

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки (специальность) 18.04.01 Химическая технология
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Моделирование жидкофазного процесса алкилирования изобутана олефинами

УДК 665.652.4-095.253:665.725.2

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Копычева Ульяна Николаевна		

Руководитель

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ивашкина Елена Николаевна	д.т.н.		

Томск – 2021 г.

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

Код компетенции СУОС	Наименование компетенции СУОС (самостоятельно устанавливаемого образовательного стандарта)
Общекультурные (универсальные) компетенции	
УК(У)-1	Способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действия
УК(У)-2	Способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способность организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности
ОПК(У)-2	Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОПК(У)-3	Способность к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки
ОПК(У)-4	Готовность к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез
ОПК(У)-5	Готовность к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способность организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей
ПК(У)-2	Готовность к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи
ПК(У)-3	Способность использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
Дополнительные профессиональные компетенции	

(профессиональные компетенции, установленные университетом)	
ДПК(У)-1	Готовность к решению профессиональных производственных задач – контролю технологического процесса, разработке параметров проведения технологического процесса, разработке технологических расходных коэффициентов сырья и материалов, энергоресурсов, к выбору основного и вспомогательного оборудования
ДПК(У)-2	Способность использовать математические модели и пакеты прикладных программ для описания и прогнозирования различных явлений
ДПК(У)-3	Способность проводить технологические и технические расчеты по проектам, технико-экономический анализ проекта
ДПК(У)-4	Способность разрабатывать учебно-методической документации для реализации образовательных программ

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

Инженерная школа *природных ресурсов*
 Направление подготовки (специальность) 18.04.01 – «Химическая технология»
 Отделение химической инженерии

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

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

<i>Магистерской диссертации</i> <small>(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)</small>
--

Студенту:

Группа	ФИО

Тема работы:

Моделирование жидкофазного процесса алкилирования изобутана олефинами	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	02.02.2021 №33-24/с
Срок сдачи студентом выполненной работы:	26 мая 2021 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>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></p>	<p style="text-align: center;"> Объект исследования – установка сернокислотного алкилирования изобутана олефинами. Технология предназначена для получения экологически чистых высокооктановых компонентов товарного бензина. </p>
---	---

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов

(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).

- 1 Литературный обзор
 - 1.1 Технология процесса алкилирования
 - 1.1.1 Сернокислотное алкилирование
 - 1.1.2 Фторводородной алкилирование
 - 1.1.3 Процесс алкилирования на твердом катализаторе
 - 1.1.4 Сравнение технологий алкилирования
 - 1.2 Химизм процесса
 - 1.3 Гетерогенные кислотные катализаторы процесса алкилирования
 - 1.3.1 Твердые кислоты
 - 1.3.2 Сульфатированные катализаторы
 - 1.3.3 Ионообменные смолы
 - 1.3.4 Цеолитные катализаторы
- 2 Объекты и методы исследования
 - 2.1 Объект исследования
 - 2.2 Методы исследования
 - 2.2.1 Кинетическая модель алкилирования
 - 2.2.2 Моделирование блока ректификации
- 3 Результаты проведенного исследования
 - 3.1 Анализ лабораторных данных
 - 3.1.1 Анализ бутан-бутиленовой фракции
 - 3.1.2 Анализ состава циркулирующего изобутана
 - 3.1.3 Анализ изобутана-хладогента
 - 3.1.4 Анализ продуктового алкилата
 - 3.1.5 Анализ серной кислоты
 - 3.2 Анализ экспериментальных данных технологического режима
 - 3.2.1 Анализ расхода сырья
 - 3.2.1 Анализ температуры
 - 3.3 Расчет потоков при действующем технологическом режиме
 - 3.3 Оценка влияния технологических параметров
 - 3.3.1 Влияние температуры
 - 3.3.2 Влияние расхода бутан-бутиленовой фракции
 - 3.3.3 Влияние расхода циркулирующего изобутана
 - 3.3.4 Влияние расхода свежей кислоты
 - 3.4.5 Рекомендации по ведению технологического режима
 - 3.5 Влияние режима ректификации на качество продуктового алкилата

Перечень графического материала
(с точным указанием обязательных чертежей)

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Рыжакина Татьяна Гавриловна
Социальная ответственность	Пашков Евгений Николаевич

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	01.02.2021 г.
---	---------------

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Копычева Ульяна Николаевна		

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

Инженерная школа природных ресурсов
 Отделение химической инженерии
 Направление подготовки (специальность) 18.04.01 – «Химическая технология»
 Профиль «Химическая технология топлива и газа»
 Уровень образования магистратура
 Период выполнения весенний семестр 2020/2021 учебного года

Форма представления работы

Магистерская диссертация

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

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	26 мая 2021 г.
--	----------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
12.03.2021 г.	Введение	10
23.03.2021 г.	Технология процесса жидкофазного алкилирования. Процесс алкилирования на твердом катализаторе. Сравнение технологий алкилирования. Химизм процесса. Гетерогенные кислотные катализаторы процесса алкилирования.	10
07.04.2020 г.	Цель и задачи исследования. Функционирование установки сернокислотного алкилирования. Характеристика объекта исследования. Кинетическая модель алкилирования. Моделирование блока ректификации.	20
30.04.2020 г.	Результаты проведенного исследования. Анализ лабораторных данных. Анализ экспериментальных данных технологического режима. Расчет потоков при действующем технологическом режиме. Оценка влияния технологических параметров. Рекомендации по ведению технологического режима. Влияние режима ректификации на качество продуктового алкилата	50
17.05.2020 г.	Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». Раздел «Социальная ответственность». Заключение.	10

Составил преподаватель

Группа	ФИО	Подпись	Дата	Группа
Доцент ОХИ ИШПР	Чузлов Вячеслав Алексеевич	К.Т.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Копычева Ульяна Николаевна		

СОГЛАСОВАНО:

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

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ92	Копычева Ульяна Николаевна

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

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>Работа с информацией, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах, статических бюллетенях и изданиях, нормативно-правовых документа</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 и инновационного потенциала НТИ</i>	<i>Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта.</i>
2. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	<i>Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НТИ</i>
3. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	<i>Проведение оценки экономической эффективности исследования</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 и бюджет проекта</i>
4. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности разработки</i>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	31.01.2021
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	к.э.н.		31.01.2021

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Копычева Ульяна Николаевна		31.01.2021

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ92	Копычева Ульяна Николаевна

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Тема ВКР:

Моделирование жидкофазного процесса алкилирования изобутана олефинами	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объект исследования: установка сернокислотного алкилирования Область применения: нефтеперерабатывающая промышленность
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> – Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019) – ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. – ГОСТ 12.4.011-89 (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<ul style="list-style-type: none"> 1. Отклонение показателей микроклимата; 2.Повышенный уровень шума; 3.Электрический ток; 4.Утечка вредных веществ; 5.Недостаточная освещенность рабочей зоны
3. Экологическая безопасность:	Загрязнители атмосферы в процессе алкилирования: <ul style="list-style-type: none"> – сернистая кислота; – азота двуокись; – углеводороды непредельные C₄; – изобутан; – гидроксид натрия; Загрязнители литосферы: <ul style="list-style-type: none"> – отработанная серная кислота; – смолы. Загрязнители гидросферы: <ul style="list-style-type: none"> – вода после промывки аппаратов; – бытовые стоки операторской.

<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<p>Перечень возможных ЧС:</p> <ul style="list-style-type: none"> – взрыв парогазового облака, образованного при разгерметизации оборудования; – пожар в форме огненного шара при мгновенном разрушении технологического аппарата, содержащего углеводороды в перегретом состоянии; – пожар пролива при разгерметизации аппарата, содержащего жидкие углеводородные фракции. <p>Наиболее типичная ЧС:</p> <ul style="list-style-type: none"> – разлив нефтепродуктов с загазованностью и последующим взрывом.
---	--

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Пашков Евгений Николаевич	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Копычева Ульяна Николаевна		

Реферат

Выпускная квалификационная работа 135 страниц, 34 рисунка, 52 таблицы, 56 источников.

В ходе работы были проведены исследования, объектом которых является технология процесса сернокислотного алкилирования. Предметом исследования являются олефиновая и изобутановая фракции.

Цель работы - оптимизация операционных затрат при получении изооктана в процессе сернокислотного алкилирования с использованием нестационарной математической модели.

Актуальность работы заключается в производстве экологически чистых высокооктановых компонентов бензинов с использованием технологии жидкофазного алкилирования.

Ключевые слова: алкилирование, математическое моделирование, изобутановая фракция, бутан-бутиленовая фракция, бензин.

Выпускная квалификационная работа выполнялась на базе Инженерной школы природных ресурсов, отделения Химической инженерии Инженерной школы природных ресурсов.

Содержание

Введение.....	16
1 Литературный обзор	18
1.1 Технология процесса алкилирования	18
1.1.1 Сернокислотное алкилирование.....	20
1.1.2 Фтороводородное алкилирование	21
1.1.3 Процесс алкилирования на твердом катализаторе	23
1.1.4 Сравнение технологий алкилирования	24
1.2 Химизм процесса.....	26
1.3 Гетерогенные кислотные катализаторы процесса алкилирования	29
1.3.1 Твердые кислоты.....	30
1.3.2 Сульфатированные катализаторы	30
1.3.3 Ионообменные смолы.....	31
1.3.4 Цеолитные катализаторы	31
2 Объекты и методы исследования	34
2.1 Объект исследования.....	34
2.2 Методы исследования.....	36
2.2.1 Кинетическая модель алкилирования.....	36
2.2.2 Моделирование блока ректификации	37
3 Результаты проведенного исследования	44
3.1 Анализ лабораторных данных	44
3.1.1 Анализ бутан-бутиленовой фракции	44
3.1.2 Анализ состава циркулирующего изобутана	46
3.1.3 Анализ изобутана-хладогента.....	48
3.1.4 Анализ продуктового алкилата.....	48
3.1.5 Анализ серной кислоты	49
3.2 Анализ экспериментальных данных технологического режима	51
3.2.1 Анализ расхода сырья.....	51
3.2.2 Анализ температуры	52
3.3 Расчет потоков при действующем технологическом режиме	55

3.4	Оценка влияния технологических параметров	57
3.4.1	Влияние температуры	58
3.4.2	Влияние расхода бутан-бутиленовой фракции	62
3.4.3	Влияние расхода циркулирующего изобутана	63
3.4.4	Влияние расхода свежей кислоты	64
3.4.5	Рекомендации по ведению технологического режима	65
3.5	Влияние режима ректификации на качество продуктового алкилата.....	65
4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	71
4.1	Потенциальные потребители результатов исследования	71
4.2	Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	71
4.4	Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	77
4.5	Инициация проекта	78
4.6	Планирование управления научно-техническим проектом.....	80
4.7	Бюджет научного исследования	82
4.8	Организационная структура проекта	87
4.9	Реестр рисков проекта	88
4.10	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности	88
4.10.1	Оценка абсолютной эффективности исследования.....	88
4.10.2	Оценка сравнительной эффективности исследования	93
5	Социальная ответственность	96
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	96
5.1.1	Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства	96
5.2	Производственная безопасность	97
5.2.1	Анализ выявленных вредных факторов при разработке, изготовлении и эксплуатации установки алкилирования	99
5.2.2	Расчет искусственного освещения	102
5.3	Экологическая безопасность.....	104

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	106
Выводы	109
Список литературы	111
Приложение А	117
Приложение Б.....	118
Приложение В.....	124

Введение

Ключевой отраслью отечественной промышленности является добыча и переработка углеводородного сырья. Нефтяная промышленность Российской Федерации позволяет поддерживать устойчивое экономическое развитие страны, нефтегазовый сектор включает в себя добычу нефти и газа, производство нефтепродуктов, а также реализацию нефтехимической продукции. Разработка и внедрение технологий, позволяющих повысить качество производимой продукции и экономическую эффективность нефтеперерабатывающих предприятий является важным фактором устойчивого экономического развития отрасли.[1]

Свыше 30% потребляемой продукции нефтегазовой промышленности на Российском потребительском рынке приходится на долю товарных бензинов для автомобилей. Ужесточение экологических требований к моторным топливам увеличивает спрос на технологии по производству экологически чистых компонентов товарных бензинов с высоким значением октанового числа, одним из таких процессов является жидкофазное алкилирование изобутана низшими олефинами [2].

Объектом исследования является процесс сернокислотного алкилирования, который позволяет получать высокооктановое топливо, не содержащие углеводороды ароматического и нафтенового строения. Основным компонентом алкилата является высокоразветвлённый изомер C_8 – 2,2,4-триметилпентан.

Для проведения исследований процесса сернокислотного алкилирования изобутана низшими олефинами необходимо применить метод математического моделирования, который позволит рассчитать состав и октановое число алкилата при различных технологических условиях процесса и переменном составе олефиновой и изобутановой фракций. Для проведения исследований необходимо выполнить следующие задачи:

- Провести анализ данных промышленных и лабораторных испытаний;

- Составить формализованную схему кинетических превращений и определить кинетические закономерности протекания С-алкилирования;
- Создать модель блока разделения для установки производства алкилата;
- Выявить закономерности влияния технологических параметров процесса на качество получаемой продукции;
- Проверить гипотезу о влиянии четкости разделения на качество товарного алкилата.

Целью работы является оптимизация операционных затрат при получении изооктана в процессе сернокислотного алкилирования с использованием нестационарной математической модели.

Математическая модель процесса сернокислого алкилирования изобутана олефинами позволит повысить эффективность управления процессом, снизить риски производства и увеличить экономические показатели.

Применение алкилата в производстве высокооктановых товарных бензинов позволит повысить экологический класс топлива и нивелировать негативное воздействие на окружающую среду.

1 Литературный обзор

На сегодняшний день мировая производительность по алкилату составляет 102 млн. тонн в год, это 10% от общего количества производимого автомобильного бензина. Ужесточение экологических требований к продукции нефтеперерабатывающих заводов приводит к росту спроса на алкилат, так как он состоит из разветвленных предельных углеводородов, имеет низкую летучесть и низкое содержание ароматических и нафтеновых углеводородов, при этом характеризуется высоким октановым числом. На рисунке 1.1 приведена доля алкилата в общем бензиновом фонде в России и за рубежом.



Рисунок 1.1 – Доля алкилата в общем бензиновом фонде в России, Западной Европе и США, % масс [2]

Производство алкилата напрямую связано с прогрессом в технологиях деструкции углеводородов, таких как крекинг. В качестве сырья на установках алкилирования используются газы каталитического крекинга, состоящие на 70% из олефинов C_3 - C_5 .

Таким образом, процесс алкилирования позволяет производить экологичное высокооктановое топливо для автомобилей и вовлекает в производство побочные продукты имеющихся установок нефтеперерабатывающих предприятий, тем самым повышая эффективность производства.

1.1 Технология процесса алкилирования

Наиболее распространенной технологией получения алкилата является взаимодействие изобутана с олефинами C_4 при использовании жидких

катализаторов, таких как серная и фторводородная кислоты. H_2SO_4 и HF кислоты имеют недостатки и преимущества.

HF обладает высокой токсичностью и летучестью, при попадании в атмосферу образует стабильные аэрозоли. Все эти факторы повышают класс безопасности установки с использованием плавиковой кислоты и стоимость строительства и эксплуатации.

Сернокислотное алкилирование является более широко применяемым, H_2SO_4 менее токсичная и менее летучая кислота, но она имеет большую коррозионную активность. В таблице 1.1 приведена сравнительная характеристика октановых чисел по исследовательскому методу при использовании серной и фторводородных кислот в качестве катализатора процесса алкилирования изобутана различными олефинами [3-4].

Таблица 1.1 – Сравнительная характеристика октановых чисел при использовании различных катализаторов и олефинов

Олефин	Октановое число по исследовательскому методу	
	HF	H_2SO_4
C_3H_6	92,0	91,5
C_4H_8-1	96,5	97,5
C_4H_8-2	96,5	97,5
i- C_4H_8	94,5	94,5
C_5H_{10}	91,0	91,0

Также существуют гетерогенное алкилирование с использованием твердых катализаторов, основанное на использовании цеолитов или анион-модифицированных оксидов металлов. Основным недостатком использования данной технологии является короткий межрегенерационный период катализатора, обусловленный реакциями олигомеризации низших олефинов с образованием высокомолекулярных соединений.

1.1.1 Сернокислотное алкилирование

Алкилирование является экзотермическим процессом, где в качестве исходного сырья используется изобутан с установки газофракционирования и бутан-бутиленовая фракция. Реакция синтеза происходит в реакторе смешения с большим выделением тепла, важно обеспечивать отведение тепла из реакционной зоны и поддерживать температуру в интервале от 4 до 18 °С для подавления побочных реакций [5-6].

На рисунке 1.2 представлена блок-схема установки сернокислотного алкилирования.

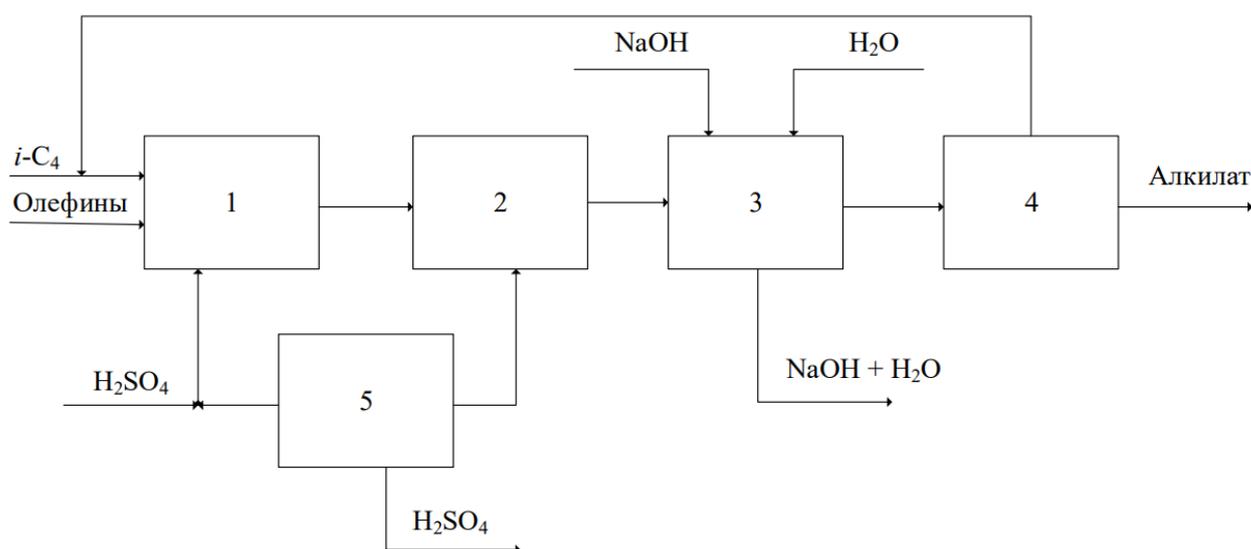


Рисунок 1.2 -Принципиальная блок-схема сернокислотного алкилирования:

1 – реакторный блок, 2 – блок отстаивания кислоты, 3 – блок водной и щелочной промывки, 4 – блок ректификации, 5 – блок регенерации кислоты.

Типовая установка сернокислотного алкилирования изобутана бутан-бутиленовой фракцией от компании STRATCO включает в себя следующие блоки [4]:

- Реакторный блок, состоящий из параллельных контакторных реакторов, что позволяет снизить расход серной кислоты.

В него поступает олефиновое сырье и изобутан, в присутствии серной кислоты происходит алкилирование. В реакторе поддерживается давление 0,6 -

1 МПа, данное значение предотвращает испарение углеводородов и серной кислоты в реакционном пространстве;

- Блок отстаивания, в котором отработанная серная кислота отделяется от сырого алкилата, отделение происходит за счет разности плотностей;

- Блок промывки служит для удаления следов свободной кислоты, кислых эфиров и нейтральных эфиров, образованных при реакции серной кислоты с олефинами. Если эти эфиры не удалить, то они могут вызвать коррозию и загрязнение оборудования;

- Блок ректификации предназначен для отделения изобутана и бутана. Мольное отношение изобутан/олефин варьируется от 7:1 до 10:1, то есть реакция происходит в избытке изобутана.

В колонне деизобутилизатора происходит отделение непрореагировавшего изобутана, который рециркулирует в реакционный блок. Для снижения давления насыщенных паров продуктового потока предусмотрена колонна – дебутанизатор, в которой происходит удаление бутана и изопентана;

- Блок регенерации серной кислоты. В котором отработанная кислота отчищается от побочных продуктов и возвращается в реактор алкилирования;

- Блок охлаждения. В процессе алкилирования используется система захлаживания реакционной смеси для съема теплоты реакции и регулирования температуры контакторов алкилирования. При захлаживании реакционной смеси углеводороды, контактирующие с серной кислотой, удерживаются в жидкой фазе. В результате обеспечивается постоянная концентрация изобутана в зоне реакции, и минимизируется рециркуляция изобутана с блока деизобутилизации.

1.1.2 Фтороводородное алкилирование

Компании Phillips (Conoco-Phillips) и UOP реализуют процесс алкилирования с использованием плавиковой кислоты, в качестве катализатора.

Сернокислотное и фтороводородное алкилирование имеют схожее аппаратное оформление, но HF-алкилирование имеет следующие особенности:

1. Реакторный блок имеет более высокую температуру, что позволяет использовать воду для снятия тепла;
2. Алкилат содержит большое количество плавиковой кислоты, из-за ее высокой летучести.
3. Все оборудование произведено из углеродистой стали.

На рисунке 1.3 показана принципиальная схема фтороводородного алкилирования на установке Mercox компании UOP.

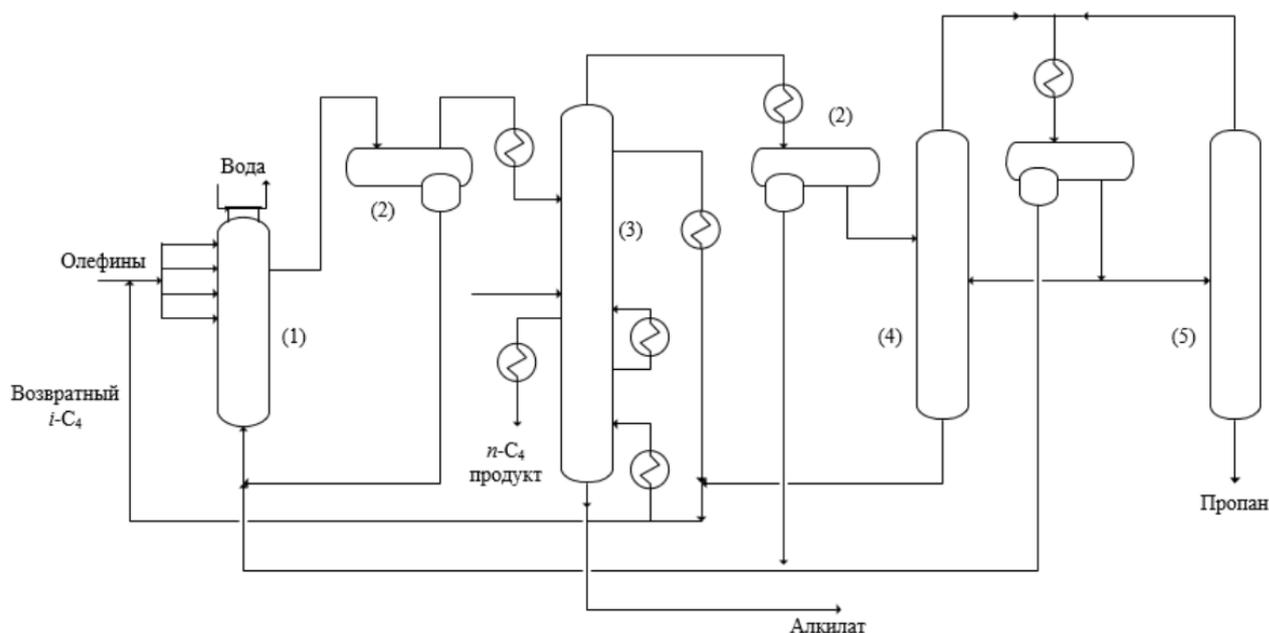


Рисунок 1.3 – Принципиальная схема установки HF-алкилирования от компании UOP [4]: 1 – реактор, 2 – отстойник кислоты, 3 – деизобутанизатор, 4 – испарительная колонна HF, 5 – депропанизатор.

В реактор алкилирования (1) поступает бутан-бутиленовая фракция и изобутан. В качестве хладогента используется вода, которая циркулирует по трубному пространству. После реактора смесь поступает в отстойник (2), где серная кислота отделяется от смеси углеводородов и возвращается в реакторную зону.

Алкилат, содержащий растворенную HF-кислоту после предварительного подогрева поступает в деизобутанизатор (3), снизу колонны отбирается алкилат, идущий в товарный парк.

Дистиллят деизобутанизатора, состоящий из изобутана, плавиковой кислоты и пропана, подается в испарительную колонну HF (4). Для удаления пропана используется внутренний депропанизатор (5), в котором отделяется пропан и плавиковая кислота.

Для поддержания высокой чистоты фторводородной кислоты, ее подвергают внутренней регенерации, что позволяет снизить потребление свежего катализатора на установке.

1.1.3 Процесс алкилирования на твердом катализаторе

Альтернативу жидкофазному алкилированию представляет компания UOP. Процесс алкилирования изобутана низшими оефинами с использованием твердокислотных катализаторов называется Alkylene, принципиальная схема которого состоит из трех основных секций [4,7]:

1. Блок предварительной обработки сырья;
2. Реакторный блок;
3. Блок фракционирования.

В блоке предварительной обработки сырья удаляются примеси из фракций, поступающих на установку, диолефины, оксигенаты, азот и серу. Помимо очистки от нежелательных компонентов, в блоке проводится изомеризация бутелена-1 в бутелен-2, что позволяет увеличить долю 2,2,3 – триметилпентана в продуктивном алкилате, который обладает наибольшим октановым числом.

Реакторный блок алкилирования оснащен регенератором твердого катализатора. Катализатор и углеводороды смешиваются в реакторе, время контакта фаз составляет всего несколько минут, разделение катализатора и алкилата происходит в верхней части реактора. Регенерация катализатора

осуществляется с помощью подачи водорода в регенератор, те есть путем гидрирования.

Соотношение катализатор/олефины поддерживается циркуляцией катализатора. Образование высокомолекулярных отложений на частицах катализатора зависит от технологического режима и побочных реакций процесса производства алкилата.

Блок ректификации аналогичен фракционированию в сернокислотном и фторводородном алкилировании. В деизобутанизаторе происходит отделение изобутановой фракции, которая с сырьем вновь подается в реактор алкилирования. В зависимости от требований к давлению насыщенных паров, предусмотрена установка дебутанизатора, где происходит отделение бутана и изопентана.

1.1.4 Сравнение технологий алкилирования

Основным показателем качества производимого алкилата является октановое число. В таблице 1.2 приведена сравнительная характеристика октановых чисел и температуры в ректоре.

Таблица 1.2 – Сравнение технологий алкилирования

Показатель	HF	H ₂ SO ₄	Твердый катализатор
Октановое число по исследовательскому методу	95,7	96,6	97,0
Октановое число по моторному методу	94,2	93,6	94,2
Температура, °C	38,0	10,0	25,0

Гетерогенное алкилирование изобутана олефинами с использованием твердого катализатора позволяет производить алкилат с наибольшим октановым числом по исследовательскому методу (97 пунктов), при этом следует отметить,

что согласно исследованиям [8-10] в данном процессе образуется наибольшая доля линейных и изо- алканов C₅-C₇.

Наибольшая доля разветвленных парафинов C₈ образуется в ходе алкилирования с использованием фторводородной кислоты, при этом октановое число имеет значение 97,6 пунктов.

Сернокислотное алкилирование позволяет получить алкилат с исследовательским октановым числом 96,6 пунктов, при этом в процессе образуется наибольшая доля тяжелых и высокомолекулярных компонентов C₉₊.

Помимо сравнения качества получаемого алкилата, необходимо оценивать капитальные затраты на строительство установки и операционные затраты на ведение процесса, то есть нужно найти оптимальное соотношение между качеством товарного алкилата и стоимостью продукта. В таблице 1.3 приведена сравнительная характеристика экономических показателей различных технологий алкилирования.

Таблица 1.3- Экономические показатели различных технологий алкилирования [4]

Показатель	Сернокислотное алкилирование	Фторводородное алкилирование	Алкилирование на твердом катализаторе
Производительность по алкилату, баррель/сутки	7064,00	7064,00	7064,00
Октановое число по исследовательскому методу	95,00	95,20	95,00
Октановое число по моторному методу	92,20	93,30	92,90
Стоимость энергоносителей, доллары/ баррель	1,32	0,70	174,0
Затраты доллары/ баррель:			
на кислоту	0,01	0,08	0,00
на катализатор	0,02	0,02	0,60
извлечение металлов	0,00	0,00	0,03

химреагенты	0,02	0,02	0,03
Постоянные затраты, доллары/баррель	3,35	2,43	1,97
Капитальные затраты, млн долларов	63,30	40,50	43,50

Наибольшими затратами на строительство обладает установка сернокислотного алкилирования, это связано с высокой коррозионной активностью H_2SO_4 , что повышает металлоемкость оборудования [11].

Оптимальными капитальными и постоянными затратами характеризуется HF-алкилирование, при этом токсичность кислоты повышает класс опасности производства, что делает данный вид алкилирования непривлекательным для нефтеперерабатывающих заводов [12].

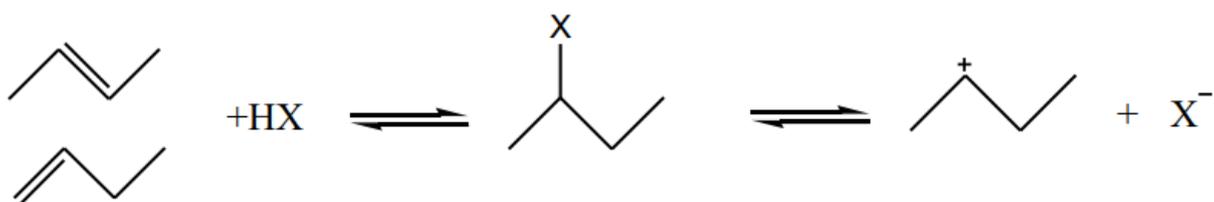
Алкилирование с использованием твердого катализатора имеет низкие затраты на строительство установки и характеризуется высокой экологичностью, при этом затраты на стоимость энергоносителей выше в сотни раз в сравнении с другими технологиями получения алкилата. Это связано с высокими операционными затратами на регенерацию твердого катализатора алкилирования.

Нельзя однозначно сказать, какая технология наиболее привлекательна. Необходимо проводить полный экономический анализ. Но в последние десятилетия мировые лидеры в нефтехимии задают тенденцию к переходу на алкилирование с использованием твердых катализаторов.

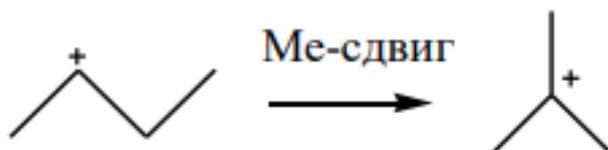
1.2 Химизм процесса

Реакция алкилирования изобутана бутеном-1 и бутеном-2 протекает по карбений ионному цепному механизму.

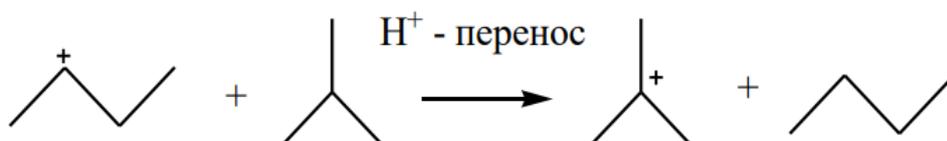
Первой стадией процесса является стадия иницирования (протонирование олефина), которая идет по правилу Марковникова в присутствии катализатора алкилирования [13-14]:



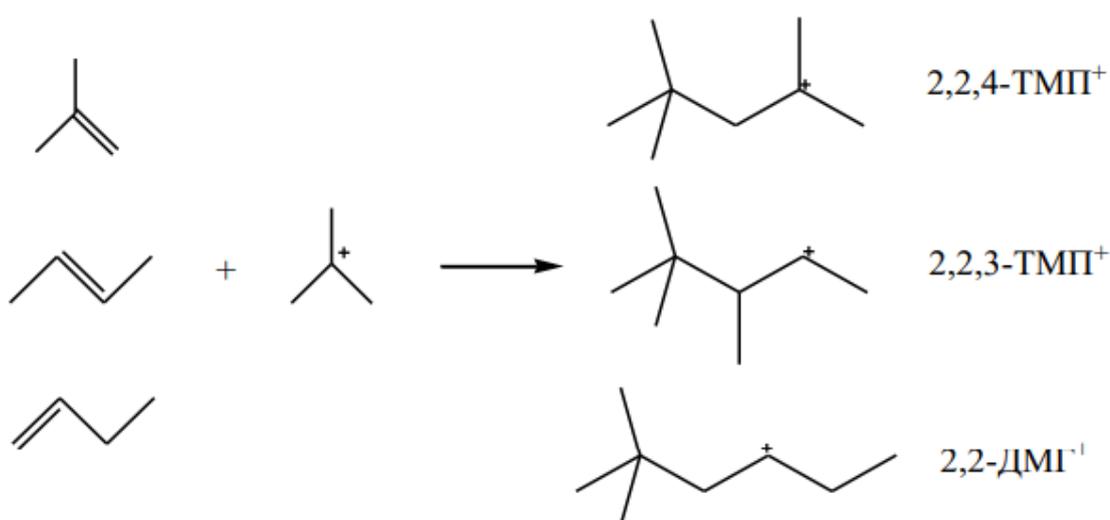
В результате метильного сдвига вторичный бутилкарбокатион изомеризуется в трет-бутилкарбокатион:



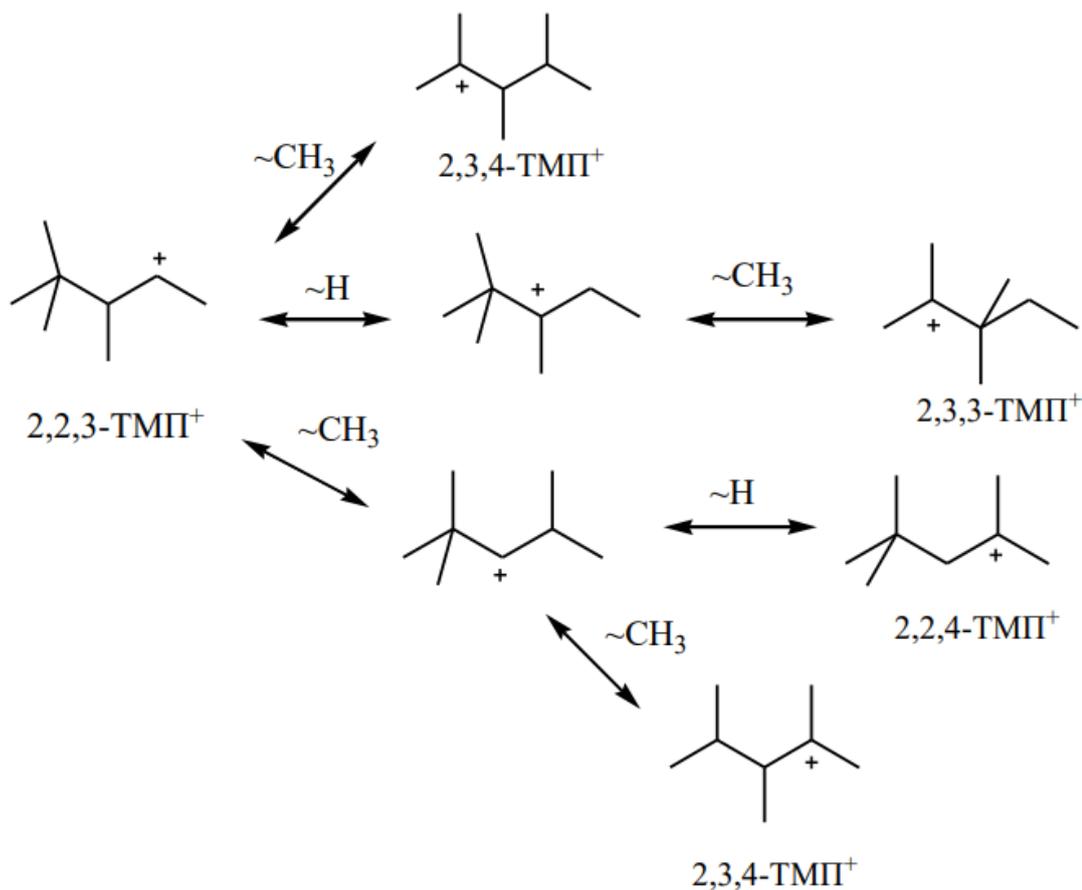
При избытке изопарафина трет-бутилкарбокатион образуется при взаимодействии карбений иона и изобутана. При этом образуется стабильный линейный алкан за счет переноса гидридного заряда и изомера:



В результате электрофильного присоединения трет-бутилкарбокатион и олефин образуют катион C_8^+ [15].

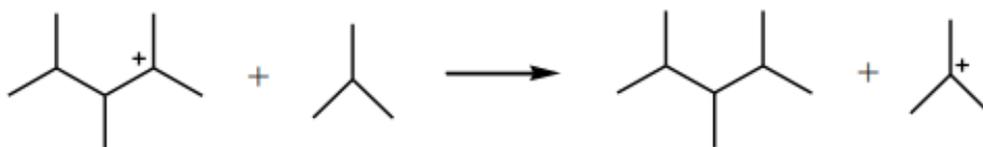


Далее вторичный изооктил изомеризуется в более стабильный третичный катион [16]:



Катализаторы, используемые в процессе алкилирования, имеют различную способность к изомеризации. Так, цеолиты и серная кислоты образуют схожие продукты алкилирования. Плавиковая кислота и хлорид алюминия образуют продукты с более низким содержанием триметилпентана.

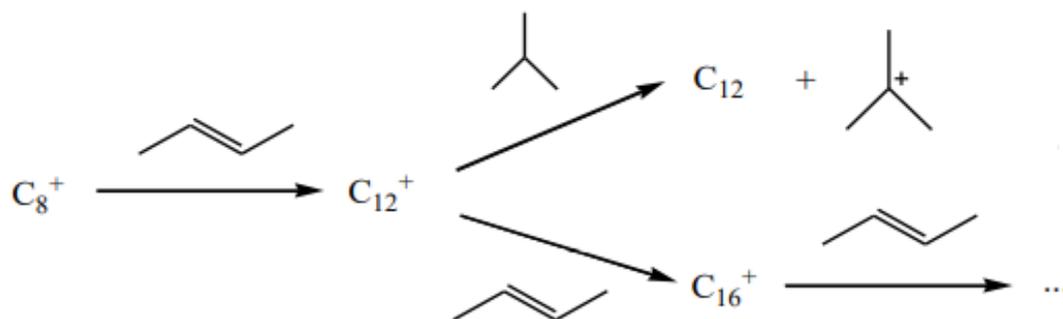
Изомеры C_8^+ обладают высокой реакционной способностью. За счет переноса протона к изоалкану образуются триметилпентаны и трет-бутилкатион, который продолжает химическое взаимодействие с изобутиеном:



Обрыв цепи происходит при переносе H^+ от карбкатиона к аниону кислоты.

Помимо основной реакции алкилирования протекают побочные реакции, продукты которых снижают качество получаемого алкилата. Взаимодействие изооктила с бутеном-1 или бутеном-2 приводит к образованию

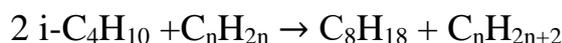
высокомолекулярных продуктов или инициированию процесса олигомеризации и полимеризации [1]:



В результате рекомбинации и диспропорционирования двух молекул C_8 образуются нежелательные изопарафины:



Реакции самоалкилирования происходят при взаимодействии изобутана и олефинов, где образуются разветвленные парафины C_8 и побочные линейные алканы:



Примеси, находящиеся в сырье, также вступают в реакцию с образованием растворимых в кислоте масел. При этом происходит загрязнение серной кислоты, вследствие чего увеличивается потребление серной кислоты.

Вредными примесями для реакции алкилирования являются бутадиены, кислородные соединения (метанол, спирты, эфиры, МТБЭ), меркаптаны (серные соединения), вода.

Присутствие в серной кислоте сульфатов железа (II и III валентного) создают более благоприятные условия для протекания вторичных реакций.

1.3 Гетерогенные кислотные катализаторы процесса алкилирования

В современной нефтеперерабатывающей практике наиболее распространёнными являются жидкофазные катализаторы алкилирования, такие как серная и фтороводородная кислоты.

Лицензиары, занимающиеся разработками в области алкилирования на твёрдых катализаторах:

- Цеолиты (Lurgi (Eurofuel), INEEL, Mobil, Shell, Institute of Chemical Technology, Институт органической химии РАН);
- Сульфатированные оксиды (Haldor Topsoe (FBA), Chemical Research & Licensing Company, Институт проблем переработки углеводородов СО РАН; - Институт катализа СО РАН);
- Другие (UOP, SINOPEC, Texas A&M University).

1.3.1 Твердые кислоты

К данному типу катализаторов алкилирования можно отнести $AlCl_3$. Хлорид алюминия характеризуется высокой активностью, при этом селективность процесса низкая за счет увеличения скорости побочных реакций, таких как диспропорционирование и крекинг [17].

Хлорид алюминия применяют при алкилировании изобутана этиленом. При этом выход парафинов C_6 в данном процессе составляет 53-67 % об, а парафинов C_8 – до 30% об., при этом селективность процесса по триметилпентанам достигает 62%.

К кислотам Льюиса, используемым в процессе алкилирования, относят цезиевые, аммонийные и калиевые соли фосфорно-12-вольфрамовой кислоты с различными стехиометрическими соотношениями. В таблице 1.4 приведен объемный выход изопарафинов C_8 при алкилирование изобутана олефинами.

Таблица 1.4 – Изменение объемного содержания изопарафинов C_8 [18]

Отношение катализатор ($Cs_xH_{3-x}PW$)/олефины	1	2	2,5	3
Содержание C_8 в алкилате, %об	86,6	43,6	67,5	100

1.3.2 Сульфатированные катализаторы

Сульфатированные гетерогенные катализаторы обладают высокой активностью и высокой стойкостью к образованию высокомолекулярных соединений в результате побочных реакций процесса алкилирования. Наиболее

часто при изготовлении используют оксиды циркония, алюминия, кремния и титана [4].

Для повышения кислотных свойств применяют хлорирование и сульфатирование оксидов Al и Zr. Такие катализаторы характеризуются высокой удельной поверхностью и кислотно-основными свойствами, поддерживающими конверсию C_4H_8 на уровне 90,0 % об. В таблице 1.5 приведено сравнение различных образцов катализаторов.

Таблица 1.5 – Сравнение конверсии и селективности катализаторов [19]

Образец катализатора	Конверсия сырья, % об	Селективность, % об	
		Углеводороды C_5-C_8	Высокомолекулярные соединения
<i>AlS – Zr – 4</i>	90,5	49,5	50,6
<i>Al – ZrO₂ – 2</i>	98,7	10,6	89,4
<i>Al – ZrS</i>	98,3	43,5	56,5

1.3.3 Ионообменные смолы

В качестве ионообменных смол в процессе алкилирования изобутана низшими олефинами используют катионообменные смолы, в основе которых применяется VF_3 .

По исследованиям [20-22] ионообменные смолы ($-SO_3X$) позволяют получать алкилат с содержанием разветвленных алканов C_8 до 88,0 % масс. Катализатор характеризуется высокой каталитической активностью. При изучении механизма алкилирования с использованием катализатора Amberlyst XN-1010 было сделано предположение о диффузионном торможении при алкилировании изобутана бутан-бутиленовой фракцией.

1.3.4 Цеолитные катализаторы

Цеолиты – широко распространенный материал при производстве катализаторов для нефтеперерабатывающей промышленности. Они обладают низкой коррозионной активностью, при этом экологичны.

При твердофазном алкилировании важно использовать катализатор с высоко развитой пористой структурой, что способствует увеличению селективности образования изооктана. На рисунке 1.5 приведено сравнение выхода алканов при использовании различных цеолитных катализаторов при алкилировании изобутана олеинами C_4 .

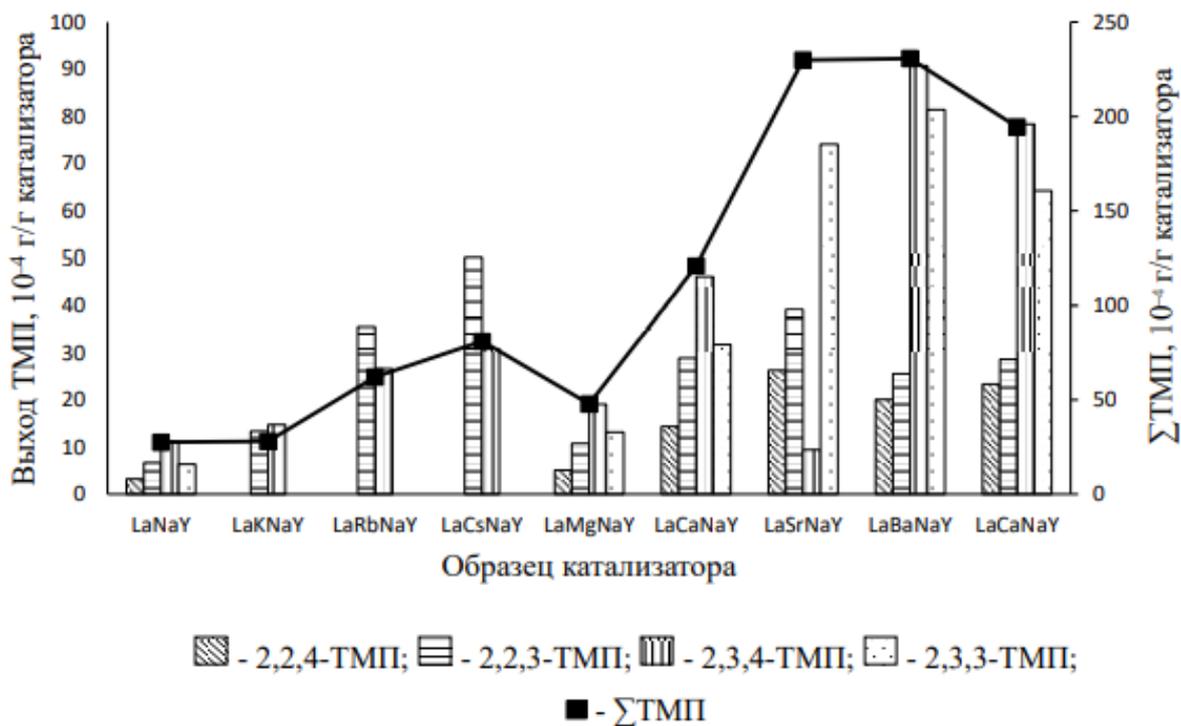


Рисунок 1.5 – Распределение разветвленных изомеров C_8 в продукте алкилирования [23]

Выход продукта изменяется от содержания соответствующего металла в следующем порядке: $Na < K < Rb < Cs$ для элементов I группы; $Mg < Ca < Sr < Ba$ для элементов II группы. Основным продуктом алкилирования изобутана олефинами является изооктан (октановое число по исследовательскому методу равно 100), все остальные гомологи C_8 могут быть получены изомеризацией 2,2,4 – триметилпентана.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что выход триметилпентанов значительно возрастает с изменением металла в структуре цеолита от натрия-калия к рубидию-цезию и от марганца, кальция, хрома до бария.

Цеолитные катализаторы, модифицированные щелочными катионами, не имеют активности для реакций крекинга и изомеризации, так как содержание 2,2,4-триметилпентана в продуктах алкилирования очень низкая.

Катионы щелочноземельных металлов катализируют реакции изомеризации 2,2,3 – триметилпентана [24].

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

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

Продукт: математическая модель процесса сернокислотного алкилирования.

Целевой рынок: промышленные предприятия нефтеперерабатывающей отрасли.

По результатам сегментирования рынка были определены основные сегменты, а также были определены наиболее благоприятные сегменты на рынке по применению математической модели, не заняты конкурентами и где уровень конкуренции низок:

- Мелким и средним НПЗ необходим доступный инструмент для оптимизации технологического режима и подбора технологических параметров установки;
- Крупные компании (AspenTech, Honeywell) предлагают программное обеспечение для типовых химических процессов, таких как алкилирование;
- Компании занимаются продажей программного продукта, не осуществляют калибровку для конкретного производства с учетом действующего режима и состава сырья.

4.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышений[31].

В данной работе проводится разработка и калибровка математической модели сернокислотного алкилирования изобутана низшими олефинами, с

целью повышения эффективности производства и снижения операционных затрат .

В таблице 4.1 приведена оценка конкурентов, где Ф – фактическая модель, К1 – программное обеспечение от AspenTech, К2 – программное обеспечение от Honeywell.

Таблица 4.1 – Оценочная карта для сравнения конкретных технических решений

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 эффективности производства	0,15	5	5	5	0,75	0,75	0,75
2. Подбор оптимального режима процесса	0,20	4	4	5	0,80	0,80	1,00
3. Удобный интерфейс	0,05	5	4	4	0,25	0,20	0,20
4. Простота использования	0,05	5	4	3	0,25	0,20	0,15
5. Адекватность результатов	0,15	3	3	3	0,45	0,45	0,45
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,05	3	5	4	0,15	0,25	0,20
2. Уровень проникновения на рынок	0,10	2	5	3	0,20	0,50	0,30
3. Цена	0,15	5	2	3	0,75	0,30	0,45
4. Возможность использования без приобретения подписки	0,03	5	3	3	0,15	0,09	0,09
5. Использование без затрат на дополнительное обучение	0,07	5	3	3	0,35	0,21	0,21
Итого	1,00	42	38	36	4,1	3,75	3,8

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

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

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

где: K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

По результатам оценки можно сделать вывод, что фактическая модель не уступает по техническому критерию, при этом имеет более положительные экономические критерии.

4.3 SWOT – анализ

SWOT –Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) –представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта [32].

SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта. Он проводится в несколько этапов.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в табличной форме (Таблица 4.2).

Таблица 4.2 – Матрица SWOT

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	С1. Потенциальная экономичность и энергоэффективность	Сл1. Ограниченность экспериментальных данных с промышленной установки.
	С2. Потенциал для повышения экологичности производства	Сл2. Плохо изучена кинетика процесса
	С3. Отсутствие аналогичных математических моделей по процессу	Сл3. Отсутствие исчерпывающих данных для проверки адекватности модели
	С4. Потенциальное улучшение качества товарного бензина	Сл4. Стандартные методы продвижения на рынке
	С5. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки	Сл5. Риски повышения износа оборудования

<p>Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт В3. Использование полученных данных предприятия нефтепереработки для оптимизации процесса производства В4. Уменьшение значимости или достоинства конкурентных разработок В5. Тенденция к цифровизации производства</p>		
<p>Угрозы: У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства У2. Создание подобной модели на рынке в более быстрые сроки У3. Внедрение других моделей на предприятия отечественных НПЗ У4. Создание более дешевой модели У5. Снижение спроса на продукцию установки алкилирования</p>		

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, интерактивная матрица проекта представлена в Таблице 4.3.

Таблица 4.3 – Интерактивная матрица проекта

		Сильные стороны проекта				
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	+	+	-	-	-
	B2	-	+	+	+	+
	B3	+	0	+	+	+
	B4	+	+	-	0	+
	B5	+	-	+	+	+

		Слабые стороны проекта				
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	Сл5
	B1	+	+	-	+	-
	B2	-	-	+	+	-
	B3	+	-	-	0	+
	B4	+	+	0	+	0
	B5	0	-	-	+	+

		Сильные стороны проекта				
Угрозы		C1	C2	C3	C4	C5
	У1	+	+	+	+	-
	У2	-	-	+	0	+
	У3	-	-	+	-	+
	У4	0	+	+	-	+
	У5	+	+	-	+	0

		Слабые стороны проекта				
Угрозы		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	Сл5
	У1	-	0	+	+	+
	У2	+	-	+	+	-
	У3	+	-	+	+	-
	У4	+	-	+	+	-
	У5	0	-	0	-	+

В рамках третьего этапа должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа, которая приводится работе (Таблица 4.4).

Таблица 4.4 – Матрица SWOT

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Потенциальная экономичность и энергоэффективность</p> <p>С2. Потенциал для повышения экологичности производства</p> <p>С3. Отсутствие аналогичных математических моделей по процессу</p> <p>С4. Потенциальное улучшение качества товарного бензина</p> <p>С5. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Ограниченность экспериментальных данных с промышленной установки.</p> <p>Сл5. Плохо изучена кинетика процесса</p> <p>Сл2. Отсутствие исчерпывающих данных для проверки адекватности модели</p> <p>Сл3. Стандартные методы продвижения на рынке</p> <p>Сл4. Риски повышения износа оборудования</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт</p> <p>В3. Использование полученных данных предприятия нефтепереработки для оптимизации процесса производства</p> <p>В4. Уменьшение значимости или достоинства конкурентных разработок</p> <p>В5. Тенденция к цифровизации производства</p>	<p>С и В:</p> <p>1. Разработка математической модели, позволяющей наиболее быстро рассчитать технологические параметры процесса изомеризации</p> <p>2. Анализ производительности различных катализаторов, используемых в этом процессе.</p> <p>3. Ускорение в сфере научно-технических инноваций, способствующих улучшению</p>	<p>СЛ и В:</p> <p>1. Помощь специалистов ТПУ в совершенствовании продукта</p> <p>2. Ограниченность экспериментальных данных с промышленной установки</p> <p>3. Разработка научного исследования</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства</p> <p>У2. Создание подобной модели на рынке в более быстрые сроки</p> <p>У3. Внедрение других моделей на предприятия отечественных НПЗ</p> <p>У4. Создание более дешевой модели</p> <p>У5. Снижение спроса на продукцию установки алкилирования</p>	<p>С и У:</p> <p>1. Продвижение программы с целью создания спроса</p> <p>2. Создание конкурентных преимуществ готового продукта</p> <p>3. Поиск запасных источников финансирования, спонсоров в лице нефтеперерабатывающих предприятий, для которых может оказаться полезной данная разработка</p>	<p>Сл и У:</p> <p>1. Необходима дальнейшая разработка модели и её уточнение</p> <p>2. Дальнейший поиск теоретических законов и зависимостей, позволяющих повысить обоснованность модели</p> <p>3. Заключение договорённостей с предприятиями о поставке данных для проверки модели</p>

4.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На какой бы стадии жизненного цикла не находилась научная разработка полезно оценить степень ее готовности к коммерциализации и выяснить уровень собственных знаний для ее проведения (или завершения). Для этого заполнена специальная форма, содержащая показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта (Таблица 4.5).

Таблица 4.5 – Оценка готовности проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	5	5
2.	Определены перспективные направления коммерциализации	4	4
3.	Определены отрасли и технологии для предложения на рынке	4	3
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	5
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	4
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	2
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	3	3
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	2
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	5	5
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	3
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	3	3
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	4
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	5	5
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	4
15.	Проработан механизм реализации проекта	3	2
	ИТОГО БАЛЛОВ	59	54

Оценка готовности научного проекта к коммерциализации (или уровень имеющихся знаний у разработчика) определяется по формуле[33]:

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

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

B_i – балл по i -му показателю.

Значение $B_{\text{сум}}$ позволяет говорить о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации. В итоге получилось, что разработка имеет перспективы выше среднего, также уровень имеющихся знаний у разработчика выше среднего.

4.5 Инициация проекта

В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в Уставе проекта[34].

1. Цели и результат проекта. В данном разделе необходимо привести информацию о заинтересованных сторонах проекта, иерархии целей проекта и критериях достижения целей (Таблица 4.6)

Таблица 4.6 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ	Выпуск высококвалифицированных специалистов
Нефтеперерабатывающие предприятия, имеющие установку сернокислотного алкилирования	Получение математической модели для определения оптимального режима работы установки, повышения качества выпускаемого продукта

В таблице 4.7 представлена информация о иерархии проекта и критериях достижения цели.

Таблица 4.7 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Создание математической модели сернокислотного алкилирования для оптимизации процесса и сокращения операционных затрат, при сохранении или улучшение качества продукта
Ожидаемые результаты проекта:	Математическая модель с высокой степенью точности
Критерии приемки результата проекта:	Математическая модель способна адекватно прогнозировать результаты опытно-промышленных испытаний
Требования к результату проекта:	Требование:
	Подбор кинетики, советующей реальному механизму процесса
	Обработка имеющихся экспериментальных данных
	Оценка критериев адекватности и точности модели
	Подбор оптимального режима установки в соответствии с сырьевыми потоком

2. Организационная структура проекта. На данном этапе работы необходимо решить следующие вопросы: кто будет входить в рабочую группу данного проекта, определить роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте (Таблица 4.8)

Таблица 4.8 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо-затраты, час.
1	Чузлов В.А., НИ ТПУ, доцент ОХИ ИШПР	Руководитель проекта	Консультирование, формирование задач, определение основных этапов проработки, контроль выполнения	500
2	Копычева У.Н., НИ ТПУ, магистрант ОХИ ИШПР	Исполнитель по проекту	Проведение литературного обзора, формирование кинетической схемы, обработка экспериментальных данных, оценка адекватности, подбор режимов	1200
ИТОГО:				1700

3. Ограничения и допущения проекта. Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» - параметры проекта или его

продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта (Таблица 4.9).

Таблица 4.9 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
3.1. Бюджет проекта	1235624,6 руб.
3.1.1. Источник финансирования	НИ ТПУ
3.2. Сроки проекта:	01.09.2019-31.05.2021
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	15.09.2019
3.2.2. Дата завершения проекта	31.05.2021

4.6 Планирование управления научно-техническим проектом

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

В рамках планирования научного проекта построены календарный график проекта (Таблица 4.10, 4.11).

Таблица 4.10– Календарный план проекта

Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Составление и утверждение технического задания	5	01.09.2019	05.09.2019	Чузлов В.А.
Согласование плана работ	5	06.09.2019	11.09.2019	Копычева У.Н., Чузлов В.А.
Подбор и изучение материалов по теме	60	12.09.2019	11.11.2019	Копычева У.Н.
Проведение патентных исследований	20	12.09.2019	02.12.2019	Копычева У.Н.
Составление кинетической модели	118	03.12.2019	01.04.2020	Копычева У.Н.
Составление математической модели	197	02.04.2020	15.10.2020	Копычева У.Н., Чузлов В.А.
Проведение теоретических расчетов	76	16.10.2020	31.01.2021	Копычева У.Н., Чузлов В.А.
Оценка адекватности модели	27	01.02.2021	28.02.2021	Копычева У.Н.
Составление пояснительной записки	92	01.03.2021	31.05.2021	Копычева У.Н.
Итого:	600			

Таблица 4.11 – Календарный план график проведения НИОКР по теме

Наименование этапа	Т, дней	2019				2020								2021										
		Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь	Июль	Август	Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май		
Составление и утверждение технического задания	5																							
Согласование плана работ	5																							
Подбор и изучение материалов по теме	60																							
Проведение патентных исследований	20																							
Составление кинетической модели	118																							
Составление математической модели	197																							
Проведение теоретических расчетов	76																							
Оценка адекватности модели	27																							
Составление пояснительной записки	92																							

 - Копычева У.Н.

 - Чузлов В.А.

4.7 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения[31].

Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты (за вычетом отходов). В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме (Таблица 4.12).

Таблица 4.12 – Расчет затрат по статье «Сырье и материалы»

Наименование	Количество, шт	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Тетрадь	3	45	135,00
Ручка шариковая	5	15	75,00
Бумага А4	250	1	212,50
Чернила для принтера	200	4	800,00
Всего за материалы			1222,50
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)			61,13
Итого по статье			1283,63

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ. В данную статью включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования, необходимого для проведения работ по теме НИР (таблица 4.13).

Таблица 4.13 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1	Компьютер	1	55000,0	55000,0
2	Программное обеспечение MicrosoftOffice	1	5990,0	5990,0
3	Borland Delphi 10	1	15000,0	15000,0
Итого, руб.:				75990,0

Расчет основной заработной платы. В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Расчет основной заработной платы сводится в таблице 15.

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}$$

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

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата.

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

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб}$$

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

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

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

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

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

Расчет заработной платы научно – производственного и прочего персонала проекта проводили с учетом работы 2-х человек – научного руководителя и исполнителя. Баланс рабочего времени исполнителей представлен в таблице 4.14.

Таблица 4.14 – Баланс рабочего времени

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

Месячный должностной оклад работника:

$$З_m = З_б \cdot (k_{пр} + k_d) \cdot k_p$$

где $З_б$ – базовый оклад, руб.;

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

k_d – коэффициент доплат и надбавок;

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

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

$$З_m = З_б \cdot K_p$$

где $З_б$ – базовый оклад, руб.;

K_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Согласно информации сайта Томского политехнического университета, должностной оклад (ППС) доцента кандидата наук в 2021 году без учета РК составил 33663 руб. Расчет основной заработной платы приведен в таблице 4.15.

Таблица 4.15 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$З_б$, руб.	$k_{пр}$	k_d	k_p	$З_m$, руб.	$З_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$З_{осн}$, руб.
Руководитель	33663,0	1	0,02	1,3	43761,9	2311,9	212	490122,8
Магистрант	2500,0	-	-	1,3	3250,0	171,7	212	36400,4

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

$$З_{доп} = З_{осн} \cdot k_{доп}$$

где $З_{доп}$ – дополнительная заработная плата, руб.;

$k_{доп}$ – коэффициент дополнительной зарплаты;

$З_{осн}$ – основная заработная плата, руб.

В таблице 4.16 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 4.16 – Заработная плата исполнителей НТИ

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

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

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

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

В соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. Стипендиальная выплата магистрам не облагается налогом.

Отчисления на социальные нужды составляют:

$$C_{\text{внеб}} = 0,3 \cdot (490122,8 + 36400,4) = 157956,9 \text{ рублей}$$

Накладные расходы. Расчет накладных расходов провели по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = 0,8 \cdot (490122,8 + 36400,4) = 421218,6 \text{ рублей}$$

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

Таким образом, затраты проекта составляет 1235624,6, которые приведены в таблице 4.17.

Таблица 4.17 – Затраты научно-исследовательской работы

Вид исследования	Затраты по статьям									
	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	Основная заработная плата	Доп-ая заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Научные и производственные командировки	Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями	Прочие прямые расходы	Накладные расходы	Итого плановая себестоимость
Данное исследование	1283,6	75990,0	526523,2	52652,3	157956,9	-	-	-	421218,6	1235624,6
Аналог 1	1283,6	500000,0	526523,2	52652,3	157956,9	-	150000,0	-	421218,6	1809634,6
Аналог 2	1283,6	400000,0	526523,2	52652,3	157956,9	-	150000,0	-	421218,6	1709634,6

4.8 Организационная структура проекта

В практике используется несколько базовых вариантов организационных структур: функциональная, проектная, матричная.

Для выбора наиболее подходящей организационной структуры можно использовать таблица 4.18.

Таблица 4.18 – Выбор организационной структуры научного проекта

Критерии выбора	Функциональная	Матричная	Проектная
Степень неопределенности условий реализации проекта	Низкая	Высокая	Высокая
Технология проекта	Стандартная	Сложная	Новая
Сложность проекта	Низкая	Средняя	Высокая
Взаимозависимость между отдельными частями проекта	Низкая	Средняя	Высокая
Критичность фактора времени (обязательства по срокам завершения работ)	Низкая	Средняя	Высокая
Взаимосвязь и взаимозависимость проекта от организаций более высокого уровня	Высокая	Средняя	Низкая

Пример проектной организационной структуры научного проекта приведен на Рисунке 4.1.

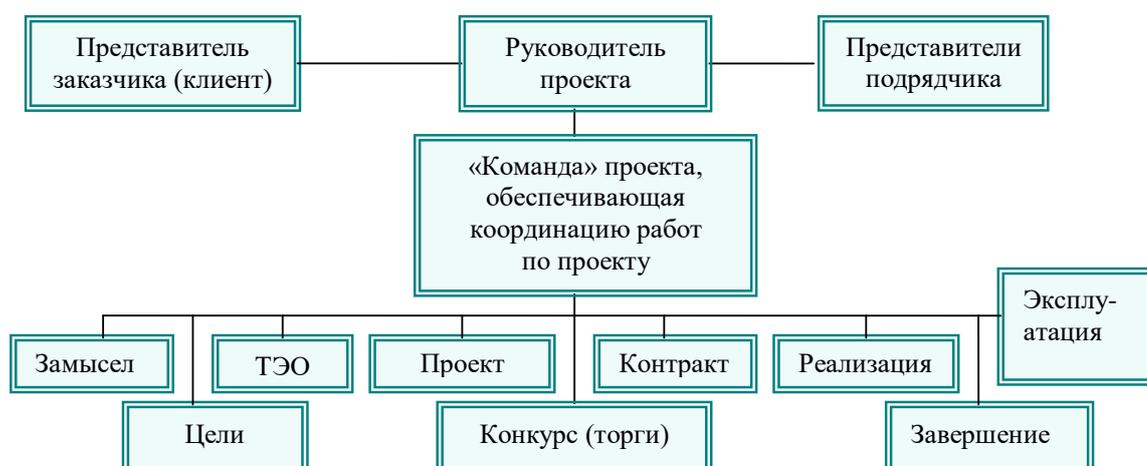


Рисунок 4.1 – Пример проектной структуры проекта [31]

4.9 Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты (Таблица 4.19).

Таблица 4.19 – Реестр рисков

№	Риск	Вероятность наступления	Влияние риска	Уровень риска*	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Отсутствие спроса на новые технологии производства	1	5	Низкий	Адаптация модели в соответствии с рынком	Ухудшение условия на рынке
2	Создание подобной модели на рынке в более быстрые сроки	4	4	Высокий	Оптимизация времени реализации проекта	Повышение уровня конкуренции
3	Внедрение других моделей на предприятия отечественных НПЗ	4	4	Высокий	Анализ рынка, калибровка модели для каждого предприятия	Повышение уровня конкуренции
4	Создание более дешевой модели	3	5	Средний	Оптимизация затрат на реализацию проекта	Повышение уровня конкуренции
5	Снижение спроса на продукцию установки алкилирования	3	5	Средний	Использование модели для снижения стоимости продукта	Снижение спроса на автомобильные бензины

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

4.10.1 Оценка абсолютной эффективности исследования

В основе проектного подхода к инвестиционной деятельности предприятия лежит принцип денежных потоков (cashflow). Особенностью является его прогнозный и долгосрочный характер. Для оценки общей

экономической эффективности в качестве основных показателей рекомендуются [33]:

- чистый доход;
- чистый дисконтированный доход;
- внутренняя норма доходности;
- потребность в дополнительном финансировании;
- срок окупаемости;
- индексы доходности затрат и инвестиций и др.

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

Расчёт NPV осуществляется по следующей формуле:

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

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

I_0 – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году;

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

n – горизонт расчета;

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

Расчет чистой текущей стоимости представлен в таблице 4.20. Амортизационные отчисления 10 %. Работы, связанные с математическим моделированием, имеют высокую рентабельность, данный вид работ не требует проведения экспериментов, анализируя стоимость услуг, предлагаемых крупными зарубежными компаниями (AspenTech), можно принять рентабельность проекта 50 %.

Таблица 4.20 – Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб.	0,0	1729874,4	1729874,4	1729874,4	1729874,4
2	Итого приток, руб.	0,0	1729874,4	1729874,4	1729874,4	1729874,4
3	Инвестиционные издержки, руб.	-1235624,6	0,0	0,0	0,0	0,0
4	Операционные затраты, руб.	0,0	746015,0	746015,0	746015,0	746015,0
5	Налогооблагаемая прибыль(1-4)	0,0	983859,4	983859,4	983859,4	983859,4
6	Налоги 20 %, руб.(5*20%)	0,0	196771,9	196771,9	196771,9	196771,9
7	Чистая прибыль, руб.(5-6)	0,0	787087,6	787087,6	787087,6	787087,6
8	Чистый денежный поток (ЧДП), руб.(чистая прибыль+амортизация)	-1235624,6	865796,3	865796,3	865796,3	865796,3
9	Коэффициент дисконтирования (КД)	1	0,833	0,694	0,578	0,482
10	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб.(9*10)	-1235624,6	721208,3	600862,6	500430,3	417313,8
11	\sum ЧДД			1004190,4		
12	Итого NPV, руб.			4829568,8		

Коэффициент дисконтирования рассчитан по формуле:

$$КД = \frac{1}{(1 + i)^t}$$

где: i – ставка дисконтирования, 20 %;

t – шаг расчета.

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 736216 рублей, что позволяет судить об его эффективности.

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

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

где: ЧДД - чистый денежный поток, руб.;

I_0 – начальный инвестиционный капитал, руб.

Таким образом PI для данного проекта составляет:

$$PI = \frac{1361624,1}{1235624,6} = 1,5$$

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

Внутренняя ставка доходности (IRR). Значение ставки, при которой обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или IRR. Чем ближе IRR к ставке дисконтирования i , тем больше риск от инвестирования.

Между чистой текущей стоимостью (NPV) и ставкой дисконтирования (i) существует обратная зависимость. Эта зависимость представлена в таблице 4.21 и на рисунке 4.2.

Таблица 4.21 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№	Наименование показателя	0	1	2	3	4	NPV, руб.
1	Чистые денежные потоки, руб.	-1235624,6	1003961,6	1003961,6	1003961,6	1003961,6	
2	Коэффициент дисконтирования						
	0,1	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	0,2	1	0,833	0,694	0,578	0,482	
	0,3	1	0,769	0,592	0,455	0,350	
	0,4	1	0,714	0,510	0,364	0,260	
	0,5	1	0,667	0,444	0,295	0,198	
	0,6	1	0,625	0,390	0,244	0,153	
	0,7	1	0,588	0,335	0,203	0,112	
	0,8	1	0,556	0,309	0,171	0,095	
	0,9	1	0,526	0,277	0,146	0,077	
	1	1	0,500	0,250	0,125	0,062	
3	Дисконтированный денежный поток, руб.						
	0,1	-1235624,6	912601,1	829272,3	753975,2	685705,8	1945929,7
	0,2	-1235624,6	836300,0	696749,4	580289,8	483909,5	1361624,1
	0,3	-1235624,6	772046,5	594345,3	456802,5	351386,6	938956,2
	0,4	-1235624,6	716828,6	512020,4	365442,0	261030,0	619696,4
	0,5	-1235624,6	669642,4	445759,0	296168,7	198784,4	374729,8
	0,6	-1235624,6	627476,0	391545,0	244966,6	153606,1	181969,2
	0,7	-1235624,6	590329,4	336327,1	203804,2	112443,7	7279,9
	0,8	-1235624,6	558202,7	310224,1	171677,4	95376,4	-100144,0
	0,9	-1235624,6	528083,8	278097,4	146578,4	77305,0	-205560,0
	1,0	-1235624,6	501980,8	250990,4	125495,2	62245,6	-294912,6

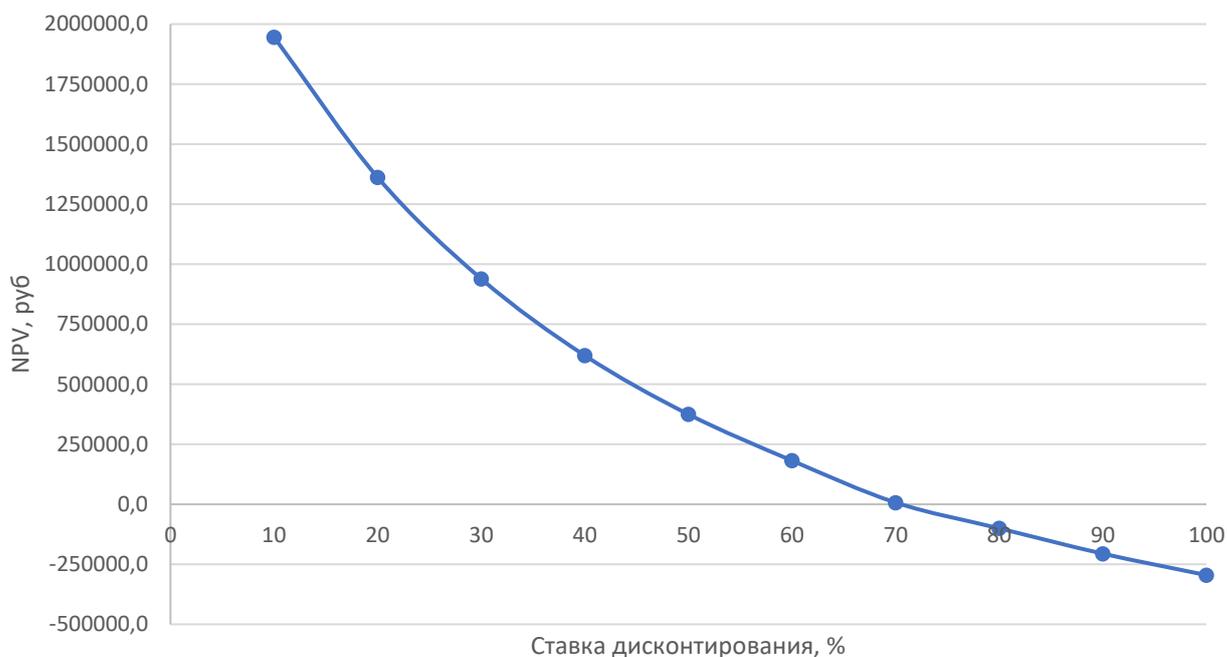


Рисунок 4.2 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Из таблицы и графика следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Значение ставки, при которой NPV обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или «внутренней нормы прибыли». Из графика получаем, что IRR составляет 70,07 %.

Запас экономической прочности проекта: $70,07\% - 20\% = 50,07\%$

Дисконтированный срок окупаемости. Одним из недостатков показателя простого срока окупаемости является игнорирование в процессе его расчета разной ценности денег во времени.

Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (Таблица 4.22).

Таблица 4.22 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток, руб.	-1235624,6	836300,0	696749,4	580289,8	483909,5
2	То же нарастающим итогом, руб.	-1235624,6	-399324,6	297424,8	877714,6	1361624,1
3	Дисконтированный срок окупаемости	PP_{дск} = 1 + (399324,6/696749,4) = 1,57 года				

Социальная эффективность научного проекта учитывает социально-экономические последствия осуществления научного проекта для общества в целом или отдельных категорий населения или групп лиц, в том числе как непосредственные результаты проекта, так и «внешние» результаты в смежных секторах экономики: социальные, экологические и иные внеэкономические эффекты (Таблица 4.23).

Таблица 4.23 – Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Проведение дорогостоящих и опасных опытных пробегов на действующих установках	Проведение расчетов на математической модели
Большая доля отработанной серной кислоты	Сокращение потребления серной кислоты

4.10.2 Оценка сравнительной эффективности исследования

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по следующей формуле:

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

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

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

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

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

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

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

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

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

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблицы (Таблице 4.24).

Таблица 4.24 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения

ПО Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Способствует увеличению производительности НПЗ	0,10	5	5	4
2. Удобство интерфейса программы	0,15	5	4	4
3. Оценка влияния технологических параметров	0,15	5	5	5
4. Ресурсосбережение	0,20	5	4	5
5. Надежность	0,25	5	5	4
6. Экологичность	0,25	4	3	4
Итого	1	4,83	4,35	4,35

$$I_m^p = 5 \cdot 0,10 + 5 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,20 + 5 \cdot 0,25 + 4 \cdot 0,25 = 4,83$$

$$I_1^A = 5 \cdot 0,10 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,20 + 5 \cdot 0,25 + 3 \cdot 0,25 = 4,35$$

$$I_2^A = 4 \cdot 0,20 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,20 = 4,35$$

Интегральный показатель эффективности разработки $I_{финр}^p$ и аналога

$I_{финр}^a$ определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p}; I_{финр}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a}$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта. Сравнительная эффективность проекта определяется по формуле:

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

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

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

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

Сравнительная эффективность разработки по сравнению с аналогами представлена в таблице 4.25.

Таблица 4.25 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,997	1,00	0,996
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,83	4,35	4,35
3	Интегральный показатель эффективности	4,84	4,35	4,37
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,00	0,89	0,90

В ходе выполнения, данного раздела была проведена оценка конкурентоспособности математической модели алкилирования. Выявлены сильные и слабые стороны разработки в SWOT-анализе, позволяющие определить необходимость проведения стратегических изменений.

Так же, оценены финансовые показатели разработки математической модели, учитывающие стоимость материальных затрат и затраты на оплату труда. Определена чистая текущая стоимость разработки NPV=4829568,8 рублей, индекс доходности PI=1,5, внутренняя ставка доходности IRR=70,07% и срок окупаемости проекта составляет 1,57 года.

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

5 Социальная ответственность

Введение жестких экологических требований, приводит к необходимости создания новых и интенсификации действующих нефтехимических процессов получения высокооктановых компонентов. Одним из таких является серноокислотное алкилирование изобутана олефинами.

Объектом исследования данной работы стала установка серноокислотного алкилирования. Сырьем для установки служит бутан-бутиленовая фракция установок предприятия, содержащая около 50% олефинов и изобутановая фракция установки газофракционирования.

Исследование проводилось на математической модели процесса серноокислотного алкилирования. Данная дипломная работа выполнялась в аудитории 133, аудитория расположена на первом этаже учебного корпуса 2 Томского политехнического университета. Аудитория 133 оборудована 13 ЭВМ. Экспериментальная часть работы осуществлялась на персональном компьютере (далее ПК) при работе с различными программными обеспечениями. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, кондиционирования воздуха. Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

В данном разделе рассмотрены специальные правовые нормы трудового законодательства и их особенности, применимые к условиям математического моделирования процесса алкилирования.

5.1.1 Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства

Законодательство РФ об охране труда основывается на Конституции РФ и состоит из федерального закона, других федеральных законов и иных нормативных правовых актов субъектов РФ. Трудовой кодекс РФ нормирует взаимоотношение между работником и работодателем [35].

Работа инженера-разработчика является офисной и относится ко второй категории тяжести труда, то есть работы выполняются при оптимальных условиях внешней производственной среды и при оптимальной величине физической, умственной и нервно-эмоциональной нагрузки. Продолжительность рабочего дня работников не должна превышать 40 часов в неделю. Возможно, сокращение рабочего времени. Для работников, возраст которых меньше 16 лет – не более 24 часа в неделю, от 16 до 18 лет – не более 35 часов, как и для инвалидов I и II группы [35].

При выполнении математической модели процесса сернокислотного алкилирования, инженеру было предоставлено рабочее пространство, соответствующее трудовому кодексу и ГОСТу 12.2.032-78 «Система стандартов безопасности труда» [37]:

- Стол инженера был размещен справа от прохода на расстоянии 300мм.
- Конструкция рабочего стола обеспечивала оптимальное размещение оборудования. Экран компьютера находился на расстоянии 600мм от глаз пользователя. Рабочее место было оборудовано подставкой для ног шириной 300мм, глубиной 400мм.
- Рабочий стул обеспечивал поддержание рациональной рабочей позы при аналитической работе за компьютером. Экспериментальная часть работы проводилась стоя.
- Стул располагался на расстоянии 400 мм от границы рабочего пространства.
- Окна в рабочем помещении ориентированы на северо -восток

5.2 Производственная безопасность

Производственная безопасность представляет собой систему организационных мероприятий и технических средств, уменьшающих вероятность воздействия на персонал опасных производственных факторов, вредных воздействий технологических процессов, энергии, средств, предметов,

условий и режимов труда до приемлемого уровня. Необходимо выявить вредные и опасные производственные факторы, которые могут возникать при разработке и эксплуатации данного прибора. Выявленные факторы перечислены в таблице 5.1 [37-39].

Таблица 5.1 – Опасные и вредные факторы производства алкилбензина

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
1. Отклонение показателей микроклимата;	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [37]
2. Повышенный уровень шума;	+	+	+	ГОСТ 12.4.011-89 (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация [38]
3. Электрический ток;	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 Электрическая безопасность. Защитное заземление, зануление [39]
4. Утечка вредных веществ;			+	ГОСТ 2184-2013 Кислота серная техническая. Технические условия [40] ГОСТ 4095-75 Изоктан технический. Технические условия [7]
5. Недостаточная освещенность рабочей зоны.	+	+	+	СНиП 23-05-95 Естественное и искусственное освещение [41]

Используя данные таблицы, можно учесть опасные и вредные факторы теоретически могут возникнуть при работе с объектом исследования-производством алкилбензина.

5.2.1 Анализ выявленных вредных факторов при разработке, изготовлении и эксплуатации установки алкилирования

Производственное оборудование должно обеспечивать безопасность работающих при монтаже (демонтаже), вводе в эксплуатацию и эксплуатации в составе технологических комплексов при соблюдении требований (условий, правил), предусмотренных эксплуатационной документацией.

1. Отклонение показателей микроклимата. Характерной особенностью процесса является размещение оборудования на открытых площадках. 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 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 время пребывания на рабочих местах (непрерывно или суммарно за рабочую смену) должно быть ограничено соответствии с СанПиНом 2.2.4.548-96[37].

2. Повышенный уровень шума. Шум на установке серноокислотного алкилирования является следствием работы компрессоров и насосов больших мощностей. Требования по допустимому уровню звукового давления, звука и эквивалентных уровней звука выполняются в соответствии с [6], согласно которому уровень звука на УСА не превышает 80 ДБА. Продолжительный повышенный уровень шума является причиной возникновения глухоты, а также головных болей, гормонального расстройства и психических заболеваний. В качестве средств индивидуальной защиты от шума в зависимости от конструктивного исполнения используются [38]:

- противошумные наушники, закрывающие ушную раковину снаружи;
- противошумные вкладыши, перекрывающие наружный слуховой проход или прилегающие к нему;

- противошумные шлемы и каски; противошумные костюмы.

3. Электрический ток. При сборке, настройке, подключении и эксплуатации реактора серноокислотного алкилирования возможно поражение электрическим током, что является опасным фактором. Поэтому конструкция производственного оборудования, приводимого в действие электрической энергией, должна включать устройства (средства) для обеспечения электробезопасности.

Производственное оборудование должно быть выполнено так, чтобы исключить накопление зарядов статического электричества в количестве, представляющем опасность для работающего, и исключить возможность пожара и взрыва. Основные способы и средства электрозащиты [39]:

- изоляция токопроводящих частей и ее непрерывный контроль;
- установка оградительных устройств;
- предупредительная сигнализация и блокировки;
- использование знаков безопасности и предупреждающих плакатов;
- использование малых напряжений;
- электрическое разделение сетей;
- защитное заземление;
- выравнивание потенциалов;
- зануление;
- защитное отключение;
- средства индивидуальной электрозащиты.

4. Утечка токсичных и вредных веществ. Сырье процесса 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.

Процесс на каталитической установке протекает при невысоких температурах (до 13°C). Ядовитые вещества проникают в организм человека

через органы дыхания. Это представляет значительную опасность, поскольку слизистая оболочка носа и дыхательной поверхности легких обладает высокой всасывающей способностью. Продуктом данного процесса является алкилат, он относится к ядовитым (токсичным) веществам.

В состав выделяющихся на производстве газов, кроме паров ББФ и изобутановой фракции входят газы серной кислоты:

- 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.
- бутан-бутиленовая и изобутановая фракции-нервный яд действует на центральную нервную систему. При остром отравлении повышается возбужденность, появляется тошнота, головокружение, при попадании на кожу вызывает обморожение.

Таблица 5.2 – Предельно-допустимые концентрации токсичных веществ в воздухе рабочей зоны [42].

Наименование	ПДК рабочей зоны, мг/м ³	Класс опасности
Серная кислота	1	2
Бутан-бутиленовая фракция	100	4
Изобутановая фракция	300	4
Алкилат	300	4

Для предотвращения попадания на кожу вредных химических веществ используют 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.

5. Недостаточная освещенность рабочего места. Обычно она связана с неправильным выбором и размещением осветительных приборов в

производственном помещении. Правильно спроектированное и выполненное освещение обеспечивает высокий уровень работоспособности, оказывает положительное психологическое воздействие на работающих, способствует повышению производительности труда. Недостаточная освещенность рабочей зоны на рабочем месте оператора развивает утомляемость, что увеличивает вероятность ошибочных действий.

При недостатке на рабочем месте естественного можно выполнить следующие мероприятия [45]:

- уменьшение времени пребывания работника в данном помещении;
- улучшение условий, создаваемых искусственным освещением;
- анализ степени загрязнения стекол в светопроемах, их чистка и последующие контрольные измерения;
- косметический ремонт помещения с использованием светлых отделочных материалов.

5.2.2 Расчет искусственного освещения

Операторская, в которой производится управление установкой, имеет длину $A=18$ м, ширину $B=12$ м, высоту $H=4$ м. Высота рабочей поверхности $h_{рп}=0,8$ м. Требуется создать освещенность $E=300$ лк.

Коэффициент отражения стен $R_c=50\%$ для свежепобеленных стен с окнами без штор, коэффициент отражения свежепобеленного потолка $R_{п}=70\%$. Коэффициент запаса для помещения с малым выделением пыли $k=1,5$. Коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп берется $E=1,1$ [45-46].

Рассчитываем систему общего люминесцентного освещения.

Выбираем светильники типа ОД, $\lambda = 1,4$.

Свес светильников принимаем $h_c=0,5$ м, исходя из этого определяем расчетную высоту:

$$h = H - h_c - h_{рп} = 4,0 - 0,5 - 0,8 = 2,7 \text{ м}$$

Расстояние между светильниками:

$$L = \lambda \cdot h = 1,4 \cdot 2,7 = 3,8 \text{ м}$$

Расстояние от крайнего ряда светильников до стены:

$$L/3 = 1,3$$

Определяем количество рядов светильников и количество светильников в ряду:

$$n_{\text{ряд}} = \frac{(B - 2/3 L)}{L} + 1 = \frac{(10 - 2/3 \cdot 3,8)}{3,8} + 1 = 3 \text{ ряда}$$

$$n_{\text{св}} = \frac{(A - 2/3 L)}{l_{\text{св}} + 0,5} = 9 \text{ светильников}$$

Размещаем светильники в 3 ряда, в каждом ряду по 9 светильников типа ОД с мощностью 40 Вт (с длиной 1,23 м). При этом разрыв между светильниками в ряду составит 50 см. Учитывая, что в каждом светильнике установлено две лампы, общее число ламп в помещении составит $N=54$.

На рисунке 1 приведено размещение светильников в операторской.

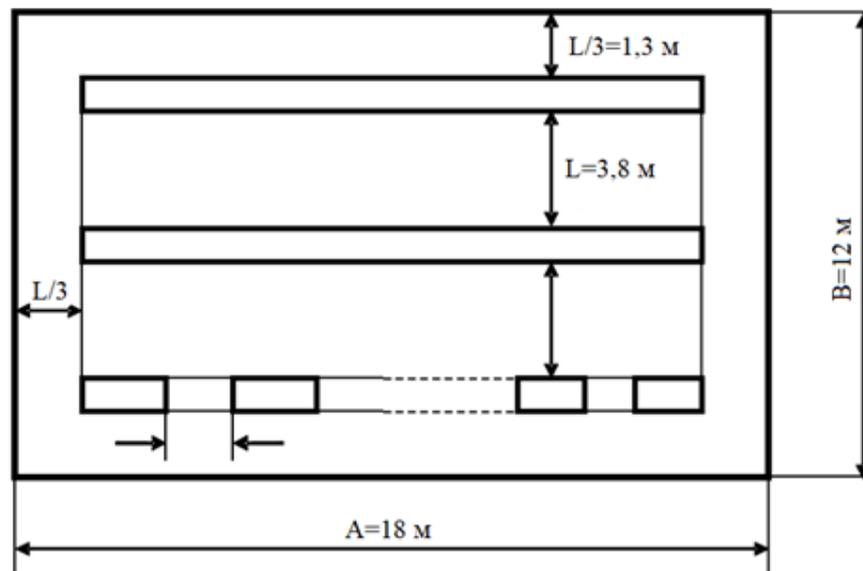


Рисунок 1 – План размещения светильников с люминесцентными лампами

Рассчитываем индекс помещения:

$$i = \frac{S}{h(A + B)} = \frac{216}{2,7 \cdot (18 + 12)} = 2,6$$

Зная коэффициенты отражения и индекс помещения, определяем коэффициент светового потока светильников $\eta=64\%$.

Определяем потребный световой поток ламп в каждом из рядов:

$$\Phi = \frac{E_n \cdot S \cdot k \cdot Z}{N_l \cdot \eta} = \frac{300 \cdot 216 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{54 \cdot 0,64} = 3093$$

По потребному световому потоку выбираем стандартную люминесцентную лампу – ЛТБ 40 Вт с потоком 2850 лм, для сети с напряжением 220 В. Делаем проверку выполнения условий:

$$\begin{aligned} -10\% \leq \frac{\Phi_{\text{л.станд}} - \Phi_{\text{л.расч}}}{\Phi_{\text{л.станд}}} \cdot 100\% \leq +20\% \\ -10\% \leq -8,52\% \leq +20\% \end{aligned}$$

Таким образом, условие выполнено.

Определяем мощность светильной установки:

$$P = 54 \cdot 40 = 2160 \text{ Вт}$$

В ходе работы, провели расчет искусственного освещения для операторской установки сернокислотного алкилирования. Определили количество и размещение светильников (Рисунок 5.1). Определили потребный световой поток $\Phi=3093$ лм и выбрали тип осветительных устройств – люминесцентные лампы ЛТБ 40 Вт для сети с напряжением 220 В, количество – 54 лампы.

5.3 Экологическая безопасность

Основными загрязнителями атмосферы на производстве разрабатываемой модели алкилирования изобутана бутиленами 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.

Общие профилактические мероприятия, направленные на сокращение и уменьшение воздействия на окружающую среду:

- устройство и озеленение площадки;

- поддержание в полной технической исправности и герметичности резервуаров и емкостей, технологического оборудования и трубопроводов;
- контроль сварных стыков физическими методами;
- гидравлическое испытание трубопроводов, резервуаров и оборудования на прочность и герметичность;
- контролируемый и планируемый слив воды после гидроиспытаний;
- высокие требования к качеству металла труб;
- необходимый запас надежности по толщине стенки труб.

Общие технологические мероприятия, направленные на сокращение и уменьшение воздействия на окружающую среду:

- покрытие оборудования и трубопроводов антикоррозионной изоляцией;
- защита оборудования от атмосферной коррозии;
- система постоянного контроля регламентированных значений технологических параметров, автоматическое регулирование и система ПАЗ при отклонении от заданных параметров для предупреждения аварийных ситуаций.

1. Основные мероприятия по охране атмосферного воздуха. С целью снижения неорганизованных выбросов вредных веществ в атмосферу через неплотности аппаратов, арматуры, фланцевых соединений, уплотнений предусмотрены следующие мероприятия:

- применение герметичных аппаратов и трубопроводов под давлением;
- применение технологического оборудования и запорно-регулирующей арматуры в соответствии с рабочими параметрами процесса и коррозионной активностью среды;
- предусмотрена система предохранительных клапанов для защиты аппаратов и трубопроводов от превышения давления;
- сбор утечек от насосов технологического оборудования предусмотрен в емкости закрытой дренажной системы опасных стоков;

- непрерывный контроль загазованности в местах максимально возможных выделений углеводородов;
- периодический контроль максимально разовой ПДК не реже 1 раза в квартал (для веществ III, IV классов опасности), не реже 1 раза в месяц (для веществ II класса опасности).

2. Основные мероприятия по защите поверхностных вод. Для защиты поверхностных вод предусмотрены следующие мероприятия:

- открытая дренажная система поверхностных стоков;
- открытая дренажная система опасных стоков;
- закрытая дренажная система;
- установка запорной секционирующей арматуры для локализации аварийных разливов нефтепродуктов в случае разгерметизации оборудования и трубопроводов.

3. Основные мероприятия по охране почв. Для защиты почв при эксплуатации месторождения предусмотрены следующие мероприятия:

- выполнение строительных работ исключительно в пределах монтажной площадки;
- организация площадок для сбора и хранения отходов производства и потребления;
- сдача отходов производства и потребления осуществляется в специализированную организацию;
- устройство ограждений вокруг технологических резервуаров.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Технологические процессы на установке алкилирования относятся к взрывопожароопасному производству, вследствие ведения технологического процесса при наличии взрывоопасных или горючих веществ. Помимо этого, производство считается опасным в связи с:

- применением в производстве раствора щелочи 10 ÷ 15 %;

- применением электроэнергии высокого напряжения для эксплуатации насосного оборудования;
- возможностью нарушения герметичности аппаратов и трубопроводов из-за коррозии;
- возможностью продуктов аккумулировать заряды статического электричества при транспортировании.

В аварийных ситуациях технологический персонал установки алкилирования должен соблюдать План локализации и ликвидации аварийных ситуаций. При возникновении ЧС, мероприятия представляют собой проведение спасательных работ и неотложных аварийно-восстановительных работ в очаге поражения. Действия персонала определяются в соответствии с ГОСТ Р 22.0.07-95 [46].

Для обеспечения безаварийной работы установки и достижения минимального уровня взрывопожароопасности процесса предусмотрены следующие мероприятия:

- все стадии технологического процесса непрерывны и склонны к устойчивому протеканию;
- при соблюдении правил эксплуатации процесс не обладает возможностью взрыва внутри технологической аппаратуры;
- контроль и управление процессом осуществляется автоматически и дистанционно из операторной с использованием электронной системы приборов.

В соответствии с требованием норм по пожаротушению на установке должны быть предусмотрены первичные и стационарные средства пожаротушения, а также пожарная сигнализация.

На установке предусмотрены следующие средства пожаротушения [47]:

- первичные средства пожаротушения (огнетушители –пенные ОП-10, ОПС-10г, углекислотные ОУ-5, ОУ-8; кошмы, ящики с песком, лопаты и т.д.);
- стационарная система пенотушения открытой насосной;
- водяная оросительная система колонных аппаратов;

- пожарные краны в помещении компрессорной.

Вывод: Модель установки сернокислотного алкилирования спроектирована в соответствии с требованиями [48].

Герметичность технологической обвязки узлов исключает загрязнение воздуха рабочей зоны вредными и взрывоопасными веществами в соответствии с требованиями и исключает недопустимые тепловыделения.

Разработка комплекса мер, направленных на модернизацию производства в целях улучшения условий труда позволит в значительной мере улучшить условия труда работающих сведет к минимуму угрозы возникновения ЧС. 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.

Выводы

В данной работе была разработана формализованная схема превращения для установки сернокислотного алкилирования изобутана бутан-бутиленовой фракцией. Также был смоделирован блок ректификации сырого алкилата, который состоит из двух колонн: деизобутанизатора и дебутанизатора. Модель является многофункциональной и позволяет подобрать оптимальный технологический режим установки в соответствии с углеводородным составом перерабатываемого сырья с целью получения максимального октавного числа алкилата.

Проведен анализ лабораторных и экспериментальных данных с действующей установки сернокислотного алкилирования:

- Содержание бутиленов в олефиновом сырье не менее 30 масс %;
- Суммарное содержание бутиленов в бутан-бутеленовой фракции колеблется от 44,0 до 51,5 % масс.;
- Состав циркулирующего изобутана соответствует регламенту и имеет содержание изобутана свыше 85% масс.;
- Содержание 2,2,4-триметилпентана в алкилате изменяется в диапазоне от 29,5 до 33,9 % масс.;
- Концентрация свежей серной кислоты, подаваемой в контакторы алкилирования, свыше 98 % масс., а концентрация отработанной серной кислоты не менее 91 % масс.;
- Загрузка реакторного блока по олефиновому сырью варьируется в диапазоне 30-60 м³ / ч (н.у.), а средняя подача циркулирующего изобутана изменяется в пределах 110-140 м³/ч (н.у.);
- В среднем температура в контакторах поддерживается в пределах от -2,9 до +4,0 °С, что позволяет снижать вклад побочных реакций. Для поддержания температуры подается хладагент, расход которого составляет 25-40 м³/ч (н.у.).

Был проведен расчет существующих потоков на математической модели сернокислотного алкилирования, расхождение между действительными и расчетными значениями составляет 0,91 % отн.

Расчеты, проведенные на математической модели, позволили сформировать следующие рекомендации по ведению технологического режима:

- Для бутан-бутиленовой фракции, с повышенным содержанием бутиленов, рекомендуется использовать циркулирующий изобутан с концентрацией изобутана более 88 % масс., для поддержания оптимального соотношения изобутан/олефины;

- Для олефинового сырья с пониженным содержанием бутиленов и повышенным содержанием компонентов C_{5+} (более 0,15 % масс.) рекомендуется увеличивать подачу серной кислоты (свыше 6 м³/ч);

- При мольном соотношении изобутан/олефин ниже 9, необходимо увеличивать расход серной кислоты до 6,5 м³/ч, для подавления побочных реакций полимеризации и деалкилирования.

Также в ходе работы была проверена гипотеза о влиянии четкости разделения в ректификационном блоке на качество товарного алкилата. Данное предположение не оправдалось, так как при удалении легких углеводородов из алкилата, снижается выход товарного алкилата из-за уноса целевых компонентов, при этом октановое число повышается всего на 0,36 пункта.

Список литературы

1. Ахметов С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа: Учеб. Пособие для ВУЗов. - Уфа: Изд. - «Гилем», 2002. - 672 с.
2. Мановян А.К. Технология переработки природных энергоносителей. - М.: Химия, КолосС, 2004. - 456 с
3. Stell, J. 2001 worldwide refining survey / J. Stell // Oil and Gas Journal. – 2001. – V. 99. – 74 p
4. Meyers, R. A. Handbook of petroleum refining processes (edition 3) / R. A. Meyers. - New York: McGraw-Hill, 2003.
5. Капустин, В.М. Инновационное развитие нефтепереработки и нефтехимии в России / В.М. Капустин // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний. – 2011. – № 6. – С. 3–7.
6. Meehan, N.J. Continuous, selective hydroformylation in supercritical carbon dioxide using an immobilised homogeneous catalyst / N.J. Meehan, M. Poliakoff, A.J. Sandee, J.N.H. Reek, P.C.J. Kamer, P.W.N.M. van Leeuwen // Chemical Communications. – 2000. – 1497-1498 pp.
7. Ipatieff, V.N. Reaction of paraffins with olefins / V. N. Ipatieff, A. V. Grosse // Journal of the American Chemical Society. – 1935. – V. 57. – 1616-1621 pp.
8. Corma, A. Chemistry, catalysts and processes for isoparaffin-olefin alkylation: actual situation and future trends / A. Corma, A. Martinez // Catalysis Reviews - Science and Engineering. – 1993. – V. 35. – 483-570 pp.
9. C. R. Cupit, J. E. Gwyn, and E. C. Jernigan, PetrolChern. Eng., 34, 49 (1962).
10. Simpson, M. Kinetics of Zeolitic Solid Acid-Catalyzed Alkylation of Isobutane with 2-Butene / M. Simpson, J. Wei, S. Sundaresan // American Chemical Society Symposium Series. – 1996. – V. 626. – 105-115 pp.
11. Roebuck, A. K. Isobutane-olefin alkylation with inhibited aluminium chloride catalysts / A. K. Roebuck, B. L. Evering // Industrial & Engineering Chemistry Product Research and Development. – 1970. – V. 9. – 76-82 pp.

12. Nivarthi, G.S. The influence of acidity on zeolite H-BEA catalyzed isobutane/2-butene alkylation / G. S. Nivarthi, K. Seshan, J. A. Lercher // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 1998. – V. 22. – 379-388 pp.
13. Corma, A. Isobutane/2-butene alkylation on Ultrastable Y-Zeolite: Influence of Zeolite Unit cell Size / A. Corma, A. Martinez, C Martinez // *Journal of Catalysis*. – 1994. – V. 146. – 185-192 pp.
14. Querini, C.A. Deactivation of solid acid catalysts during isobutene alkylation with C4 olefins / C.A. Querini, E. Roa // *Applied Catalysis A: General*. – 1997. – V. 163. – 199-215 pp
15. Nivarthi, G. S. Alkylation of isobutane with light olefins catalyzed by zeolite beta / G. S. Nivarthi, A. Feller, K. Seshan, J. A. Lercher // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2000. – V. 35-36. – 75-87 pp. 11 He, Y. The effect of trace amounts of promoter on the selectivity of catalyst in the solid acid alkylation / Yigong He and Yufeng He // *Applied Catalysis A: General*. – 2004. – V. 268. – 115-119 pp.
16. Алкилирование. Исследования и промышленное оформление процесса / Под ред. Л.Ф. Олбрайта и А.П. Голдсби. – М.: Химия, 1982. – 366 с.
17. Arunajatesan, V. Pressure-Tuning the Effective Diffusivity of Near-critical Reaction Mixtures in Mesoporous Catalysts / V. Arunajatesan, K.A.Wilson, B. Subramaniam // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 2003. – V. 42. – 2639-2643 pp
18. Дроздов, Г. В. Получение моторных алкилатов на основе парафинов и ациклических олефиновых углеводородов / Г. В. Дроздов. – М.: ЦНИИТЭНефтехим, 1979. – 84 с.
19. Schmerling, L. The mechanism of the alkylation of paraffins / L. Schmerling // *Journal of the American Chemical Society*. – 1945. – V. 67. – 1778-1783 pp.
20. Schmerling, L. The mechanism of the Alkylation of paraffins. II. Alkylation of isobutane with propene, 1-butene, 2-butane / L. Schmerling // *Journal of the American Chemical Society*. – 1946. – V. 68. – 275 - 281pp

21. Shlegeris, R. J. Alkylation of isobutane with various olefins in the presence of sulfuric acid / R. J. Shlegeris, L. F. Albright // *I & EC Process Design and Development*. – 1969. – V. 8. – 92-98 pp.
22. Albright, L. F. Alkylation of isobutane with pentenes using sulfuric acid as catalyst: chemistry and reaction mechanisms / L. F. Albright // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 1992. – V. 31. – 475-481 pp.
23. Roebuck, A. K. Isobutane-olefin alkylation with inhibited aluminium chloride catalysts / A. K. Roebuck, B. L. Evering // *Industrial & Engineering Chemistry Product Research and Development*. – 1970. – V. 9. – 76-82 pp
24. G. F. Prescott, C. T. Lewis, W. R. Owens. Iso-butane pretreatment in alkylation with ethylene utilizing aluminium chloride hydrocarbon complex, hydrogen chloride and ethyl chloride. Пат. США №3 873 653, 1975.
25. Murzin, D.Yu. Acid-base properties of sulfated heterogeneous catalysts for isobutane conversion / D.Yu. Murzin, S.V. Myakin, E.A. Vlasov, M.M. Sychoy, A, Yu. Postnov, N.V. Mal'tseva, A.O. Dolgashev, Sh.O. Omarov. // *Izvestiya Sankt Peterburgskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo instituta (tekhnicheskogo universiteta)*. – 2014. – № 27. – V. 53. –11-17 s.
26. Morris B. Berenbaum, Thomas P. J. Izod, Donald R. Taylor, John D. Hewes. Preparation of strong and super acid catalysts using elemental fluorine. Пат. США №5220087, 1993.
27. Yigong He, Yufeng He, wenhua Xie, Qiang Fu. Process for alkylation of isoparaffin with olefin. Пат. США №6492571B1, 2002.
28. Lawrence A. Smith, Jr. Enhanced diisobutene production in the presence of methyltertiary butyl ether. Пат. США №4375576, 1983.
29. Zhuang, Y. Iso-butane/1-butene alkylation on LaNaY catalysts modified by alkali and alkaline-earth cations / Y. Zhuang, F. T. T. Nguyen // *Applied Catalysis A: General*. – 1999. –V. 190. – 137-147 pp
30. Lai, P.P. Szilard–Chalmers cation recoil studies in zeolites X and Y. Part 1.—Ion exchange in zeolites X and Y / P.P. Lai, L.V.C. Rees // *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 1*. – 1976. – V. 72. – 1809-1817 pp.

31. Лисицын Н.В., Викторов В.К., Кузичкин Н.В., Федоров В.И. Химико-технологические системы: оптимизация и ресурсосбережение.- 2-е изд., перераб. И доп. – Спб,: Менделеев, 2013. - 392 с.
32. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике.–М.: Наука, 1987.–502 с.2.
33. Бесков В.С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов и реакторов.–М.: Химия, 1991.–256 с
34. Кузнецов А.А., Кагорманов С.М., Судаков Е.Н.Расчеты процессов и аппаратов нефтеперерабатывающей промышленности:учебное пособие.– Л.:Химия, 1974.–342с
35. ГОСТ 32513-2013 Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия. - М.: Стандартинформ, 2013, 12 с
36. Скворцов Ю.В. Организационно-экономические вопросы в дипломном проектировании: Учебное пособие. – М.: Высшая школа, 2006. – 399 с.
37. Основы функционально-стоимостного анализа: Учебное пособие / Под ред. М.Г. Карпунина и Б.И. Майданчика. - М.: Энергия, 1980. - 175 с.
38. Кузьмина Е.А, Кузьмин А.М. Методы поиска новых идей и решений "Методы менеджмента качества" №1 2003 г.
39. Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 28.12.2013).
40. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.
41. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.-М.: Информационно-издательский центр Минздрава России, 1997.–20с
42. ГОСТ 12.4.011-89. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация.-М.: ИПК Издательство стандартов, 2001.–8 с

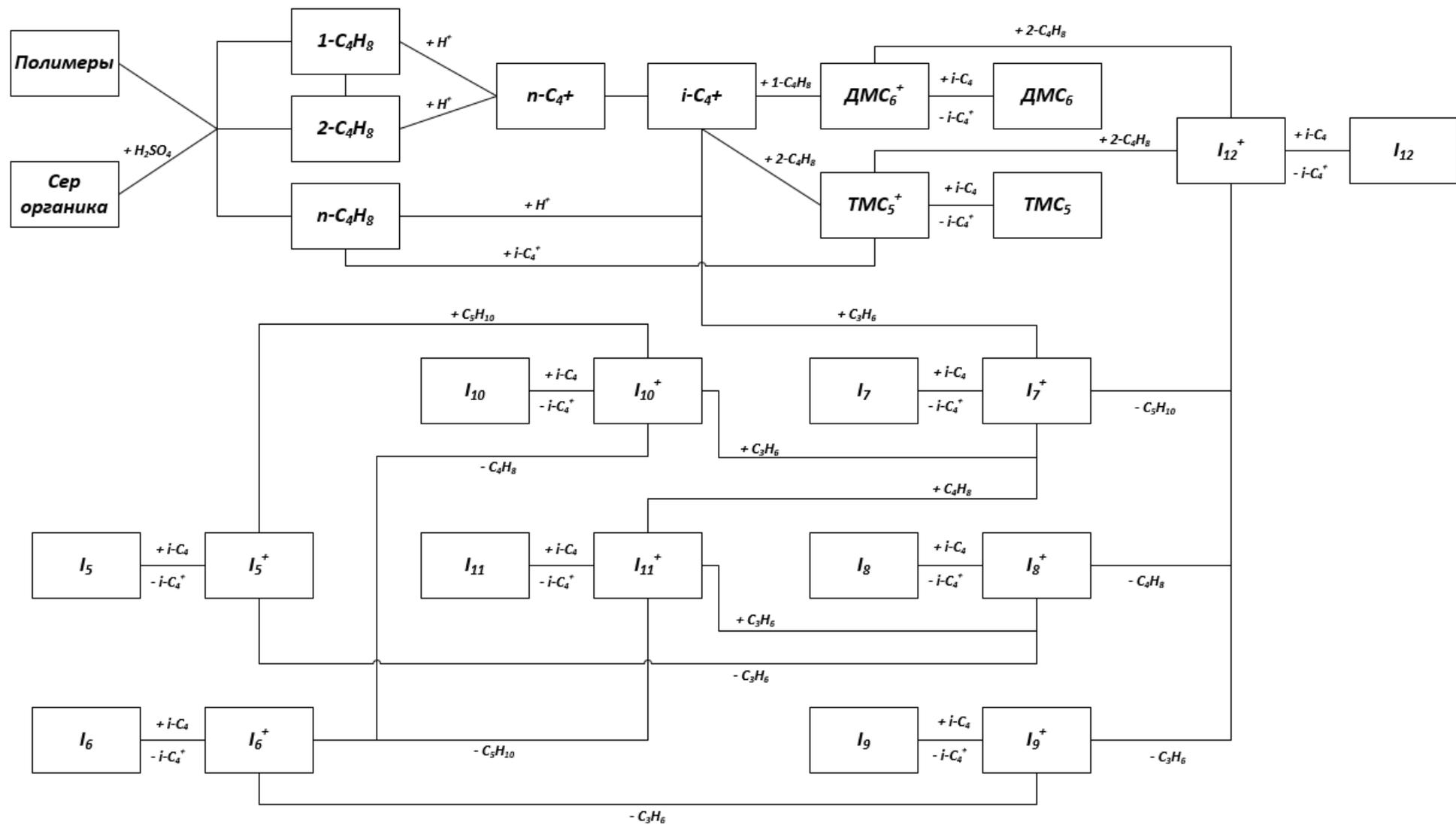
43. ГОСТ 12.1.030-81 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление.
44. ГОСТ 2184-2013. Кислота серная техническая. Технические условия (с Поправками). -М.: Стандартинформ, 2014.–37с. 46. ГОСТ 4095-
45. Изоктан технический. Технические условия (с Изменениями N 1, 2, 3). -М.: Стандартинформ, 2009.–6с 8. СНиП 23-05-95 Естественное и искусственное освещение.
46. ГН 2.2.5.3532-18. Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны. 2018.–170 с.
47. ГОСТ Р 55710 -2013. Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений. -М.: Стандартинформ, 2016.–20 с.
48. Долин П.А. Справочник по технике безопасности. –М.: Энергоатомиздат, 1982. –800с.
49. ГОСТ 6825-91. Лампы люминесцентные трубчатые для общего освещения.
50. ГОСТ Р 22.0.07-95. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Источники техногенных чрезвычайных ситуаций. Классификация и номенклатура поражающих факторов и их параметров.
51. Приказ Ростехнадзора от 25.03.2014 N 116[Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/542627299> (дата обращения 12.05.2021).
52. Рекомендации по устройству и безопасной эксплуатации технологических трубопроводов. Приказ от 27 декабря 2012 года N 784 [Электронный ресурс] –Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/542627299>(дата обращения 12.05.2021).
53. Zheng, W., Huang, C., Sun, W., Zhao, L., 2018. Microstructures of the sulfonic-acid functionalized ionic liquid/sulfuric acid and their interactions: a perspective from the isobutane alkylation. J. Phys. Chem. B 122, 1460-1470.

54. Sun, W., Shi, Y., Chen, J., Xi, Z., Zhao, L., 2013. Alkylation kinetics of isobutane by C4 olefins using sulfuric acid as catalyst. *Indust. Eng. Chem. Res.* 52, 15262-15269.

55. . Yang, Z., Cui, X., Jie, H., Yu, X., Zhang, Y., Feng, T., Liu, H., Song, K., 2015. Kinetic study and process simulation of transesterification of methyl acetate and isoamyl alcohol catalyzed by ionic liquid. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 54, 1204-1215.

56. Wang, A., Zhao, G., Liu, F., Ullah, L., Zhang, S., Zheng, A., 2016. Anionic clusters enhanced catalytic performance of protic acid ionic liquids for isobutane alkylation. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 55, 8271-8280.

Приложение А



Приложение Б

R[1] := k[1] * C[1];
R[2] := k[2] * C[2];
R[3] := k[3] * C[1];
R[4] := k[4] * C[3];
R[5] := k[5] * C[2];
R[6] := k[6] * C[3];
R[7] := k[7] * C[1] * C[4] * C[5];
R[8] := k[8] * C[6] * C[7];
R[9] := k[9] * C[3] * C[4];
R[10] := k[10] * C[6];
R[11] := k[11] * C[2] * C[4] * C[5];
R[12] := k[12] * C[6] * C[7];
R[13] := k[13] * C[6] * C[2];
R[14] := k[14] * C[6] * C[3];
R[15] := k[15] * C[8] * C[5];
R[16] := k[16] * C[8] * C[5];
R[17] := k[17] * C[8] * C[5];
R[18] := k[18] * C[6] * C[1];
R[19] := k[19] * C[12] * C[5];
R[20] := k[20] * C[12] * C[5];
R[21] := k[21] * C[12] * C[5];
R[22] := k[22] * C[5] * C[16];
R[23] := k[23] * C[5] * C[16];
R[24] := k[24] * C[5] * C[16];
R[25] := k[25] * C[5] * C[16];
R[26] := k[26] * C[5] * C[16];
R[27] := k[27] * C[5] * C[16];
R[28] := k[28] * C[5] * C[3];
R[29] := k[29] * C[5] * C[1];
R[30] := k[30] * C[5] * C[2];
R[31] := k[31] * C[5] * C[24];
R[32] := k[32] * C[5] * C[5] * C[16];
R[33] := k[33] * C[5] * C[5] * C[16];
R[34] := k[34] * C[5] * C[5] * C[16];
R[35] := k[35] * C[5] * C[5] * C[16];
R[36] := k[36] * C[5] * C[5] * C[16];
R[37] := k[37] * C[5] * C[5] * C[16];
R[38] := k[38] * C[5] * C[1];
R[39] := k[39] * C[5] * C[2];
R[40] := k[40] * C[5] * C[3];
R[41] := k[41] * C[3] * C[3] * C[16];
R[42] := k[42] * C[3] * C[3] * C[16];
R[43] := k[43] * C[3] * C[3] * C[16];

$R[44] := k[44] * C[3] * C[3] * C[16];$
 $R[45] := k[45] * C[3] * C[3] * C[1];$
 $R[46] := k[46] * C[3] * C[3] * C[1];$
 $R[47] := k[47] * C[3] * C[3] * C[1];$
 $R[48] := k[48] * C[3] * C[3] * C[1];$
 $R[49] := k[49] * C[3] * C[3] * C[1];$
 $R[50] := k[50] * C[8] * C[2];$
 $R[51] := k[51] * C[12] * C[2];$
 $R[52] := k[52] * C[32] * C[5];$
 $R[53] := k[53] * C[28] * C[2];$
 $R[54] := k[54] * C[29] * C[2];$
 $R[55] := k[55] * C[30] * C[2];$
 $R[56] := k[56] * C[31] * C[2];$
 $R[57] := k[57] * C[17] * C[2];$
 $R[58] := k[58] * C[18] * C[2];$
 $R[59] := k[59] * C[19] * C[2];$
 $R[60] := k[60] * C[20] * C[2];$
 $R[61] := k[61] * C[21] * C[2];$
 $R[62] := k[62] * C[9];$
 $R[63] := k[63] * C[11];$
 $R[64] := k[64] * C[10];$
 $R[65] := k[65] * C[13];$
 $R[66] := k[66] * C[14];$
 $R[67] := k[67] * C[15];$
 $R[68] := k[68] * C[33];$
 $R[69] := k[69] * C[33];$
 $R[70] := k[70] * C[33];$
 $R[71] := k[71] * C[33];$
 $R[72] := k[72] * C[33];$
 $R[73] := k[73] * C[33];$
 $R[74] := k[74] * C[33];$
 $R[75] := k[75] * C[33];$
 $R[76] := k[76] * C[6] * C[37];$
 $R[77] := k[77] * C[38];$
 $R[78] := k[78] * C[37] * C[4];$
 $R[79] := k[79] * C[1];$
 $R[80] := k[80] * C[2];$
 $R[81] := k[81] * C[3];$
 $R[82] := k[82] * C[1] * C[38];$
 $R[83] := k[83] * C[2] * C[38];$
 $R[84] := k[84] * C[3] * C[38];$

где $R[j]$ – скорость j -ой химической реакции; $k[j]$ – константа скорости j -ой химической реакции; $C[i]$ – концентрация i -го компонента, моль / л;

Обозначения концентраций компонентов представлены в таблице 6.1.

Таблица 6.1. Обозначение концентраций компонентов в кинетической модели

Компонент	Обозначение в кинетической модели
Бутен-1	C[1]
Бутен-2	C[2]
Изобутен	C[3]
H ⁽⁺⁾	C[4]
Изобутан	C[5]
iC ₄ H ₉ ⁽⁺⁾	C[6]
nC ₄ H ₁₀	C[7]
TMC ₅ ⁽⁺⁾	C[8]
224TMC ₅	C[9]
233TMC ₅	C[10]
234TMC ₅	C[11]
ДМС ₆ ⁽⁺⁾	C[12]
25ДМС ₆	C[13]
24ДМС ₆	C[14]
23ДМС ₆	C[15]
C ₃ H ₆	C[16]
24ДМС ₅	C[17]
223TMC ₄	C[18]
2МС ₆	C[19]
23ДМС ₅	C[20]
3МС ₆	C[21]
I ₇	C[22]
I ₈	C[23]
C ₅ H ₁₀	C[24]
I ₉	C[25]
C ₃ H ₈	C[26]
iC ₅ H ₁₂	C[27]
23ДМС ₄	C[28]
22ДМС ₄	C[29]
2МС ₅	C[30]
3МС ₅	C[31]
iC ₁₂ H ₂₅ ⁽⁺⁾	C[32]
iC ₁₂ H ₂₆	C[33]
I ₁₀	C[34]

I11	C[35]
C2H6	C[36]
HSO4	C[37]
H2SO4	C[38]
Полимер	C[39]
H2O	C[40]
1-C4H6	C[41]
2-C4H6	C[42]
i-C4H6	C[43]
SO2	C[44]

Изменение концентрации *i*-го компонента во времени, с учетом модели идеального смешения, выражается следующим образом:

$$dC[1]/dt = 1 / tk * (C0[1] - C[1]) - R[1] + R[2] - R[3] + R[4] - R[7] + R[8] - R[18] - R[29] - R[38] - R[45] - R[46] - R[47] - R[48] - R[49] + R[69] - R[79]$$

$$dC[2]/dt = 1 / tk * (C0[2]-C[2]) + R[1] - R[2] - R[5] + R[6] - R[11] + R[12] - R[13] - R[30] - R[39] - R[50] - R[51] - R[53] - R[54] - R[55] - R[56] - R[57] - R[58] - R[59] - R[60] - R[61] + R[70] - R[80]$$

$$dC[3]/dt = 1 / tk * (C0[3]-C[3]) + R[3] - R[4] + R[5] - R[6] - R[9] + R[10] - R[14] - R[28] - R[40] - 2 * R[41] - 2 * R[42] - 2 * R[43] - 2 * R[44] - 2 * R[45] - 2 * R[46] - 2 * R[47] - 2 * R[48] - 2 * R[49] + R[62] + R[62] + R[76] - R[81]$$

$$dC[4]/dt = 1 / tk * (C0[4] - C[4]) - R[7] + R[8] - R[9] + R[10] - R[11] + R[12] + R[77] - R[78]$$

$$dC[5]/dt = 1 / tk * (C0[5] - C[5]) - R[7] + R[8] - R[11] + R[12] - R[15] - R[16] - R[17] - R[19] - R[20] - R[21] - R[22] - R[23] - R[24] - R[25] - R[26] - R[27] - R[28] - R[29] - R[30] - R[31] - 2 * R[32] - 2 * R[33] - 2 * R[34] - 2 * R[35] - 2 * R[36] - 2 * R[37] - R[38] - R[39] - R[40] - R[52] + R[62]$$

$$dC[6]/dt = 1 / tk * (C0[6] - C[6]) + R[7] - R[8] + R[9] - R[10] + R[11] - R[12] - R[13] - R[14] + R[15] + R[16] + R[17] - R[18] + R[19] + R[20] + R[21] + R[52] - R[76]$$

$$dC[7]/dt = 1 / tk * (C0[7] - C[7]) + R[7] - R[8] + R[11] - R[12]$$

$$dC[8]/dt = 1 / tk * (C0[8] - C[8]) + R[13] + R[14] - R[15] - R[16] - R[17] - R[50]$$

$$dC[9]/dt = 1 / tk * (C0[9] - C[9]) + R[15] + R[32] - R[62]$$

$$dC[10]/dt = 1 / tk * (C0[10] - C[10]) + R[16] + R[33] - R[64]$$

$$dC[11]/dt = 1 / tk * (C0[11] - C[11]) + R[17] + R[34] - R[63]$$

$$\begin{aligned}
dC[12]/dt &= 1 / tk * (C0[12] - C[12]) + R[18] - R[19] - R[20] - R[21] - R[51] \\
dC[13]/dt &= 1 / tk * (C0[13] - C[13]) + R[19] + R[35] - R[65] \\
dC[14]/dt &= 1 / tk * (C0[14] - C[14]) + R[20] + R[36] - R[66] \\
dC[15]/dt &= 1 / tk * (C0[15] - C[15]) + R[21] + R[37] - R[67] \\
dC[16]/dt &= 1 / tk * (C0[16] - C[16]) - R[22] - R[23] - R[24] - R[25] - R[26] - \\
&R[27] - R[32] - R[33] - R[34] - R[35] - R[36] - R[37] + R[38] + \\
&R[39] + R[40] - R[41] - R[42] - R[43] - R[44] + R[65] + R[66] + \\
&R[67] + R[68] \\
dC[17]/dt &= 1 / tk * (C0[17] - C[17]) + R[22] + R[45] - R[57] + R[71] \\
dC[18]/dt &= 1 / tk * (C0[18] - C[18]) + R[23] + R[46] - R[58] + R[72] \\
dC[19]/dt &= 1 / tk * (C0[19] - C[19]) + R[24] + R[47] - R[59] + R[73] \\
dC[20]/dt &= 1 / tk * (C0[20] - C[20]) + R[25] + R[48] - R[60] + R[74] \\
dC[21]/dt &= 1 / tk * (C0[21] - C[21]) + R[26] + R[49] - R[61] + R[75] \\
dC[22]/dt &= 1 / tk * (C0[22] - C[22]) + R[27] \\
dC[23]/dt &= 1 / tk * (C0[23] - C[23]) + R[28] + R[29] + R[30] + R[69] + R[70] \\
dC[24]/dt &= 1 / tk * (C0[24] - C[24]) - R[31] + R[71] + R[72] + R[73] + R[74] \\
&+ R[75] \\
dC[25]/dt &= 1 / tk * (C0[25] - C[25]) + R[31] + R[68] \\
dC[26]/dt &= 1 / tk * (C0[26] - C[26]) + R[32] + R[33] + R[34] + R[35] + R[36] \\
&+ R[37] + R[63] \\
dC[27]/dt &= 1 / tk * (C0[27] - C[27]) + R[38] + R[39] + R[40] + R[41] + R[42] \\
&+ R[43] + R[44] + R[45] + R[46] + R[47] + R[48] + R[49] + R[63] \\
&+ R[65] + R[66] + R[67] \\
dC[28]/dt &= 1 / tk * (C0[28] - C[28]) + R[41] - R[53] + R[64] \\
dC[29]/dt &= 1 / tk * (C0[29] - C[29]) + R[42] - R[54] \\
dC[30]/dt &= 1 / tk * (C0[30] - C[30]) + R[43] - R[55] \\
dC[31]/dt &= 1 / tk * (C0[31] - C[31]) + R[44] - R[56] \\
dC[32]/dt &= 1 / tk * (C0[32] - C[32]) + R[50] + R[51] - R[52] \\
dC[33]/dt &= 1 / tk * (C0[33] - C[33]) + R[52] - R[68] - R[69] - R[70] - R[71] - \\
&R[72] - R[73] - R[74] - R[75] \\
dC[34]/dt &= 1 / tk * (C0[34] - C[34]) + R[53] + R[54] + R[55] + R[56] \\
dC[35]/dt &= 1 / tk * (C0[35] - C[35]) + R[57] + R[58] + R[59] + R[60] + R[61] \\
dC[36]/dt &= 1 / tk * (C0[36] - C[36]) + R[64] \\
dC[37]/dt &= 1 / tk * (C0[37] - C[37]) - R[76] + R[77] - R[78]
\end{aligned}$$

$$dC[38]/dt = 1 / tk * (C0[38] - C[38]) + R[76] - R[77] + R[78]$$

$$dC[39]/dt = 1 / tk * (C0[39] - C[39]) + R[79] + R[80] + R[81]$$

$$dC[40]/dt = 1 / tk * (C0[40] - C[40]) + R[82] + R[83] + R[84]$$

$$dC[41]/dt = 1 / tk * (C0[41] - C[41]) + R[82]$$

$$dC[42]/dt = 1 / tk * (C0[42] - C[42]) + R[83]$$

$$dC[43]/dt = 1 / tk * (C0[43] - C[43]) + R[84]$$

$$dC[44]/dt = 1 / tk * (C0[44] - C[44]) + R[82] + R[83] + R[84]$$

Приложение В

(справочное)

Modeling of liquid-phase alkylation of isobutane with olefins

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Копычева Ульяна Николаевна		

Руководитель ВКР

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

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Терре Диана Анатольевна	к.ф.н.		

Introduction

The alkylation reaction combines isobutane with light olefins in the presence of a strong acid catalyst. The resulting highly branched, paraffinic product is a low-vapor-pressure, high-octane blending component. Although alkylation can take place at high temperatures without catalyst, the existing processes of commercial production operate at low to moderate temperatures using either sulfuric or hydrofluoric acid catalysts. Several different companies are currently pursuing research to commercialize a solid alkylation catalyst. The reactions which occur in alkylation are complex and produce an alkylate product that has a wide boiling range. By optimizing operating conditions, the majority of the product is within the desired gasoline boiling range, with motor octane numbers (MONs) being up to 95 and research octane numbers (RONs) - up to 98.

A quality mathematical model of the alkylation will allow creating and adjusting the operating mode parameters of the plant to achieve high output of the products and high selectivity of the process.

To create a mathematical model, it is necessary to know the dependencies of thermodynamic and kinetic parameters on controlled pressure, temperature in order to optimize the model.

The purpose of this research is to develop and analyze a non-stationary mathematical model of sulfuric acid alkylation sensitive to changes in the composition of raw materials and technological parameters.

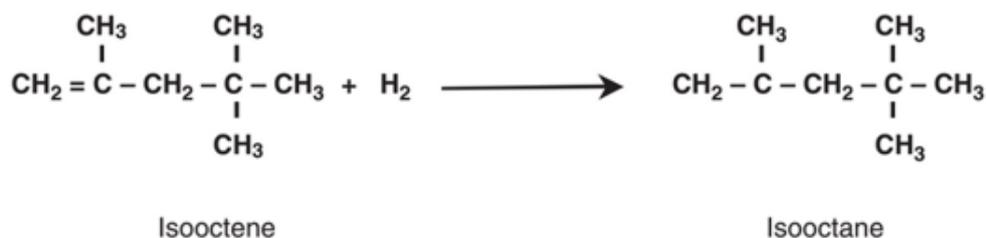
1.1 Process chemistry

The primary reaction in the process is the dimerization of isobutylene over acidic ion-exchange resin catalyst. This dimerization reaction forms two isomers of trimethylpentene (TMP), or isooctene, namely, 2,4,4-TMP-1 and 2,4,4-TMP-2, according to a number of reactions. TMP further reacts with isobutylene to form trimers, tetramers, etc. Formation of these oligomers is inhibited by oxygen-containing polar components in the reaction mixture. Water and alcohol are used as inhibitors for

alkylation. These polar components block acidic sites on the ion-exchange resin, thereby controlling the catalyst activity and increasing the selectivity to the formation of dimers. The process conditions in the dimerization reactions are selected to maximize the yield of high-quality isooctene product [4].

A small quantity of C₇ and C₉ components and other C₈ isomers will be formed when other olefin components such as propylene, n-butenes, and isoamylene are present in the reaction mixture. These reactions are much slower than the isobutylene dimerization reaction, and therefore only a small fraction of these components is converted due to this process.

Isooctene can be hydrogenated to produce isooctane, according to the following reaction:



1.2 Liquid catalysts for alkylation

The alkylation of isobutane with butylene serves to obtain gasoline fractions with a high-octane number, which have high stability and detonation resistance. The raw material for this process is isobutane and butane-butylene fraction (BBF) and propane-propylene fraction.

In modern industry two main methods for producing alkylate are used [4,53]:

- alkylation of isobutane with BBF catalyzed by sulfuric acid.

The raw material for this process is isobutane from a gas-fractionating unit and BBF is in a ratio of 7:1 or 12:1. The catalyst is 98% sulfuric acid. The process is carried out in a mixing reactor at a temperature of 4 to 13 °C. The pressure in the reactor does not affect the yield of the product, so it is maintained slightly higher than the pressure of the saturated vapors of the hydrocarbons used at a given temperature to maintain them in the liquid phase.

- alkylation of isobutane with BBF catalyzed by hydrofluoric acid.

The feed of this process is isobutane and propylene, butylene or amylene. The process is carried out at a temperature of 32 °C. The pressure in the unit ranges from 0.7 to 0.8 MPa to maintain hydrocarbons and catalyst in the liquid phase.

Thus, there are two types of liquid phase alkylation. A comparison of the two types of alkylation is shown in Table 7.1.

Table 7.1 – Comparison of liquid alkylation catalysts

Properties	H ₂ SO ₄ (98 %)	HF (50 %)
Density, m ³ /kg	1836.5	1155
Melting temperature, °C	0.1	-83.4
Boiling temperature, °C	332.4	19.4
Viscosity, MPa·s	24.5	0.53
Surface tension, N/m	55·10 ⁻³	10·10 ⁻³

Higher physicochemical values, such as viscosity, density, and surface tension H₂SO₄ make it more difficult to create a phase interface between sulfuric acid and hydrocarbons. One of the main advantages of hydrofluoric acid is the good solubility of isobutene; however, the dissolution rate of olefins exceeds the dissolution rate of paraffins. The dissolution rate and solubility of isobutane in HF is higher than in H₂SO₄, so the ratio between isobutane and alkene at the center of the reaction zone is higher. Therefore, the selectivity of the hydrogen fluoride catalyst is higher than that of the sulfuric acid catalyst.

A safer method of producing alkylate is synthesis using sulfuric acid catalyst. However, this alkylate synthesis technique is more energy consuming, because a large amount of the waste sulfuric acid is formed during alkylation, which must be regenerated or disposed of. This complicates the hardware design of this technology and increases the additional capital costs associated with the operation of regenerators. Today, only sulfuric acid alkylation is used in Russia, as it is less toxic.

1.3 Process description

A block flow diagram of the STRATCO effluent refrigerated H₂SO₄ alkylation project is shown in Figure 1. Each section of the block flow diagram is described below [4]:

- Reaction section where the reacting hydrocarbons are brought into contact with sulfuric acid catalyst under controlled conditions.
- Refrigeration section where the heat of reaction is removed, and light hydrocarbons are removed from the unit.
- Effluent treating section where the free acid, alkyl sulfates, and dialkyl sulfates are removed from the net effluent stream to avoid downstream corrosion and fouling.
- Fractionation section where isobutane is recovered for recycle to the reaction section, and remaining hydrocarbons are separated into the desired products.
- Blowdown section where spent acid is degassed, wastewater pH is adjusted, and acid vent streams are neutralized before being sent off-site.

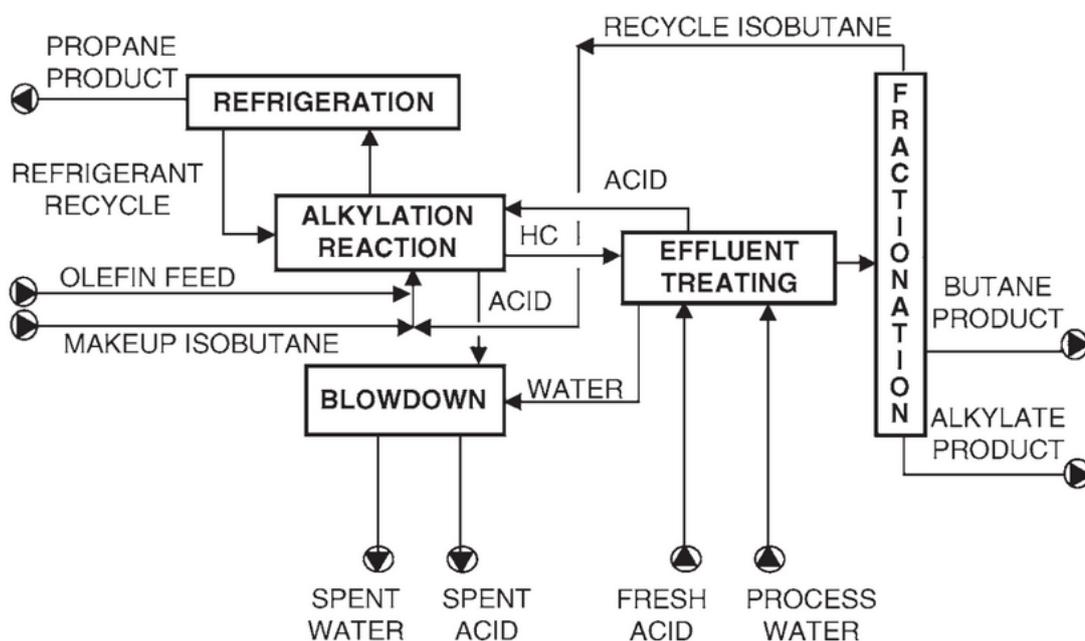


Figure 7.1 – Block flow diagram of STRATCO Inc.

1.3.1 Reaction section

In the reaction section, olefins and isobutane are alkylated in the presence of sulfuric acid catalyst. The olefin feed is initially combined with the recycle isobutane. The olefin and recycle isobutane mixed stream is then cooled to approximately 15.6°C by exchanging heat with the net effluent stream in the feed/effluent exchangers.

Since the solubility of water is reduced at lower temperatures, water is freed from the hydrocarbon to form a second liquid phase. The feed coalescer removes this free water to minimize dilution of the sulfuric acid catalyst.

The feed stream is then combined with the refrigerant recycle stream from the refrigeration section. The refrigerant recycle stream provides additional isobutane to the reaction zone. This combined stream is fed to the Contactor reactors.

The use of separate contactor reactors in the process allows for the segregation of different olefin feeds to optimize alkylate properties and acid consumption. In these cases, the unit will have parallel trains of feed/effluent exchangers and feed coalescers.

At the “heart” of alkylation technology is the contactor reactor (Figure 2). The contactor reactor is a horizontal pressure vessel containing an inner circulation tube, a tube bundle to remove the heat of reaction, and a mixing impeller. The hydrocarbon feed and sulfuric acid enter the circulation tube on the suction side of the impeller. As the feeds pass across the impeller, an emulsion of hydrocarbon and acid is formed. The emulsion in the contactor reactor is continuously circulated at very high rates [4].

The superior mixing and high internal circulation of the contactor reactor minimize the temperature difference between any two points in the reaction zone to 0.6°C. This reduces the possibility of localized hot spots that lead to degraded alkylate product and increased chances for corrosion. The intense mixing in the contactor reactor also provides uniform distribution of the hydrocarbons in the acid emulsion. This prevents localized areas of nonoptimum isobutane/olefin ratios and acid/olefin ratios, both of which promote olefin polymerization reactions [54].

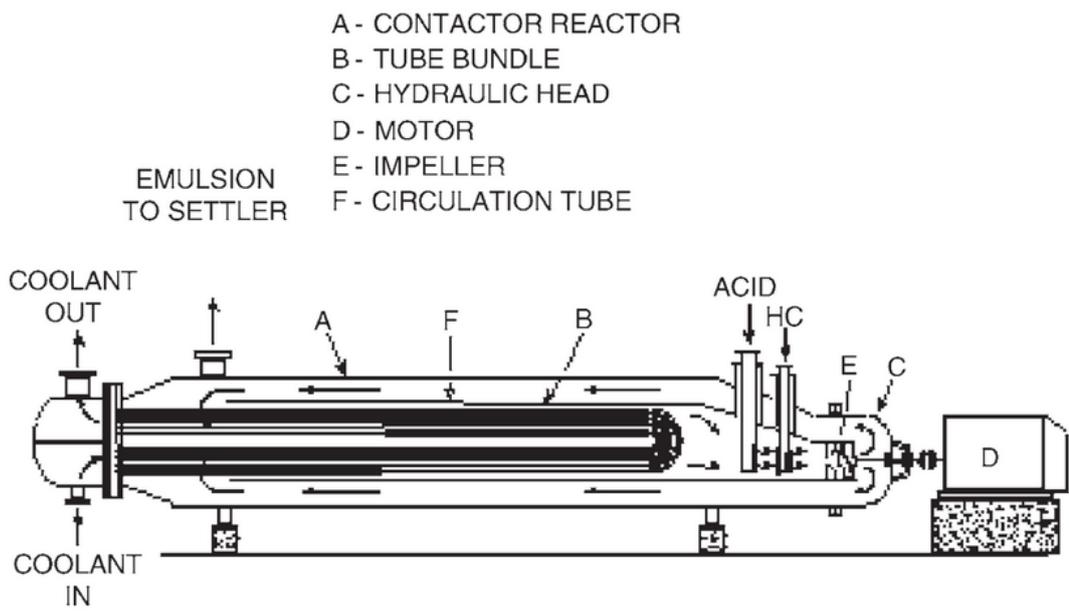


Figure 7.2 – Contactor reactor

The STRATCO alkylation process utilizes an effluent refrigeration system to remove the heat of reaction and to control the reaction temperature. With effluent refrigeration, the hydrocarbons in contact with the sulfuric acid catalyst are kept in the liquid phase.

The hydrocarbon effluent flows from the top of the acid settler to the tube bundle in the contactor reactor. A control valve located in this line maintains a back pressure of about 4.2 kg/cm² gage in the acid settler [4].

This pressure is sufficient to prevent vaporization in the reaction system. In plants with multiple contactor reactors, pressures in the acid settlers differ by 0.4 kg/cm² so that the pressure differential can sustain sequential acid flow.

The sulfuric acid present in the reaction zone serves as a catalyst to the alkylation reaction. Theoretically, a catalyst promotes a chemical reaction without being changed as a result of that reaction. In reality, however, the acid is diluted as a result of the side reactions and feed contaminants. To maintain the desired spent acid strength, a small amount of fresh acid is continuously charged to the acid recycle line from the acid settler to the contactor reactor, and a similar amount of spent acid is withdrawn from the acid settler.

In multiple contactor reactor plants, the reactors are usually operated in parallel on hydrocarbons and in series/parallel on acids, up to a maximum of four stages. Fresh acid and intermediate acid flow rates between the contactor reactors control the spent acid strength. The spent acid strength is generally monitored by titration, which is done in the laboratory.

When alkylating segregated olefin feeds, the optimum acid settler configuration will depend on the olefins processed and the relative rates of each feed. Generally, STRATCO recommends processing the propylene at high acid strength, butylenes at intermediate strength, and amylenes at low strength. The optimum configuration for a particular unit may involve operating some reaction zones in parallel and then cascading to additional reaction zones in series. STRATCO considers several acid staging configurations for every design in order to provide the optimum configuration for the particular feed.

1.3.2 Refrigeration section

Figure 7.3 is a diagram of the most common refrigeration configuration. The partially vaporized net effluent stream from the contactor reactor flows to the suction trap/flash drum, where the vapor and liquid phases are separated.

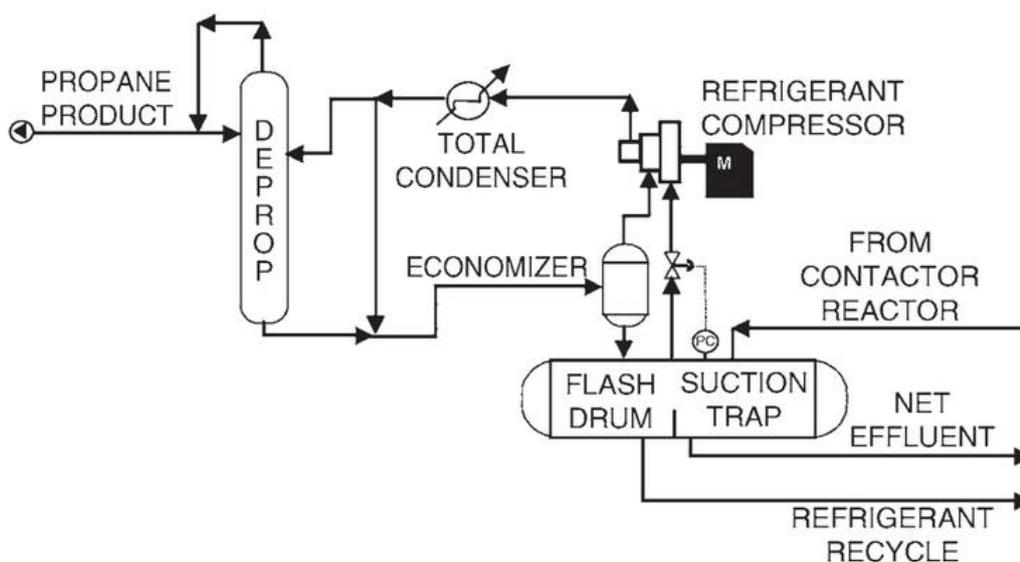


Figure 7.3 – Refrigeration with economizer

A portion of the refrigerant condensate is purged or sent to a depropanizer. The remaining refrigerant is flashed across a control valve and sent to the economizer. If a depropanizer is included in the design, the bottoms stream from the tower is also sent to the economizer. The economizer operates at a pressure between the condensing pressure and the compressor suction pressure. The economizer liquid is flashed and sent to the flash drum side of the suction trap/flash drum [53].

The purge is contacted with strong caustic (10 to 12 %) in an in-line static mixer and is sent to the caustic wash drum. The separated hydrocarbon stream from the caustic wash drum then mixes with process water and is sent to a coalescer. The coalescer reduces the carryover caustic in the hydrocarbon stream that could cause stress corrosion cracking or caustic salt plugging and fouling in downstream equipment. The injection of process water upstream of the coalescer enhances the removal of caustic carryover in the coalescer.

1.3.3 Fractionation section

The fractionation section configuration of grassroots alkylation units, either effluent refrigerated or autorefrigerated, is determined by feed composition as well as the unit and product specifications. As mentioned previously, the alkylation reactions are enhanced by an excess amount of isobutane. A large recycle stream is required to produce the optimum I/O volumetric ratio of 7:1 to 10:1 in the feed to the contactor reactors. Therefore, the fractionation section of the alkylation unit is not simply a product separation section; it also provides a recycle isobutane stream.

Low C₅ content of the n-butane product is difficult to meet with a vapor side draw on the DIB and requires the installation of a debutanizer tower (Figure 7.4). A debutanizer is typically required when the specified C₅ content of the n-butane product must be less than 2 %. A simpler system consisting of a deisobutanizer (DIB) with a side draw may suffice if a high-purity n-butane product is not required.

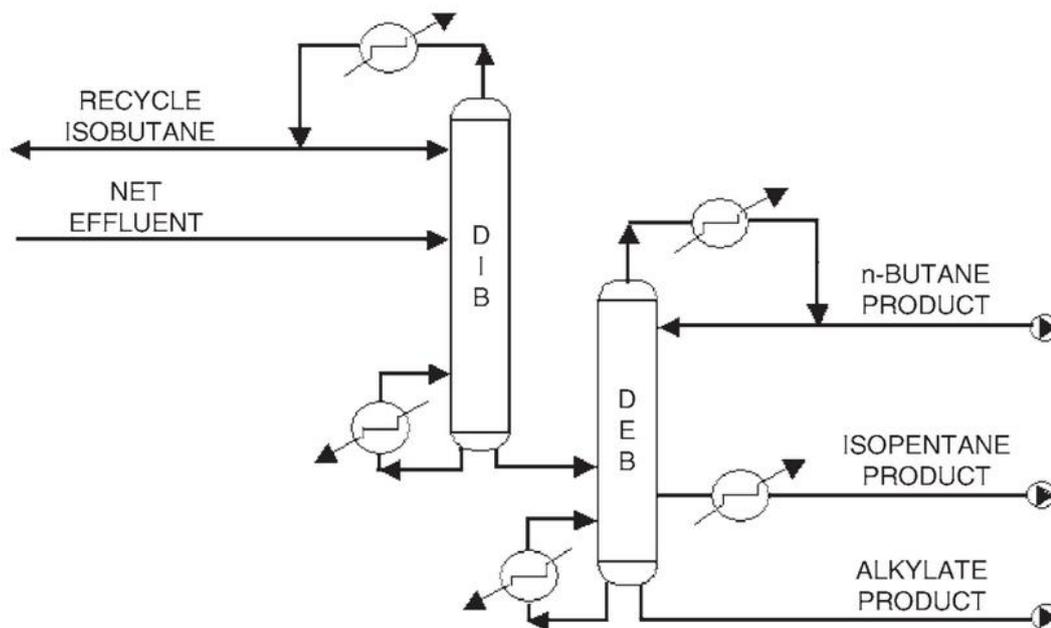


Figure 7.4 – Fractionation system.

1.4 Kinetic model of the alkylation process

Alkylation proceeds via a carbenium ion mechanism, as shown in Figure 7.5. The complex reaction paths include an initiation step, a propagation step, and hydrogen transfer. Secondary reactions are polymerization, isomerization and cracking of paraffins. The target products are formed by reacting isobutane with the butane-butylene fraction.

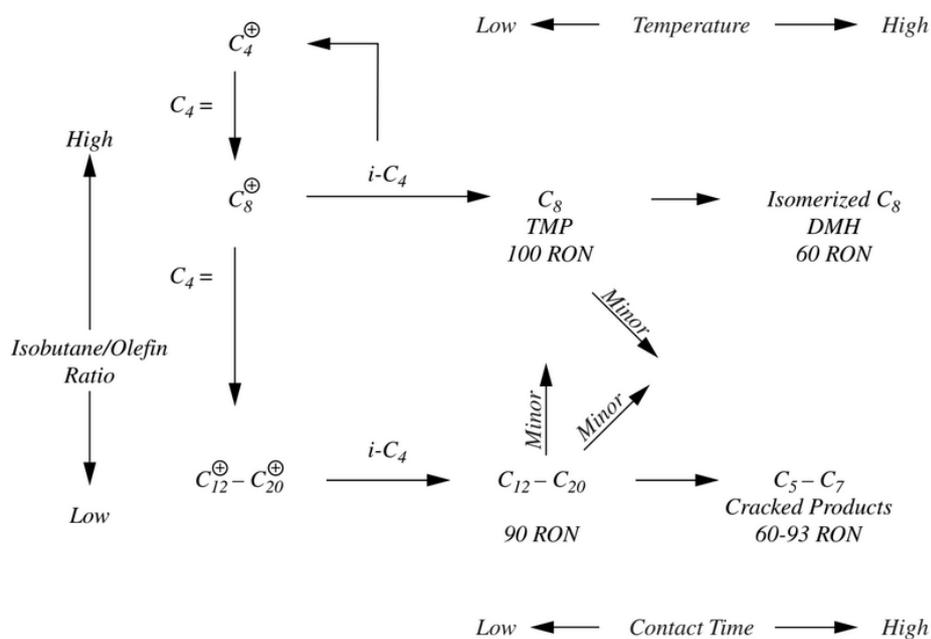


Figure 7.55 – Reaction mechanism [54].

A key step is protonation of the light olefin with a catalyst and addition of the olefin to the C₄ carbocation and formation of the C₈ carbocation. Side reactions make heavy products such as resins [4].

For the initiation step, 2-butene changes into sec-butyl carbonium ion (sec-C₄H₉⁺) by rapid protonatio. Then, fast hydride transfer occurs from isobutane to sec-C₄H₉, giving tert-butyl carbonium ion (tert-C₄H₉⁺) and n-butane [55].

The resulting i-C₄⁺ reacts with a butene to generate a corresponding C₈ carbonium ion. Under acidic conditions, the C₈ carbonium ions can isomerize to give several isomer ions through methyl shifts and hydride transfer reaction.

The alkylate formed by alkylating isobutane with 2-butene is the preferred 2,2,3-TMP compared to the 2,2-DMH formed by alkylating isobutane with 1-butene [55].

The mechanism of the process is necessary for the compilation of the kinetic model. This allows the thermal effect and concentration change to be calculated.

A traditional way to calculate enthalpy of a reaction is to calculate heats of formation, and take the appropriate sum and difference. The enthalpy of a reaction with zero-point energy correction can be calculated simply by using the formula:

$$\Delta_r H^\circ (298 \text{ K}) = \sum_{\text{products}} \Delta_f H^\circ (298 \text{ K}) - \sum_{\text{reactants}} \Delta_f H^\circ (298 \text{ K})$$

Considering a first order reaction, the reaction rate can be calculated by:

$$k(T) = \frac{k_B T}{h c^0} e^{-\Delta G_{\text{activ}}^\circ / RT}$$

Equation for calculating trial activation energy by considering the tunneling correction is deduced as follows [56]:

$$E_e = E - \left(\frac{N_A}{12} \right) \frac{(h\nu^\ddagger)^2 / (k_B T)}{10^3}$$

Conclusion

Alkylate is an environmentally friendly component of motor gasoline, it is a clean-burning, low-sulfur, low-RVP gasoline blending component that does not contain olefinic or aromatic compounds. The process provides refiners with a tool to achieve sustainable economy and efficiency, one that will assist refiners in maintaining or strengthening their position in the production and marketing of gasolines.

Today, the most popular type of alkylation in Russia is sulfuric acid alkylation. The process is imperfect and produces toxic waste, so it is important to conduct research to optimize and improve efficiency. Modeling is an effective tool for research, but the first attempts in this area should be made to correctly evaluate the kinetics of the process.