

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

Институт природных ресурсов

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

Кафедра ХТТ и ХК

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Математическое моделирование процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами с учетом дезактивации катализатора

УДК 547.214:547.313:66.095.253:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К31	Ушаков Антон Сергеевич		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Научный сотрудник	Долганова Ирэна Олеговна	К.Т.Н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Немцова Ольга Александровна	-		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ХТТ и ХК	Юрьев Егор Михайлович	К.Т.Н.		

Томск – 2017 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ООП 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»)

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС ВПО, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Профессиональные компетенции</i>		
P1	Применять базовые математические, естественнонаучные, социально-экономические и специальные знания в профессиональной деятельности	Требования ФГОС (ПК-1,2,3,14,16,17,18), Критерий 5 АИОР (п.1.1)
P2	Применять знания в области энерго-и ресурсосберегающих процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии для решения производственных задач	Требования ФГОС (ПК-4,5,9,15 ОК-7), Критерий 5 АИОР (пп.1.1,1.2)
P3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии.	Требования ФГОС (ПК-4,5,8,11 ОК-2,4), Критерий 5 АИОР (пп.1.2)
P4	Проектировать и использовать энерго-и ресурсосберегающее оборудование химической технологии, нефтехимии и биотехнологии	Требования ФГОС (ПК-8,11,23,24), Критерий 5 АИОР (п.1.3)
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области энерго-и ресурсосберегающих процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии	Требования ФГОС (ПК-1,4,5,19-22, ОК-7,10), Критерий 5 АИОР (п.1.4)
P6	Осваивать и эксплуатировать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.	Требования ФГОС (ПК-6,7,10,12,13,14,17 ОК-3,4,8), Критерий 5 АИОР (п.1.5)
<i>Общекультурные компетенции</i>		
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1,2,6-10), Критерий 5 АИОР (пп.2.4,2.5)
P8	Самостоятельно учиться непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-6,7,8), Критерий 5 АИОР (2.6)
P9	Владеть иностранным языком на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-11), Критерий 5 АИОР (п.2.2)
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.	Требования ФГОС (ОК-3,4,5,12), Критерий 5 АИОР (пп.1.6, 2.3)

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

Институт природных ресурсов

Направление подготовки (специальность) «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»

Кафедра ХТТ и ХК

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой

(Подпись)

(Дата)

Юрьев Е.М.
(Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

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

Студенту:

Группа	ФИО
2К31	Ушакову Антону Сергеевичу

Тема работы:

Математическое моделирование процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами с учетом дезактивации катализатора	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	31.01.2017, №420/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01.06.2017
--	-------------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	Установка сернокислотного алкилирования изобутана олефинами 25/12. Сырьем для установки служит бутан-бутиленовая фракция (ББФ) установок предприятия, содержащая около 50 % олефинов и изобутановая фракция установки ГФУ 2. Режим работы – непрерывный. Установка сернокислотного алкилирования предназначена для производства алкилбензина по технологии лицензированной американской фирмой “СТРАТКО”. Производительность установки составляет 300 тысяч тонн алкилбензина в год.
--	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	1.Задача исследования: выполнить исследования и установить влияние основных параметров процесса (расход сырья, расход катализатора, концентрация серной кислоты и др.) на выход и октановое число алкилата 2.Объект исследования: промышленный процесс сернокислотного алкилирования изобутана олефинами 3.Методика исследования: метод математического моделирования 4.Программа исследования 4.1 Литературная часть (тема и содержание реферата): современное технологическое и аппаратное оформление процесса алкилирования изобутана олефинами, новые катализаторы, опыт моделирования 4.2 Экспериментальная часть: выполнить расчеты по модели основных показателей процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами и учесть дезактивацию катализатора 4.3 Обработка результатов: анализ сводных таблиц, построение графиков и выдача рекомендаций об эффективности работы промышленной установки
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	Результаты исследования (графики, таблицы)
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент кафедры менеджмента, к.э.н., Рыжакина Татьяна Гавриловна
Социальная ответственность	Ассистент кафедры ЭБЖ, Немцова Ольга Александровна
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	31.01.2017
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Научный сотрудник	Долганова Ирэна Олеговна	к.т.н.		31.01.2017

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К31	Ушаков Антон Сергеевич		31.01.2017

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

Студенту:

Группа	ФИО
2К31	Ушаков Антон Сергеевич

Институт	Электронного обучения	Кафедра	ХТТнХК
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Энерго- и ресурсосберегающие процессы химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Использование информации, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах и изданиях, нормативно-правовых документах</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Проведение предпроектного анализа. Выполнение SWOT-анализа.</i>
2. <i>Определение возможных альтернатив проведения научных исследований</i>	<i>Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.</i>
3. <i>Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	<i>Разработан календарный план проекта. Определён бюджет НИИ</i>
4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	<i>Спроектирована конкурентоспособная разработка, отвечающая требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>

Перечень графического материала(с точным указанием обязательных чертежей):

1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i> 2. <i>Матрица SWOT</i> 3. <i>График проведения НИИ</i> 4. <i>Определение бюджета НИИ</i> 5. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ</i> 6. <i>Сравнительная эффективность разработки</i>
--

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К31	Ушаков Антон Сергеевич		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2К31	Ушакову Антону Сергеевичу

Институт	ИПР	Кафедра	ХТТ и ХК
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объект исследования – сернокислотное алкилирование изобутана олефинами Область применения – нефтехимическая промышленность.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Производственная безопасность 1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности: – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты; – (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства). 1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности: – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты);	1.1 Анализ вредных факторов: 1.1.1 Утечка токсичных и вредных веществ; 1.1.2 Повышенный уровень шума; 1.1.3 Повышенный уровень вибраций; 1.1.4 Отклонение показателей микроклимата на открытом воздухе; 1.1.5 Недостаточная освещенность рабочей зоны. 1.2 Анализ опасных факторов: 1.2.1 Электробезопасность; 1.2.2 Аппараты, работающие под давлением; 1.2.3 Движущиеся машины и механизмы; 1.2.4 Пожарная безопасность.

– электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).	
2. Экологическая безопасность: – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.	Основными загрязнителями атмосферы на производстве являются пары серной кислоты и щелочи. Повышения экологической безопасности можно достигнуть путем снижения выбросов во время эксплуатации за счет использования улучшенных фильтрационных и очистительных сооружений.
3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях: – перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.	Возникновение ЧС, требующих обеспечение электро- и пожаровзрывобезопасности на рабочем месте. Перечень возможных ЧС: - пожар; - взрыв; - розлив продуктов/компонентов производства; Для обеспечения безопасной эксплуатации установки предусмотрена рациональная технологическая схема с комплексной автоматизацией технологического процесса, позволяющая обеспечить его непрерывность и стабильную работу оборудования. Предусмотрено отключение электрооборудования со щита операторной. ГОСТ Р 22.3.03-94 «Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Защита населения. Основные положения».
. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:	К нормативным актам, регулирующим вопросы охраны труда, в первую очередь относится Трудовой кодекс Российской

– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	Федерации. Для обеспечения безопасности на рабочем месте необходимо руководствоваться санитарными нормами и правилами. Для снижения вредного воздействия химических факторов работникам производства выдается молоко питьевое в количестве 0,5 литра за смену для выведения из организма токсических веществ.
---	---

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры ЭБЖ	Немцова Ольга Александровна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К31	Ушаков Антон Сергеевич		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 105 стр., 18 рис., 36 табл., 42 источника литературы, 3 приложения.

Ключевые слова: алкилирование изобутана олефинами, алкилбензин, изооктан, сернокислотное алкилирование, нестационарная математическая модель, кинетическая модель, термодинамический анализ, оптимизация, компьютерная моделирующая система.

Объектом исследования является установка сернокислотного алкилирования.

Целью данной работы стала разработка нестационарной математической модели сернокислотного алкилирования изобутана олефинами, учитывающей влияние катализаторных примесей.

В работе выполнен термодинамический и кинетический анализ реакций, протекающих в реакторе алкилирования изобутана олефинами, детально изучен и описан механизм дезактивации катализатора, разработана нестационарная математическая модель процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.

Основной метод, применяемый в работе – метод математического моделирования. Модель объекта строилась с учетом физико-химических закономерностей протекания процесса.

Степень внедрения: полученные результаты положены в основу компьютерной моделирующей системы процесса сернокислотного алкилирования, апробированной на промышленной установке.

Областью применения модели является нефтехимическая промышленность.

Дипломная работа выполнена в текстовом редакторе Microsoft® Office Word 2013.

Оглавление

Реферат.....	11
Введение.....	15
Глава 1. Обзор литературы	17
1.1 Процессы производства компонентов автомобильных бензинов.....	17
1.2 Обзор современных катализаторов процесса алкилирования изобутана олефинами.....	19
1.3 Гомогенные катализаторы алкилирования.....	20
1.3.1 Современные технологии сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом.....	22
1.3.1.1 Организация внутреннего устройства реакторов сернокислотного алкилирования.....	24
1.4 Гетерогенные катализаторы алкилирования.....	26
1.4.1 Современные технологии твердокислотного алкилирования изобутана бутиленом.....	27
Глава 2 Объект и методы исследования.....	31
2.1 Химизм процесса.....	31
2.2 Сырьё процесса алкилирования.....	34
2.3 Основные технологические параметры процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинам.....	34
2.3.1 Концентрация изобутана в реакционной зоне.....	34
2.3.2 Температура в реакционной зоне.....	35
2.3.3 Давление в реакционном контуре.....	35
2.3.4 Объемный расход олефинов.....	35
2.3.5 Концентрация кислоты и насыщенность ею смеси в реакторе.....	35
2.4 Принципиальная схема процесса алкилирования.....	36
Глава 3 Экспериментальная часть.....	38
3.1 Определение термодинамических параметров реакций алкилирования.....	38
3.2 Составление математической модели процесса сернокислотного алкилирования.....	42
3.2.1 Кинетическая модель процесса.....	43
3.2.2 Математическая модель реактора алкилирования.....	46

3.3 Моделирование работы промышленной установки сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом с использованием разработанной компьютерной моделирующей системы.....	47
3.3.1 Влияние примесей на состав и октановое число алкилата.....	47
3.4 Учет нестационарности математической модели.....	49
3.4.1 Кинетическая модель дезактивация серной кислоты.....	50
Глава 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	54
4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	54
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	54
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	56
4.1.3 SWOT-анализ.....	57
4.1.4. Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	59
4.2 Планирование работы.....	59
4.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ).....	59
4.3.1 Расчет материальных затрат НТИ.....	59
4.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных экспериментальных) работ.....	60
4.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы.....	60
4.3.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы.....	62
4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	63
4.3.6 Расчет затрат на научные и производственные командировки.....	64
4.3.7 Накладные расходы.....	64
4.3.8 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта.....	65
4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	66
Глава 5 Социальная ответственность.....	69
5.1 Анализ вредных факторов на рабочем месте.....	70
5.1.1 Утечка токсичных и вредных веществ.....	71
5.1.2 Повышенный уровень шума.....	74
5.1.3 Повышенный уровень вибраций.....	74

5.1.4 Отклонение показателей микроклимата на открытом воздухе.....	75
5.1.5 Недостаточная освещенность рабочей зоны.....	75
5.2 Анализ опасных факторов.....	76
5.2.1 Электробезопасность.....	76
5.2.2 Сосуды, работающие под давлением.....	77
5.2.3. Движущиеся машины и механизмы.....	77
5.2.4 Пожарная безопасность.....	79
5.3 Охрана окружающей среды.....	81
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	82
5.5 Правовые вопросы обеспечения безопасности.....	82
Заключение.....	84
Список публикаций.....	86
Список использованных источников.....	87
Приложение.....	92

Введение

В нынешнее время в связи с ужесточением общемировых требований к качеству топлива увеличилось количество процессов, которые повышают степень переработки нефти, а значит и способствуют увеличению октанового числа бензинов. В нашей стране это является особенно актуальным потому, что на значительной части нефтеперерабатывающих заводов глубина переработки все же составляет 70-75% [1]. При увеличении глубины переработки возрастают запасы газов, производимых на заводе. Основными среди них являются олефины, которые как раз задействованы в процессе алкилирования изобутана.

Алкилирование изопарафинов олефинами является одним из важнейших процессов российской нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности. Продукт данного процесса, алкилат, является одним из основных компонентов товарного бензина. Основные достоинства алкилата это высокое октановое число (до 96 по исследовательскому и до 92 по моторному методу), отсутствие сернистых примесей, бензола, низкое давление насыщенных паров. Благодаря именно этим показателям алкилат имеет преимущество по сравнению с остальными бензинами, однако доля его в товарных бензинах крайне невелика. Например, в России этот показатель составляет меньше одного процента, общемировой – около 8 процентов. Бесспорный лидер по внедрению алкилата – США, где доля эта составляет 13 процентов и продолжает непрерывно расти [2].

В связи с вышеизложенным, можно сделать вывод, что углубленное исследование процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами является одним из наиболее приоритетных в современной нефтеперерабатывающей промышленности.

Для комплексного исследования влияния наиболее важных параметров на процессы нефтепереработки и нефтехимии самым подходящим является метод математического моделирования. Он позволяет с минимальными затратами спроектировать наиболее приближенную к реальной установку. Данный метод имеет ряд существенных преимуществ над методом физического моделирования.

Целью данной работы является разработка и анализ математической модели, ее чувствительность к расходу и составу сырья, а также её нестационарность, которая выражается в изменении активности катализатора при влиянии на него различных технологических параметров.

Глава 1 Обзор литературы

Впервые процесс алкилирования изобутана олефинами был открыт советскими учеными из Государственного института высоких давлений в 1932 г. Катализаторами данного процесса были кислоты Льюиса: AlCl_3 , BF_3 , которые были промотированы HCl [3]. Данное открытие стало началом исследований по поиску наиболее оптимальных катализаторов и реакторных устройств.

В настоящее время в качестве жидкофазных катализаторов данного процесса используется серная и фтороводородная кислота, а также твердокислотные катализаторы. Несмотря на положительные стороны использования данных катализаторов (низкая стоимость, легкое поддержание активности), кислоты имеют и ряд отрицательных свойств. Высокая коррозионная активность, высокая токсичность не позволяет применять их повсеместно, поэтому существует общемировая тенденция поиска и перехода от жидких катализаторов к твердым [4].

Данный раздел содержит в себе информацию по различным типам используемых на настоящий момент катализаторов (жидко- и твердофазных), устройству реакторных пространств установок сернокислотного алкилирования, а также технологии получения алкилата и способах процесса алкилирования.

1.1 Процессы производства компонентов автомобильных бензинов

В связи с возрастающими потребностями увеличения производства нефтепродуктов, а также использовании этих продуктов в более широком спектре человеческой деятельности, вопрос об ограничении добычи нефти становится все более насущным. Решение кроется в наиболее рациональной эксплуатации нефтяных месторождений, а также в более глубокой степени переработки нефтяного сырья, при которой объемы непереработанного сырья будут значительно меньше нынешних показателей.

В России вопрос производства моторных топлив реализуется с помощью трех основных процессов: каталитического риформинга, каталитического крекинга, а также изомеризации. Также в состав товарного продукта входит продукт первичной переработки нефти – прямогонный бензин, отделяемый на установках атмосферной перегонки.

Прямогонная бензиновая фракция содержит в себе около 65% парафинов, большинство из которых – это н-парафины, 25% нафтенов и около 10% ароматики [4]. Из этого можно сделать вывод, что октановое число данной фракции крайне низко, она не соответствует требованиям товарного продукта [6]. Для повышения октанового числа бензиновой фракции, а также бензины коксования и термокрекинга.

Каталитический риформинг занимает ведущее место в производстве высокооктановых бензинов. Кроме того, продуктом установок каталитического риформинга является водородсодержащийся газ (ВСГ), который в дальнейшем используется в различных других гидрокаталитических процессах, таких как гидроочистка широкого спектра нефтяных фракций или каталитический крекинг, без которых на сегодняшний день немыслимо обеспечение глубокой переработки нефти, а также сырье для последующей нефтехимической переработки – бензол, толуол, ксилолы.

Несмотря на, казалось бы, существенный плюс в виде большого октанового числа, одним из главных минусов его является высокая канцерогенность, получаемая за счет присутствия большого количества (около 60%) ароматических соединений, которую, безусловно, необходимо снижать. В источнике [7] говорится, что для соблюдения требований экологических стандартов Евро-4 и Евро-5, массовая доля ароматических углеводородов не должна превышать 35 процентов.

Каталитический крекинг – процесс термокаталитической переработки нефти, целью которого является получение высокооктановых компонентов бензина, а также легких и тяжелых газойлей и непредельных углеводородных газов, например, бутан-бутиленовой фракции, являющейся сырьем для процесса алкилирования. Каталитический крекинг также является одним из важнейших процессов получения товарного бензина. Однако по сравнению с каталитическим риформингом тоннаж продуктов данного процесса весьма невелик. Доля данного компонента в производстве составляет около 23% [8]. В результате данного процесса происходит расщепление молекул тяжелых углеводородов с получением более легких фракций – керосиновой, бензиновой. Октановое число, по сравнению

с каталитическим риформингом, не так велико и равно около 90 пунктов по исследовательскому методу. Общее содержание ароматики в нем не более 40%, бензола - не более 1% [9]. Однако, основным недостатком процесса является то, что в составе бензина каталитического крекинга находится большое количество непредельных углеводородов (15-20%), а также серы (до 0,5%). [10]

Бензин-изомеризат является гораздо менее крупнотоннажным, чем бензины двух основных процессов, о которых было сказано выше. Основное его назначение – разбавлять бензин каталитического риформинга, так как ОЧ изомеризата колеблется в районе от 80 до 90 пунктов. Механизм данного процесса включает в себя дегидрирование парафина нормального строения, затем его протонирование, изомеризацию, депротонирование и гидрирование. Сырьем процесса является нефтяная фракция н.к.-62оС, а также рафинаты катриформинга – н-С₅H₁₂ и н-С₆H₁₄. Положительной стороной данного компонента для компаундирования является его экологическая чистота.

Кроме вышеперечисленных крупнотоннажных бензинов в состав товарного продукта входят различные другие октаноповышающие добавки, такие, как МТБЭ, ТАМЭ, ММА, спирты. Их используют предприятия, на которых глубина переработки не позволяет получать экологически чистые разветвленные парафины. Однако, в настоящее время контроль присутствия в товарных бензинах кислородсодержащих соединений ужесточился, и суммарное количество данных соединений не должно составлять более 2%. [8].

Таким образом, итогом всего вышесказанного является то, что исследуемый в данной работе алкилбензин наиболее полно отвечает экологическим требованиям, и в будущем вовлечение его в более крупных объемах в производство товарных бензинов может стать вполне осуществимым.

1.2 Обзор современных катализаторов процесса алкилирования изобутана олефинами

В настоящее время в промышленности используются различные катализаторы процессов алкилирования. Основные из применяемых в рассматриваемой технологии описаны в данной работе более подробно.

1.3 Гомогенные катализаторы алкилирования

Первыми катализаторами алкилирования были жидкие кислоты – серная и фтороводородная, а также хлорид алюминия. Их исследование [11] велось учеными с 30-ых годов XX в. по недавнее время, внимание уделялось в основном аппаратурному оформлению, позволяющему смягчить отрицательное влияние катализаторов на среду, в которой они находятся, среди которых будут, например, низкая селективность, коррозионная активность, трудность разделения продуктов реакции.

Таблица 1 - Основные физико-химические свойства кислот

Катализатор	H ₂ SO ₄	HF
Плотность при 20°C, кг/м ³	1836,5 (98%) 1830 (100%)	980(при 12 °C) 954 (при 25 °C)
Температура плавления, °C	0,1(98%) 5,7 (99%) 10,4 (100%)	-83,4
Температура кипения, °C	332,4 (98%) 296,2 (100%)	19,4
Вязкость, мПа·с	24,5 (при 25 °C) 33,0 (при 15 °C)	0,53 (при 0 °C)
Поверхностное натяжение, Н/м	55·10 ⁻³ (при 20 °C)	10,1·10 ⁻³ (при 0 °C) 8,6·10 ⁻³ (при 18 °C)
Диэлектрическая постоянная	114 (при 20 °C)	86 (при 0 °C) 60 (при 19 °C)
Функция кислотности Гаммета	-12,2 (100%) -9,85 (95%) -8,92(92%)	-10,2 (100%) -8,9 (98%)
Массовая растворимость изобутана при 26,6 °C, %	0,100 (99,5%) 0,070 (98,7%) 0,040 (96,5%)	2,7 (100%, при 13 °C)

Неоспоримым плюсом фтороводородной кислоты является способность растворить больше изобутана, чем серная кислота, на 1-2 порядка. Соответственно, скорость реакции при данном катализаторе выше, отношение изобутан:олефины будет большим, а, значит, общая доля побочных реакций будет меньше.

Приведем пример жидкокислотного алкилирования (катализатор процесса HF), описанный в патенте [12].

Процесс выполняли в охлаждаемом реакторе периодического действия с постоянным отводом тепла, образующегося по причине экзотермичности реакции. Внутри реактора встроены мешалки. Смесь линейных альфа-олефинов смешивали

с сухим бензолом, затем смесь нагревали до определенной температуры. Следующая стадия – ввод HF до заранее выбранного мольного соотношения сырье:катализатор. Продолжительность самой реакции – 10 минут. В таблице 2 представлены рабочие условия реакции алкилирования.

Таблица 2 - Рабочие условия реакции алкилирования

Катализатор	HF
Температура реакции, °C	60
Время реакции, мин	10
Объемное отношение HF/олефин	1
Молярное отношение изобутан/олефин	10

В источнике [13] приводится описание процесса с использованием как фтороводородной, так и серной кислот. Принципиальная схема процесса включает в себя реакционный блок, блок фракционирования, регенерации кислоты и регенерации щелочи. Также в данном источнике говорится, что процесс алкилирования с использованием фтороводородной кислоты осуществляется легче благодаря температурному режиму, характерному для данной кислоты. При использовании HF температура внутри реактора должна поддерживаться на отметке 25-40°C, тогда как сернокислотное алкилирование следует проводить в температурных пределах от 6 до 13 градусов.

Также в источнике [13] указывается и основной недостаток HF-алкилирования – высокая токсичность и коррозионная активность, поэтому наиболее вероятный и правильный путь дальнейшего развития процесса алкилирования должен быть направлен на замену жидкого катализатора твердым. Например, раскрывается алкилирование изобутана пропиленом или бутеном в реакторе-стояке (riser-reactor), то есть в реакторе с вертикальной трубой с псевдоожиженным слоем твердого катализатора. Эффлюент из такого реактора-

стояка содержит желаемый алкилированный продукт. Твердый катализатор отделяют от эффлюента и отправляют на регенерацию.

В патенте [14] описывается способ усовершенствования реакционной зоны в при HF-алкилировании. Он включает в себя предварительное смешение потока изопарафинов с катализатором из отстойника при небольшой нагрузке насосов. После смешения поток идет в реактор-стояк, куда также подается поток олефинов. Далее происходит сама реакция и разделение на 2 фазы: углеводородную и кислотную. Кислотная фаза уходит через предусмотренный снизу клапан, а углеводороды – на разделение на непрореагировавшие изопарафины и продукт.

Авторы работы [4] говорят, что фтористоводородное алкилирование характеризуется оптимальным сочетанием экономичности процесса и состава продукта именно благодаря реакторному устройству, сырье для которого проходит 2 этапа очистки, температуре, при которой не требуется затрат на дополнительное охлаждение, а также тесному контакту сырья и катализатора.

В источнике [15] был проведен анализ работы секции 3000 комплексной установки алкилирования (КУА), в результате которого было установлено, что температура действительно очень сильно влияет на процесс. При ее повышении с 28 до 35°C происходит уменьшение ОЧИ на 1,1, а ОЧМ на 0,7 пунктов. Также повышенный режим проведения процесса сказывается на конце кипения алкилата, что может говорить о нахождении в нем нежелательных высококипящих фракций.

1.3.1 Современные технологии сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом

Рассмотрим ниже процессы алкилирования в присутствии серной кислоты.

В данном процессе серная кислота является не только катализатором, но и дисперсионной средой, в которой растворено углеводородное сырье. Именно этим и объясняется огромный расход кислоты на расчете на одну тонну алкилата – 160 кг [5]. Исходя из этого, можно сделать вывод, что процесс является низкоэффективный. Основываясь на данных источника [16], основные реакции данного процесса протекают в кислотной фазе, так как невозможно существование ионов в углеводородной фазе в виду ее малой полярности. Так как растворимость

алкенов в кислоте много больше растворимости изобутана, процесс невозможно проводить в кинетической области, а скорость будет зависеть от поверхности раздела фаз.

В патенте [17] описан способ проведения процесса алкилирования изобутановой фракции бутан-бутиленовой фракцией в присутствии концентрированной серной кислоты последовательно в двух реакционных устройствах, в которых осуществляется перемешивание, а также последующее разделение продуктов реакции, непрореагировавшего сырья и катализатора. Происходит это сначала в первом реакционном устройстве, откуда в дальнейшем удаляется балансовая часть кислоты с последующим ее возвращением на вход в первое реакционное устройство. Продукты и оставшуюся часть кислоты направляют параллельными потоками во второе реакционное устройство, куда также подают бутан-бутиленовую фракцию, расход ББФ составляет 1-3 м³/ч на 1 м³ катализатора. После этого смесь продукта, избытка изобутана и кислоты направляют на гидроциклон, в котором происходит разделение УВ- и кислотной фаз. Кислотную фазу направляют в отстойную зону первого реакционного устройства, а углеводородную – на окончательное разделение с кислотной фазой и изобутаном.

Современные промышленные технологии сернокислотного алкилирования обладают следующими серьезными недостатками [3,18]:

- а) низкая селективность (выход триметилпентанов не превышает 65 мас. %);
- б) большой расход кислоты (до 160 кг/т алкилата);
- в) высокая кислотность получаемого алкилата и связанная с этим необходимость большого расхода щелочных реагентов;
- г) получаемый алкилат, как правило, содержит большое количество легких углеводородов, которые являются легколетучими и выделяются в окружающую среду, а также большое количество «тяжелых» углеводородов C₉ - C₁₂, что понижает октановые характеристики моторного топлива;

- е) из-за низкой растворимости изобутана в кислоте следует создать эффективное перемешивающее устройство, однако, по окончании стадии

образования алкилата эмульсию необходимо разрушить; процесс разрушения эмульсии протекает медленно, для ускорения приходится использовать аппараты с большей зоной отстаивания.

В патенте [19] описан один из вариантов устройства реактора сернокислотного алкилирования с внутренним автоматическим охлаждением. В нижней части реактора расположен вход для хладагента, серной кислоты и несколько параллельных входов для олефинового сырья, расположенных на одинаковом расстоянии. Поток реагентов проходит путь, взаимодействуя последовательно с перегородками в реакционных зонах. Перегородки взаимодействуют с роторным смесителем с множеством лопастных колец для обеспечения перемешивания. Выходы для испаренного хладагента и реакционного потока предусмотрены на верхней части сосуда. В процессе алкилирования углеводородный реагент/хладагент (жидкий парафин) и серная кислота входят в нижнюю часть и направляются одним потоком, куда в дальнейшем поступают олефины, клапаны ввода которых расположены друг от друга на одинаковом расстоянии. Реакционная смесь протекает через ряд последовательно расположенных реакционных зон внутри реактора, где и происходит более тщательное перемешивание изопарафина с кислотным катализатором.

В силу экологических и технологических недостатков гомогенных катализаторов алкилирования в мире наметилась тенденция отказа от жидких кислотных систем и перевода процессов алкилирования на твердые кислотные катализаторы.

1.3.1.1 Организация внутреннего устройства реакторов сернокислотного алкилирования

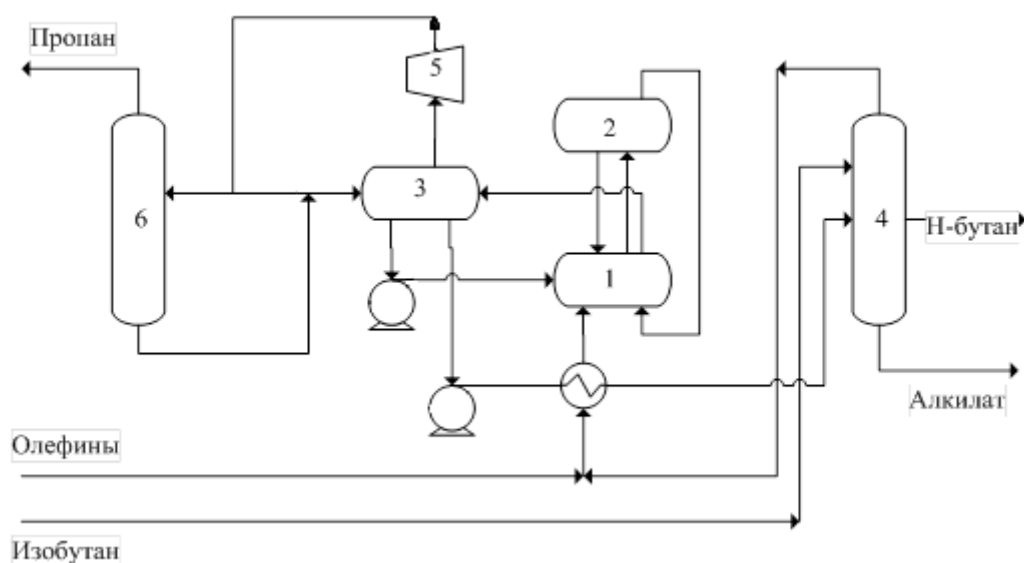
Так как реакция алкилирования изобутана олефинами является экзотермической, необходимо организовать эффективную систему охлаждения. Обычно она организуется одним из двух способов:

- 1) выделяющееся тепло отводится через внутреннюю поверхность теплообмена; в качестве хладагентов – аммиак, пропан;

2) выделяющееся тепло поглощается путем испарения компонентов реакции, например, изобутана или пропана, в самом реакторе; данная организация теплоотвода не требует наличие поверхности теплообмена.

Одной из наиболее распространенных технологий производства алкилбензина в присутствии серной кислоты является продукция компании DuPont. Реактор-контактор технологии STRATCO представляет собой горизонтальный аппарат, работающий под давлением и содержащий внутреннюю циркуляционную трубу, трубный пучок для съема теплоты реакции алкилирования и крыльчатку для смешивания углеводородного сырья и серной кислоты. Исследовательское октановое число алкилата, выпущенного по этой технологии, равно 95 пунктам.

Рисунок 1 – Схема установки сернокислотного алкилирования компании DuPont: 1 – реактор-контактор; 2 – отстойник; 3 – сепаратор; 4 – деизобутанизатор; 5 – компрессор; 6 – пропановая колонна



Технологическая схема установки СКА, изготовленная и выпущенная ГК РАН, представлена на рисунок 2.

Рисунок 2 – Технология сернокислотного алкилирования ГК РАН



Реактор алкилирования является струйным, в нем происходит эффективное перемешивание эмульсий. Данная технология [20] уже на протяжении 15 лет используется на установке 25/7 нефтеперерабатывающего завода ОАО «Славнефть-ЯНОС». Основными преимуществами данной разработки являются компактность реактора и отсутствие в нем перемешивающих устройств.

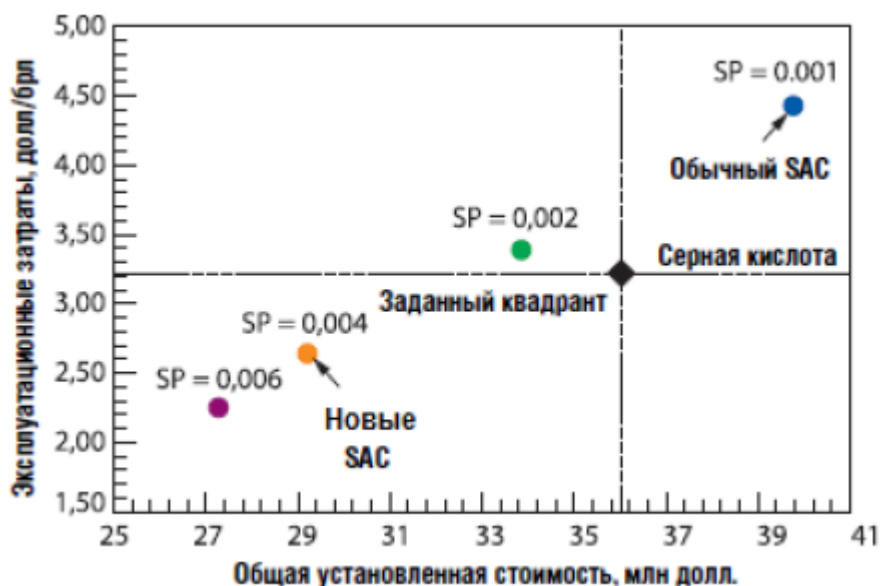
1.4 Гетерогенные катализаторы алкилирования

Современные процессы гетерогенного алкилирования тесно связаны с использованием нанесенных кислотных каталитических комплексов или твердых кислотных катализаторов. Остановимся более подробно на основных видах гетерогенных катализаторов.

В настоящее время активно изучаются цеолитсодержащие катализаторы процессов алкилирования, созданные на основе цеолита, обладающие высокой кислотностью, а также хорошей термической стабильностью. В твердокатализаторном алкилировании [21] одним из главных параметров является стабильность катализатора, выражаемая параметром стабильности SP. Для большего распространения цеолитных катализаторов этот параметр должен быть

не менее 0,0018, как у серной кислоты. Затраты на катализаторы для разных значений SP вы можете увидеть ниже.

Рисунок 3 – Эксплуатационные и капитальные затраты для разных значений параметра стабильности



1.4.1 Современные технологии твердокислотного алкилирования изобутана бутиленом

В течение последних 20 лет разработаны и с успехом эксплуатируются в промышленности установки парофазного алкилирования в присутствии цеолитсодержащих катализаторов на основе цеолита типа ZSM-5 [22].

Известны характеристики цеолитсодержащих катализаторов по типу связующего звена. Связанные с этим работы приведены в источнике [23], где представлена информация, полученная в ходе проведенных исследований, о цирконосиликатных связующих, представляющих значительный интерес для процессов алкилирования на цеолитах с целью повышения селективности катализатора, а также стабильности его работы.

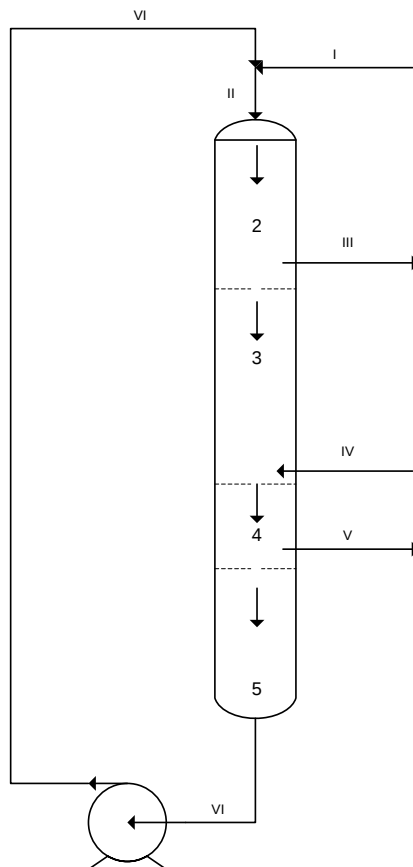
В патенте [24] описан способ получения алкилбензина на катализаторах следующего состава: $Al_2O_3:SiO_2=7,0:2,8$; Na_2O с массовой долей 0,26-0,8%; $PtO_2/PdO_2/ReO_2$ с долей 0,2-2,0%, а также оксид редкоземельного металла с массовой долей 2-20%. В источнике [24] также описаны 2 способа получения катализатора, один из которых состоит в том, то цеолит сначала обрабатывают

водными растворами солей кальция, редкоземельного элемента и аммония при повышенной температуре до тех пор, пока цеолит не перейдет в редкоземельный кальциевый цеолит. Затем его промывают, сушат, прокаливают, в результате чего получается таблетированный редкоземельный кальциевый цеолит с нанесенным на него $\text{PtO}_2/\text{PdO}_2/\text{ReO}_2$. Пример одного из катализаторов: Na_2O - 0,6; La_2O_3 - 12,1; CaO - 3,0; Re_2O_7 - 2,0; $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{SiO}_2$ - остальное ($\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3=4$). В результате, активность катализатора повышается до 100%, селективность по изооктанам до 76% и выход целевого продукта на 10-15% масс.

На сегодняшний день целый ряд фирм разработали собственные процессы, в основу которых положено алкилирование на твердокислотных катализаторах. Так, фирма «Санойл» [25] разработала процесс в присутствии гранулированного алюмосиликата типа Linde, располагающегося в реакторе слоями (обычно 5). Параметры процесса: $t=100$ °C, $P=35$ атм, $\text{ОСПС}=2$ ч⁻¹, соотношение изобутан:бутен=6:1. Процесс ведут следующим образом. Поток сырья вводят перед первым слоем катализатора. Продукты после первого слоя делят на 2 потока, один из которых смешивается с новой порцией олефинов и идет на рецикл, а другой проходит через последующие слои. Данный способ обеспечивает выход алкилата до 50% (по олефиновому сырью).

Для того, чтобы регенерация цеолитного катализатора обеспечивалась непрерывно, фирмой UOP был придуман процесс [26] с имитацией движения неподвижного слоя катализатора. Схему процесса можно увидеть на рисунок 4.

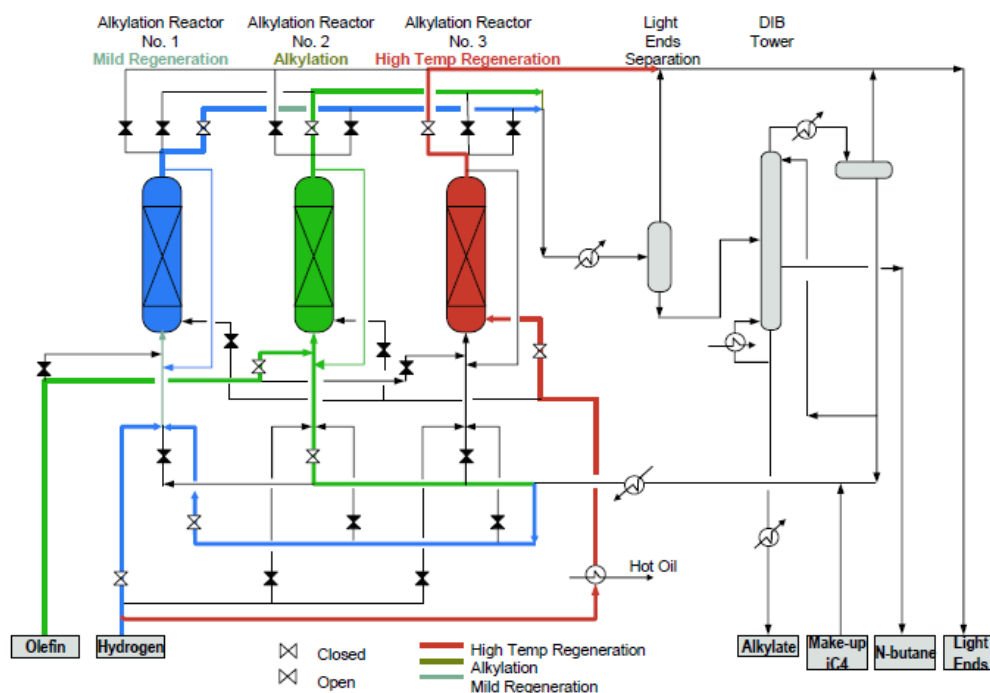
Рисунок 4 – Технологическая схема алкилирования изобутана бутенами с имитированием псевдоожиженного слоя цеолитного катализатора. Потоки: I – реагенты; II, VI – рециркулят; III, V – продукт; IV – очищенный катализатор. Зоны: 2,4 – реакторные зоны; 3,5 – зоны отстаивания.



Процесс протекал в реакторе с 4-мя секциями. Смесь изобутан:бутен-1 = (30-100):1 смешивали с рециркулятом и вводили в виде нисходящего потока в реакционную секцию 2. Температура процесса 66-121 оС, давление 10-50 атм., ОСПС(бутены)=0,1-100 ч⁻¹. Общее время цикла составляло 10-600 минут, после чего изменялось функциональное использование секций реактора, тем самым и имитируя движение слоя цеолитного катализатора в потоке реагентов.

На нынешнем рынке технологий вторичной переработки нефтяного сырья фирма CB&I предлагает процесс AlkyClean [27], позволяющий получать алкилбензин с ОЧИ=96 пунктов. Сырье – также изобутан и олефины C3-C5.

Рисунок 5 – Технологическая схема установки AlkyClean.



Технологическая схема включает в себя 4 основных секции: блок подготовки сырья, реакционный блок, блок регенерации катализатора и блок разделения продуктов алкилирования. Олефиновое сырье очищается и вместе с изобутаном поступает в реактор, температура в котором варьируется от 50 до 90°C. Во время регенерации катализатора подпитка олефинами прекращается, и в реактор подают H_2 для устранения из реактора диссоциированного водорода, что способствует минимизации тепловых и материальных потерь.

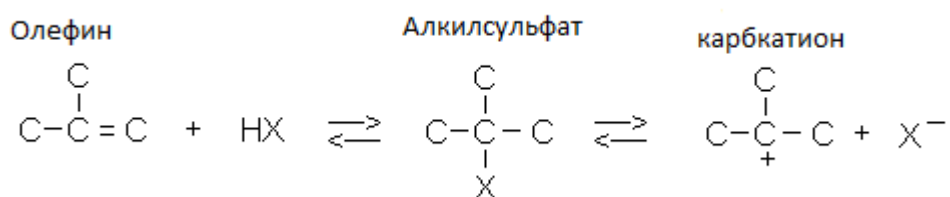
Глава 2. Объект и методы исследования

2.1 Химизм процесса

Реакция С-алкилирования представляет собой взаимодействие олефинов С3-С5 с изобутаном в присутствии сильных кислот. Несмотря на то, что алкилирование можно проводить и при высоких температурах, коммерчески более выгодным является именно использование серной или фтороводородной кислоты. Алкилирование – процесс сложный, продуктом являются большое количество веществ (от 75 до 150 компонентов), что говорит о широте интервала кипения получаемого алкилбензина. Процесс алкилирования позволяет получать моторное топливо с ОЧИ=90-98 и ОЧМ=88-95. Тепловой эффект данного процесса составляет около 90 кДж/моль, поэтому необходимо наличие эффективного охлаждения, что и обеспечивается реактором-контактором STRATCO с помощью технологии охлаждения реакционного пространства за счет испарения части продуктов и непрореагировавшего сырья.

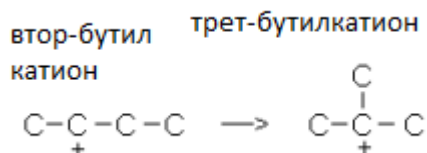
Считается, что алкилирование изобутана олефинами протекает через ряд последовательных и параллельных стадий. Ниже данный механизм будет рассмотрен постадийно [28].

1. Первая стадия – присоединения протона кислоты к олефину с получением трет-бутильного карбкатиона через образование алкилсульфата.

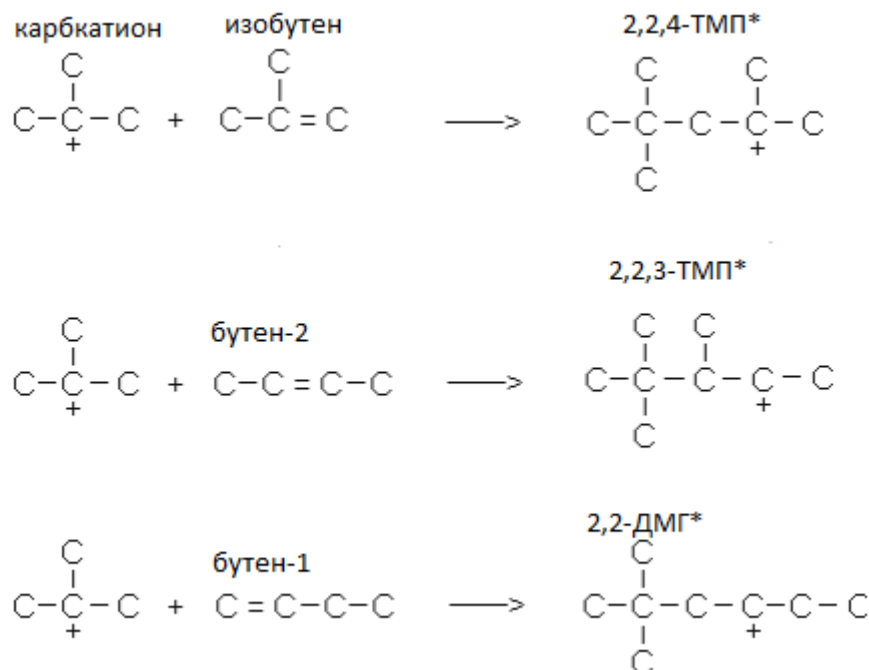


Алкилсульфат, образованный из пропилена, является более стабильным, чем из бутилена или амилена:

Трет-бутильный карбкатион образуется в результате перестроения из молекулы вторичного бутильного карбкатиона:



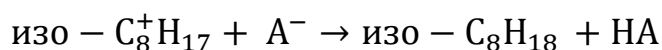
2. Вторая стадия – трет-бутильный карбокатион присоединяется к олефину с образованием соответствующего изооктила:



3. Третья стадия – передача иона от изобутана к изооктилу. Таким образом организуется цепной механизм реакции:

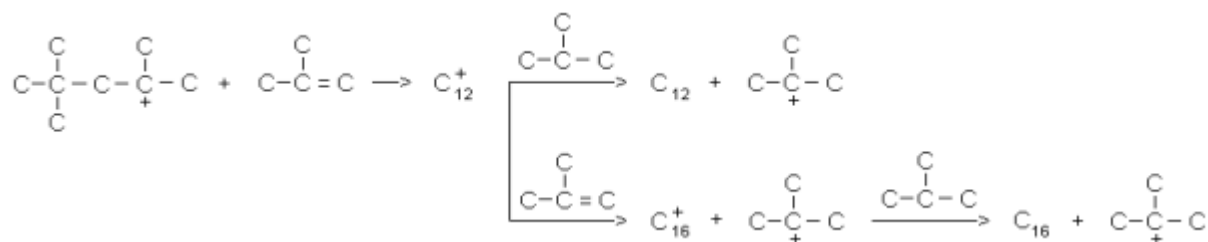


4. Обрыв цепи происходит при передаче протона от изооктила кислотному аниону:



Кроме перечисленных реакций также имеют место и побочные, нежелательные реакции. Они ухудшают качество алкилата, а также дезактивируют катализатор.

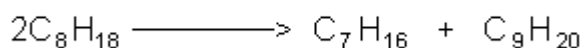
5. Полимеризация. Данная реакция является результатом присоединения олефина к изооктил-иону, образованному на 2-ой стадии. Ион C_{12}^+ может



продолжить присоединять молекулы олефина, формируя в конце катионы C_{12}^+ , C_{16}^+ и т.д.

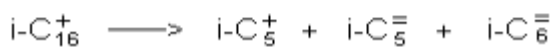
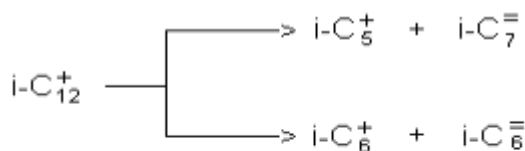
Также данные катионы C_{12}^+ , C_{16}^+ , C_{20}^+ и т.д. могут реагировать с изобутаном, образуя алкилсульфаты огромной молекулярной массы, в результате чего увеличивается расход серной кислоты.

6. Диспропорционирование. Результатом данной реакции зачастую

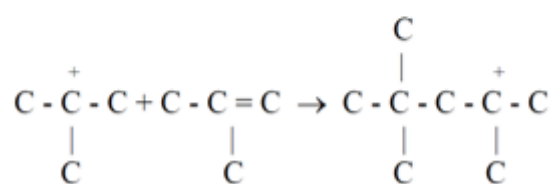
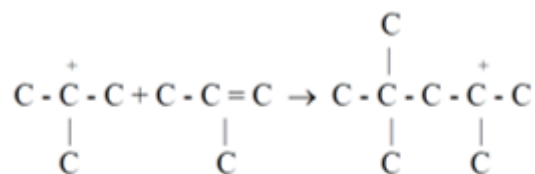
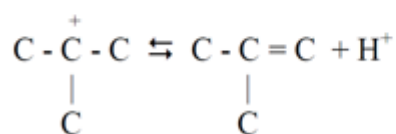
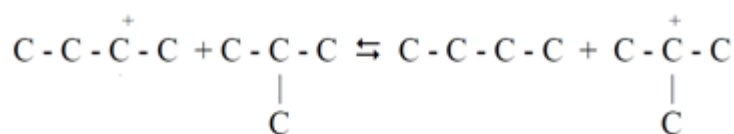


являются 2 углеводорода, имеющие на 1 атом углерода больше и на 1 меньше, чем у исходного УВ.

Также, в результате разложения полимерных длинноцепочечных алканов может образоваться смесь алканов и алкенов.



7. Автоалкилирование (самоалкилирование). Суть данной реакции заключается в Н-переносе от изобутана ко вторичному бутилу, образованному на 1-ой стадии, в результате чего образуются вещества с низким ОЧ, а также повышается расход изобутана.



Характерна данная реакция при большом соотношении изобутан:олефины.

2.2 Сырье процесса алкилирования

Сырьем процесса алкилирования является ППФ (пропан-пропиленовая), ББФ (бутан-бутиленовая) и ПАФ (пентан-амиленовая) фракции с установки каталитического крекинга, а также изобутан установок газодифракционного разделения. Наибольшее распространение получило использование изобутана с ББФ. Более точный покомпонентный состав приведен в таблице А1 приложения А.

2.3 Основные технологические параметры процесса сернокислотного изобутана олефинами

2.3.1 Концентрация изобутана в реакционной зоне

Для того, чтобы в реакторном пространстве протекали именно те реакции, которые способствуют получению требуемых компонентов продукта, необходимо поддерживать высокую концентрацию изобутана. Низкое отношение I/O (i-butane:olefins) ведет к увеличению вероятности реакции полимеризации, и, как результат, низкому октановому числу и образованию большого количества ASO (высокомолекулярные вещества). Стандартное отношение I/O должно держаться в

районе от 5:1 до 10:1. Сырье, состоящее из ПАФ и ББФ более чувствительно к соотношению I/O, чем ППФ-сырье.

2.3.2 Температура в реакционной зоне

При использовании сернокислотного катализатора температура колеблется от 4 до 13°C. Увеличение температуры неблагоприятно, так как на первое место выходят реакции полимеризации и окисления углеводородов. При температуре ниже 4°C увеличивается унос кислоты с продуктом, ниже 2°C – увеличиваются затраты на перемешивание углеводородно-кислотной эмульсии в реакторе.

2.3.3 Давление в реакционном контуре

Давление поддерживается на уровне, необходимом для пребывания компонентов реакции в жидкофазном состоянии.

2.3.4 Объемный расход олефинов

Объемный расход определяется как объем олефинов, подаваемых в час, деленный на средний объем серной кислоты в реакторе-контакторе. Обычно данный показатель изменяется в пределах 0,25 – 0,5 ч⁻¹. В общем случае, увеличение объемной скорости приводит к увеличению расхода серной кислоты и уменьшению октанового числа. Более того, тепловой эффект будет слишком велик, и избавиться от данного негативного последствия будет довольно сложно.

2.3.5 Концентрация кислоты и насыщенность ею смеси в реакторе

В рассматриваемом процессе алкилирования в качестве катализатора используют 90-98% серную кислоту. Кислота с меньшим показателем крепости кислоты делает более вероятными реакции полимеризации, с более высоким – увеличивает реакции сульфирования.

Причин для понижения концентрации кислоты, как принято считать, две:

1. В результате накопления в ней ASO (эфир, высокомолекулярные углеводороды);
2. В следствие разбавления кислоты водой и иными примесями, попадающими в реактор с сырьем.

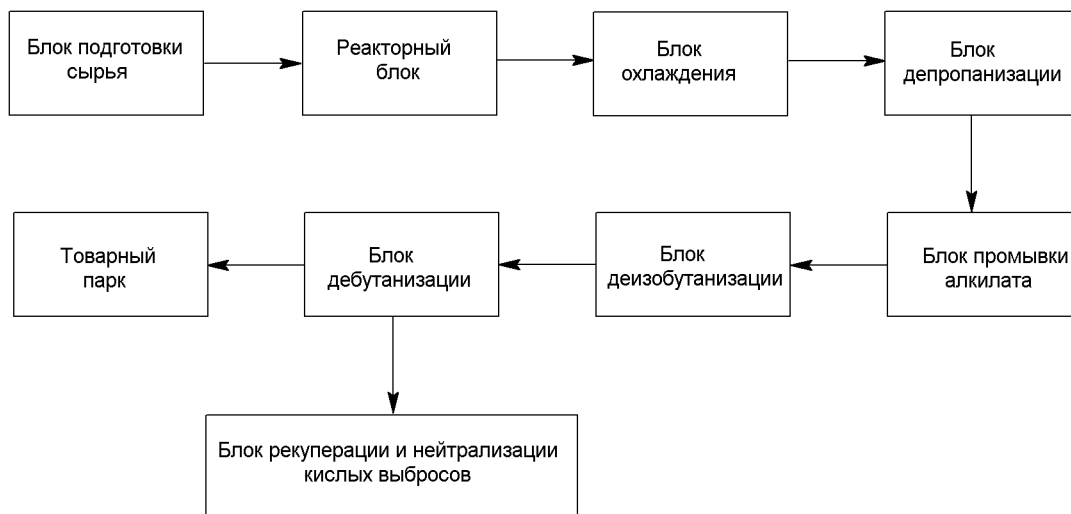
Известно, что один килограмм меркаптанов и H_2S в сырье способен разбавить 65 килограмм кислоты с концентрацией 98 % до 90%, а 1 кг H_2S – 11 кг кислоты до такой же концентрации.

Так как серная кислота является дисперсионной средой, в которой растворение изобутана довольно невелико, необходимо организовывать тщательное перемешивание эмульсии. Соотношение кислота:углеводороды в эмульсии должно быть на уровне (1,0-1,1):1,0. Повышение отношения нецелесообразно, так как будет увеличиться нагрузка на перемешивающее устройство, понижение неблагоприятно сказывается на качестве алкилбензина.

2.4 Принципиальная схема процесса

Принципиальная схема установки сернокислотного алкилирования показана на рисунке 6.

Рисунок 6 - Принципиальная схема установки сернокислотного алкилирования



Блок подготовки сырья необходим для очистки сырья, идущего с установки каталитического крекинга от механических примесей и воды.

В реакторном блоке осуществляются основные процессы превращения сырья в продукт.

Блок охлаждения предназначен для отделения от продуктов реакции изобутана и пропана с целью их возврата и компремирования и последующего охлаждения эмульсии в контакторах.

Блок депропанзации представляет собой ректификационную колонну для отделения пропана, играющего роль хладагента.

Блок промывки необходим для очистки алкилата щелочью, а затем водой от кислотных и нейтральных эфиров с целью предотвращения корродирования оборудования.

Блок деизобутанизации предназначен для отделения от сырого алкилата непрореагировавшего изобутана и его возвращения в контакторы и систему охлаждения.

Блок дебутанизции предназначен для разделения смеси алкилата и н-бутана.

Глава 3 Экспериментальная часть

Математическое моделирование является удобным инструментом оптимизации работы промышленных установок.

Но такие задачи позволяют решить лишь математические модели, разработанные с учетом термодинамических и кинетических закономерностей реакторных процессов, так как именно они остаются чувствительными к изменению состава сырья и эксплуатационных свойств катализаторов. Математическое моделирование процесса включает в себя следующие этапы: проведение подробного термодинамического анализа многокомпонентного химического процесса, формализация механизма превращений углеводородов, составление формализованной схемы превращений веществ.

Задачей данной работы являлась разработка математической модели процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами, учитывающей влияние присутствия воды и образование ASO в реакторе-контакторе.

3.1 Определение термодинамических параметров реакций алкилирования

В настоящее время развитие компьютерного и программного обеспечения позволяет широко использовать в численном моделировании электронной и атомной структур сложных систем методы квантовой химии. Существует огромный выбор программных продуктов, позволяющих реализовать методы квантовой химии и молекулярной динамики, однако, сложность использования данных компьютерных систем не позволяет широкой аудитории производить данные расчеты. Среди множества таких комплексов необходимо выделить программный пакет GAUSSIAN, использующий современную теорию электронного строения молекул [29].

С помощью методов квантовой химии возможно, прогнозировать различные свойства молекул и особенности реакций, например, энергию и структуру молекулы, энергию и структуру переходных состояний, энергии связи и энергетические характеристики реакций, молекулярные орбитали, мультипольные моменты, атомные заряды и электростатические потенциалы, частоты колебаний,

ИК спектры, спектры ядерного магнитного резонанса, поляризуемость и гиперполяризуемость, термодинамические свойства, механизмы реакций.

Существует три класса методов расчета электронной структуры молекул:

- полуэмпирические, такие как AM1, MINDO/3 и PM3, представленные в таких программах, как MOPAC, AMPAC, HyperChem, GAUSSIAN и др., использующие параметры, полученные из экспериментальных данных для упрощения вычислений. При этом уравнение Шредингера решается с определенными приближениями, использующими подходящие параметры исследуемых систем. Разные методы характеризуются разными наборами параметров;

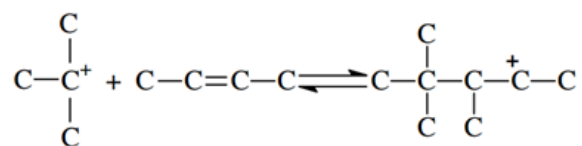
- неэмпирические, не использующие в расчетах параметры, полученные экспериментально. Расчеты в данном методе основываются только на законах квантовой механики и на небольшом наборе физических констант, таких как скорость света, масса и заряд электрона и ядра, постоянная Планка.

- класс электронно-структурных методов: методы, основанные на теории функционала плотности. DFT (DFT–Density Functional Theory) вычисления требуют такого же количества компьютерных ресурсов, как и вычисления по Хартри-Фоку. Основной особенностью, которая отличается от других методов, является учет модели DFT эффекта электронной корреляции, иначе говоря, то, что, взаимодействуя друг с другом, электроны отталкиваются.

В данной работе описанные квантово-химические методы расчета использовались для оценки таких термодинамических функций, таких как энтальпия, энтропия и энергия Гиббса. Для расчета термодинамических функций молекул использовался метод DFT, содержащий процедуру B3LYP-21.

Используя квантово-химические расчеты, проведена оценка термодинамики и кинетики переходных состояний основных реакций сернокислотного алкилирования.

Первичной реакцией, приводящей к образованию октильных карбкатионов, является реакция между бутильным карбениевым ионом и бутиленом:



Для переходного состояния данной реакции были определены термодинамические и кинетические параметры:

Таблица 3 – Рассчитанные термодинамические характеристики переходного состояния 2,3,3-ТМП иона

$\epsilon_0 + H_{\text{corr}}$, Хартри	$\epsilon_0 + G_{\text{corr}}$, Хартри	S, кал/(моль·К)
0,458026	0,418666	87,275

Здесь $\epsilon_0 + H_{\text{corr}}$, $\epsilon_0 + G_{\text{corr}}$, S – соответственно энтальпия, свободная энергия и энтропия переходного состояния.

Таблица 4 – Рассчитанные термодинамические и кинетические характеристики активации переходного состояния 2,3,3-ТМП иона

$\Delta H^\ddagger$, Хартри	$\Delta H^\ddagger$, кДж/моль	$\Delta G^\ddagger$, Хартри	$\Delta G^\ddagger$, кДж/моль	$\Delta S^\ddagger$, кал/моль*К	$\Delta S^\ddagger$, Дж/моль*К	[K _{ТАК}]
-0,001907	-5,006828	0,336286	882,918765	-35,563	-148,895168	$4,56 \cdot 10^4$

Здесь $\Delta H^\ddagger$, $\Delta G^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$, [K_{ТАК}] – соответственно энтальпия, свободная энергия, энтропия, константа скорости активации

Содержание различных изооктанов в алкилате определяется скоростью изомеризации октильных карбкатионов, поэтому очень важно знать их кинетические и термодинамические параметры.

Первоначально образовавшийся на стадии роста цепи вторичный 2,2,3-триметилпентил карбокатион подвергается дальнейшим превращениям:

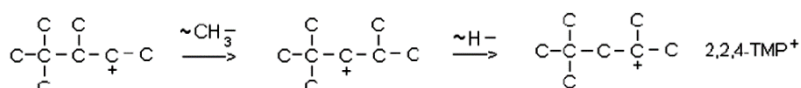
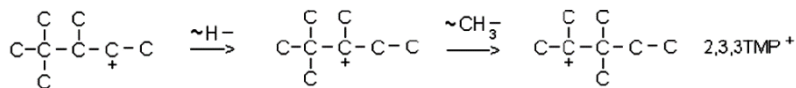
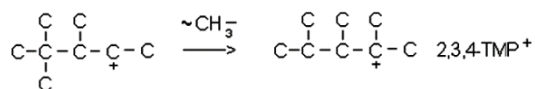


Таблица 5 – Параметры активации переходного состояния для 2,3,4-ТМП⁺

$\varepsilon_0 + H_{\text{corr}}$, Хартри	$\varepsilon_0 + G_{\text{corr}}$, Хартри	S, кал/(моль·К)
0,474898	0,434214	90,21

Таблица 6 – Параметры активации переходного состояния для 2,3,4-ТМП⁺

$\Delta H^\ddagger$, Хартри	$\Delta H^\ddagger$, кДж/моль	$\Delta G^\ddagger$, Хартри	$\Delta G^\ddagger$, кДж/моль	$\Delta S^\ddagger$, кал/моль *К	$\Delta S^\ddagger$, Дж/моль *К	[K _{ТАК}]
0,048301	126,814257	0,336286	882,9187652	-35,563	-148,895168	$4,56 \cdot 10^4$

Образование 2,3,3-ТМП⁺ и 2,2,4-ТМП⁺ происходит в две стадии (гидридный и метильный 1,2 переход), что соответствует двум переходным состояниям:

Таблица 7 – Параметры активации переходного состояния для 2,3,3-ТМП⁺

№ переходного состояния	$\varepsilon_0 + H_{\text{corr}}$, Хартри	$\varepsilon_0 + G_{\text{corr}}$, Хартри	S, кал/(моль·К)
1(гидридный переход)	0,434299	0,393767	89,873
2(метильный переход)	0,447752	0,407293	89,711

Таблица 8 – Параметры активации переходного состояния для 2,3,3-ТМП⁺

№ переходного состояния	$\Delta H^\ddagger$, Хартри	$\Delta H^\ddagger$, кДж/моль	$\Delta G^\ddagger$, Хартри	$\Delta G^\ddagger$, кДж/моль	$\Delta S^\ddagger$, кал/ моль*К	$\Delta S^\ddagger$, Дж/м оль*К	[K _{ТАК}]
1(гидридный переход)	0,007702	20,2215 98	0,009363	24,582552	-3,683	-15,41998	$1,25 \cdot 10^{12}$

2(метильный переход)	0,035216	92,4595 9462	0,035633	93,5544279 6	-0,925	-3,87279	$3,87 \cdot 10^{12}$

Таблица 9 – Параметры активации переходного состояния для 2,2,4-ТМП⁺

№ переходного состояния	$\varepsilon_0 + H_{\text{сорт}},$ Хартри	$\varepsilon_0 + G_{\text{сорт}},$ Хартри	S, кал/(моль·К)
1(метильный переход)	0,45924	0,41813	91,154
2(гидридный переход)	0,404302	0,362811	91,999

Таблица 10 – Параметры активации переходного состояния для 2,2,4-ТМП⁺

№ переходного состояния	$H^\ddagger,$ Хартри	$\Delta H^\ddagger,$ кДж/моль	$\Delta G^\ddagger,$ Хартри	$\Delta G^\ddagger,$ кДж/моль	$\Delta S^\ddagger,$ кал/моль* К	$\Delta S^\ddagger,$ Дж/моль* К	[K _{ТАК}]
1(метильный переход)	0,032 643	85,7041 84	0,033726	88,547600	-2,402	-10,056694	$2,09 \cdot 10^{12}$
2(гидридный переход)	- 0,029 527	- 77,5231 27	- 0,028925	-75,942577	-1,335	-5,589378	$3,46 \cdot 10^{12}$

Из квантово-химических расчетов следует, что содержание 2,3,3-триметилпентана, 2,3,4-триметилпентана, 2,2,4-триметилпентана относится как 1,00:1,11:1,67, что подтверждается экспериментальными данными.

3.2 Составление математической модели процесса сернокислотного алкилирования

При составлении математической модели такого сложного химического процесса, как алкилирование, нет объективной необходимости и технической возможности учитывать превращения всех индивидуальных компонентов.

3.2.1 Кинетическая модель процесса

На основании анализа экспериментальных данных, а также по результатам проведения термодинамических и кинетических расчетов была разработана математическая модель процесса алкилирования изобутана олефинами. Формализованная схема превращений веществ в процессе, представлена на рисунке Б1 приложения Б. Кинетические параметры реакций представлены в таблице Б1 приложения Б, термодинамические – в таблице Б2 приложения Б.

В приведенной формализованной схеме учтены химические превращения углеводородов сырья с образованием таких индивидуальных компонентов, как триметилпентаны, диметилгексаны и диметилбутаны. В то же время, углеводороды, содержание которых в продуктовой смеси реактора алкилирования мало и вклад в величину октанового числа алкилата незначителен, были объединены в группы.

Для определения кинетических и термодинамических параметров реакций, а также для установления параметров процесса дезактивации серной кислоты использовался метод теории функционала плотности (DFT) на уровне B3LYP. Уровень B3LYP является наивысшим среди уровней DFT, а базисный набор был выбран таким образом, чтобы сохранить управляемость расчетов, но при этом не снизить точность описания физической ситуации.

Для учета физико-химических свойств серной кислоты необходимо задать в данном методе такие параметры, как статическая(ϵ_{ps}) и оптическая(ϵ_{psinf}) диэлектрические проницаемости; для серной кислоты они равны соответственно 101 и 2,042.

На основании разработанной формализованной схемы превращений была составлена кинетическая модель.

$$W_{19} = k_{19} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}}$$

Разработанная кинетическая модель процесса включает уравнения покомпонентного материального баланса. Уравнения кинетической модели согласно формализованной схеме превращений веществ имеют вид:

Реагенты:

$$\begin{aligned} \frac{dC_{\text{изобутан}}}{d\tau} = & -k_1 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_2 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_3 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} \\ & - k_4 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_5 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_6 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} \\ & - k_7 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_8 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{изобутилен}} - k_9 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{изобутилен}} \\ & - k_{10} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{изобутилен}} - k_{11} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_{12} \cdot C_{\text{изобутан}} \\ & \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_{13} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_{14} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_{15} \\ & \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_{16} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_{17} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}} - k_{18} \\ & \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}} - k_{19} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}} - k_{20} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{изобутилен}} - k_{21} \\ & \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_{22} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_{23} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}} - k_{25} \\ & \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_{26} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{\text{бутилен-1}}}{dt} = & -k_1 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_2 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_3 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} \\ & - k_{11} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_{12} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_{13} \cdot C_{\text{изобутан}} \\ & \cdot C_{\text{бутилен-1}} - 2 \cdot k_{21} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_{25} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} - k_{26} \\ & \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{\text{бутилен-2}}}{d\tau} = & -k_4 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_5 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутелен-2}} - k_6 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутелен-2}} \\ & - k_7 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_{14} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - k_{15} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} \\ & - k_{16} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} - 2 \cdot k_{22} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутелен-2}} - 2 \cdot k_{23} \cdot C_{\text{изобутан}} \\ & \cdot C_{\text{пропилен}} \end{aligned}$$

$$\frac{dC_{\text{пропилен}}}{d\tau} = -k_{17} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}} - k_{18} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}} - k_{19} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}}$$

Целевые продукты:

$$\frac{dC_{2,2,4-\text{ТМП}}}{d\tau} = k_1 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} + k_4 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}} + k_5 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot$$

$$C_{\text{бутелен-2}} + k_8 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{изобутилен}}$$

$$\frac{dC_{2,3,3-\text{ТМП}}}{dt} = k_2 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} + k_5 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутелен-2}} + k_9 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{изобутилен}}$$

$$\frac{dC_{2,3,4-\text{ТМП}}}{dt} = k_3 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} + k_6 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутелен-2}} + k_{10} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot$$

$$C_{\text{изобутилен}}$$

$$\frac{dC_{2,2,3-ТМП}}{d\tau} = k_7 \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}}$$

Побочные продукты:

$$\frac{dC_{2,5-ДМГ}}{d\tau} = k_{13} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} + k_{16} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}}$$

$$\frac{dC_{\text{изопентан}}}{d\tau} = k_{21} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} + k_{22} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутелен-2}}$$

$$\frac{dC_{2,3-ДМГ}}{d\tau} = k_{11} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} + k_{14} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}}$$

$$\frac{dC_{\text{И-9}}}{d\tau} = k_{17} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}} + k_{26} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}}$$

$$\frac{dC_{2,4-ДМГ}}{d\tau} = k_{12} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} + k_{15} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-2}}$$

$$\frac{dC_{\text{И-10}}}{d\tau} = k_{24} \cdot C_{\text{изобутитен}} \cdot C_{\text{изогексан}}$$

$$\frac{dC_{\text{И-11}}}{d\tau} = k_{21} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} + k_{22} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутелен-2}}$$

$$\frac{dC_{\text{изогексан}}}{d\tau} = k_{23} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}} - k_{24} \cdot C_{\text{изобутитен}} \cdot C_{\text{изогексан}}$$

$$\frac{dC_{2,2-ДМП}}{d\tau} = k_{17} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}}$$

$$\frac{dC_{2,3-ДМП}}{d\tau} = k_{18} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}}$$

$$\frac{dC_{2,4-ДМП}}{d\tau} = k_{19} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}}$$

$$\frac{dC_{2,2,3,3-ТМБ}}{d\tau} = k_{20} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{изобутилен}}$$

$$\frac{dC_{4-МНонан}}{d\tau} = k_{23} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{пропилен}}$$

$$\frac{dC_{2-МГ}}{d\tau} = k_{25} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}} + k_{26} \cdot C_{\text{изобутан}} \cdot C_{\text{бутилен-1}}$$

С начальными условиями: при $\tau=0$ $C_i(0)=C_{i,0}$, где i – соответствующий углеводород.

3.2.2 Математическая модель реактора алкилирования

Математическое описание процесса в реакторе включает в себя кинетическую и гидродинамическую составляющие. Принимая допущение, что гидродинамика контактора алкилирования описывается моделью идеального смешения, можно представить математическую модель реактора в следующем виде для i -го вещества:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{\tau}(C_{i,0} - C_{i,1}) \mp W_i,$$

где τ — время контакта, сек., C_i — концентрация i -го компонента, W_i — скорость реакции по i -му компоненту, t — время.

Будем использовать квазигомогенную модель реактора.

Так, например, уравнение материального баланса для изобутана имеет вид:

$$\frac{dC_{\text{изобутан}}}{dt} = \frac{1}{\tau}(C_{\text{изобутан},0} - C_{\text{изобутан},1}) - W_1 - W_2 - W_3 - W_4 - W_5 - W_6 - W_7 - W_8 - W_9 - W_{10} - W_{10} - W_{11} - W_{12} - W_{13} - W_{14} - W_{15} - W_{16} - 2W_{17} - 2W_{18} - W_{19}$$

Уравнение теплового баланса реактора алкилирования запишется следующим образом:

$$\rho^{\text{см}} C_p^{\text{см}} \frac{dT}{dt} = \rho^{\text{см}} C_p^{\text{см}} \frac{1}{\tau}(T_0 - T) + Q_1 W_1 + Q_2 W_2 + Q_3 W_3 + Q_4 W_4 + Q_5 W_5 + Q_6 W_6 + Q_7 W_7 + Q_8 W_8 + Q_9 W_9 + Q_{10} W_{10} + Q_{11} W_{11} + Q_{12} W_{12} + Q_{13} W_{13} + Q_{14} W_{14} + Q_{15} W_{15} + Q_{16} W_{16} + Q_{17} W_{17} + Q_{18} W_{18} - KF(T - T_{\text{хл}})$$

где Q_j — тепловой эффект химической реакции, W_j — скорость химической реакции, C_p — мольная теплоемкость реакционной смеси, Дж/К·моль, ρ — плотность смеси, кг/м³, T — температура, К.

Разработанная математическая модель была реализована в виде прикладной программы в среде Delphi, основное диалоговое окно представлено на рисунке Б3 приложения Б.

3.3 Моделирование работы промышленной установки сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом с учетом дезактивации катализатора с использованием разработанной компьютерной моделирующей системы

3.3.1 Влияние примесей на состав и октановое число алкилата

К примесям в сырье относятся нормальные парафиновые углеводороды с низкой реакционной способностью (пропан, н-бутан, н-пентан), которые разбавляют углеводородную фазу и, следовательно, снижают концентрацию в ней изобутана и бутиленов.

Расчеты по модели показали, что при изменении концентрации пропана и н-бутана, октановое число алкилата существенно не изменяется, но изменяется его выход в материальном балансе. Это объясняется тем, что пропан, н-бутан не участвуют в реакциях алкилирования, являясь балластом. При увеличении содержания этих компонентов, выход алкилата уменьшается (рисунки 7,8)

Рисунок 7 – Зависимость выхода алкилата от концентрации пропана в ББФ

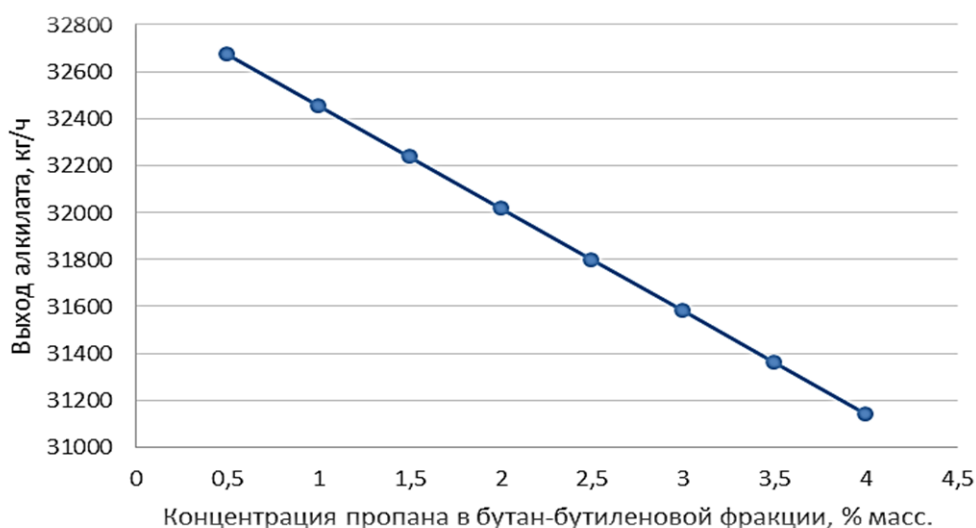
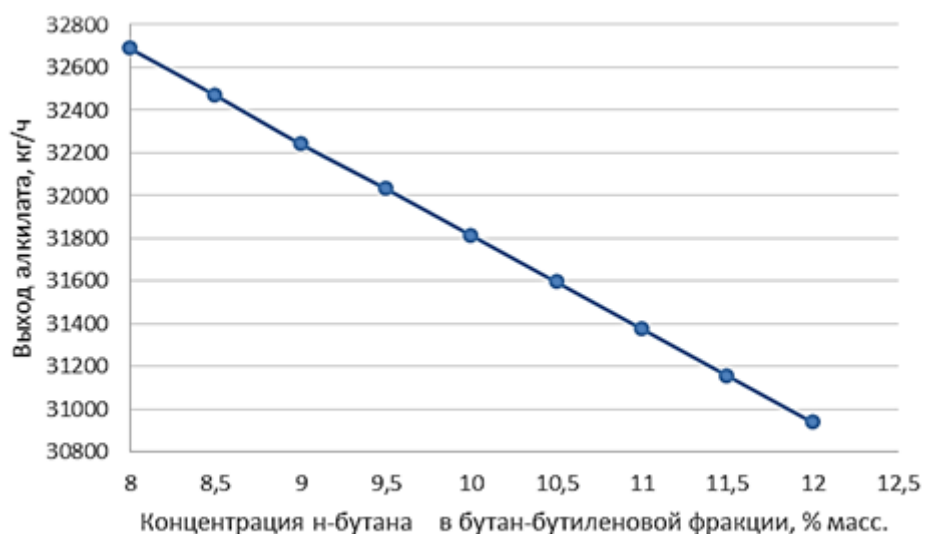


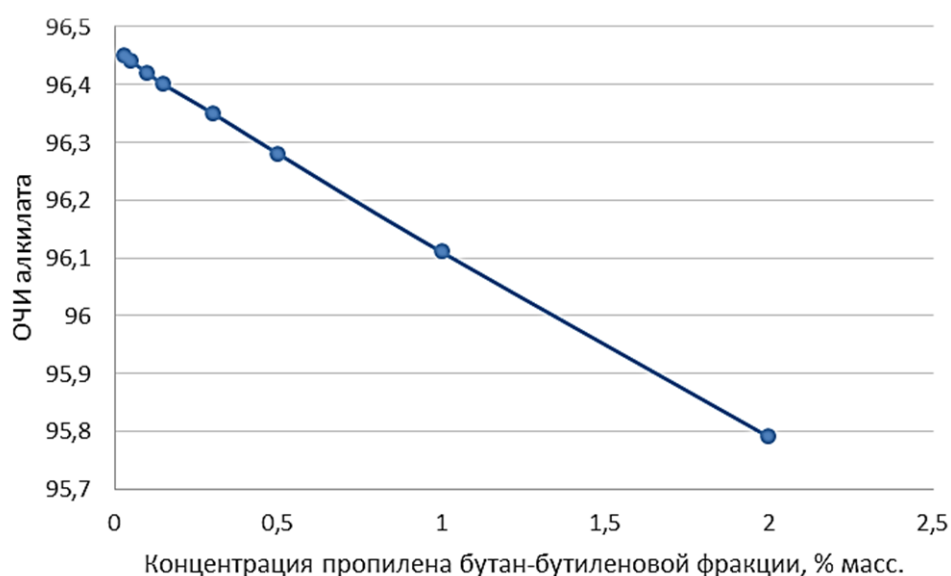
Рисунок 8 – Зависимость выхода алкилата от концентрации н-бутана в ББФ



Численные исследования показали, что при увеличении содержания пропилена, октановое число алкилата снижается.

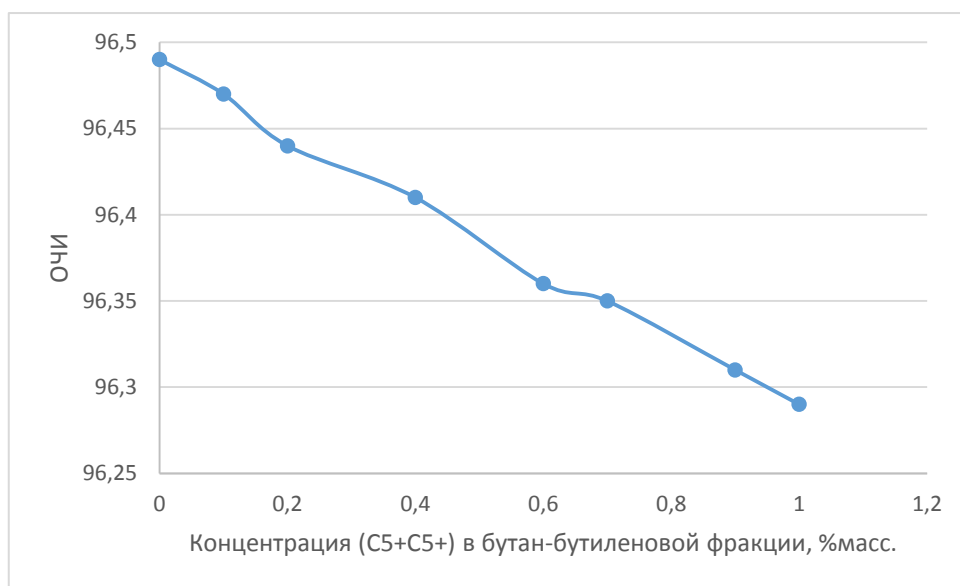
Пропилен реагирует с изобутаном с образованием 2,4-диметилпентана, 2,3-диметилпентана и 2,2-диметилпентана, которые имеют октановые числа ниже изооктанов, следовательно, повышение их концентрации в алкилате понижает его октановое число (рисунок 9).

Рисунок 9 – Зависимость октанового числа алкилата от концентрации пропилена в ББФ



Как показали расчеты, присутствие н-бутана нежелательно в сырье, т.к. оно влияет на качество получаемого алкилбензина. Повышение содержания ($\Sigma C_5 + \Sigma C_{5+}$) также вносит отрицательный вклад в свойства продукта (рисунок 10).

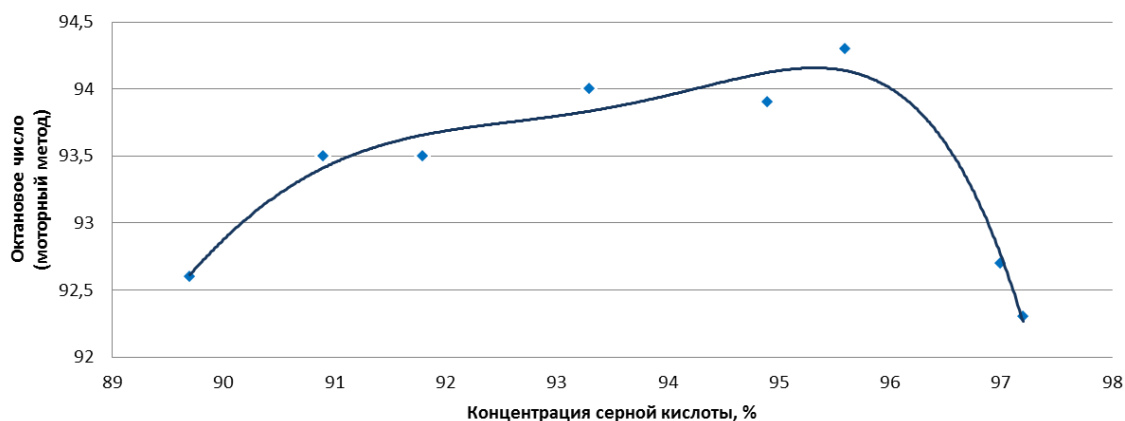
Рисунок 10 - Зависимость октанового числа алкилата от концентрации ($C_5 + C_{5+}$) в ББФ



3.4 Учет нестационарности математической модели

Концентрация серной кислоты в реакторе является одним из основных параметров процесса. Для алкилирования обычно используют серную кислоту, содержащую от 88 до 98% моногидрата. Однако только 95-96 процентная серная кислота позволяет получать алкилат с максимальным октановым числом (рисунок 11).

Рисунок 11 – Зависимость ОЧМ от концентрации серной кислоты.



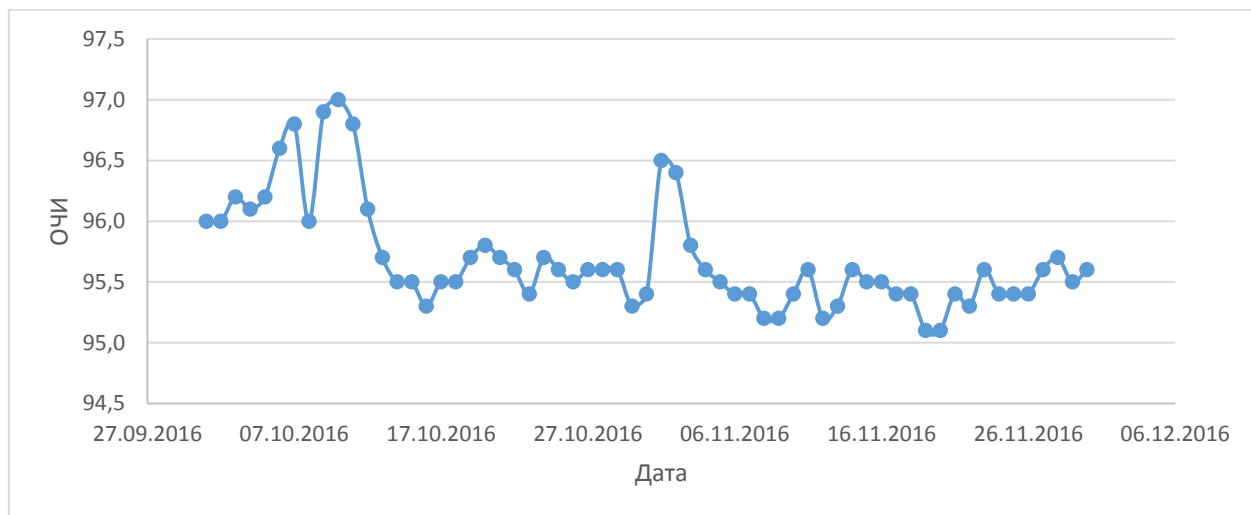
Изменение концентрации серной кислоты, вследствие дезактивации является основной причиной нестационарности процесса. Поэтому необходимо поддерживать концентрацию кислоты в реакторе на постоянном уровне путём регулирования подачи свежей и откачки отработанной серной кислоты.

3.4.1 Кинетическая модель дезактивация серной кислоты

Основными причинами понижения концентрации серной кислоты являются накопление в ней высокомолекулярных органических соединений и разбавление её водой, попадающей в реактор с сырьём и образующейся некоторых побочных реакций.

Однако точного механизма образования высокомолекулярных органических веществ нет. Лишь достоверно известно, что молекула высокомолекулярного углеводорода имеет молекулярную массу от 265–360 г/моль и в своём составе содержит пятичленные кольца с сопряженными двойными связями.

Рисунок 12 – Изменение ОЧИ за 2 цикла использования катализатора



На рисунке 12 показано, что в период с 01.10.16 по 30.11.16 наблюдалось падение ОЧИ. В результате анализа графика и данных по массовым концентрациям воды и ASO в соответствующие даты, было установлено, что с начала 1-го цикла, 10 октября, и до его конца 30 октября шло плавное падение ОЧИ, которое можно представить в виде убывающей экспоненциальной функции $x = K * e^{(-C_{\text{вещества}})}$, где K , в данном случае, - константа скорости образования вещества. К образованию высокомолекулярных углеводов приводят все реакции, перечисленные в формализованной схеме превращений, следовательно, константы образования этих веществ можно представить в следующем виде:

$$K_{\text{дез}} = K_i * e^{(C_{\text{воды}} * \alpha + C_{\text{ASO}} * \beta)},$$

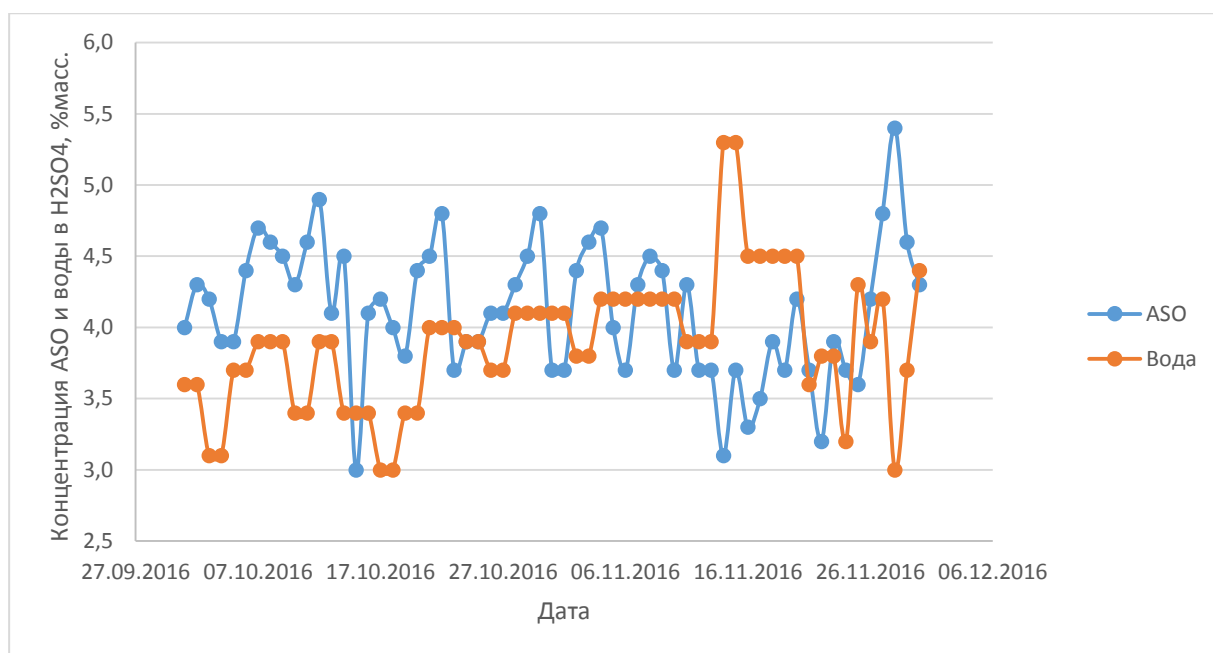
где α – коэффициент, учитывающий дезактивацию кислоты водой;

β – коэффициент, учитывающий дезактивацию кислоты ASO;

K_i – константа образования вещества;

$K_{\text{дез}}$ – константа образования вещества, учитывающая негативное влияние примесей в составе катализатора.

Рисунок 13 – Изменение концентрации ASO и воды.



Подбор коэффициентов α и β осуществлялся в два этапа:

- 1) корректировка значений кинетических параметров в датах с минимальными значениями концентрации воды и высокомолекулярных углеводов;
- 2) определение коэффициентов α и β путем их подбора и усреднения данных значений по датам, когда содержание воды и ASO было максимальным.

Все расчеты проходили в программе Alkylation, написанной на кафедре ХТТ и ХК НИ ТПУ в программе Delphi на языке Pascal. Результат в окне программы можно наблюдать на рисунке Б2 приложения Б.

Таблица 11 – Экспериментальные и расчетные данные установки СА

Дата	ОЧМ (эксперимент)	ОЧИ (эксперимент)	ОЧМ (расчет)	ОЧИ (расчет)	Концентрация ASO, %масс.	Концентрация воды, %масс	Погрешность ОЧИ, %	Погрешность ОЧМ, %
13.01.2017	92,2	95,6	91,38	95,97	3,9	4,4	0,89	-0,39
16.01.2017	92,2	95,5	91,14	95,3	4,4	4,6	1,15	0,21
11.01.2017	92,4	96,0	91,19	95,34	3,3	4,9	1,31	0,69
30.01.2017	92,2	95,5	91,28	95,33	4,6	5,3	1,00	0,18
09.01.2017	92,2	95,6	91,83	95,85	3,4	6,7	0,40	-0,26

Поварьировав данными в программе, были подобраны коэффициенты α и β таким образом, что значение ОЧИ/ОЧМ(расчет) максимально близко приближалось к ОЧИ/ОЧМ(эксперимент).

Таблица 12 – Подбор коэффициентов в уравнение константы скорости

Дата	α	β
13.01.2017	-0,05	-0,02
16.01.2017	-0,08	0,045
11.01.2017	-0,05	0,06
30.01.2017	-0,043	0,06
09.01.2017	-0,036	0,02
Среднее значение	-0,0518	0,033

Рассчитанные коэффициенты были подставлены в программу, после чего был произведен расчет октановых чисел для января 2017 года. Данные показаны в таблице Б3 приложения Б. Исходя из полученных погрешностей, можно сделать вывод, что α и β были подобраны верно, модель является адекватной и пригодна для дальнейших исследований по прогнозированию выхода алкилата.

Глава 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

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

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование (рис.1).

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

Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга) [30].

Критерием сегментирования может служить вид оказываемых услуг с применением математической модели процесса производства компонентов автомобильного бензина:

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

Лидирующие позиции в настоящее время занимают продукты компаний – SimulationSciences (SimSci), AspenTechnologies и Hysprotech. Программные продукты данных компаний: Hysys и Hysim, Pro II и ProVision, AspenPlus и

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

Таблица 13 – Карта сегментирования рынка услуг

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



SimSci



AspenTechnologies



Hyprotech

Продажа разработанной моделирующей системы для процесса сернокислотного алкилирования ограничивается количеством нефтеперерабатывающих заводов (НПЗ), на которых реализован процесс сернокислотного алкилирования. На сегодняшний день в России находятся 10 НПЗ, на которых реализован процесс сернокислотного алкилирования, причём по данным Министерства энергетики РФ, в период до 2020 года будут реконструированы 7 и построены 2 установки алкилирования. Таким образом, конкурентные преимущества получают те компании, чьи программные продукты способны адаптироваться реконструированию установки

алкилирования. Это требует постоянных контактов с руководством НПЗ и компаний, занимающиеся их реконструкцией.

Тренажерная система, разработанная в программе для анализа отклонений в работе процесса алкилирования изобутана алкенами, и тестовые задания позволят расширить целевой рынок за счёт образовательных учреждений и НПЗ, которые планируют построить установки алкилирования в будущем. Таких потенциальных НПЗ – 5, что повышает на 30% потенциальный рынок.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений

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.

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

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

Как видно из оценочной карты, разрабатываемая моделирующая система является относительно конкурентоспособной на российском рынке. Преимуществом нашей разработки является чувствительность модели к составу перерабатываемого сырья, что позволяет ей адаптироваться к изменению условий процесса. Также цена на наш программный продукт ниже, чем на продукты конкурентов. Однако есть и определённые недостатки: во-первых, это ограниченная функциональность. Программные продукты конкурентов содержат гораздо большее число процессов.

Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений представлена ниже в таблице В1 приложения В.

4.1.3 SWOT-анализ

Для комплексной оценки научно-исследовательского проекта применяют SWOT-анализ, результатом которого является описание сильных и слабых сторон проекта, выявление возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Матрица SWOT-анализа представлена в таблице В2 приложения В.

После того как сформулированы четыре области SWOT переходят к реализации второго этапа, который состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Каждый фактор помечается либо знаком «+» – сильное соответствие сильных сторон возможностям, либо знаком «-» – слабое соответствие; «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-». Интерактивная матрица проекта представлена ниже.

Таблица 14 – Интерактивная матрица проекта.

Сильные стороны проекта					
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4
	B1	-	+	+	+
	B2	+	+	+	+
	B3	+	+	-	+
	B4	-	-	+	0
Сильные стороны проекта					
Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4
	Y1	-	+	-	0
	Y2	+	+	-	+
	Y3	-	-	-	-
	Y4	+	+	+	-
Слабые стороны проекта					
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	B1	+	-	0	+
	B2	-	+	0	-
	B3	-	+	-	+
	B4	-	-	-	-
Слабые стороны проекта					
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	Y1	+	+	0	+
	Y2	0	-	0	-
	Y3	+	+	+	+
	Y4	+	0	+	+

В случае, когда две возможности сильно коррелируют с одними и теми же сильными сторонами, с большой вероятностью можно говорить об их единой природе. В этом случае, возможности описываются следующим образом: B2B3C2C3.

В рамках третьего этапа должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа [Приложение В], которая приводится в бакалаврской работе.

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

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

4.1.4 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

Таблица 15 – Морфологическая матрица моделирования процесса алкилирования изобутана олефинами

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

4.2 Планирование работы

Календарный план проекта представлен в таблице В4 приложения В.

Календарный план-график проведения научного проекта представлен в таблице В5 приложения В.

4.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

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

4.3.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

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

Материальные затраты, необходимые для данной разработки, отражены ниже.

Таблица 16 — Материальные затраты

Наименование	Единица	Количество	Цена за ед., с НДС тыс.руб.	Затраты на материалы, тыс.руб. (З _м),
--------------	---------	------------	-----------------------------	---

	изме рени я	Исп. 1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп. 2	Исп. 3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
Бутан- бутиленнова я фракция	м ³	40*	50	50	1	1	1	40	50	50
Изобутанова я фракция	м ³	400	500	500	0,4	0,4	0,5	160	200	250
Серная кислота	м ³	440	550	550	0,5	0,5	0,5	220	225	220
Итого								420	475	520

Для данной разработки необходимо меньше сырья, чем для разработок конкурентов, так как, используя разработанную математическую модель, удалось поддерживать качество алкилбензина при меньшем расходе сырья.

4.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

Для выполнения данного проекта необходимо приобретение персонального компьютера для трех участников проекта, ПО MicrosoftOffice 365 для создания документов, лицензионного программного обеспечения Gaussian для расчета термодинамических параметров реакций в ходе процесса сернокислотного алкилирования изобутана алкенами лицензионного программного пакета Delphi 7 для компьютерной реализации модели. Также необходимо иметь экспериментальные данные с завода, которые могут быть получены двумя способами: 1) Запросить данные с лаборатории завода, 2) Провести необходимые исследования в лаборатории кафедры. Список затрат на оборудование представлен в таблице В6 приложения В.

4.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле (1):

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}, \quad (1)$$

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

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле (2):

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (2)$$

В формуле (2):

Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 рабочих дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн. (таблица 17).

Таблица 17 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Научный руководитель проекта	Специалист по проекту - студент
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
– выходные дни	86	86
– праздничные дни	15	15
Потери раб.времени		
– отпуск	48	24
– невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд раб.времени, раб. дн.	216	240

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_б \cdot (k_{пр} + k_d) \cdot k_p, \quad (3)$$

где $Z_б$ – базовый оклад, руб.;

$k_{пр}$ – премиальный коэффициент;

k_d – коэффициент доплат и надбавок;

k_p – районный коэффициент, равный 1,3.

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 18.

Таблица 18 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители		k_p				
-------------	--	-------	--	--	--	--

	З _б , руб.		З _м , руб.	З _{дн} , руб.	Т _р , раб. дн.	З _{осн} ,руб .
Научный руководитель проекта	15000	1, 3	19500	1206,6	216	260600
Специалист по проекту – студент	0	1, 3	0	0	240	0
Итого З _{осн} :						218400

4.3.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}} \quad (4)$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (принимается равным 0,12).

$$C_{\text{зп}} = З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}, \quad (5)$$

где $З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата;

$З_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата.

В таблице 19 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 19 – Заработная плата исполнителей НП

Заработная плата Исполнители	Основная , З _{осн} ,руб.	к _{доп}	Дополнительная, З _{доп} ,руб	Итоговая зарплата, С _{зп} ,руб
Научный руководитель проекта	260600	0,12	31272	291872

Специалист по проекту – студент	0		0	0
Итого:	260600		31272	291872

Расчеты показали, что годовая заработная плата за время выполнения проекта составляет 291872 руб.

4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

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

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

На 2017г. в соответствии с ФЗ от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2017 году водится пониженная ставка – 30%. Отчисления во внебюджетные фонды для студента не предусмотрены.

Таблица 20 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнители	Заработная плата, $C_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}$, руб.	Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды, $k_{\text{внеб}}$	$C_{\text{внеб}}$, руб.
1	2	3	4=п.2·п3
Научный руководитель проекта	291872	0,271	79097
Итого:			79097

4.3.6 Расчет затрат на научные и производственные командировки

За время научного исследования необходимо совершить одну производственную командировку. Требуемые затраты на командировку приведены в таблице 21.

Таблица 21 – Затраты на производственную командировку

№	Затраты	Сумма, руб.
1.	Билет Томск – Омск	1500
2.	Проживание	4000
3.	Суточные	1400
4.	Билет Омск – Томск	1500
Итого:		8400

4.3.7 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, электроэнергия, оплата услуг связи, почтовые расходы, размножение материалов и т.д. Их величина определяется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = (\text{сумма статей } 1 \div 5) \cdot k_{\text{нр}},$$

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов берем в размере 16%.

$$C_{\text{накл1}} = (5257750 + 260600 + 31872 + 79097 + 8400) \cdot 0,16 = 902035 \text{ руб.}$$

$$C_{\text{накл2}} = (5307750 + 260600 + 31872 + 79097 + 8400) \cdot 0,16 = 910035 \text{ руб.}$$

$$C_{\text{накл3}} = (5327750 + 260600 + 31872 + 79097 + 8400) \cdot 0,16 = 913235 \text{ руб.}$$

4.3.8 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект и диаграмма затрат приведены в таблице В7 приложения В.

Рисунок 14 – Диаграмма затрат на проект (не включая материальные затраты), исп.2.

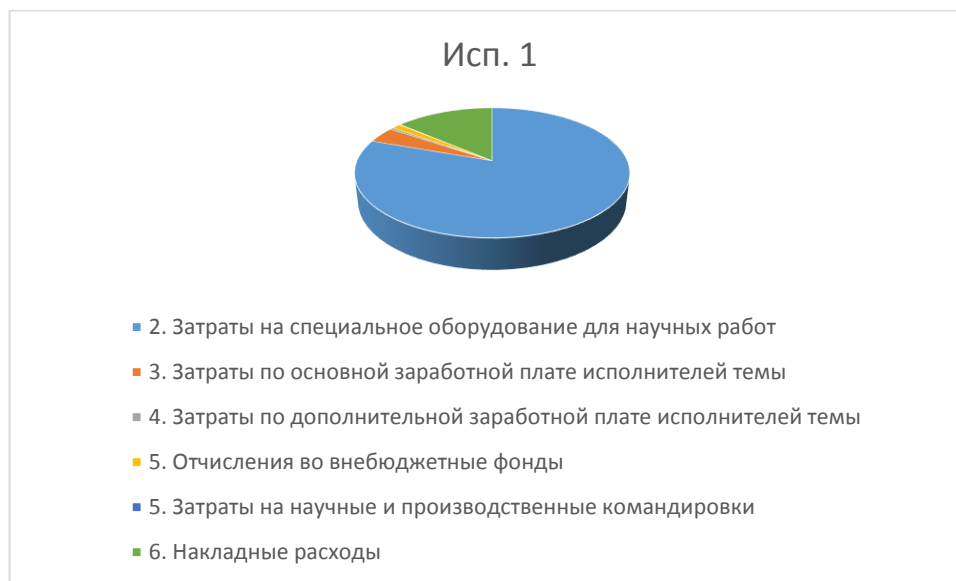


Рисунок 15 – Диаграмма затрат на проект (не включая материальные затраты), исп.2.

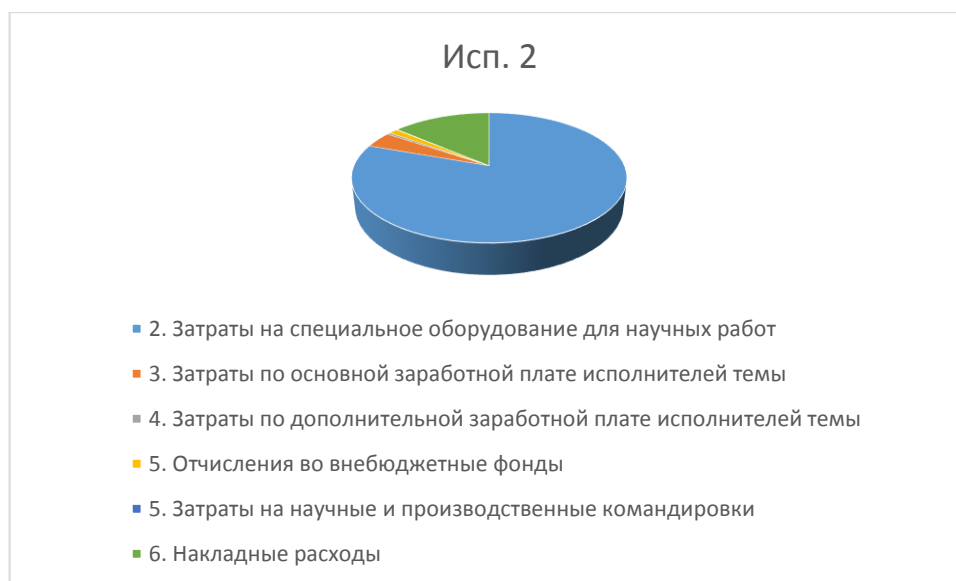
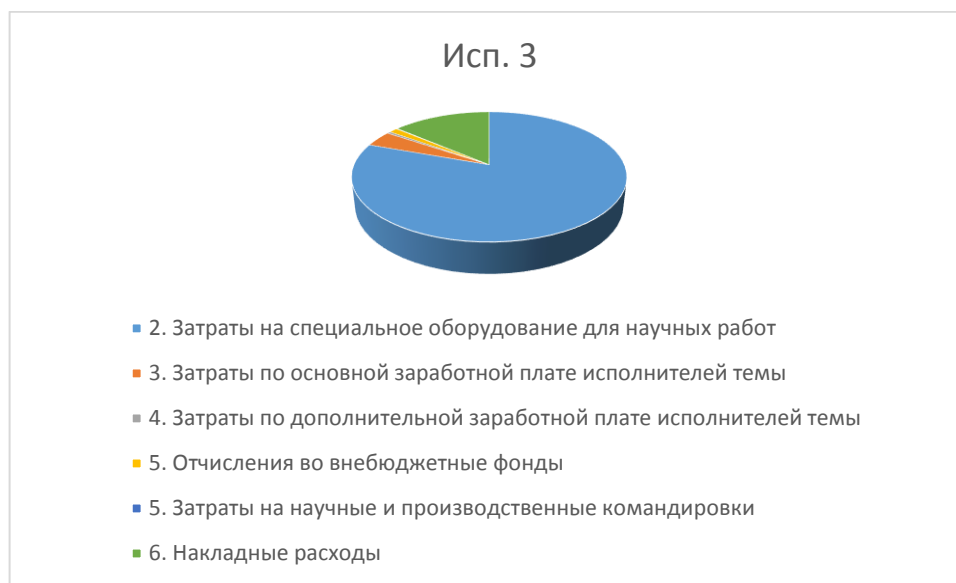


Рисунок 16 – Диаграмма затрат на проект (не включая материальные затраты), исп.3.



При планировании бюджета научно-технического исследования были учтены все статьи расхода на его реализацию. Итоговый бюджет составил 6539754 (исп.1), 6597754 (исп.2), 6620954 (исп.3) рублей. На диаграмме затрат видно, что основной вклад в бюджет вносит затраты на оборудование для научных работ.

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

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

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу

расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

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

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

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

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом: $I_{\text{pi}} = \sum a_i \cdot b_i$

Таблица 22 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Способствует росту производительности труда	0,1	5	4	3
2. Удобство в эксплуатации	0,15	4	5	3
3. Энергосбережение	0,15	5	4	4
4. Надежность	0,20	4	5	4
5. Воспроизводимость	0,25	4	4	4
6. Материалоемкость	0,15	5	4	4
ИТОГО	1	4,5	4,2	3,9

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{\text{исп.}i}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{\text{исп.}1} = \frac{I_{\text{p-исп1}}}{I_{\text{исп.}1}^{\text{финр}}} \quad I_{\text{исп.}2} = \frac{I_{\text{p-исп2}}}{I_{\text{исп.}2}^{\text{финр}}}$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных.

Таблица 23 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	0,98	0,96
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,5	4,2	3,9
3	Интегральный показатель эффективности	4,13	4,45	4,06
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,97	0,91

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

Глава 5 Социальная ответственность

Объектом исследования данной работы стала установка сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.

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

Целью данной работы стало создание математической модели процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами и исследование с помощью нее процесса дезактивации катализатора.

Данная дипломная работа выполнялась в аудитории 224, расположенная на втором этаже учебного корпуса 16-Б Томского политехнического университета. Аудитория 224 оборудована 11 ЭВМ. Экспериментальная часть бакалаврской работы осуществлялась на персональном компьютере (далее ПК) при работе с различными программными обеспечениями на кафедре химической технологии топлива и химической кибернетики. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, кондиционирования воздуха. Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного.

5.1 Анализ вредных факторов на рабочем месте

Ниже представлен список вредных факторов производства алкилирования изобутана олефинами.

1. Утечка серной кислоты, щелочи, бутан-бутиленовой, изобутановой, бутановой фракции, а также алкилата могут привести к поражению кожи, ожогам, заражению крови, кроветворных органов, обладать наркотическим действием, вызывать обморожение, а также иметь токсическое воздействие.
2. Шум на рабочем месте оператора, на производственной площадке, может стать причиной утомляемости, головокружения, расстройства нервной системы, пищеварительного тракта, а также способствует развитию гипертонии.
3. Вибрация на производственной площадке может стать причиной изменений нервной системы (центральной и вегетативной), сердечно-сосудистой системы и вестибулярного аппарата.
4. Микроклиматические параметры (отопление, вентиляция). Как следствие – перегрев или переохлаждение, контролируется «СанПиН 2.2.4.548-96».
5. Недостаточная освещенность рабочей зоны на рабочем месте оператора или производственной площадке развивает утомляемость, тем самым увеличивая вероятность ошибочных действий. Контролируется «СНиП 23-05-95 Естественное и искусственное освещение».
6. Статическое электричество может привести к неприятным ощущениям, расстройству центральной нервной системы. Регулируется «ГОСТ 12.4.124-83».
7. Опасность электрического тока может возникнуть как на рабочем месте оператора, так и возле любого другого источника тока.

Регулируется «ГОСТ 12.1.038-81 Электрическая безопасность. Защитное заземление, зануление».

8. Электромагнитное излучение вызывает трофические заболевания, помутнения хрусталика глаза, изменения в эндокринной системе. Регулируется «ГОСТ 12.1.006-84 Электромагнитные излучения. Общие требования безопасности».
9. Трубопровод, резервуары, компрессора, вакуумсоздающее устройство, колонна и т. д. являются сосудами, работающими под давлением (вакуумом). Необходимо применение средств контроля за давлением, мембран и т.д.

5.1.1 Утечка токсичных и вредных веществ

Сырье процесс серноокислотного алкилирования изобутана бутиленом, получаемые полупродукты, а также готовая продукция являются вредными, взрывопожароопасными веществами, способными образовать в смеси с воздухом взрывопожароопасные и опасные для здоровья концентрации.

При возникновении аварийного положения на установке технологический персонал должен немедленно принять соответствующие меры по ликвидации аварии. Сообщить об аварийной ситуации диспетчеру производства, дежурным соответствующих энергетических служб (электроэнергия, пар, вода, воздух и т.д.), вызвать пожарную команду при угрозе пожара, газоспасательную службу, медицинскую помощь. Технологический персонал обязан также оповестить об аварии все взаимосвязанные технологические объекты.

Процесс на каталитической установке протекает при невысоких температурах (до 13°C), однако серная кислота все же испаряется. Большинство ядовитых веществ попадает в организм человека через органы дыхания. Это опасно из-за большой всасывающей способности слизистой оболочки носа и дыхательной поверхности легких. Продуктом данного процесса является алкилат – бензин без примеси в нем серо- или азотсодержащих веществ. Он относится к ядовитым (токсичным) веществам.

В состав выделяющихся на производстве газов, кроме паров бензина, ББФ и изобутановой фракции входят газы серной кислоты и едкого натра.

- Серная кислота и олеум — очень едкие вещества. Они поражают кожу, слизистые оболочки, дыхательные пути (вызывают химические ожоги). При вдыхании паров этих веществ они вызывают затруднение дыхания, кашель, нередко — ларингит, трахеит, бронхит и т. д.

- Едкий натр представляет собой едкое коррозионноактивное вещество. При попадании на кожу вызывает химические ожоги, а при длительном воздействии может вызывать язвы и экземы. Сильно действует на слизистые оболочки. Опасно попадание едкого натра в глаза. В случае попадания в глаза или на кожу тщательно промыть водой.

- ББФ - Нервный яд действует на центральную нервную систему. При остром отравлении повышается возбужденность, появляется тошнота, головокружение, при попадании на кожу вызывает обморожение.
- Изобутановая фракция - Нервный яд действует на центральную нервную систему. При остром отравлении повышается возбужденность, появляется тошнота, головокружение, при попадании на кожу вызывает обморожение
- Бутановая фракция - попадая на тело человека, вызывает обморожение. По характеру действия обморожение напоминает ожог. Человек, находящийся в атмосфере с небольшим содержанием паров бутана, испытывает кислородное голодание, а при значительных концентрациях может погибнуть от удушья. Бутан является наркотиком и действует на нервную систему.

Важно знать какая предельно предельно-допустимая концентрация этих веществ должна быть в воздухе, чтобы они не оказывали сильного влияния на организм человека. По определению ПДК вещества в воздухе рабочей зоны: концентрация которая при ежедневной работе без средств защиты в течении 8 часов или другой продолжительности но не более 40 часов в неделю в течении

всего рабочего стажа не могут вызвать заболеваний или отклонений в состоянии здоровья (таблица 1).

Для некоторых веществ класс опасности может быть изменен на более низкий, даже при высокой ПДК. Это объясняется тем, что при высокой разовой концентрации вещества в рабочей зоне влияние на организм человека может многократно усиливаться. Примером таких веществ, используемых на рассматриваемом производстве могут являться серная кислота и гидроксид натрия.

Таблица 24 – Предельно-допустимые концентрации токсичных веществ в воздухе рабочей зоны [1]

Наименование	ПДК рабочей зоны, мг/м ³	Класс опасности
Серная кислота	1	2
Едкий натр	0,5	2
ББФ	100	4
Изобутановая фракция	300	4
Бутановая фракция	300	4
Алкилат	300	4

К средствам защиты от попадания на кожу вредных химических веществ служат резиновые перчатки, лабораторные халаты, шапочки, обувь. Для защиты дыхательных путей от действия вредных химических веществ служат специальные ватно-марлевые повязки, респираторы, противогазы. Для защиты слизистой оболочки глаз можно использовать специальные очки. Средством защиты от поражения вредными химическими веществами служит также точное соблюдение техники безопасности и инструкций к используемым веществам.

5.1.2 Повышенный уровень шума

Другим вредным фактором на производстве является уровень на установке сернокислотного алкилирования (УСА), что является следствием работы компрессоров и насосов больших мощностей.

Требования по допустимому уровню звукового давления, звука и эквивалентных уровней звука выполняются в соответствии с [2], согласно которому уровень звука на УСА не превышает 80 децибел. Продолжительный повышенный уровень шума является причиной возникновения глухоты, а также головных болей, гормонального расстройства и психических заболеваний. В случае повышенного шумового фона (более 80 децибел) в помещениях насосных и на узле смешения УСА рабочие, осуществляющие ремонт и обслуживание оборудования, должны работать в наушниках.

5.1.3 Повышенный уровень вибраций

Вибрации оборудования на рабочих местах не превышают допустимых величин, установленных [3], однако нахождение в непосредственной близости с высокопроизводительными компрессорами в течение длительного времени может пагубно сказаться на здоровье работника. Высокий уровень вибрации приводит к различным физиологическим отклонениям: нарушению функции сердечно-сосудистой системы, пагубно влияет на опорно-двигательный аппарат, на нервную систему; происходит уменьшение иммунитета и опущение органов брюшной полости и малого таза, что является причиной возникновения дисфункции ЖКТ. Для снижения уровня шума и вибраций оборудования и приборов на фундаменты устанавливают амортизирующие прокладки, описанные в нормативных документах [4]. Уровень шума уменьшен с использованием звукопоглощающих материалов с максимальными коэффициентами звукопоглощения в области частот 63-8000 Гц для отделки помещений (разрешенных органами и учреждениями Госсанэпиднадзора), подтвержденных специальными акустическими расчетами.

5.1.4 Отклонение показателей микроклимата на открытом воздухе

К метеорологическим факторам, влияющим на человека, относятся температура, влажность, скорость движения воздуха.

Характерной особенностью процесса является размещение оборудования на открытых площадках. Для обеспечения нормальных условий труда строятся производственные помещения, отвечающие санитарным нормам [5].

В тёплый период года температура воздуха должна быть 20 - 22 °С, а в холодный период 22 - 24 °С, относительная влажность воздуха 30 - 60 %, скорость воздуха 0,2 - 0,7 м/с. С целью защиты персонала от неблагоприятных метеорологических факторов приборы автоматического и дистанционного управления устанавливаются на выносных панелях и размещаются в закрытых помещениях, находящихся на определённом расстоянии от установки. Контрольно-измерительные приборы располагают не на оборудовании, а тоже делают выносными и располагают в одном месте, которое снабжено навесом, либо крышей, чтобы человек имел возможность работать вне помещения при плохой погоде, также рабочие обеспечиваются индивидуальными средствами защиты.

5.1.5 Недостаточная освещенность рабочей зоны

Для нормализации визуальной обстановки в рабочих помещениях представляют собой осветительные проемы, фонари, прожекторы, защитные устройства [6].

Таблица 25 – Нормы освещенности рабочих мест по ГОСТ Р 55710 - 2013

Наименование помещений, зрительной работы и вида деятельности	$E_{\text{экс}}$, лк	U_0 , не менее	R , не более	R_a , не менее	K_p , %, не более
Производственные процессы с дистанционным управлением.	50	0,4	-	20	-
Процессы с частичным применением ручного труда.	150		28	40	

Постоянная ручная работа на производственных установках.	300	0,6	22	80	20
Лаборатории	500		16		10

5.2 Анализ опасных факторов

5.2.1 Электробезопасность

Источниками электрической опасности являются:

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

От токоведущих частей электроустановок человека защищают изолирующие защитные средства. Они подразделяются на основные и дополнительные. Основными изолирующими средствами защиты разрешается прикасаться к токоведущим частям электроустановок, имеющих рабочее напряжение до 1000 Вольт. В первую очередь, к таким защитным средствам относится слесарно-монтажный инструмент, снабженный изолирующими рукоятками – плоскогубцы, ножи, отвертки и т.п.

Электробезопасность работающего персонала и посторонних лиц должна обеспечиваться выполнением следующих мероприятий [7]:

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

5.2.2 Сосуды, работающие под давлением

В соответствии с ПБ 10 – 115 – 96 к сосудам, работающим под давлением, относят герметически закрытые емкости для ведения технологических процессов, а также для хранения и перевозки сжатых, сжиженных и растворенных газов и жидкостей под давлением.

Правила устройства и безопасной эксплуатации сосудов, работающих под давлением, распространяются на сосуды, работающие под давлением более 0,07 МПа.

Сосуды, работающие под избыточным давлением, подлежат техническому освидетельствованию (наружному внутреннему осмотру каждые 2 года и гидравлическому испытанию раз в 8 лет).

На каждый сосуд, работающий под давлением, на видном месте должна быть прикреплена металлическая пластина с нанесёнными клеймами следующих паспортных данных:

- наименование или обозначение сосуда;
- рабочее давление, МПа;
- расчётное давление, МПа;
- давление при гидроиспытании, МПа;
- допустимая максимальная и (или) минимальная рабочая температура стенки, °С.

Для управления работой и обеспечения безопасных условий эксплуатации сосуда должны быть оборудованы приборами контроля давления и температуры среды, предохранительными клапанами, запорной арматурой.

5.2.3 Движущиеся машины и механизмы

Движущиеся механизмы и их части, относятся к числу опасных производственных факторов, поскольку существует возможность получения механической травмы в результате контакта движущейся части механизма с телом человека.

Условия существования потенциальной опасности воздействия объекта (движущегося механизма) на человека можно рассматривать как:

- 1) Предусмотренные самим технологическим процессом в зависимости от его назначения (например, работа с подъемно-транспортным оборудованием, станками, прессами и т.д.);
- 2) Приводящие к опасности из-за недостатков в монтаже и конструкции объекта (например, обрывы конструктивных элементов и их падение, разрушение от коррозии и т.п.);
- 3) Возникающие вновь при изменении технологического процесса и применении другого типа оборудования (по сравнению с ранее принятым в проекте);
- 4) Зависящие от человека (психофизиологические особенности, целевое устремление, отношение к необходимости поддерживать культуру производства на достаточно высоком уровне и т.п.).

Проявление данного фактора в большинстве случаев обуславливается результатом конструктивных недостатков оборудования, недостаточности освещения, неисправности защитных средств, оградительных устройств, а также несоблюдение правил безопасности из-за неподготовленности работников, низкая трудовая и производственная дисциплина, неправильная организация работы, отсутствие надлежащего контроля за производственным процессом и др.

В качестве профилактических мер следует систематически производить проверку наличия защитных ограждений на движущихся и вращающихся частях машин и механизмов; плановую и внеплановую проверку пусковых и тормозных устройств; проверку состояния оборудования и своевременное устранение дефектов [8].

Основными мерами предосторожности являются: соблюдение всех требований правил техники безопасности при работе с инструментами; соблюдение формы одежды (все пуговицы на одежде должны быть застегнуты, полы одежды не должны болтаться); периодическая проверка

технического состояния используемых при отборе проб инструментов, повышенное внимание на рабочем месте.

5.2.4 Пожарная безопасность

Компрессорный блок, насосная подачи сырья и т.п. относится к взрывопожароопасным объектам. Это связано с тем, что в качестве топлива для печей используется сухой углеводородный газ. Насосы перекачивают ЛВЖ под большим избыточным давлением.

Причины возникновения пожаровзрывоопасной ситуации:

- Разгерметизация трубопроводов в местах соединения;
- Проведение огневых работ без первичных средств пожаротушения;
- Разгерметизация оборудования с возгоранием;
- Большое количество резервуаров, емкостей и аппаратов, в которых имеются пожароопасные продукты под высоким давлением и высокой температуре;
- Высокая теплота сгорания веществ и материалов;
- Использование неисправного оборудования;
- Нарушение технологического режима;
- Пуск неисправной технологической линии (аппарата) установки;
- Нарушение правил ремонтных работ;
- Несоблюдение правил остановки технологической установки [11].

Пожарно-профилактические мероприятия

На основании анализа пожарной опасности технологического процесса, с учетом режимов работы технологического оборудования на каждом предприятии, где повышенный риск взрывопожарной опасности, проводятся пожарно-профилактические мероприятия [10].

Первичные средства пожаротушения

Здания, сооружения, помещения, технологические установки должны быть обеспечены первичными средствами пожаротушения: огнетушителями, ящиками с песком, асбестовое полотно, грубошерстная ткань, войлок (кошма),

пожарными ведрами, совковыми лопатами, штыковыми лопатами, пожарным инструментом (крюками, ломami, топорами и т.п.), которые используются для локализации и ликвидации пожаров в начальной стадии их развития [9].

Пожарно-профилактические мероприятия [9]:

Реакторный блок:

- теплообменные аппараты;
- компрессора;
- насосная подачи сырья в узел смешения;
- холодные сепараторы высокого давления.

Мероприятие: установка предохранительных клапанов (ПК) или мембран;

Установка приборов КИПиА для:

- контроля температуры в реакторах;
- контроль температуры сальников на насосах;
- контроль давления и температуры при подаче топливного газа на горелки печей;
- контроль давления при компремировании газа.

Блок ректификации:

- Теплообменники;
- Ректификационные колонны;
- Воздушные холодильники;

Мероприятие: 1) установка предохранительных клапанов на ректификационные колонны; 2) необходимость заземления воздушных холодильников;

Установка приборов КИПиА для:

- контроля уровня в ректификационных колоннах;
- контроль давления и температуры в колоннах;
- контроль давления и температуры при подаче топливного газа на горелки печей.

Приемный парк:

- Резервуары приема сырья;
- Мероприятие: установка «дыхательных» клапанов;
- Установка приборов КИПиА для:
- контроль уровня в РВС.

5.3 Охрана окружающей среды

Опасное воздействие на окружающую среду может возникнуть из-за неправильной работы объекта моделирования – процесса алкилирования изобутана олефинами.

Вредное воздействие установок алкилирования распространяется на водные бассейны и атмосферу прилегающих территорий. Нефтеперерабатывающая промышленность, которая включает процесс алкилирования относится к наиболее водоемким отраслям народного хозяйства. По объектам водопотребления её опережает лишь энергетика, металлургическая, химическая промышленность и коммунальное хозяйство.

Установка алкилирования изобутана олефинами имеет организованные и неорганизованные выбросы вредных веществ в атмосферу.

К неорганизованным выбросам относятся выбросы:

- от разгерметизированного технологического оборудования;
- выбросы из открытых помещений насосных и помещения контакторов;
- от бассейна нейтрализации из-за негерметичности его крышки;

К организованным выбросам относятся вентиляционные выбросы компрессорной и насосной.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Технологические процессы на установке алкилирования относятся к взрывопожароопасному производству, вследствие ведения технологического процесса при наличии горючих, взрывоопасных продуктов.

Кроме того, опасность производства возрастает в связи с:

- использованием в качестве реагента едкого вещества – раствора щелочи 10 ÷ 15 %;
- использованием для привода насосного оборудования электроэнергии высокого напряжения;
- возможностью нарушения герметичности аппаратов и трубопроводов из-за коррозии;
- возможностью образования пиррофорных отложений;
- возможностью продуктов накапливать заряды статического электричества при транспортировании.

В аварийных ситуациях, в результате которых возможно возгорание, образование взрывоопасных смесей и загазованность аппаратного двора, технологический персонал установки алкилирования должен руководствоваться планом локализации и ликвидации аварийных ситуаций (ПЛАС).

При возникновении ЧС, мероприятия представляют собой проведение спасательных работ и неотложных аварийно-восстановительных работ в очаге поражения. Данные мероприятия определены в [10] и проводятся на основании положения комплекса государственных стандартов по предупреждению и ликвидации чрезвычайной ситуации.

5.5 Правовые вопросы обеспечения безопасности

Обеспечение безопасности жизни и здоровья работников в процессе трудовой деятельности является одним из национальных приоритетов в целях сохранения человеческого капитала [12], что неразрывно связано с решением задач по улучшению условий и охраны труда, промышленной и экологической

безопасности. При этом крайне необходимо совершенствование нормативной правовой базы в целях повышения эффективности систем оценки условий труда работающих, выявления и управления профессиональными рисками.

Для обеспечения соблюдения требований охраны труда на предприятии существуют контролирующие органы власти, в качестве которых выступают Правительство РФ и уполномоченные исполнительные органы на местах, а также Федеральная служба по труду и Государственные инспекции труда.

Разработка комплекса мер, направленных на модернизацию производства в целях улучшения условий труда позволит в значительной мере улучшить условия труда работающих. При разработке данных мер, крайне важно учитывать не только отечественные разработки и результаты, но и международный опыт, что позволит осуществить совершенствование нормативной правовой базы Российской Федерации в соответствии с международными нормами.

Заключение

Проведенный термодинамический анализ данной работы позволил определить вероятность образования в процессе сернокислотного алкилирования таких веществ, как изооктанов, изогептанов и других углеводородов изостроения.

Положенная в основу модели схема превращений углеводородов в достаточной степени детализирована, тем самым обеспечивает чувствительность модели к изменению состава сырья, но, в то же время, не усложняет расчетов благодаря достаточной степени формализации.

Разработанная программа позволяет рассчитывать состав получаемого алкилата, определять выход целевых и побочных продуктов, подбирать оптимальные технологические условия проведения процесса для заданного состава сырья.

В ходе данного исследования было установлено, что такие примеси, как н-бутан, пропан и пропилен в ББФ негативно сказываются на выходе и качестве алкилбензина. Так, увеличение содержания пропилена на 1,5% понижает октановое число продукта на 1 пункт. Решить данную проблему с пропиленом можно с помощью увеличения отношения I/O, однако, тепловой эффект взаимодействия изобутан-пропилен выше, чем изобутан-бутилен, вследствие чего необходимо придумать более эффективный способ охлаждения реакторных устройств.

Был установлен приблизительный механизм образования высокомолекулярных углеводородов (ASO), которые образовывались из-за сниженного соотношения изобутан:олефины.

Проанализировав воздействие высокомолекулярных углеводородов и воды, образующихся в реакторе и негативно влияющих на октановое число алкилата, была установлена экспоненциальная зависимость снижения ОЧИ и ОЧМ. Данную проблему удалось решить, введя поправочную функцию $K_{\text{дез}} = K_i * e^{(C_{\text{воды}} * \alpha + C_{\text{ASO}} * \beta)}$, коэффициенты α и β в которой позволяют снизить

негативное воздействие или свести к нулю. В результате вычислений были определены были найдены значения коэффициентов: $\alpha = -0,0518$, $\beta = 0,033$. Ввод данной функции дезактивации привел к уменьшению погрешности эксперимента с 0,66% до 0,09% (для ОЧИ) и с 0,33% до 0,16% (для ОЧМ). Более подробные значения вычислений представлены в таблице Б3 приложения Б.

Список публикаций

1. А.С. Ушаков, С.С. Бойченко, А.Е. Нурмаканова Построение математической модели процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами // Материалы XVII Международной научно-практической конференции студентов и молодых учёных «Химия и химическая технология в XXI веке», Томск, 17-20 Мая 2016. - Томск: НИ ТПУ, 2016 - Т. 1 - С. 373.
2. Бойченко С.С., Нурмаканова А.Е., Ушаков А.С, «Определение оптимальных технологических параметров процесса алкилирования изобутана олефинами с применением математической модели» // Нефть и газ 2016: тезисы докладов: в 3 т., Москва, 18-20 Апреля 2016. – Москва: РГУ нефти и газа им. Губкина, 2016 – Т. 2 – С. 138.
3. Бойченко С.С., Нурмаканова А.Е., Ушаков А.С., «Оптимизация технологических параметров процесса алкилирования изобутана олефинами» // Техника и технология нефтехимического и нефтегазового производства: материалы 6-й Международной научно-технической конференции, Омск, 25-30 Апреля 2016. – Омск: ОмГТУ.
4. А.С. Ушаков, И.О. Долганова, И.М. Долганов. Разработка компьютерной моделирующей системы процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами с учетом дезактивации катализатора// Материалы XVIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых учёных «Химия и химическая технология в XXI веке», Томск, 29 Мая – 01 июня 2017. - Томск: НИ ТПУ, 2017 - С. 556.

Список литературы

1. Ибрагимова Г.М. Низкая глубина переработки углеводородного сырья – проблема нефтеперерабатывающей промышленности России// Экономические науки. – 2011. – №3.– С.122.
2. Климентова Г.Ю., Маврин В.Ю. Топливные присадки для двухтактных двигателей // Вестник технологического университета, 2010. - №10. - С. 323-326.
3. Дорогочинский А.З. и др. Сернокислотное алкилирование изопарафинов олефинами. –М.: Химия, 1970– 270 с.
4. Солодова Н.Л., Абидуллин А.И., Емельянычева Е.А. Алкилирование изопарафинов олефинами// Вестник Казанского технологического университета. – 2013. – №18. – с.253-258.
5. Ахметов С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа: Учебное пособие для вузов. – Уфа: Гилем, 2002 – 672 с.
6. ГОСТ Р 51866-2002. Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия. — Введ. 30.06.2002. Последнее изменение 18.10.2016. — М.: Стандартиформ, 2009. — 34 с.
7. Технический регламент "О требованиях к автомобильному и авиационному бензину, дизельному и судовому топливу, топливу для реактивных двигателей и топочному мазуту"(утв. постановлением Правительства РФ от 27 февраля 2008 г. N 118) (с изменениями от 25 сентября, 30 декабря 2008 г., 21 апреля 2010 г., 7 сентября 2011 г.)
8. Информационно-аналитический центр RUPEC, Высокооктановые компоненты 2014-2020, 2014г.
9. Левинбук М.И., Каминский Э.Ф. «О некоторых проблемах российской переработки» // Химия и технология топлив и масел. 2000. №2. С.6-11.
10. Исагулянц В.И. Химия нефти: [для нефтяных специальностей вузов]/ В.И. Исагулянц, Г.М. Егорова. – М.: Химия. – 1965. – 506 с.

11. Лавренов А.В., Богданец Е.Н., Дуплякин В.К. Твердокислотное алкилирование изобутана бутенами: путь от выяснения причин быстрой дезактивации катализаторов к технологическому оформлению процесса// Институт проблем переработки углеводородов СО РАН, г. Омск. – 2009. – с.28-38.
12. Патент RU 2396254 C2. Способ получения высокорастворимых линейных алкилбензолсульфонатов / Гонсальвес Альмейда Хосе Луис (ES), Берна Техеро Хосе Луис (ES). – 2006.
13. Handbook of Petroleum Refining Processes / под редакцией Robert A. –Meyers, Second Edition, McGraw-Hill.–New York, 1997.
14. Patent WO/2017/015255 (US). C10L 1/08 (2006.01), C07C 9/16 (2006.01), B01J 31/02 (2006.01). Modified HF alkylation reaction zone for ionic liquid alkylation; заявитель UOP LLC [US/US]; изобретатель Leeton, Eric (US); дата международной подачи: 19.07.2016, дата публикации 26.01.2017.
15. 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.
16. Магарил Р.З. Теоретические основы химических процессов переработки нефти: Учебное пособие для вузов. – Л.: Химия, 1985, 280 с.
17. Патент №2385856 (RU). МПК C07C2/62, C10L1/02. Способ получения высокооктанового компонента автомобильных бензинов; авторы Князьков Александр Львович (RU), Никитин Александр Анатольевич (RU), Лагутенко Николай Макарович (RU), Романов Александр Анатольевич (RU), Захаров Василий Александрович (RU), Кириллов Дмитрий Владимирович (RU), Лукашов Николай Николаевич (RU), Гудкевич Игорь Владимирович (RU), Пронин Сергей Викторович (RU), Румянцев Сергей Валерьевич (RU), Кесарев Алексей Сергеевич (RU); патентообладатель Открытое акционерное общество "Славнефть-Ярославнефтеоргсинтез"

- (ОАО "Славнефть-ЯНОС") (RU); дата подачи заявки: 2008-06-16; дата публикации патента: 10.04.2010.
- 18.Алкилирование. Исследования и промышленное оформление процесса /под ред. Л.Ф.Олбрайта и А.Р. Голдсби. -М., Химия. – 1982– 342 с.
- 19.Patent № 20120130140 (US). C07C 2/62. Process for isoparaffin olefin alkylation; заявители Strauss Ramon A., ExxonMobil Research and Engineering Company, Hemrajani Ramesh R.; изобретатели Strauss Ramon A., Hemrajani Ramesh R., Spinelli Guido L.; дата международной подачи: 21.12.2011, дата публикации 24.05.2012.
- 20.Внедрение новых разработок – технология СКА [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://rangroup.ru/areas/newdevelopment/ska/> – Заглавие с экрана. – (Дата обращения: 14.04.2017).
- 21.Солодова Н.Л., Хасанов И.Р. Перспективные процессы алкилирования изопарафинов олефинами// Вестник технологического университета. – 2015. – №9. – с.117-121.
- 22.Басимова Р. А., Павлов М. Л., Мячин С. И., Прокопенко А. В., Мусина А. Г., Задорин А. Н. Кутепов Б. И. Ли И. А. Алкилирование бензола этиленом и трансалкилирование этилбензолов на цеолитных катализаторах // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2008. - №4–5. – С. 94-96.
- 23.Шириязданов Р. Р., Николаев Е. А., Рахимов М. Н. Влияние типа связующего на избирательность и стабильность цеолитсодержащего катализатора алкилирования изобутана бутан-бутиленовой фракцией // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2010. - №8. – С. 14-16.
- 24.Патент RU2445165C1. МПК В01J29/12, В01J29/16, В01J23/02, В01J23/10, В01J37/02, C07B37/00. Катализатор, способ его получения (варианты) и способ жидкофазного алкилирования изобутана олефинами C₂-C₄ в его присутствии; авторы Хаджиев Саламбек Наирович (RU), Герзелиев Ильяс Магомедович (RU), патентообладатели Учреждение Российской академии наук Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН (ИНХС РАН) (RU), Открытое акционерное

- общество "Электрогорский институт нефтепереработки" (ОАО "ЭЛИНП") (RU); дата подачи заявки: 2010-09-09, дата публикации: 20.03.2012.
25. Patent № 3976713 (US). C07C 2/00, C07C 2/58, B01J 8/04. Isoparaffin-olefin alkylation utilizing recycle streams and multiple packed catalyst beds; заявители Sun Oil Company of Pennsylvania; изобретатели Holmes Timothy L., Thompson Sheldon L.; дата международной подачи: 19.06.1975, дата публикации 24.08.1976.
26. Patent № 4049739 (US). C07C 2/00, C07C 2/66, B01J 8/04, B01J 29/00, B01J 29/90. Simulated moving bed alkylation process; заявители UOP Inc.; изобретатели Zabransky Robert F., Anderson Robert F.; дата международной подачи: 27.08.1976, дата публикации 20.09.1977.
27. AlkyClean® [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.cbi.com/getattachment/61818074-13d9-4b08-9c5f-1261ccdefad2/AlkyClean-Solid-Acid-Catalyst-Alkylation-Technolo.aspx> – Заглавие с экрана. – (Дата обращения: 15.04.2017).
28. Технологический регламент установки сернокислотного алкилирования ТР 25-12, 2013 г.
29. Полещук О.Х., Кижнер Д.М. Химические исследования методами расчета электронной структуры молекул. – Томск: Изд-во ТПУ, 2006.
30. Федеральный закон Российской Федерации от 28 декабря 2013 г. N 426-ФЗ «О специальной оценке условий труда»
31. ГН 2.2.5.1313-03. Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны
32. Шум. Общие требования безопасности. – М.: Стандартинформ, 2008. – 13 с.
33. СН 2.2.4/2.1.8.566-96. Производственная вибрация, вибрация в помещениях жилых и общественных зданий [Электронный ресурс]. - Режим доступа www.URL: <http://www.complexdoc.ru/ntdtext/485621>, свободный. – Дата обращения: 28.04.2017 г.

- 34.ГОСТ 12.1.012-2004 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Вибрационная безопасность. Общие требования.
- 35.СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
- 36.СНиП 23-05-95 «Естественное и искусственное освещение».
- 37.ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
- 38.ГОСТ 12.2.003-91. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Оборудование производственное. Общие требования безопасности.
- 39.Технологический регламент установки сернокислотного алкилирования ТР 25-12, 2013 г.
- 40.Горячев С.А., Клубань В.С. Пожарная профилактика технологических процессов производств. М.: ВИПТШ МВД СССР, 1983.
- 41.ГОСТ 12.1.004. – 91. Пожарная безопасность
- 42.Общие требования.Типовая инструкция по охране труда при работе на персональном компьютере ТОИ Р-45-084-01: утверждена Приказом Министерства РФ по связи и информатизации от 2 июля 2001 г. N 162.

Приложение А.

Таблица А1 – Покомпонентный состав установки сернокислотного алкилирования

Поток	Компонент	Концентрация
ББФ	Сумма С2	0,00–1,50
	Пропан	0,20–1,30
	Пропилен	0,17–0,70
	Пропан+пропилен	1,00–1,60
	Изобутан	38,00–43,00
	н-Бутан	6,80– 7,50
	Бутилен	15,50–16,50
	изобутилен	5,50–8,00
	транс-бутилен	16,50–17,90
	цис-бутилен	11,00–12,00
	дивинил	0,2–0,3
	Сумма С5+	0,00–0,18
Изобутан циркулирующий	Сумма С2	0,00
	Пропан+пропилен	2,30–3,20
	Изобутан	83,00-85,00
	н-бутан	10,20–13,60
	Сумма бутиленов	0,00
	Сумма С5	0,30–0,50

Приложение Б. Рисунок Б1 – Формализованная схема превращений веществ в процессе сернокислотного алкилирования изобутана олефинами: k_i – константа скорости соответствующей реакции

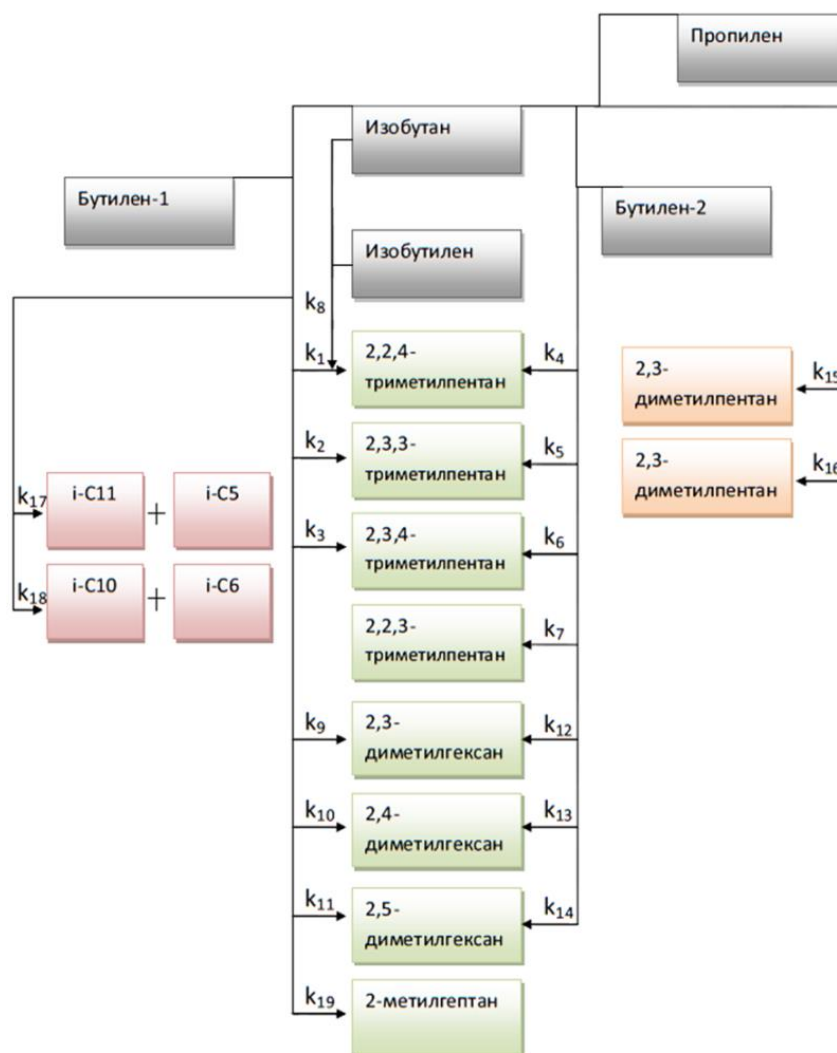


Таблица Б1 – Кинетические параметры основных реакций процесса алкилирования.

№	Химическая реакция	Е _а реакции, кДж/моль	Предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса, с ⁻¹
1	Изобутан + Бутилен-1 → 2,2,4-триметилпентан	67,03	2,09·10 ¹²
2	Изобутан + Бутилен-1 → 2,3,3-триметилпентан	64,50	1,25·10 ¹²
3	Изобутан + Бутилен-1 → 2,3,4-триметилпентан	63,28	1,38·10 ¹²
4	Изобутан + Бутилен-2 → 2,2,4-триметилпентан	63,92	2,09·10 ¹²
5	Изобутан + Бутилен-2 → 2,3,3-триметилпентан	61,39	1,25·10 ¹²
6	Изобутан + Бутилен-2 → 2,3,4-триметилпентан	60,17	1,38·10 ¹²
7	Изобутан + Бутилен-2 → 2,2,3-триметилпентан	62,78	4,56·10 ⁴
8	Изобутан + Изобутилен → 2,2,4-триметилпентан	63,38	1,10·10 ¹²
9	Изобутан + Бутилен-1 → 2,3- диметилгексан	66,17	7,74·10 ¹¹
10	Изобутан + Бутилен-1 → 2,4- диметилгексан	67,35	8,04·10 ¹¹
11	Изобутан + Бутилен-1 → 2,5- диметилгексан	68,36	8,04·10 ¹¹
12	Изобутан + Бутилен-2 → 2,3- диметилгексан	63,06	7,74·10 ¹¹
13	Изобутан + Бутилен-2 → 2,4- диметилгексан	64,24	8,04·10 ¹¹
14	Изобутан + Бутилен-2 → 2,5- диметилгексан	65,25	8,04·10 ¹¹
15	Изобутан+ Пропилен → 2,3-диметилпентан	66,91	6,02·10 ¹¹
16	Изобутан+ Пропилен → 2,4-диметилпентан	69,41	8,29·10 ¹¹
17	2Изобутан + 2Бутилен-1 → 2-метилдекан (и-С11) + и-С5	87,13	1,46·10 ³
18	2Изобутан + 2Бутилен-1 → 2,7-диметилоктан (и-С10) + 2-метилпентан (и-С6)	87,11	2,05·10 ³
19	Изобутан+Бутилен-1 → 2-метилгептан (и-С8)	67,62	6,11·10 ⁴

Таблица Б2 – Термодинамические характеристики основных реакций процесса алкилирования.

№	Химическая реакция	ΔH , кДж/моль	ΔS , Дж/моль·К	ΔG , кДж/моль
1	Изобутан + Бутилен-1 $\rightarrow$ 2,2,4-триметилпентан	-75,71	-178,65	-25,15
2	Изобутан + Бутилен-1 $\rightarrow$ 2,3,3-триметилпентан	-65,58	-174,18	-16,29
3	Изобутан + Бутилен-1 $\rightarrow$ 2,3,4-триметилпентан	-60,73	-168,43	-13,07
4	Изобутан + Бутилен-2 $\rightarrow$ 2,2,4-триметилпентан	-63,27	-173,61	-14,14
5	Изобутан + Бутилен-2 $\rightarrow$ 2,3,3-триметилпентан	-53,14	-169,13	-5,28
6	Изобутан + Бутилен-2 $\rightarrow$ 2,3,4-триметилпентан	-48,29	-163,39	-2,05
7	Изобутан + Бутилен-2 $\rightarrow$ 2,2,3-триметилпентан	-58,73	-173,79	-9,54
8	Изобутан + Изобутилен $\rightarrow$ 2,2,4-триметилпентан	-61,11	-176,95	-11,04
9	Изобутан + Бутилен-1 $\rightarrow$ 2,3-диметилгексан	-72,28	-160,60	-26,83
10	Изобутан + Бутилен-1 $\rightarrow$ 2,4-диметилгексан	-76,99	-163,88	-30,61
11	Изобутан + Бутилен-1 $\rightarrow$ 2,5-диметилгексан	-81,05	-162,26	-35,13
12	Изобутан + Бутилен-2 $\rightarrow$ 2,3-диметилгексан	-59,83	-155,56	-15,81
13	Изобутан + Бутилен-2 $\rightarrow$ 2,4-диметилгексан	-64,55	-158,84	-19,60
14	Изобутан + Бутилен-2 $\rightarrow$ 2,5-диметилгексан	-68,61	-157,22	-24,11

15	Изобутан+ Пропилен → 2,3- диметилпентан	-75,26	-153,17	-31,91
16	Изобутан+ Пропилен → 2,4- диметилпентан	-85,25	-156,75	-40,89
17	2Изобутан + 2Бутилен-1 → 2-метилдекан (и-С11) + и-С5	-156,14	-321,02	-65,29
18	2Изобутан + 2Бутилен-1 → 2,7- диметилоктан (и-С10) + 2-метилпентан (и-С6)	-156,06	-318,39	-65,95
19	Изобутан+Бутилен-1 → 2-метилгептан (и-С8)	-78,08	-158,50	-33,22

Рисунок Б2 – Рабочее окно программы Alkylation.

Программа расчета установки сернокислотного алкилирования v1.0

Файл Сервис Справка

Температура в контакторах, С

R-311A	R-311B	
11,148	11,807	
R-311C	R-311D	
11,807	11,148	

Плотность изобутана, кг/м3

566	

Плотность ББФ, кг/м3

582	

Соотношение изобут./олефины

R-311A	R-311B
8,61	8,78
R-311C	R-311D
8,61	8,61

Объемная скорость реакции, ч-1

R-311A	R-311B
0,078	0,066
R-311C	R-311D
0,07	0,078

Концентрация воды, %

4	3,65

Альфа (для воды)

-0,0518

Бета (для кислоты)

0,033

Состав сырья и продуктов, %мас.

Изобутан ББФ

Фр. Бутановая Фр. Пропановая

Материальный баланс

Компонент	Входной поток	Выходной поток
ППФ т/ч	3,44	3,43
ББФ т/ч	190,84	154,78
Алкилбензин т	0	36,07
Итого	194,28	194,28

Состав алкилата

Общий поток

2,3,3-тримет	2,3,4-тримет	2,2,3-тримет	2,3-диметил	2,4-диметил	2,5-диметил	2,2-диметил	2,3-диметил	2,4-диметил	2,2,3,3-тетра	И11	И7	И10	И8	И9	ОЧИ(Q-Dis)	ОЧМ(Q-Dis)	ОЧИ	ОЧМ
17,011	14,925	6,414	3,714	3,944	4,826	0,000	1,467	1,865	0,000	4,726	0,000	0,304	2,237	2,500	Еди50	Еди48	95,99	92,03

Таблица Б3 - Конечный расчет погрешности эксперимента

Дата	ОЧМ (экспер имент)	ОЧИ (экспе римен т)	ОЧМ (расч ет)	ОЧИ (расч ет)	Концент рация ASO, %масс.	Концент рация воды, %масс	Погреш ность ОЧИ, %	Погреш ность ОЧМ, %	ОЧИ с учетом дезактив ации	ОЧМ с учетом дезактив ации	Погрешн ость ОЧИ с учетом дезактив ации, %	Погрешн ость ОЧМ с учетом дезактив ации, %
01.01.2017	92,1	95,5	91,6	96,23	3,2	3,8	0,54	-0,76	95,72	92,26	-0,23	-0,17
02.01.2017	92,2	95,6	91,57	96,2	3,7	3,3	0,68	-0,63	95,68	92,24	-0,08	-0,04
03.01.2017	92,1	95,5	91,71	96,31	3,9	3,9	0,42	-0,85	95,8	92,37	-0,31	-0,29
04.01.2017	92,1	95,5	91,63	96,09	3,8	4,0	0,51	-0,62	95,71	92,14	-0,22	-0,04
05.01.2017	92,0	95,4	91,54	96,04	2,8	3,2	0,50	-0,67	95,65	92,07	-0,26	-0,08
06.01.2017	92,1	95,5	91,51	95,99	3,6	4	0,64	-0,51	95,61	92,03	-0,12	0,08
07.01.2017	92,2	95,6	91,37	95,93	3,1	3,6	0,90	-0,35	95,54	91,91	0,06	0,31
08.01.2017	91,6	94,7	92,64	96,43	3,4	3,1	-1,14	-1,83	95,7	92,09	-1,06	-0,53
09.01.2017	92,2	95,6	91,83	95,85	3,4	6,7	0,40	-0,26	95,71	91,77	-0,12	0,47
10.01.2017	92,1	95,4	91,17	95,26	4,0	5,2	1,01	0,15	95,37	91,21	0,03	0,97
11.01.2017	92,4	96,0	91,19	95,34	3,3	4,9	1,31	0,69	95,58	91,56	0,44	0,91
12.01.2017	92,1	95,5	91,36	95,7	3,9	3,8	0,80	-0,21	95,48	91,71	0,02	0,42
13.01.2017	92,2	95,6	91,38	95,97	3,9	4,4	0,89	-0,39	95,63	91,86	-0,03	0,37
14.01.2017	92,2	95,6	91,93	96,25	4,3	4,4	0,29	-0,68	95,84	92,33	-0,25	-0,14
15.01.2017	92,1	95,4	91,27	95,75	4,8	4,5	0,90	-0,37	95,42	91,75	-0,02	0,38
16.01.2017	92,2	95,5	91,14	95,3	4,4	4,6	1,15	0,21	95,61	91,59	-0,12	0,66
17.01.2017	92,3	95,7	91,03	95,12	4,3	4,5	1,38	0,61	95,78	92,12	-0,08	0,20
18.01.2017	92,4	95,9	91,97	96,31	4,7	5,1	0,47	-0,43	96,1	92,32	-0,21	0,09
19.01.2017	92,5	96,0	92,78	96,84	4,4	3,2	-0,30	-0,88	96,2	92,85	-0,21	-0,38

20.01.2017	92,3	95,7	91,98	96,1	4,3	3,6	0,35	-0,42	95,82	92,52	-0,13	-0,24
21.01.2017	92,2	95,6	91,82	96,23	3,1	3,6	0,41	-0,66	95,82	92,37	-0,23	-0,18
22.01.2017	92,0	95,4	91,31	95,88	3,3	3,1	0,75	-0,50	95,41	91,93	-0,01	0,08
23.01.2017	92,1	95,4	91,28	95,84	2,9	3,6	0,89	-0,46	95,37	91,89	0,03	0,23
24.01.2017	92,1	95,5	91,28	95,84	3,7	4,3	0,89	-0,36	95,37	91,9	0,14	0,22
25.01.2017	92,1	95,5	91,38	95,89	3,9	3,8	0,78	-0,41	95,46	91,96	0,04	0,15
26.01.2017	92,2	95,6	91,61	96,12	3,6	4,2	0,64	-0,54	95,72	92,16	-0,13	0,04
27.01.2017	92,2	95,8	91,3	95,38	5,4	3,7	0,98	0,44	95,58	91,92	0,23	0,30
28.01.2017	92,2	95,9	91,4	95,47	4,3	3,9	0,87	0,47	95,6	91,99	0,33	0,23
29.01.2017	92,2	95,6	91,34	95,41	4,6	4,3	0,93	0,20	95,86	91,94	-0,27	0,28
30.01.2017	92,2	95,5	91,28	95,33	4,6	5,3	1,00	0,18	95,5	91,59	0,00	0,66

Приложение В.

Таблица В1 –Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Повышение производительности	0,15	4	3	2	0,6	0,45	0,3
2. Удобство в эксплуатации	0,05	3	5	5	0,15	0,25	0,25
3. Энергоэкономичность	0,08	5	4	4	0,4	0,32	0,32
4. Надежность	0,08	5	3	3	0,4	0,24	0,24
5. Безопасность	0,1	5	5	5	0,5	0,5	0,5
6. Простота эксплуатации	0,05	4	5	5	0,2	0,25	0,25
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,11	4	3	3	0,44	0,33	0,33
2. Уровень проникновения на рынок	0,05	1	2	2	0,05	0,1	0,1
3. Цена	0,08	5	4	3	0,35	0,32	0,24
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0,07	4	4	4	0,28	0,28	0,28
5. Финансирование научной разработки	0,08	3	5	4	0,24	0,4	0,32
6. Срок выхода на рынок	0,05	2	4	4	0,1	0,2	0,2
7. Наличие сертификации разработки	0,05	1	3	3	0,05	0,15	0,15
Итого	1				3,75	3,79	3,48

Бф – продукт проведенной исследовательской работы;

Бк1 – CHEMCAD III;

Бк2– PROSIM.

Таблица В2 – Матрица SWOT-анализа.

	Сильные стороны проекта: С1. Высокая точность математической модели С2. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки С3. Наличие бюджетного финансирования С4. Чувствительность к изменению состава сырья	Слабые стороны проекта: Сл1. Устаревшая технология, заложенная в модель Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой Сл3. Ограниченность экспериментальных данных с промышленной установки Сл4. Отсутствие учета в модели концентрации серной кислоты – катализатора процесса
Возможности: В1. Внедрение разработанной системы на предприятия нефтепереработки для оптимизации процесса производства бензинов В2. Внедрение разработанной системы на производство для отработки действий персонала В3. Внедрение системы в образовательную сферу в качестве компьютерного тренажера для обучения студентов В4. Внедрение на Российских НПЗ процесса алкилирования.	1. Разработка математической модели процесса серноокислотного алкилирования с целью перехода к более совершенным технологиям, конструкциям оборудования и новым катализаторам 2. Повышение эффективности использования сырья на предприятии 3. Проведение экспериментов в лабораториях ТПУ для проверки модели на адекватность 4. Создание удобного интерфейса программы на основе модели	1. Постепенный переход к новым технологиям, другим катализаторам 2. Моделирование всей технологической схемы процесса, с целью прогнозирования промышленных данных 3. Разработка модели, учитывающей концентрацию серной кислоты 4. Приобретение необходимого оборудования опытного образца
Угрозы: У1. Внедрение других систем на предприятиях отечественных НПЗ У2. Ограниченный рынок основного сырья (изобутан и ББФ) У3. Отсутствие спроса; не заинтересованность предприятий по внедрению инновационного проекта У4. Высокая конкуренция со стороны других технологий алкилирования, использующих различные катализаторы	1. Продвижение новой технологии с целью появления спроса на усовершенствованную модель 2. Развитие конкурентной среды 3. Сокращение временных затрат на создание модели 4. Введение в модель чувствительности к составу сырья и создание базы катализаторов	1. Разработка научного исследования 2. Приобретение необходимого оборудования опытного образца 3. Приобретение необходимых экспериментальных данных по составу сырья и продукта с промышленной установки 4. Продвижение новой технологии с целью появления спроса

Таблица В3 – Итоговая матрица SWOT-анализа для проекта по моделированию процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.

	Сильные стороны проекта: С1. Высокая точность математической модели С2. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки С3. Наличие бюджетного финансирования С4. Чувствительность к изменению состава сырья	Слабые стороны проекта: Сл1. Устаревшая технология, заложенная в модель Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой Сл3. Ограниченность экспериментальных данных с промышленной установки Сл4. Отсутствие учета в модели концентрации серной кислоты – катализатора процесса
Возможности: В1. Внедрение разработанной системы на предприятия нефтепереработки для оптимизации процесса производства бензинов В2. Внедрение разработанной системы на производство для отработки действий персонала В3. Внедрение системы в образовательную сферу в качестве компьютерного тренажера для обучения студентов В4. Внедрение на Российских НПЗ процесса алкилирования.	1. Разработка математической модели процесса сернокислотного алкилирования с целью перехода к более совершенным технологиям, конструкциям оборудования и новым катализаторам(В1С2С3) 2. Повышение эффективности использования сырья на предприятии(В2С1С2С3С4) 3. Проведение экспериментов в лабораториях ТПУ для проверки модели на адекватность(В3С1С2С4) 4. Создание удобного интерфейса программы на основе модели(В4С3)	1. Постепенный переход к новым технологиям, другим катализаторам(В1Сл1Сл4) 2. Моделирование всей технологической схемы процесса, с целью прогнозирования промышленных данных(В2Сл2) 3. Разработка модели, учитывающей концентрацию серной кислоты(В3Сл2) 4. Приобретение необходимого оборудования опытного образца(-)
Угрозы: У1. Внедрение других систем на предприятиях отечественных НПЗ У2. Ограниченный рынок основного сырья (изобутан и ББФ) У3. Отсутствие спроса; не заинтересованность предприятий по внедрению инновационного проекта У4. Высокая конкуренция со стороны других технологий алкилирования, использующих различные катализаторы	1. Продвижение новой технологии с целью появления спроса на усовершенствованную модель(У1С2) 2. Развитие конкурентной среды(У2С1С2С4) 3. Сокращение временных затрат на создание модели(-) 4. Введение в модель чувствительности к составу сырья и создание базы катализаторов(У4С1С2С3)	1. Разработка научного исследования(У1Сл1Сл2) 2. Приобретение необходимого оборудования опытного образца(-) 3. Приобретение необходимых экспериментальных данных по составу сырья и продукта с промышленной установки(У3Сл1Сл2Сл3Сл4) 4. Продвижение новой технологии с целью появления спроса(У4Сл1Сл3Сл4)

Таблица В4 – Временные показатели проведения научного исследования

№	Название	Дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Введение	7	01.09.16	07.09.16	Студент
2	Литературный обзор	22	08.09.16	30.09.16	Руководитель
3	Теоретический анализ	22	01.10.16	23.10.16	Руководитель, студент
4	Постановка задачи исследования	15	24.10.16	9.11.16	Руководитель, студент
5	Термодинамический анализ реакций	78	10.11.16	27.01.17	Студент
6	Корректировка имеющейся кинетической модели процесса	76	28.01.16	14.04.16	Руководитель, студент
7	Оценка адекватности математической модели реальному процессу	5	15.04.16	20.04.16	Студент
8	Оценка влияния подобранных параметров параметров на целевые реакции процесса	25	21.04.16	15.05.16	Студент
9	Результаты и обсуждения	14	16.05.16	30.05.16	Руководитель, студент
И т о г о:		264			

Таблица В5 – Календарный план-график проведения НИОКР

№	Вид работ	Исполнители	Продолжительность выполнения работ								
			Сентябрь, 2016	Октябрь, 2016	Ноябрь 2016	Декабрь 2016	Январь 2017	Февраль 2017	Март 2017	Апрель 2017	Май 2017
1	Введение	Студент									
2	Литературный обзор	Студент									
3	Теоретический анализ	Студент, руководитель									
4	Постановка задачи исследования	Руководитель, студент									
5	Термодинамический анализ реакций	Студент									
6	Корректировка имеющейся кинетической модели процесса	Студент									
7	Оценка адекватности математической модели	Студент									
8	Оценка влияния технологических параметров на целевые реакции процесса	Студент									
9	Результаты и обсуждения	Руководитель, студент									

Таблица В6 — Затраты на оборудование

Наименование	Единица измерения	Количество			Цена за ед., тыс. руб.			Общая стоимость оборудования, тыс. руб.		
		Исп. 1	Исп.2	Исп. 3	Исп.1	Исп. 2	Исп. 3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
Реактор фирмы «Stratco»	шт.	4	4	4	1000	1000	1000	4000	4000	4000
Вспомог.оборудование(сепараторы, теплообменники)	шт.	20	20	20	60	60	60	1200	1200	1200
Персональный компьютер	шт.	1	1	1	25	25	25	25	25	25
ПО Microsoft Office 365 Small Bus Prem	шт.	1	1	1	5,750	5,75	5,75	5,75	5,75	5,75
Лицензия на программный пакет Gaussian	шт.	-	1	1	-	50	50	-	50	50
Лицензия на программный пакет Delphi 7	шт.	1	1	1	27	27	27	27	27	27
Лицензия на программный пакет STATISTICA 10	шт.	1	1	1	-	-	20	-	-	20
Итого								5257,75	5307,75	5327,75

Таблица В7 – Расчет бюджета проекта

Наименование статьи	Сумма, руб.		
	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Затраты на материалы	420000	475000	520000
2. Затраты на специальное оборудование для научных работ	5257750	5307750	5327750
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	260600	260600	260600
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	31872	31872	31872
5. Отчисления во внебюджетные фонды	79097	79097	79097
5. Затраты на научные и производственные командировки	8400	8400	8400
6. Накладные расходы	902035	910035	913235
7. Бюджет затрат	6539754	6597754	6620954