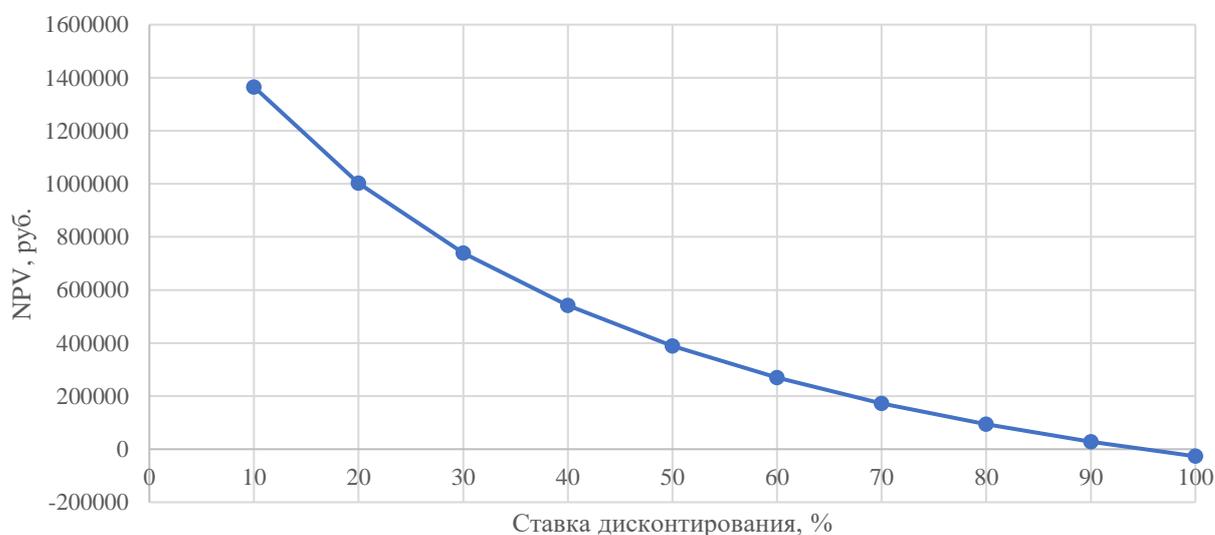


Рисунок 39 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Таким образом, 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 95 %.

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

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 28).

Таблица 28 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток, руб.	-611374,54	519668,36	433057	360880,8	300734
2	То же нарастающим итогом, руб.	-611374,54	-91706,18	341350,82	702231,62	1002965,62
3	Дисконтированный срок окупаемости	$DPP_{диск} = 1 + \left( \frac{91706,18}{433057} \right) = 1,2 \text{ года}$				

Социальная эффективность научного проекта учитывает социально экономические последствия осуществления научного проекта для общества в целом или отдельных категорий населений 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 29).

Таблица 29 – Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Проведение дорогостоящих и опасных технологических процессов	Проведение расчетов на математической модели
Использование токсичной серной кислоты	Внедрение в процесс катализатора на основе цеолита

#### 4.4.2 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.

В таблице 30 представлена сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Аналог 1 соответствует разработке модели в программной среде Delphi, а аналог 2 – разработка модели в программной среде Pascal ABC.

Таблица 30 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерий	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Способствует росту производительности труда	0,25	5	5	4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителя)	0,15	5	4	3
3. Пригодность к исправлению ошибок	0,25	4	4	3
4. Стоимость разработки	0,15	4	5	2
5. Специфичность для конкретного производства	0,20	5	3	4
ИТОГО	1	23	21	16

Тогда интегральный показатель ресурсоэффективности будет равен:

$$I_{\text{ТП}} = 0,25 \cdot 5 + 0,15 \cdot 5 + 0,25 \cdot 4 + 0,15 \cdot 4 + 0,20 \cdot 5 = 4,6;$$

$$I_{A1} = 0,25 \cdot 5 + 0,15 \cdot 4 + 0,25 \cdot 4 + 0,15 \cdot 5 + 0,20 \cdot 3 = 4,2;$$

$$I_{A2} = 0,25 \cdot 4 + 0,15 \cdot 3 + 0,25 \cdot 3 + 0,15 \cdot 2 + 0,20 \cdot 4 = 3,3;$$

В таблице 31 представлена сравнительная эффективность разработки

Таблица 31 – Сравнительная эффективность разработки

№	Показатели	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,45	1	0,98
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,6	4,2	3,3
3	Интегральный показатель эффективности	10,2	4,2	3,37
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	2,4	0,4	0,3

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 1002965,6 руб.; индекс доходности ИД = 2,64, внутренняя ставка доходности IRR = 95%, срок окупаемости DPPдск = 1,2 года. Таким образом мы имеем ресурсоэффективный проект с высоким запасом финансовой прочности и коротким сроком окупаемости.

## **5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ**

Данная выпускная квалификационная работа направлена на разработку модели процесса алкилирования изобутана олефинами с целью повышения эффективности ведения технологического процесса. Соответственно, областью применения выступает нефтеперерабатывающая промышленность.

В качестве объекта исследования выступает оборудование, рабочее место и помещение, в котором находится инженер.

Работа выполнялась в Томском политехническом университете в корпусе 2 аудитории 133.

Экспериментальная часть магистерской диссертации осуществлялась на персональном компьютере при работе с различным программным обеспечением и локальной вычислительной сетью с выходом в Интернет.

Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, кондиционирования воздуха и естественным и искусственным освещением. Также в аудитории находится аптечка первой медицинской помощи, углекислотный огнетушитель для тушения пожара.

### **5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

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

К основным нормативным документам также можно отнести Федеральный закон «Об обязательном социальном страховании от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний» от 24.07.1998 N

125- ФЗ. Данный закон устанавливает в Российской Федерации правовые, экономические и организационные основы обязательного социального страхования от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний и определяет порядок возмещения вреда, причиненного жизни и здоровью работника при исполнении им обязанностей по трудовому договору и в иных установленных настоящим Федеральным законом случаях.

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

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

Основными задачами трудового законодательства являются создание необходимых правовых условий для достижения оптимального согласования интересов сторон трудовых отношений, интересов государства, а также правовое регулирование трудовых отношений и иных непосредственно связанных с ними отношений по [56]:

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

- государственному контролю (надзору), профсоюзному контролю за соблюдением трудового законодательства (включая законодательство об охране труда) и иных нормативных правовых актов, содержащих нормы трудового права;
- разрешению трудовых споров;
- обязательному социальному страхованию в случаях, предусмотренных федеральными законами.

Рабочее пространство и рабочее место должны проектироваться в соответствии с ГОСТ Р ИСО 6385-2016. Проектирование должно учитывать стабильность рабочих поз трудящихся и их мобильность. Для эффективного выполнения рабочих обязанностей необходимо иметь достаточное пространство, обеспечивающее удобные рабочие позы, возможность их вариаций и передвижений. Оборудование должно быть легкодоступным и безопасным, должны соблюдаться эргономические требования к оборудованию и отсчетным устройствам индикаторов, прописанные в ГОСТ 12.2.049-80 ССБТ и ГОСТ 22902-78.

Согласно гигиеническим нормам, СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 [57] помещение в целом и рабочее место должны быть освещены достаточно и равномерно. При оборудовании рабочей зоны необходимо также учесть, что яркий солнечный свет порождает блики на мониторе, следовательно, существует потребность в установке жалюзи.

Поскольку трудовая деятельность в рассматриваемом случае связана с работой на ЭВМ, необходимо соблюдать меры безопасности, направленные на сохранение полноценного зрения сотрудника:

- экран видеомонитора должен находиться от глаз пользователя на оптимальном расстоянии от 600 до 700 мм, но не ближе 500 мм с учетом размеров алфавитно-цифровых знаков и символов;
- уровень глаз при вертикально расположенном экране должен приходиться на центр или 2/3 высоты экрана. Линия взора должна быть перпендикулярна центру экрана и оптимальное её отклонение от

перпендикуляра, проходящего через центр экрана в вертикальной плоскости, не должно превышать 5 градусов, допустимое 10 градусов.

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

## 5.2 Производственная безопасность

Производственная безопасность – это система организационных мероприятий и технических средств, уменьшающих вероятность воздействия на персонал опасных производственных факторов, вредных воздействий технологических процессов, энергии, средств, предметов, условий и режимов труда до приемлемого уровня.

Выбор факторов производится с использованием ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация» [58]. Выявленные факторы представлены в таблице 32.

Таблица 32 – Возможные опасные и вредные факторы при эксплуатации установки алкилирования

Факторы	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
1. Неудовлетворительный микроклимат	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений
2. Поражение электрическим током	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 Электрическая безопасность. Защитное заземление, зануление

3. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95; ГОСТ Р 55710 – 2013 Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений.
4. Пожаровзрывобезопасность на объектах	+	+	+	ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования
5. Повышенный уровень шума	-	+	+	ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности

### 5.2.1 Отклонение показателей микроклимата

Нормы производственного микроклимата установлены в СанПиН 2.2.4.548-96 [59]. Они едины для всех производств и всех климатических зон с некоторыми незначительными отступлениями.

В этих нормах отдельно нормируется каждый компонент микроклимата в рабочей зоне производственного помещения: температура, относительная влажность, скорость движения воздуха в зависимости от способности организма человека к акклиматизации в разное время года, характера одежды, интенсивности производимой работы и характера тепловыделений в рабочем помещении.

Нормирование параметров микроклимата осуществляется для оптимальных и допустимых метеорологических условий. Оптимальные микроклиматические условия определяются сочетанием параметров микроклимата, которые при длительном и систематическом воздействии на

человека обеспечивают сохранение нормального функционального и теплового состояния организма без напряжения терморегуляции. Они создают ощущение теплового комфорта. Категория работ 1а и 1б.

Оптимальные величины показателей микроклимата на рабочем месте для помещений данных категорий приведены в таблице 33.

Таблица 33– Оптимальные характеристики микроклимата

<b>Оптимальные значения характеристик микроклимата</b>				
Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	22 ÷ 24	21 ÷ 25	40 ÷ 60	0,1
Теплый	23 ÷ 25	23 ÷ 26	40 ÷ 60	0,1
<b>Допустимые значения характеристик микроклимата</b>				
Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	20 ÷ 25	19 ÷ 26	15 ÷ 75	0,1
Теплый	21 ÷ 28	20 ÷ 29	15 ÷ 75	0,1 ÷ 0,2

На рабочих местах пользователей ПК должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата в соответствии с таблицей 33. Например, физиологически оптимальной является относительная влажность 40 ÷ 60 %. Относительная влажность менее 25 % приводит к высыханию слизистых оболочек и снижению защитной деятельности мерцательного эпителия верхних дыхательных путей, что приводит к ослаблению организма и снижается работоспособность.

Рекомендуется устанавливать системы охлаждения воздуха для поддержания относительной влажности в оптимальных пределах. Для обеспечения требуемого микроклимата воздушной среды предложена искусственная вентиляция или кондиционирование.

### **5.2.2 Поражение электрическим током**

Источником электромагнитного излучения является любой предмет, работающий на электрическом токе, в нашем случае это компьютер. Электрические установки, к которым относятся персональный компьютер, представляют для человека большую потенциальную опасность. В процессе эксплуатации или при проведении профилактических работ человек может коснуться частей, находящихся под током.

Электрический ток оказывает на человека термическое, электролитическое, биологическое и механическое воздействие. Действие электрического тока на человека приводит к травмам или гибели людей. Для переменного тока частотой 50 Гц допустимое значение напряжения прикосновения составляет 2 В, а силы тока – 0,3 мА, для тока частотой 400 Гц, соответственно – 2 В и 0,4 мА, для постоянного тока – 8 В и 1 мА [60].

Основными техническими способами и средствами защиты от поражения электрическим током являются [60]:

- защитное зануление;
- выравнивание потенциалов;
- защитное заземление;
- электрическое разделение сети;
- изоляция токоведущих частей;
- оградительные устройства и другое.

Для контроля состояния электрической изоляции проводов, производят периодические испытания изоляции. Периодическое измерение сопротивления изоляции позволяет своевременно выявить и устранить повреждения.

### **5.2.3 Недостаточная освещенность рабочей зоны**

Плохое освещение негативно воздействует на зрение, приводит к быстрому утомлению, снижает работоспособность, вызывает дискомфорт, является причиной головной боли и бессонницы.

Согласно [61] в помещениях для эксплуатации ПК организовано естественное освещение через светопроемы, обеспечивающее коэффициенты естественной освещенности (КЕО) не ниже 1,5 %. Искусственное освещение представлено комбинированной системой. Поскольку монитор ПК также является источником света, то рекомендуется в целях снижения мерцания экрана устанавливать частоту кадров 60 Гц для ЖКИ–мониторов.

Освещённость на рабочем месте составляет 300-500 лк, для помещений, в которых эксплуатируются персональные компьютеры и видеодисплейные терминалы; для работников вычислительных центров – 750 лк. Естественная освещенность в дневное время суток в операторной составляет 1,5 %, поэтому установлены окна, которые обеспечивают необходимое освещение, и при этом устойчивые к вибрационному воздействию.

Для обеспечения нормируемых значений освещенности в рабочих помещениях проводится чистка стекол оконных рам и светильников два раза в год и своевременная замена перегоревших ламп. Необходимо ограничивать прямую блёскость от источников освещения, при этом яркость светящихся поверхностей в поле зрения не превышает 200 кд/м<sup>2</sup>. Яркость бликов на экране персональных компьютеров не превышает 40 кд/м<sup>2</sup>, а яркость потолка, при применении системы отраженного освещения, не превышает 200 кд/м<sup>2</sup>, что соответствует параметрам ГОСТ Р 55710 – 2013 [62].

#### **5.2.4 Пожаровзрывобезопасность на объектах**

Работа с персональными компьютерами связана с рисками возгорания электрического оборудования, в связи с чем в зданиях должны быть предусмотрены конструктивные, объемно-планировочные и инженернотехнические решения, обеспечивающие в случае пожара [63]:

- возможность эвакуации людей независимо от их возраста и физического состояния наружу на прилегающую к зданию территорию до наступления угрозы их жизни и здоровью вследствие воздействия опасных факторов пожара;

- возможность спасения людей;
- возможность доступа личного состава пожарных подразделений и подачи средств пожаротушения к очагу пожара, а также проведения мероприятий по спасению людей и материальных ценностей;
- нераспространение пожара на рядом расположенные здания, в том числе при обрушении горящего здания;
- ограничение прямого и косвенного материального ущерба, включая содержимое здания и само здание, при экономически обоснованном соотношении величины ущерба и расходов на противопожарные мероприятия, пожарную охрану и ее техническое оснащение.

### 5.2.5 Повышенный уровень шума

Повышенный уровень шума связан с работой агрегатов персонального компьютера. В производственных помещениях при выполнении основных или вспомогательных работ с использованием ПК уровни шума на рабочих местах не должны превышать предельно допустимых значений, установленных для данных видов работ в соответствии с действующими санитарно-эпидемиологическими нормативами (Таблица 34).

Таблица 34 – Допустимые значения уровней звукового давления в октавных полосах частот и уровня звука, создаваемого ПК

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

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

## 5.2.6 Расчет искусственного освещения

Источники света, применяемые для искусственного освещения, делят на две группы: газоразрядные лампы и лампы накаливания. Для общего освещения, как правило, применяются газоразрядные лампы как энергетически более экономичные и обладающие большим сроком службы. Наиболее распространёнными являются люминесцентные лампы (Таблица 35).

В лабораториях зрительные работы часто относятся к первой группе работ по освещенности. И это говорит об особой важности качественного освещения в ее стенах, поэтому в качестве искусственного освещения чаще всего, используются лампы дневного света.

Таблица 35 – Основные характеристики люминесцентных ламп [64]

Мощность, Вт	Напряжение сети, В	Световой поток ЛД, лм
15	127	835
20	127	1060
30	220	2020
40	220	2800
65	220	4600
80	220	5200
125	220	–

Интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина  $\lambda = \frac{L}{h}$ , характеризующая наилучшее относительное расстояние между светильниками. Уменьшение  $\lambda$  удорожает устройство и обслуживание освещения, а чрезмерное увеличение ведёт к резкой неравномерности освещённости. В таблице 36 приведены значения  $\lambda$  для разных светильников.

Таблица 36 – Наиболее оптимальное расположение светильников [64]

Наименование светильников	$\lambda$
Люминесцентные с защитной решеткой ОДР, ОДОР, ШЛД, ШОД	1,1 ÷ 1,3
Люминесцентные без защитной решетки типа ОД, ОДО	1,4
ПВЛ	1,5

ГС, ЛЩ	1,6
У, ПУ с отражателем	1,8
ШМ, ПУ без отражателя	2,3
СЗ-4-ДРЛ	1,0

Рабочее помещение обладает следующими характеристиками:

- длина  $A = 19$  м;
- ширина  $B = 5$  м;
- высота  $H = 7$  м;
- высота рабочей поверхности  $h_{\text{рп}} = 0,8$  м;
- уровень освещенности в лабораториях должен составлять от 500 лк;
- коэффициент отражения стен  $R_c = 30$  %;
- коэффициент отражения потолка  $R_n = 50$  %;
- коэффициент запаса  $k = 1,5$ ;
- коэффициент неравномерности  $Z = 1,1$ .

Произведем расчет системы общего люминесцентного освещения.

Выберем светильники типа ОД с  $\lambda = 1,4$ .

Примем, что  $h_c = 0,5$  м, тогда расчетная высота составит:

$$h = H - h_c - h_{\text{рп}} = 7 - 0,5 - 0,7 = 5,7 \text{ м};$$

Расстояние  $L$  между светильниками будет равно:

$$L = \lambda \cdot h = 1,4 \cdot 5,7 = 7,98 \text{ м};$$

Расстояние от крайнего ряда светильников до стены:

$$L = \frac{L}{3} = \frac{7,98}{3} = 2,7 \text{ м};$$

Количество рядов светильников с люминесцентными лампами определяется по формуле:

$$n_{\text{ряд}} = \frac{\left(B - \frac{2}{3} \cdot L\right)}{L} + 1 = \frac{\left(5 - \frac{2}{3} \cdot 2,7\right)}{2,7} + 1 = 2;$$

Количество светильников с люминесцентными лампами:

$$n_{\text{св}} = \frac{\left(A - \frac{2}{3} \cdot L\right)}{l_{\text{св}} + 0,5} = \frac{\left(19 - \frac{2}{3} \cdot 2,7\right)}{1,23 + 0,5} = 10;$$

Светильники размещаем в 2 ряда. В каждом ряду установим по 10 светильников типа ОД мощностью 40 Вт. Длина каждого светильника составляет 1,23 м, разрыв между светильниками в ряду 50 см. В каждом светильнике установлено по 2 лампы. Общее количество светильников в помещении составляет  $N = 20$  штук.

В таком случае индекс освещения будет равен:

$$i = \frac{S}{h \cdot (A + B)} = \frac{19 \cdot 5}{7 \cdot (19 + 5)} = 0,6;$$

Коэффициент использования светового потока будет равен:

$$\eta = 0,33;$$

Определим световой поток ламп:

$$\Phi = \frac{E_{\text{н}} \cdot S \cdot K_{\text{з}} \cdot Z}{N_{\text{л}} \cdot \eta} = \frac{500 \cdot 95 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{40 \cdot 0,5} = 3918,75 \text{ лм};$$

Выбираем лампу ЛБ 65 Вт со световым потоком 4600 лм. Делаем проверку выполнения условия:

$$-10 \% \leq \frac{\Phi_{\text{л.станд}} - \Phi_{\text{л.расч}}}{\Phi_{\text{л.станд}}} \cdot 100 \% \leq +20 \%$$

Получаем:

$$-10 \% \leq 14,81 \% \leq +20 \%$$

Тогда мощность осветительной установки:

$$P = 65 \cdot 40 = 2600 \text{ Вт};$$

### 5.3 Экологическая безопасность

В результате разработки модели процесса алкилирования источниками загрязнения окружающей среды могут стать вышедшие из строя персональные компьютеры, оргтехника и бытовой мусор.

Вышедший из строя персональный компьютер и сопутствующая оргтехника относится к IV классу опасности и подлежит специальной

утилизации. Для оказания наименьшего влияния на окружающую среду, необходимо проводить специальную процедуру утилизации, при которой более 90 % отправится на вторичную переработку и менее 10 % будут отправлены на свалки. При этом она должна соответствовать процедуре утилизации ГОСТ Р 53692-2009 Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Этапы технологического цикла отходов [65].

В ходе деятельности организация также создает бытовой мусор (канцелярские, пищевые отходы, искусственные источники освещения), который должен быть утилизирован в соответствии с определенным классом опасности или переработан, чтобы не оказывать негативное влияние на состояние литосферы.

#### **5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях**

При возникновении ЧС, мероприятия представляют собой проведение спасательных работ и неотложных аварийно-восстановительных работ в очаге поражения. Данные мероприятия проводятся на основании положения комплекса государственных стандартов по предупреждению и ликвидации чрезвычайной ситуации.

Основную опасность для помещений, оборудованных персональными компьютерами, на территории г. Томска представляют пожары, разрушение оборудования, поражение и гибель людей. Поэтому в случае грозových явлений предусмотрена молниезащита. Это система, обеспечивающая перехват молнии и отвод ее в землю, тем самым, защищая здание от повреждения и пожара.

При возгорании электрических аппаратов или веществ около проводов, находящихся под током во время тушения пожаров, всегда имеется опасность поражения током. Поэтому в здании или его части, где производится тушение пожара, электрическая сеть должна быть отключена.

В случае поступления сигнала об эвакуации необходимо: обесточить все электроприборы, находящиеся на рабочем месте и позвонить в подразделение

пожарной охраны по телефону 01 или 112, сообщить о случившемся руководителю подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения согласно ГОСТ Р 51057-2001 [66].

### **Выводы по разделу «Социальная ответственность»**

В ходе проведенной работы были рассмотрены правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности, нормы трудового законодательства. Указаны требования к правильному расположению и компоновке рабочей зоны исследователя, при разработке модели процесса алкилирования изобутана.

Произведен анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникать при проведении исследований на рабочем месте, а также при разработке или эксплуатации проектируемого решения. Общий уровень загрязнения воздуха рабочей зоны вредными веществами может быть оценен как низкий – концентрации вредных веществ не превышают соответствующих ПДК. Приведено обоснование мероприятий по снижению уровней воздействия опасных и вредных факторов на исследователя (работающего), рассмотрены требования безопасности, предъявляемые ко всем видам работ, установкам и устройствам, формирующим опасные факторы.

Проанализирован характер воздействия проектируемого решения на окружающую среду, а также предложены мероприятия по снижению негативного влияния.

Выполнен анализ возможных чрезвычайных ситуаций, которые могут возникнуть при разработке модели процесса алкилирования, а также приведено обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были проведены расчеты кинетических параметров реакций, протекающих в процессе алкилирования изобутана олефинами. На основании полученных расчетов была составлена математическая модель, благодаря которой возможно тестирование и управление процессом. Данная модель соответствует моделируемому процессу алкилирования, поскольку отклонение расчетных и действительных значений выхода основных компонентов минимально.

Благодаря расчетам, проведенным на модели, было показано, что с ростом температуры в зоне реактора (от 68 до 92 °С) и давления (от 1,12 до 1,52 МПа) происходит увеличение выхода алкилата и снижение его октанового числа. При увеличении содержания бутена-1 и бутена-2 в составе олефиновой фракции в диапазоне от 0,05 до 0,425 масс. доли происходит одновременное снижение как выхода алкилата, так и его детонационной стойкости. Увеличение соотношения изобутан : олефины от 5,1 : 1 до 6,9 : 1 приводит к повышению выхода алкилата, а также его октанового числа. При варьировании числа секций в реакторе от 2 до 12 наблюдается увеличение выхода алкилата, но в то же время происходит снижение качества получаемого продукта.

По итогу проведенных расчетов произвели сравнение двух технологий – жидкофазного и твердофазного алкилирования – и показали, что процесс с участием твердофазного катализатора в среднем позволяет получать алкилат с октановым числом на 1,9 % выше, а селективность по триметилпентанам превышает аналогичный показатель жидкофазного процесса на 32,6 %.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Россия экспортировала в декабре 2022 года рекордные объемы бензина и дизеля // Ведомости URL: <https://www.vedomosti.ru/business/articles/2023/01/18/959559-rossiya-eksportirovala> (дата обращения: 12.02.2023).
- 2 Какой тип топлива используют россияне для заправки автомобилей? // АВТОСТАТ URL: <https://www.autostat.ru/news/35811/> (дата обращения: 12.02.2023).
- 3 Махмудов М.Ж., Наубеев Т.Х., Абишов З.М. Современные методы улучшения качества автомобильных бензинов // «Science and Education» Scientific Journal. – 2021. – №2. – С. 226-237.
- 4 Справочник: пер. с англ. 3-го изд./ [Р. А. Мейерс и др.]; под ред. О.Ф. Глаголевой, О.П. Лыкова. – СПб.: ЦОП «Профессия», 2011. – 944 с.: ил.
- 5 Солодова Н.Л., Хасанов И.Р. Перспективные процессы алкилирования изопарафинов олефинами // Вестник технологического университета. – 2015. – №9. – С. 117-121.
- 6 Солодова Н.Л., Терентьева Н.А. Современное состояние и тенденции развития каталитического крекинга нефтяного сырья // Вестник Казанского технологического университета. – 2012. – №1. – С. 141-145.
- 7 Ахмадова Х. Х., Магомадова М. Х., Ахмадова А. Р. Алкилат - основной компонент высокооктановых бензинов // Вестник ГГНТУ. – 2019. – №4. – С. 49-59.
- 8 Солодова Н.Л., Хасанов И.Р. Анализ работы установки HF-алкилирования ООО "ЛУКОЙЛ-Нижегороднефтеоргсинтез" // Вестник технологического университета. – 2015. – №7. – С. 119-123.
- 9 Эрих В.Н., Расина М.Г., Рудин М.Г. Химия и технология нефти и газа. – 2-е пер. изд. – Л.: Химия, 1977. - 424 с.
- 10 Петров А.Д. Химия моторных топлив. – М.: АН СССР, 1953. – 513 с.

- 11 Суханов, В.П. Каталитические процессы в нефтепереработке / В.П. Суханов. – М.: Химия, 1979. – 344 с.
- 12 Дорогочинский А.З. Серноокислотное алкилирование изопарафинов олефинами / А.З. Дорогочинский, А.В. Лютер, Е.Г. Вольнова. – М.: Химия, 1970. – 216 с.
- 13 Ahmed F. E. Toxicology and human health effects following exposure to oxygenated or reformulated gasoline // Elsevier. - 2001. - №123. - С. 89-113.
- 14 Hobson G. D. Modern Petroleum Technology / G. D. Hobson, W. Pohl. – NY: John Wiley & Sons. –1973. – p. 996.
- 15 Вадулина Н. В., Закирова З.А., Голик К.С. Повышение безопасности производства серноокислотного алкилирования за счет замены действующей каталитической системы // Нефтегазовое дело. – 2017. – №5. – С. 38-51.
- 16 Капустин, В.М. Инновационное развитие нефтепереработки и нефтехимии в России / В.М. Капустин // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний. – 2011 – № 6 – С. 3-7.
- 17 Технология и оборудование процессов переработки нефти и газа: Учебное пособие / С. А. Ахметов, Т. П. Сериков, И. Р. Кузеев, М. И. Баязитов; Под ред. С. А. Ахметова. – СПб.: Недра, 2006. – 868 с.
- 18 Vincent J. D'Amico. New solid acid alkylation process for motor gasoline production // ABB Review. - 2000. - №2. - P. 71-76.
- 19 Трапезникова Е.Ф., Смольникова Т.В., Хафизова С.Р., Николаева Т.В., Нурисламова Р.Р. Перспектива применения цеолитсодержащих катализаторов в процессе алкилирования // Нефтегазовое дело. – 2018. –№4. – С. 117-143.
- 20 Технология переработки нефти и газа: Учебное пособие / Е.Н. Ивашкина, Е.М. Юрьев, Н.И. Кривцова, Н.С. Белинская; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2021. – 172 с.

- 21 Магарил Р.З. Теоретические основы химических процессов переработки нефти: Учебное пособие для вузов. – Л.: Химия. – 1985. – 280 с.
- 22 Справочник нефтепереработчика / Под ред. Г. А. Ластовкина, Б. Д., Радченко, М. Г. Рудина. — М.: Химия, 1986.— 648 с.
- 23 Geren P.M. et. al.: Fixed-Bed Alkylation – Commercialization of the Topsoc Process // Solid Acid '95 Conference. – 1995.— P. 4-5.
- 24 Weitkamp J., Traa Y. Isobutane/butene alkylation on solid catalysts. Where do we stand? // Catalysis Today. – 1999. – №49. – P. 193-199.
- 25 Заботин Л.И. Химия и технология вторичных процессов переработки нефти: Учеб. пособие / Л.И. Заботин. – Самара: Самар. гос. техн. ун-т, 2014. – 332 с.
- 26 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.
- 27 Лебедев Д.С. Аналитический обзор катализаторов алкилирования изобутана олефинами // Вестник магистратуры. – 2018. – №5-3. – С. 33-37.
- 28 Хаджиев С. Н., Герзелиев И. М., Ведерников О. С., Клейменов А. В., Кондрашев Д. О., Окнина Н. В., Кузнецов С. Е., Сайтов З. А., Басханова М. Н. Новый процесс производства алкилата // Катализ в пром-сти. – 2016. – Т. 16. – № 6. – С. 42-47.
- 29 Chen Zh., Gao F., Ren K., Wu Q., Luo Y., Zhou H., Zhang M., Xu Q. Mechanism of byproducts formation in the isobutane/butene alkylation on HY zeolites // RSC Advances. – 2018. – V. 8. – № 7. – P. 3392-3398.
- 30 Zhang H., Xu J., Tang H., Yang Z., Liu R., Zhang S. Isobutane/2-butene alkylation reaction catalyzed by Cu-modified and rare earth X-type zeolite: Research-article // Ind. Eng. Chem. Res. – 2019. – V. 58. – № 22. – P. 9690-9700.
- 31 Feller A. Common mechanistic aspects of liquid and solid acid catalyzed alkylation of isobutane with n-butene // J. Catal. – 2003. – V. 216. – P. 313-323.

32 Josl R. Regeneration of zeolite catalysts deactivated in isobutane/butene alkylation: An in situ FTIR investigation at elevated H<sub>2</sub> pressure // *Catal. Commun.* – 2004. – V. 5. – № 5. – P. 239-241.

33 Klingmann R., Josl R., Traa Y., Gläser R., Weitkamp J. Hydrogenative regeneration of a Pt/La-Y zeolite catalyst deactivated in the isobutane/n-butene alkylation // *Appl. Catal. A.* – 2005. – V. 281. – № 1-2. – P. 215-223.

34 Ginosar D. M., Thompsom D. N., Burch K. C. Recovery of alkylation activity in deactivated USY catalyst using supercritical fluids: A comparison of light hydrocarbons // *Appl. Catal. A.* – 2004. – V. 262. – P. 223-321.

35 Guzman A., Zuazo I., Feller A., Olindo R., Sievers C., Lercher J. A. On the formation of the acid sites in lanthanum exchanged X zeolites used for isobutane / cis-2-butene alkylation // *Micropor. Mesopor. Mater.* – 2005. – V. 83. – № 1-3. – P. 309-318.

36 Sievers C., Zuaza I., Guzman A., Olindo R., Syska Y., Lercher J. Stages of aging and deactivation of zeolite LaX in isobutane/2-butene alkylation // *J. Catal.* – 2007. – V. 246. – № 2. – P. 315-324.

37 Zhuang Y., Ng F. T. T. Isobutane/1-butene alkylation on LaNaY catalysts modified by alkali and alkaline-earth cations // *Appl. Catal. A.* – 2000. – V. 190. – № 1-2. – P. 137-147.

38 Costa B. O. D., Querini C. A. Isobutane alkylation with solid catalysts based on beta zeolite // *Appl. Catal. A.* – 2010. – V. 385. – № 1-2. – P. 144-152.

39 Sievers C., Liebert J. S., Stratmann M. M., Olindo R., Lercher J. A. Comparison of zeolites LaX and LaY as catalysts for isobutane/2-butene alkylation // *Appl. Catal. A.* – 2008. – V. 336. – № 1-2. – P. 89-100.

40 Герзелиев И. М., Остроумова В. А., Басханова М. Н., Сайтов З. А., Темникова В. А., Хусаимова Д. О. О выборе метода ионного обмена цеолита типа FAU для синтеза активного и селективного катализатора алкилирования изобутана бутиленами // *Нефтехимия.* – 2017. – Т. 57. – № 6. – С. 205-208.

41 Герзелиев И. М., Темникова В. А., Басханова М. Н., Максимов А. Л. Алкилирование изобутана бутиленами на катализаторах с различными

цеолитами NaX в CaLaHX-форме // Журнал прикладной химии. – 2020. – № 10. – С. 1490-1498.

42 M. Mukherjee, S. Sundaresan. ExSact: A step-out iso-paraffin alkylation technology // Exelus. - 2005. - №2.

43 Michael F. Simpson, James Wei, Sankaran Sundaresan Kinetic Analysis of Isobutane/Butene Alkylation over Ultrastable H-Y Zeolite // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 1996. – № 35. – P. 3861-3873.

44 Колесников С.И. Научные основы производства высокооктановых бензинов с присадками и каталитическими процессами / С.И. Колесников. – М.: Нефть и газ, 2007. – 540 с.

45 AlkyClean [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://library.e.abb.com/public/da7221743801301bc1256e2b002ff6cb/54\\_55%20RU.pdf](https://library.e.abb.com/public/da7221743801301bc1256e2b002ff6cb/54_55%20RU.pdf) (дата обращения: 16.03.2023).

46 Азнабаев Ш.Т., Валеева Г.Г., Ширматов Т.А., Бирюзов О.С. Современные технологии каталитического алкилирования изопарафинов олефинами // Заметки Ученого. – 2022. – №2. – С. 137-142.

47 Mukherjee M., Nehlsen J. Reduce Alkylate Costs with Solid-Acid Catalysts // Hydrocarbon Processing. – 2007.

48 Roeseler C.M., Black S.M., Shields D.J., Gosling C.D. Improved Solid Catalyst Alkylation Technology for Clean Fuels // The Alkylen Process. NPRA Annual Meeting. San Antonio, USA. – 2002.

49 Внедрение новых разработок – технология СКА [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://rangroup.ru/areas/newdevelopment/ska/> (дата обращения: 16.03.2023)

50 Капустин, В. М. Нефтеперерабатывающая промышленность США и бывшего СССР / В. М. Капустин, С. Г. Кукес, Р. Г. Бертолусини. – М.: Химия, 1995. – 304 с.

51 N. A. Rudnev, E. F. Trapeznikova, S. R. Khafizova, T. V. Smol'nikova, Yu. A. Khamzin, R. R. Shiriyazdanov Development of kinetic model of alkylation

of isobutane by olefins at zeolite-containing catalysts // *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. – 2018. – №4. – P. 411-416.

52 T. Hamzehlouyan, M. Kazemeini, F. Khorasheh // *Chemical Engineering Science*. – 2010. – №65. – P. 645–650.

53 Subramanya V. Nayak, Palghat A. Ramachandran, Milorad P. Dudukovic. Modeling of key reaction pathways: Zeolite catalyzed alkylation processes // *Chemical Engineering Science*. – 2010. – №65. – P. 335-342.

54 Sahebdehfar S., Kazemeini M., Khorasheh F., Badakhshan A. Deactivation behavior of the catalyst in solid acid catalyzed alkylation: effect of pore mouth plugging // *Chem.Eng.Sci.* – 2002. – №57. – P. 3611-3620.

55 Патент № 244507 Российская Федерация, МПК C07C 2/58 (2006.01), C07C 9/16 (2006.01), B01J 8/04 (2006.01). Способ получения алкилбензина : № 2010133667/04 : заявл. 12.08.2010 : опубл. 10.03.2012 / Хаджиев С.Н., Герзелиев И.М. ; заявитель ИНХС РАН, ОАО «ЭЛИНП». – 15 с. : ил. – Текст : непосредственный.

56 Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 28.03.2021) // *Собрание законодательства РФ*. — 07.01.2002. — № 1 (ч. 1). — Ст. 3.

57 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.: Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03: Постановление государственного санитарного врача РФ от 3 июня 2003 №118.

58 ГОСТ 12.0.003-2015 Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. – введ. 01.03.2017. - М.: Стандартинформ, 2017.

59 СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. – введ. 01.09.1996. - М.: Стандартинформ, 2018.

60 ГОСТ 12.1.019-2017 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты. - введ. 01.01.2019 - М.: Стандартинформ, 2019.

61 СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95. – введ. 08.05.2017. - М.: Стандартинформ, 2017.

62 ГОСТ Р 55710 – 2013 Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений. – введ. 01.07.2014. - М.: Стандартинформ, 2016.

63 ГОСТ 12.1.004-91 Пожарная безопасность. Общие требования- введ.01.07.1992.-М.: Стандартинформ, 2017.

64 Методическое указание «Расчет искусственного освещения» [Электронный ресурс]. Дата обращения: 20.04.2023 г.

65 ГОСТ Р 53692-2009 Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Этапы технологического цикла отходов. - введ. 01.01.2011. - М.: Стандартинформ, 2019.

66 ГОСТ Р 51057-2001 Техника пожарная. Огнетушители переносные. Общие технические требования. Методы испытаний. – введ. 25.10.2001. – М.: Издательство стандартов, 2002.

# Приложение А

(справочное)

Part 1

## Alkylation of isobutane with butenes on a solid catalyst

(Literary review)

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ12	Жигало Ирина Владимировна		

Руководитель ВКР:

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

Консультант – лингвист отделения иностранных языков ШБИП:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОИЯ ШБИП	Уткина Анна Николаевна	к.филос.н.		



As the reduction in the content of olefins, aromatics, and sulfur and nitrogen compounds is the current trend in gasoline formulation, and considering that alkylate is one of the few high-octane blending components that meets all these requirements, the alkylation process will continue playing an important role in the gasoline production within an oil refinery.

Figure A2 shows the involvement of alkylate in the composition of commercial gasoline.

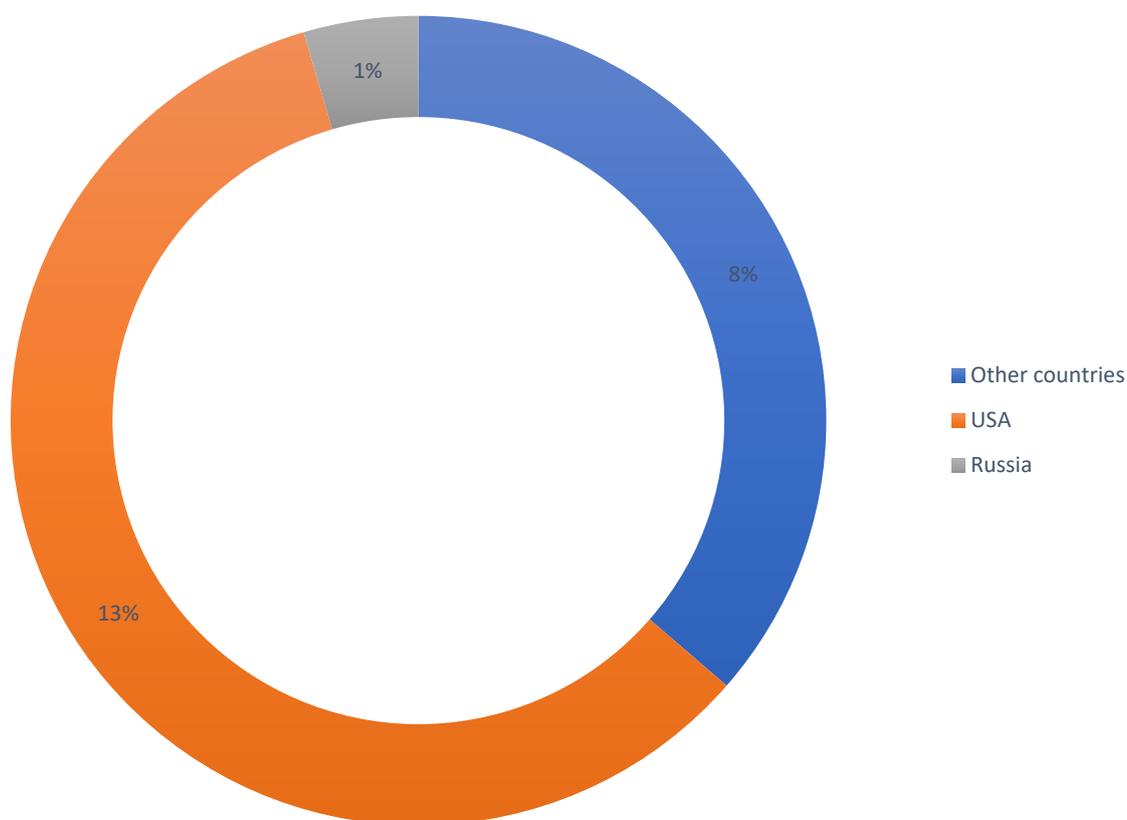


Figure A2 - Demand for alkylate in the world

### 1.1 Catalysts for alkylation

In the refining industry the alkylate production is based mainly on liquid acid processes, among which two acids have been used successfully: hydrofluoric (HF) and sulfuric acid ( $H_2SO_4$ ). On the other hand, several processes based on solid acid catalysts have been developed, but with no commercial applications so far.

Since one of the main concerns are the safety and environmental problems related to liquid acid processes, the main aim of this study is to design a process concept, where the use of a solid acid is evaluated at conceptual level to produce alkylate. Besides safety and environmental concerns, other disadvantages linked to the conventional processes have been identified:

- Equipment corrosion problems and high demand for sophisticated materials of construction;
- Acid separation and regeneration in different pieces of equipment required;
- Problems related with emulsion stability.

Table A1 shows the most popular technologies for solid phase alkylation.

Table A1 – Solid acid alkylation developments

Company	Catalysts
Catalitica	BF <sub>3</sub> on Alumina
Haldore Topsøe	CF <sub>3</sub> SO <sub>3</sub> H on Silica
IFP	Promoted H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> on Silica
Kerr McGee	AlCl <sub>3</sub>
Mobil	BF <sub>3</sub> & Zeolites
CR&L	SbF <sub>5</sub> on Silica
UOP	Zeolitic Catalyst (HAL <sup>TM</sup> 100)

In the case of a solid acid process, rapid passivation of the catalyst can occur, which would require continuous regeneration of the catalyst. The comparison with the heterophasic alkylation is presented in table A2.

Table A2 – Comparison of solid phase reactor concept with traditional acid catalysts

Performance Indicator	Units	Solid Catalyst	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> Catalyst	HF Catalyst
Alkylate selectivity	vol %	96	97	96
Expected RON	-	94 ÷ 97	95 ÷ 97	94 ÷ 96
Total volume reactor	m <sup>3</sup>	26 · 2 = 52	68	48
Catalyst inventory	m <sup>3</sup>	7 · 2 = 14	98	50
Catalyst separation	-	Not required	Tight emulsion	Tight emulsion
Catalyst regeneration	-	In situ (same place of equipment)	Ex situ (other plant)	In situ (other place of equipment)
Material of construction	-	Carbon Steel	Alloy 20	Monel

Regardless of the kind of acid catalyst used, the alkylation reactions mechanism follows the same pattern.

### 1.2 Alkylation reactions

Alkylation of isobutane with light (C<sub>3</sub>–C<sub>5</sub>) olefins in the presence of a strong acid catalyst involves a series of consecutive and simultaneous reactions occurring through carbocation intermediates (Figure A3). The addition of proton to an olefin, followed by hydride abstraction from iso-butane, leads to a t-butyl cation. The t-butyl cation then combines with an olefin (say, C<sub>4</sub>) to give the corresponding C<sub>8</sub> carbocation: These C<sub>8</sub> carbocations may isomerize via hydride transfer and methyl shifts to form more stable cations. These C<sub>8</sub> cations undergo rapid hydride transfer as iso-butane regenerates the t-butyl cation to perpetuate the chain sequence.

- Alkylation
  - ♦  $iC_4H_{10} + C_4H_8 \rightarrow iC_8H_{18}$
  - ♦ isobutane + butene  $\rightarrow$  iso-octane (alkylate)
- Polymerization
  - ♦  $n (C_4H_8) \rightarrow C_nH_{2n}$
  - ♦  $n$  (butene)  $\rightarrow$  oligomers
- Product Degradation
  - ♦  $iC_8H_{18} + C_4H_8 \rightarrow iC_{12}H_{26}$
  - ♦ Iso-octane + butene  $\rightarrow$  heavy paraffins

Figure A3 – Iso-paraffin alkylation reactions

Alkylation reactions are highly exothermic (on average  $75 \div 96$  kJ/mol), therefore heat removal is essential.

Unfortunately, these are not the only reactions occurring during alkylation. There are a number of secondary reactions that, in general, tend to reduce the quality of alkylate. The  $C_8^+$  can continue to react with olefins and form larger cations. The successive addition of olefins to carbocations, or olefin polymerization, is the primary route to formation of large hydrocarbon residue or «coke», leading to catalyst deactivation.

Figure A4 shows a simplified mechanism, as well as the influence of the main variables. In this figure, S stands for a Brønsted acid site.

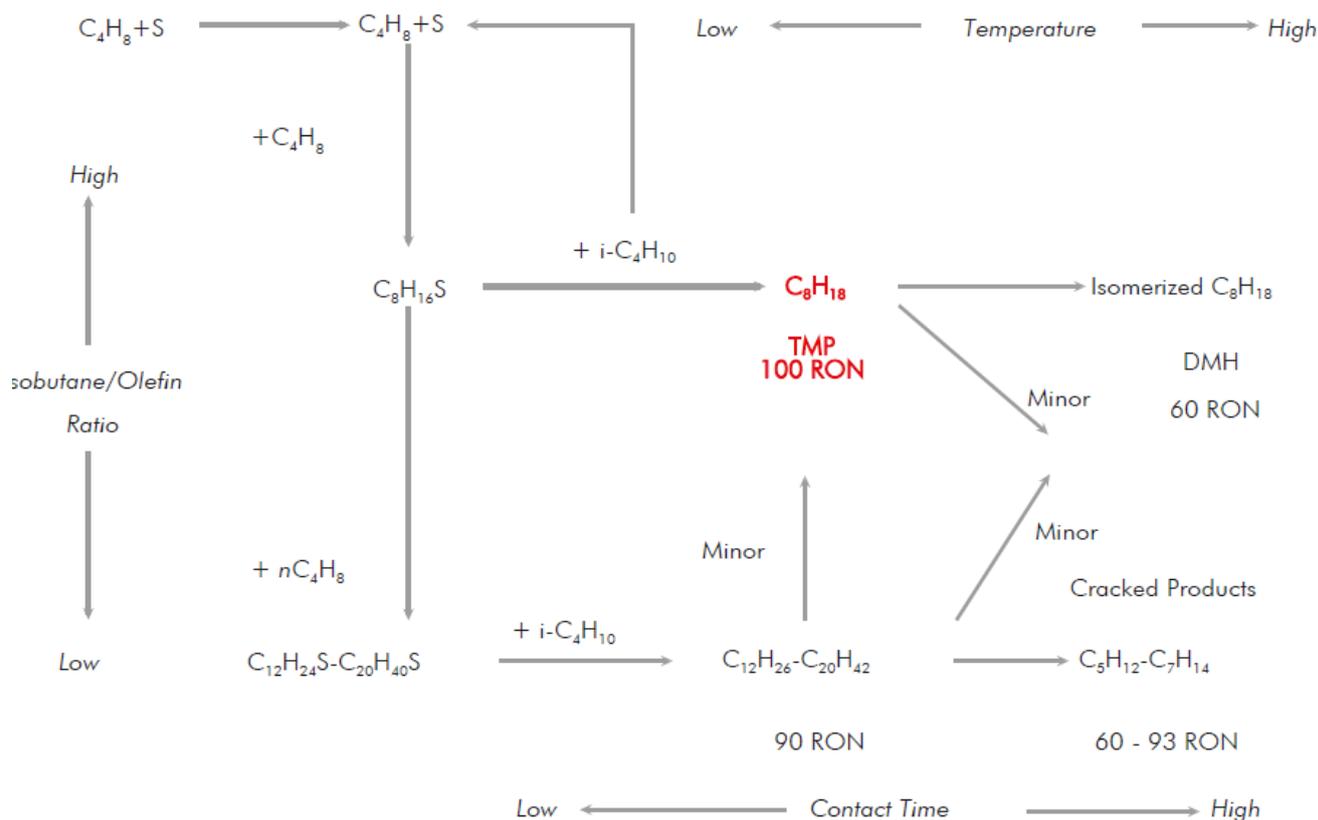


Figure A4 – Simplified alkylation mechanism

As it can be observed in figure A4, the formation of alkylate is favored at a high isobutane/olefin ratio, low temperature and short contact time. Moreover, since deactivation of the catalysis is one of the main concerns with solid acid catalyst, it would be desirable to operate under conditions that allow to reduce this problem. The optimal conditions for minimizing the deactivation would be achieved by using a catalyst with high acid site density, and at the same time by performing the alkylation reactions under low olefin concentration everywhere around the catalyst, in order to avoid olefin oligomerization.

Based on the weaknesses of liquid catalyst alkylation, and the considerations described above, a list of desired improvements and process needs was formulated, as follows:

- Avoid the use of a liquid acid as a catalyst;
- Minimize oligomerization reactions;
- Assure a high acid site density;

Assure a short contact time of the olefins with the catalyst (operation under kinetic control is preferred).

### 1.3 Problems with Solid-Acid Catalysts

#### 1.3.1 Catalyst activity

A catalytic process is not commercially viable unless the chemical transformation is achieved within practical limits of space-time yields. Economic necessities determine the lower limit for industrial catalysis – too long a reactor residence time will make the reactor costs too high. The upper limit is imposed by achievable rates of heat and mass transfer.

When one switches from a liquid-acid catalyzed process to one catalyzed by solid-acids, there is a significant decrease in the number of available acid sites. 1 gram of sulfuric acid contains roughly  $20 \cdot 10^{-3}$  moles of acid sites; 1 gram of solid acid catalysts (e.g. zeolite or promoted zirconia) on the other hand, contains at most  $10^{-3}$  moles of acid sites of which only 20 ÷ 30 % are strong enough to catalyze the alkylation reaction. In other words, there are 100 times more active acid sites in a gram of liquid-acid compared to a gram of solid-acid catalyst (Figure A5).

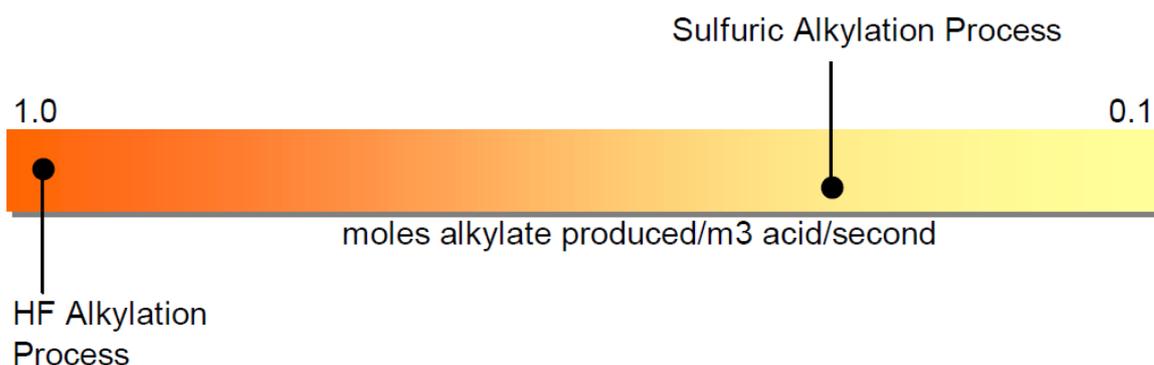


Figure A5 – Rates of reactions for industrial alkylation processes

This is the case for solid acid catalysts having very large surface areas (and hence small pores); the situation is worse with catalyst formulations having lower surface areas and larger pores. One can use a large excess of catalyst to compensate for the lower acid site density for solid acid catalysts – but that would greatly reduce

the space-time yields making it economically unattractive. This is one major reason why replacing liquid acids with solid-acid catalysts has proved to be so elusive a goal.

### **1.3.2 Catalyst Stability**

All liquid acids produce conjunct polymers as alkylation by-products. These polymers are called acid-soluble oil (ASO) or red oil. The oil is a complex mixture of unsaturated hydrocarbons having molecular weights in the range of 250 ÷ 300. They dilute the acid and thus lower the acid strength. In commercial scale operations, a small slip-stream of used acid has to be withdrawn and replenished by fresh acid.

In solid-acid catalysts, this polymer builds up on acid sites eventually blocking the catalyst pore mouth and deactivating the catalyst. Pore-mouth plugging typically occurs when the catalyst suffers from severe intra-particle diffusional limitations. The problem of rapid deactivation via pore-mouth plugging, leading to very short catalyst lifetimes (on the order of minutes), has prevented virtually every known solid-acid alkylation catalyst from being a commercially viable and environmentally superior alternative to conventional liquid-acid alkylation processes.

Increasing the pore size increases catalyst life, but affects the catalyst site density adversely. Decreasing the pore size increases the number of active sites per unit volume, and hence the initial activity, but leads to quicker plugging of the pores.

### **1.4 Process control parameters**

The SAC alkylation process developed by ABB and Akzo Nobel (Figure A6) employs a true solid acid catalyst, i.e., the catalytic acid function is intrinsic to the solid itself rather than being a separate species, such as an immobilized liquid deposited on a solid substrate.

As a result, there is no migration or leaching of any potentially corrosive acid from the SAC reactor system into any process or product stream. This new catalyst is similar to others widely used in the refining industry; it is non-toxic and does not require the use of any promoter or activation agent.

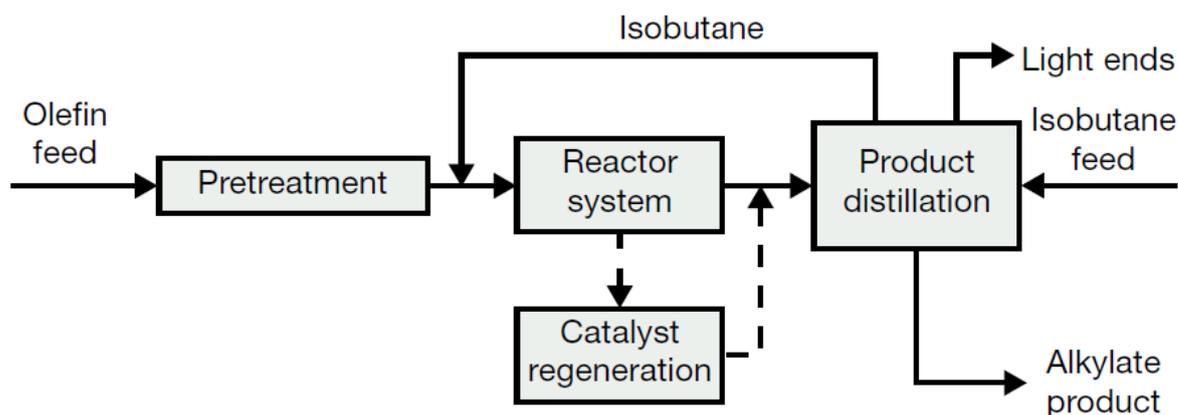


Figure A6 – Flow diagram of the SAC alkylation process

Consider the influence of the main control parameters on the example of this process.

#### 1.4.1 Temperature

The heart of the process is the reactor system. The SAC reactors operate in the liquid phase in the temperature range of  $40 \div 90$  °C, so there is no need for the costly refrigeration systems required for  $\text{H}_2\text{SO}_4$  reactors ( $4 \div 10$  °C). The operating temperature of the alkylation reactors is interrelated to the requirement for excess isoparaffin (eg, isobutane) in the reaction section. At higher temperatures and with lower excess isoparaffin, alkylate octane decreases.

#### 1.4.2 Isoparaffin/olefin (I/O)

To achieve a high octane alkylate and limit heavy hydrocarbon byproduct production,  $\text{H}_2\text{SO}_4$  units typically utilize a total reaction section feed I/O of between 8/1 and 10/1, while HF units run at an I/O of about 12/1 to 15/1.

In comparison, without any alkylate octane debit, the I/O for the SAC process is in the range of 8/1 to 10/1, comparable with the  $\text{H}_2\text{SO}_4$  process that operates at a significantly lower temperature. In addition, the SAC process does not produce a heavy polymeric byproduct stream, while both HF and  $\text{H}_2\text{SO}_4$  form acid-soluble oils (ASOs) with this material, which must be further treated for recovery of the dissolved and complexed acids.

### 1.4.3 Composition of the olefin feed stream

As Table A3 shows, the SAC technology appears to be less sensitive to feed olefin compositional variation than both liquid acids.

Table A3 – Impact of feed olefin on alkylate product octane

Feed olefin	SAC	HF	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
100% 2-butene	x	x	x
100% 1-butene	x	x – 6	x
35% isobutene	x – 0,5	x – 2	x – 7

Of the butene isomers, 2-butene generates the highest octane alkylate. For SAC and H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, increasing 1-butene relative to 2-butene had no measurable impact on product octane, indicating that 1-butene is isomerized to 2-butene.

HF does so also, but only to a limited extent. The table also shows the relative impact on octane of a feed olefin stream containing 35% isobutene.

### 1.4.4 Reaction time

As shown in the left-hand part of figure A7, the alkene is completely converted at the beginning of the experiment, i.e., as long as the catalyst is fresh. After a certain time-on-stream (about 30 min), the butene conversion begins to drop and finally stabilizes at a low level (in the example chosen at ca. 30%). It should be noted that the butene conversion into hydrocarbons with five or more carbon atoms was considered only in figure A7, i.e., the double-bond isomerization of 1-butene into cis- and trans-2-butene is not included.

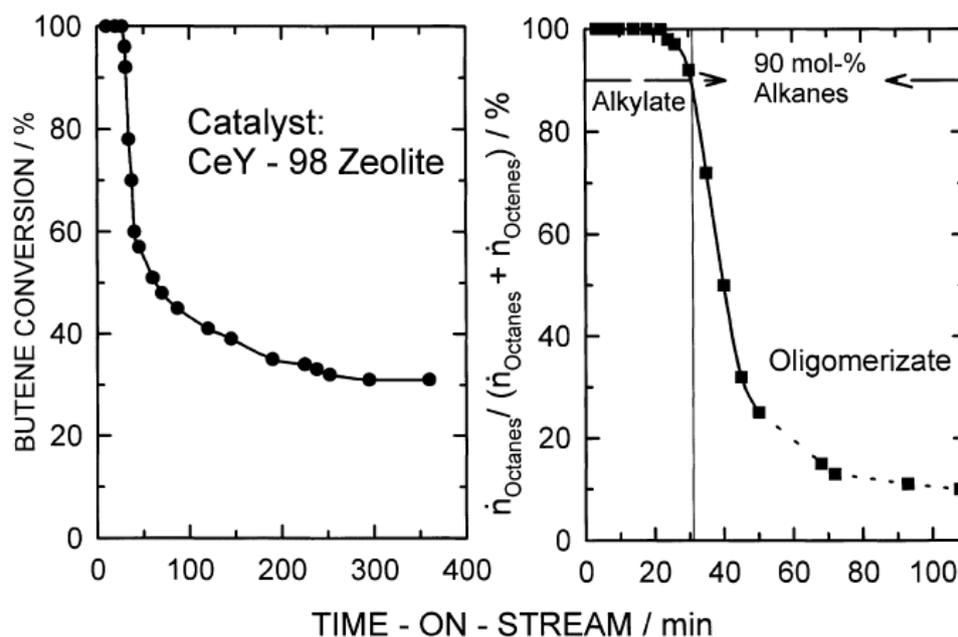


Figure A7 – Conversion of a liquid isobutane/1-butene mixture on a CeY-98 zeolite in a fixed-bed reactor ( $T = 808\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $p = 31\text{ bar}$ , liquid feed rate =  $7,5\text{ cm}^3/\text{h}$ , mass of catalyst =  $1,4\text{ g}$ ,  $n_{\text{isobutane}} / n_{\text{1-butene}} = 11 : 1$ ), after  $[13\pm 15]$

Probably much more serious than the loss of catalyst activity shown in the left-hand part of figure A7 is the loss of selectivity, as depicted for the same experiment in the right-hand part of the same figure: it can be easily seen that, initially, the  $\text{C}_8$  product fraction consists of alkanes exclusively. This is the region where an alkylate is formed on the zeolite. Approximately at the time, when the butene conversion begins to drop, the product quality deteriorates dramatically, and as shown for the  $\text{C}_8$  product fraction in figure A7, more and more alkenes are formed. Late in the experiment, no alkylation takes place any more, instead the zeolite catalyzes nothing else than the oligomerization of the butene.