

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической
технологии, нефтехимии и биотехнологии
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Математическое моделирование процесса каталитической изомеризации бензиновых фракций

УДК 665.73.095.21.097:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Копычева Ульяна Николаевна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения химической инженерии	Долганов Игорь Михайлович	к.т.н.		

Консультант

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент отделения химической инженерии	Чузлов Вячеслав Алексеевич	-		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения социально- гуманитарных наук	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения общетехнических дисциплин	Белоенко Елена Владимировна	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения химической инженерии	Юрьев Егор Михайлович	к.т.н.		

Томск – 2019 г.

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

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
P1	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности.
P2	Применять знания в области современных химических технологий для решения производственных задач.
P3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии.
P4	Разрабатывать технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий
P6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.
P9	Активно владеть иностранным языком на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки (специальность) 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Юрьев Е.М.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

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

Студенту:

Группа	ФИО
2К51	Копычевой Ульяне Николаевне

Тема работы:

Математическое моделирование процесса каталитической изомеризации бензиновых фракций
Утверждена приказом директора (дата, номер) От 14.05.2019 г. № 3745/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	24.05.19 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>Объект исследования – технология изомеризации гепатновой фракции. Технология предназначена для получения высокооктанового компонента автомобильных бензинов.</p>
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ol style="list-style-type: none">1 Литературный обзор<ol style="list-style-type: none">1.1 Технология процесса изомеризации C₅-C₆1.2 Изомеризация C₅-C₆ в присутствии различных катализаторов1.3 Технология процесса изомеризации C₇-C₈1.4 Изомеризация C₇-C₈ в присутствии различных катализаторов1.5 Математическое моделирование процесса изомеризации2 Объект и методы исследования<ol style="list-style-type: none">2.1 Объект исследования2.2 Термодинамический анализ

	2.3 Кинетические закономерности 2.4 Оценка адекватности 3 Результаты проведенного исследования 3.1 Влияние состава перерабатываемого сырья 3.2 Влияние температуры 3.3 Влияние объемной скорости подачи 3.4 Внедрение процесса изомеризации гептановой фракции в структуру действующего нефтеперерабатывающего предприятия
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Креницына Зоя Васильевна, к.т.н., доцент ОСГН ШБИП
Социальная ответственность	Белоенко Елена Владимировна, к.т.н., доцент ООД ШБИП
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	14.01.19 г.
---	--------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Долганов И.М.	к.т.н.		14.01.19 г.

Консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОХИ ИШПР	Чузлов В.А	-		14.01.19 г.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Копычева У.Н.		14.01.19 г.

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

Студенту:

Группа	ФИО
2К51	Копычевой Ульяне Николаевне

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Химическая инженерия
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Работа с информацией, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах, статических бюллетенях и изданиях, нормативно-правовых документах;
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта.
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИИ.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Проведение оценки экономической эффективности исследования.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

<ol style="list-style-type: none"> 1. Оценка конкурентоспособности технических решений 2. Матрица SWOT 3. Альтернативы проведения НИ 4. График проведения и бюджет НИ 5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ 	
---	--

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Креницына Зоя Васильевна	Кандидат технических наук, доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Копычева Ульяна Николаевна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2К51	Копычевой Ульяне Николаевне

Школа	ИШПР	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	18.03.02. Энерго - и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Тема ВКР:

Математическое моделирование процесса каталитической изомеризации бензиновых фракций	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p style="text-align: center;">Объект исследования – каталитическая изомеризация</p> <p style="text-align: center;">Область применения – нефтехимическая промышленность.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<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. Общие эргономические требования – СанПиН 2.2.4.548-96 "Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений" – ГОСТ 12.4.011-89 (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация
<p>2. Производственная безопасность:</p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<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
<p>3. Экологическая безопасность:</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Вредные вещества, которые выделяются или используются во время работы аппарата - Вредные воздействия на гидросферу и литосферу не воздействуют.
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Наиболее вероятные чрезвычайные ситуации – пожар, взрыв.

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Белоенко Е. В.	К.Т.Н		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Копычева У.Н.		

Реферат

Выпускная квалификационная работа 99 страниц, 22 рисунка, 39 таблиц, 54 источника.

В ходе работы были проведены исследования, объектом которых является технология процесса изомеризации. Предметом исследования является гептановая фракция.

Цель работы – разработка математической модели процесса изомеризации гептановой фракции для получения компонента товарного бензина с улучшенными свойствами.

Актуальность работы заключается в решении следующих вопросов:

- переработка низкооктановых фракций и увеличение доли их использования в процессе компаундирования;
- минимизация содержания бензола и ароматических углеводородов в составе компонентов смешения автомобильных бензинов;
- переработка рафината с установок производства ароматических углеводородов;
- сокращение использования МТБЭ и других дорогостоящих неароматических компонентов при выпуске автомобильных бензинов по стандарту Евро-5.

Ключевые слова: изомеризация, математическая модель, гептановая фракция, октановое число, катализатор.

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

Список сокращений и условных обозначений

ОСПС – объемная скорость подачи сырья

НК – начало кипения

ДТМЗ – ди- триметилзамещенные изомеры

ВСГ – водородсодержащий газ

ЧС – чрезвычайная ситуация

ОЧИ – октановое число по исследовательскому методу

МТБЭ – метил – трет – бутиловый эфир

C_1 – метан

C_2 –этан

C_3 – пропан

nC_4 – н-бутан

н- C_5 – н-пентан

изо- C_5 – изопентан

CC_5 – циклопентан

н- C_6 – н-гексан

изо- C_6 – изогексаны

CC_6 – циклические углеводороды C_6

A_6 – бензол

н- C_7 – н-гептан

изо- C_7 – изогептаны

CC_7 – циклические углеводороды C_7

A_7 – ароматические углеводороды C_7

н- C_8 – н-октан

изо- C_8 – изооктаны

CC_8 – циклические углеводороды C_8

A_8 – ароматические углеводороды C_8

Содержание

Введение	12
1 Литературный обзор.....	14
1.1 Технология процесса изомеризации C_5-C_6	14
1.2 Изомеризация C_5-C_6 в присутствии различных катализаторов	20
1.3 Технология процесса изомеризации C_7-C_8	25
1.4 Изомеризация C_7-C_8 в присутствии различных катализаторов	27
1.5 Математическое моделирование процесса изомеризации	33
2 Объект и методы исследования	35
2.1 Объект исследования	35
2.2 Термодинамический анализ.....	37
2.3 Кинетические закономерности	39
2.4 Оценка адекватности.....	43
3 Результаты проведенного исследования.....	45
3.1 Влияние состава перерабатываемого сырья	45
3.2 Влияние температуры	47
3.3 Влияние объемной скорости подачи.....	50
3.4 Внедрение процесса изомеризации гептановой фракции в структуру действующего нефтеперерабатывающего предприятия	51
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение ...	64
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	64
4.2 SWOT-анализ.....	65
4.3 Структура работ в рамках научного исследования	68
4.4 Определение трудоемкости выполнения работ.....	69
4.5 Разработка графика проведения научного исследования	69
4.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	72
4.6.1 Расчет материальных затрат НТИ	72
4.6.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ.....	73

4.6.3 Основная заработная плата исполнителей темы	74
4.6.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы	75
4.6.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	76
4.6.6 Накладные расходы	76
4.6.7 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	77
4.7 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования .	77
5 Социальная ответственность	80
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	80
5.1.1 Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства	81
5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны	81
5.2 Производственная безопасность	82
5.2.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования	82
5.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований	83
5.2.3 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов	86
5.3 Экологическая безопасность	87
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	87
5.4.1. Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований.	88
5.4.2 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС	88
5.5 Вывод по разделу	89
Выводы	90
Список литературы	92

Введение

Основным направлением устойчивого развития экономики России является добыча и переработка нефтегазового сырья. Нефтяная промышленность Российской Федерации включает в себя добычу нефти и газа, производство нефтепродуктов, а также их реализации. Разработка и внедрение технологий, позволяющих улучшить качество продуктов нефтехимических и нефтеперерабатывающих предприятий, является ключевым фактором успешного развития данной отрасли отечественной промышленности.

Более 30 % потребляемой продукции нефтехимического комплекса на внутреннем рынке приходится на долю автомобильных бензинов. Введение жестких требований к моторным топливам вызывает необходимость производства высокооктановых и экологически чистых компонентов смешения товарной продукции, поэтому изомеризация линейных алканов является актуальной технологией при производстве товарных бензинов.

Процесс каталитической изомеризации легких углеводородов позволяет улучшить эксплуатационные свойства прямогонных бензиновых фракций и рафинатов каталитического риформинга, имеющих большое количество линейных парафинов с низким октановым числом.

Предприятия переработки нефти и газа, включают в себя каталитическую изомеризацию фракции н.к. – 62 °С, производящую высокооктановый продукт, который содержит изомеры пентана и гексана. Для повышения ресурсоэффективности современным заводам необходимо внедрять установки каталитической изомеризации C₇-C₈, для переработки низкооктановой фракции с температурой кипения 70– 105°С.

Для проведения исследования процесса каталитической изомеризации углеводородов C₇-C₈ необходимо создание математической модели, которая позволит рассчитывать состав и свойства изомеризата при различных технологических условиях процесса и переменном компонентном составе

прямогонных бензиновых фракций, содержащих углеводороды гептанового и октанового рядов. Для проведения исследования необходимо выполнить следующие задачи:

- Провести анализ результатов промышленных и лабораторных исследований;
- Определить термодинамические и кинетические закономерности протекания конверсии углеводородов C_{7+} на бифункциональном катализаторе;
- Выявить закономерности влияния технологических параметров процесса изомеризации на качество получаемой продукции.

Основной задачей математического моделирования является определение оптимальных технологических параметров процесса, с целью увеличения выхода диметилзамещенных изомеров и снижения вклада побочных реакций гидрокрекинга углеводородов.

Целью данной работы является оценка эффективности внедрения процесса изомеризации C_{7+} в структуру действующего нефтеперерабатывающего предприятия. Математическая модель позволяет определять технологические условия конверсии гептана, с учетом группового состава имеющихся прямогонных потоков.

Применение высокооктановых фракций в производстве товарных бензинов марок АИ-92 и АИ-95, позволяет сократить долю дорогостоящих компонентов, таких как метил – трет – бутиловый эфир, алкил бензин и толуол.

1 Литературный обзор

1.1 Технология процесса изомеризации C₅-C₆

Основная доля производства высокооктановых компонентов товарных бензинов долгое время приходилась на процессы каталитического крекинга и риформинга, но введение жестких экологических требований к моторным топливам приводит к сокращению использования риформата в компаундировании бензинов. Поэтому необходимо создание новых и модификация действующих процессов по улучшению эксплуатационных свойств бензиновых фракций, одним из таких процессов является каталитическая изомеризация [1-3].

При производстве высокооктановых экологически чистых компонентов бензинов эффективной технологией является изомеризация бензиновых фракций. Данный процесс позволяет улучшить эксплуатационные свойства прямогонных бензинов и рафинатов каталитического риформинга, имеющих большое количество линейных парафинов с низким октановым числом.

Октановое число компонентов, используемых при производстве различных товарных марок бензинов, указывает на детонационную стойкость данного вида топлива. Разница между октановым числом различных групп углеводородов нефти вызывает необходимость разработки технологий, с учетом качества исходного сырья, для получения высокооктановых компонентов. В случае парафинов C₅ и C₆ наиболее разветвленные изомеры имеют более высокие октановые числа.

В таблице 1.1 приведены значения октанового числа по исследовательскому и моторному методу для легких углеводородов, входящих в состав сырья изомеризации и изомеризата.

Таблица 1.1 – Октановые числа углеводородов с числом атомов углерода C₄,C₅,C₆ [3]

Компонент	Октановое число	
	Исследовательский метод	Моторный метод
н – бутан	93,8	89,6
изо – бутан	100,4	97,6
н – пентан	61,7	62,6
изо – пентан	92,3	90,3
н – гексан	24,8	26,0
2 – метилпентан	73,4	71,5
3 – метилпентан	74,5	71,3
2,2 – диметилбутан	91,8	89,4
2,3 - диметилбутан	101,0	94,3

Данные таблицы показывают, что октановое число изо-пентана более чем на 30 пунктов выше, чем у пентана нормального строения. Аналогично и для алканов гексанового ряда, изомер 2,2-диметилбутан имеет октановое число на 72 пункта выше значения н-гексана. Очевидно, что сильно разветвленные алканы являются необходимыми компонентами для производства моторного топлива.

При внедрении в производственную схему нефтеперерабатывающего комплекса процесса изомеризации легких бензиновых фракций выполняются следующие задачи: сокращение доли ароматических углеводородов, в том числе и бензола, минимизация содержания серы в продуктовой фракции, уменьшение доли непредельных углеводородов.

Бензиновая фракция сырой нефти содержит в себе большое количество алканов линейного и монозамещенного строения. Для улучшения эксплуатационных качеств легкой бензиновой фракции необходимо превратить неразветвленные углеводороды с низким октановым числом в разветвленные алканы с высоким октановым числом. Поэтому изомеризация пентан-гексановой фракции является важным этапом производства компонентов моторных топлив[4].

Наиболее эффективной технологией каталитической изомеризации является ИЗОМАЛК-2, разработанная ООО «НПП Нефтехим», г. Краснодар. Существует несколько вариантов технологической схемы процесса изомеризации [5-7].

На рисунке 1.1 представлен вариант установки «за проход», данная вариация исполнения процесса изомеризации требует наименьших капитальных затрат, при этом октановое число продуктовой фракции находится в диапазоне 82-84 пункта по исследовательскому методу.

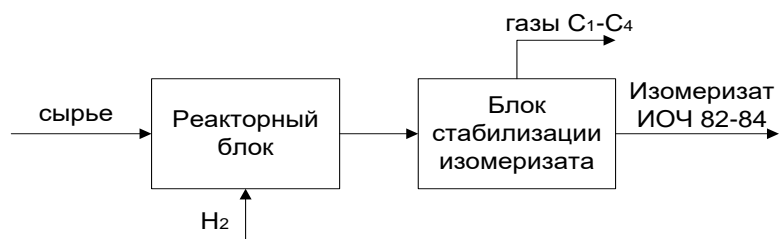


Рисунок 1.1- Блок-схема процесса «за проход»

Схема с рециклом $n-C_5$ применяется для сырья, в котором содержание углеводородов C_5 составляет от 50% до 70%. Колонна деизопентанизации устанавливается до реакторного блока с целью снятия нагрузки на реактор изомеризации. Установка колонны депентанизации после блока стабилизации позволяет увеличить степень конверсии пентана, с целью повышения октанового числа продуктовой фракции, выход изомеризата в данной технологической схеме составляет не менее 98 мас. %. На рисунке 1.2 представлена блок-схема процесса конверсии легких углеводородов с рециклом пентана линейного строения.

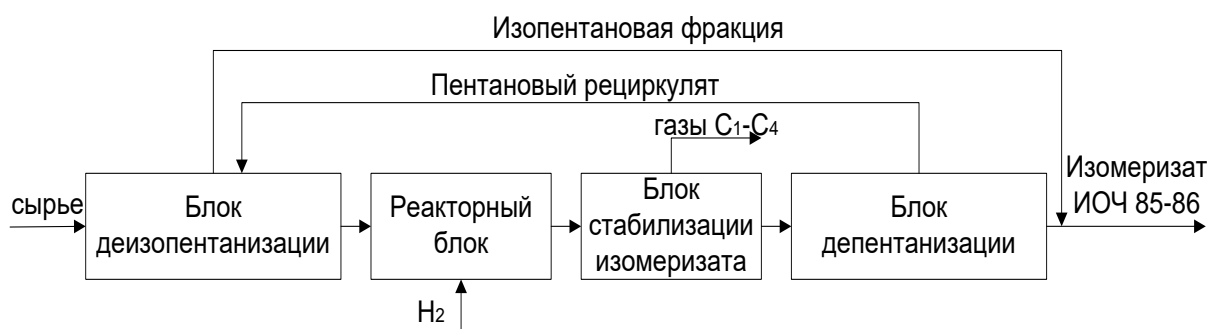


Рисунок 1.2 – Блок-схема процесса с рециклом n -пентана

Блок деизогексанизации применяется для переработки сырья с содержанием углеводородов гексанового ряда в пределах 50-70%. Колонну деизогексанизации устанавливают после блока стабилизации, в данной колонне происходит отделение малоразветвленных гексанов. Н-гексан и метилпентаны отправляются на рецикл в реактор с целью повышения степени конверсии. На рисунке 1.3 представлена схема изомеризации с рециклом малоразветвленных гексанов. Данная схема позволяет повысить октановое число изомеризата за счет возврата малоразветвленных углеводородов C_6 в реакторный блок, при этом в продуктовой фракции не повышается количество изопентанов.

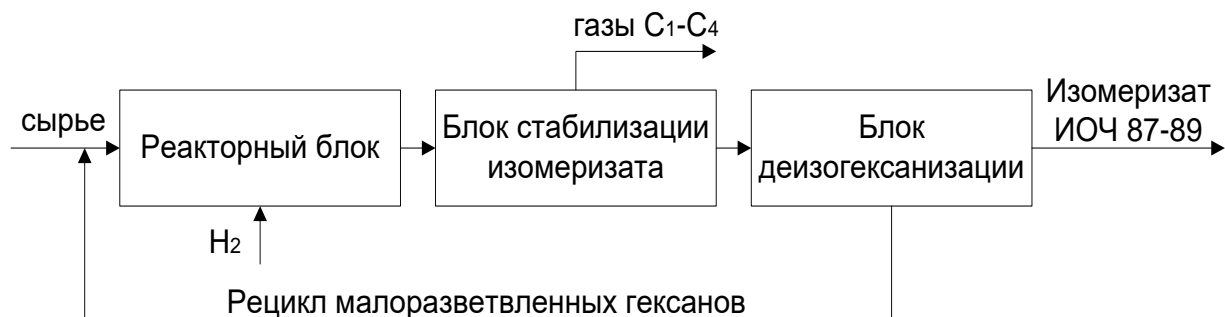


Рисунок 1.3 – Блок-схема процесса с рециклом малоразветвленных гексанов

Для увеличения степени изомеризации пентана и снятия нагрузки с реакторного блока схему с колонной деизогексанизации дооборудуют колонной деизопентанизации. На рисунке 1.4 представлен данный вариант схемы изомеризации.

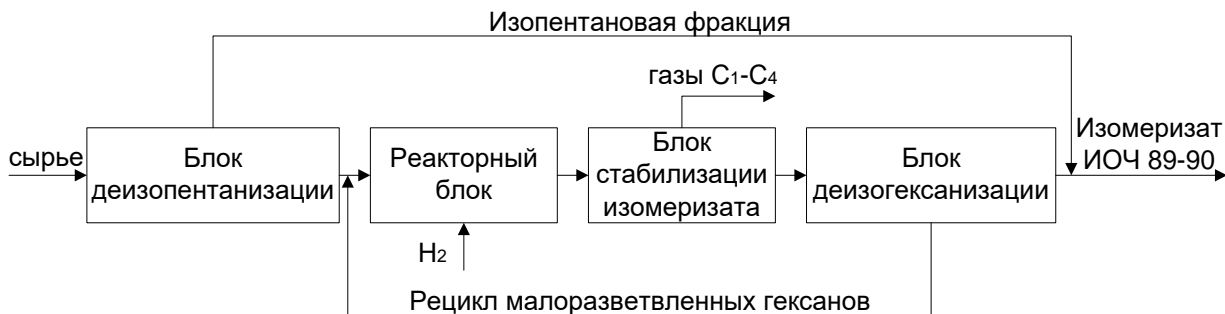


Рисунок 1.4 – Блок-схема процесса с колонной деизогексанизации и колонной деизопентанизации

Не смотря на высокие капитальные и эксплуатационные затраты, установка изомеризации с рециклом н-пентана и низкоотктановых гексанов реализует максимальную степень конверсии парафинов нормального строения. При этом изомеризат соответствует экологическому классу моторных топлив Евро-5. На рисунке 1.5 показана схема установки изомеризации с рециклом н-пентана и малоразветвленных гексанов.

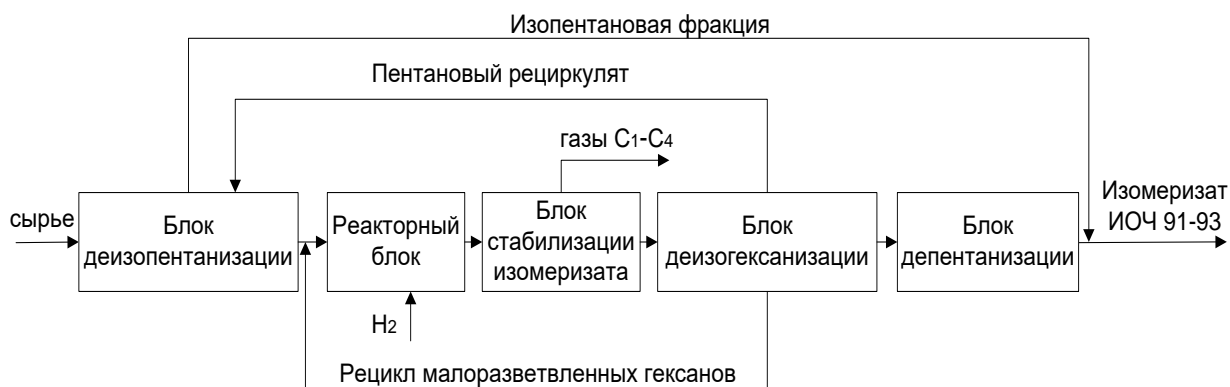


Рисунок 1.5 – Блок-схема процесса с рециклом н-пентана и малоразветвленных гексанов

Для увеличения октанового числа изомеризата необходимо конвертировать все малоразветвленные парафины, это может быть достигнуто включением в технологическую схему процесса адсорбции на молекулярных ситах. Поры в молекулярных ситах достаточно велики, чтобы пропускать разветвленные алканы. После десорбции н-парафины возвращаются к исходному сырью, процессы десорбции и адсорбции цикличны.

На рынке технология с молекулярными ситами представлена компанией Axens, которая запатентовала две разновидности технологических схем: Ipsorb и Hexorb [7, 8].

Процесс Ipsorb включает в себя колонну деизопентанизации и рециркуляции углеводородов C_5-C_6 нормального строения на молекулярных ситах. На рисунке 1.6 представлена блок-схема процесса Ipsorb, в данной технологии в качестве десорбента используется изопентан. В первую очередь

выделяют изопентановую фракцию для снятия нагрузки с реактора, затем отделяют $n\text{-C}_5$ и $n\text{-C}_6$ и отправляют на рецикл.

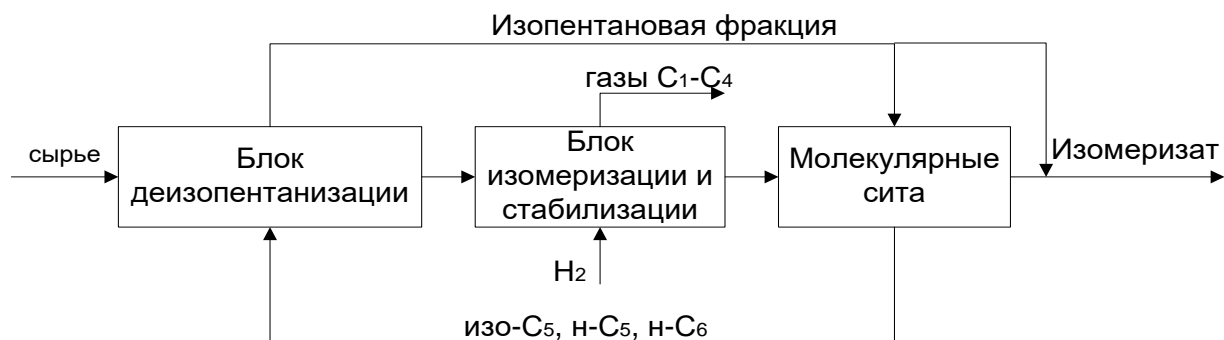


Рисунок 1.6 – Блок- схема процесса Ipsorb

Для получения изомеризата с октановым числом свыше 90 пунктов, необходимо полностью превратить все метилпентаны в диметилбутаны, для этого устанавливают колонну деизогексанизации после блока с молекулярными ситами. На рисунке 1.7 изображена блок-схема процесса Nexorb, реализующего данную технологию.

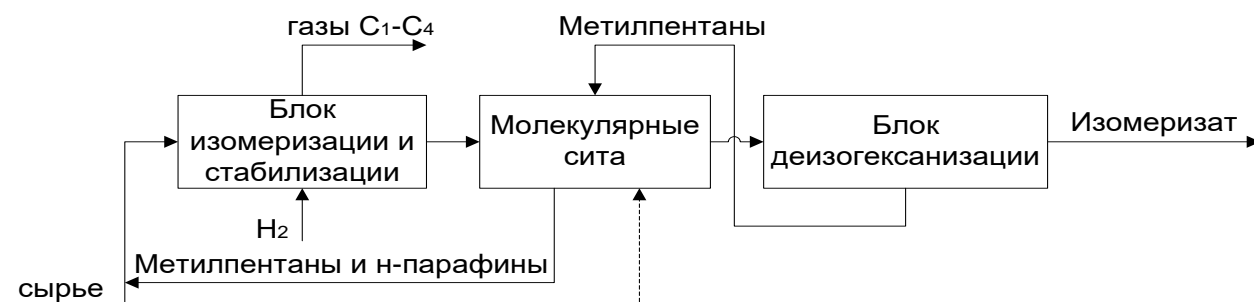


Рисунок 1.7 – Блок-схема процесса Nexorb

Наличие установки каталитической изомеризации характерно только для крупных нефтеперерабатывающих предприятий. В первую очередь, для производств, имеющих в сырьевом парке пентан-гексановую фракцию с температурой кипения $n.к.-62^{\circ}\text{C}$, необходимо учитывать следующие факторы. Процесс изомеризации требует постоянного потока водорода, помимо этого, большинство катализаторов процесса изомеризации

чувствительны к содержанию серы в сырьевом потоке, поэтому необходимо наличие установки гидроочистки сырья [6].

1.2 Изомеризация C₅-C₆ в присутствии различных катализаторов

Проведение реакции конверсии алканов при низкой температуре приводит к образованию компонентов с наибольшим октановым числом. Активность катализатора и низкая температура проведения процесса изомеризации являются важными факторами для достижения экономической эффективности производства [8-10].

Катализаторы изомеризации предназначены для протонирования вторичного атома углерода, при этом катализаторы обладают высокой кислотностью. В дополнение к сильной кислотности катализаторы изомеризации должны быть способны к гидрогенолизу.

Катализаторы на основе хлорированного оксида алюминия для процесса изомеризации парафинов обладают самой высокой активностью и доступностью, они увеличивают октановое число до 85 пунктов по исследовательскому методу в установке типа «за проход». Коммерческими примерами катализаторов данного типа являются UOP-I-80 и I-8 [11].

Хлорированные катализаторы на основе оксида алюминия являются самыми коммерчески распространенными из-за высокой селективности и низкой температуры проведения процесса конверсии легких углеводородов (120-180°C). Данный катализатор является не регенерируемым, поэтому необходимо производить перезагрузку катализатора. Так же для поддержания высокой активности катализатора необходимо осуществлять введение в сырье хлорсодержащих соединений, данная особенность вызывает необходимость щелочной промывки от органического хлора в специальных скрубберах. Главным недостатком катализаторов данной группы является высокая чувствительность к действию каталитических ядов[12].

Цеолитные катализаторы процесса изомеризации, такие как UOP HS-10 или I-7, работают при более высоких температурах, чем хлорированные оксиды алюминия. При превышении оптимальной температуры (250-300 °С) происходит уменьшение селективности катализатора и снижение октанового числа изомеризата, вследствие увеличения побочных реакций образования низкомолекулярных алканов. Главным преимуществом катализаторов данной группы является устойчивость к отравлению каталитическими ядами. Установка изомеризации на цеолитных катализаторах не требует предварительной гидроочистки сырья, но для поддержания максимальной активности катализаторов рекомендуется её применение [9,10,13].

Сульфатированные металлооксидные катализаторы, которые позиционируются как твердые суперкислоты, проявляют высокую активность при изомеризации углеводородов пентан - гексанового ряда. Эти катализаторы составляют основу нового поколения катализаторов изомеризации. В качестве оксидов чаще всего используют оксид олова (SnO_2), оксид циркония (ZrO_2), оксид титана (TiO_2) или оксид железа (Fe_2O_3). Данные оксиды сульфатируются в результате взаимодействия с серной кислотой или сульфатом аммония [11].

Типичным катализатором на основе сульфатированного оксида металла является UOP LPI-100, он имеет более высокую активность по сравнению с традиционными цеолитными катализаторами и это преимущество эквивалентно понижению температуры примерно на 80°С в реакторе изомеризации. Более низкая температура реакции позволяет получать продукт с октановым числом 82 пункта по исследовательскому методу.

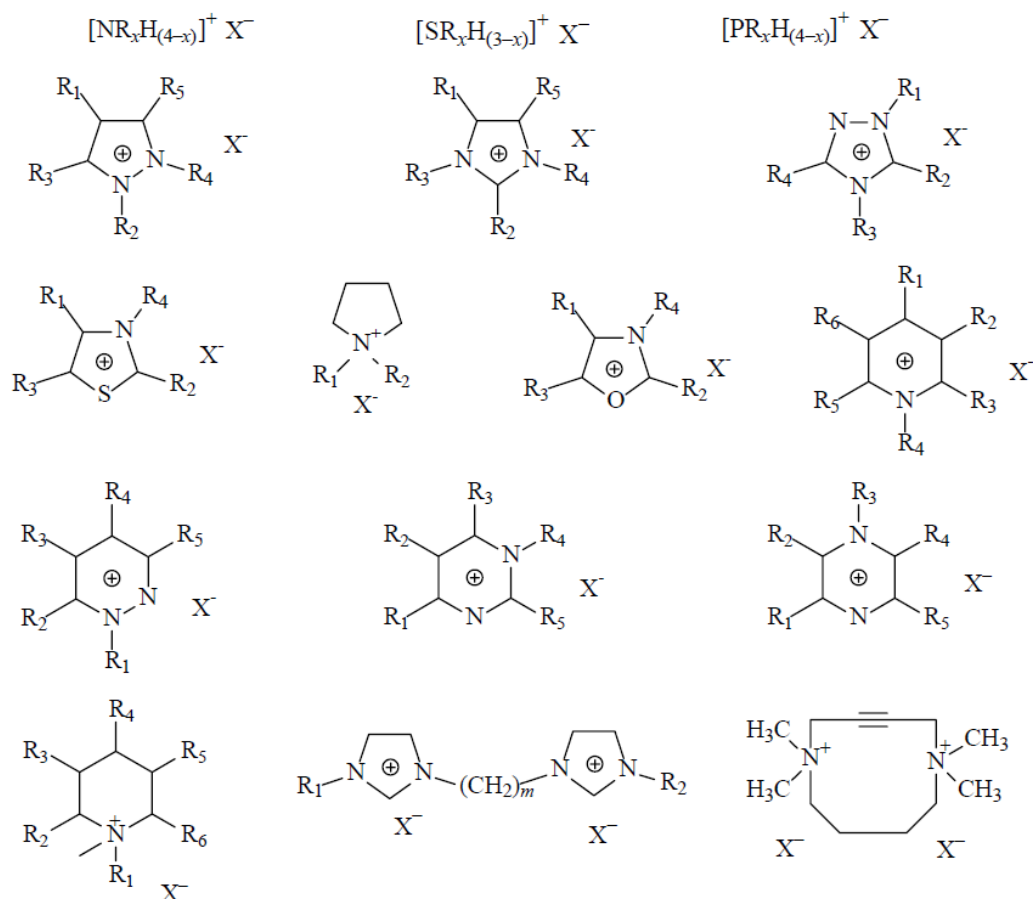
Катализаторы на основе оксидов металлов способны к регенерации, также они устойчивы к действию каталитических ядов [14-16].

Ионные жидкости широко исследуются как новые реакционные среды для проведения каталитических процессов. Изомеризация нормальных парафинов может также катализироваться ионными жидкостями. Каталитическая изомеризация алканов с числом атомов углевода $\text{C}_5\text{-C}_8$ может

проводиться с использованием жидкофазных катализаторов, которые включают в состав азотсодержащие гетероциклические или алифатические органические катионы или ионы, получаемые из галогенидов [17-19].

Ионные жидкости, применяемые в качестве катализатора, имеют следующие преимущества: отсутствие летучести, высокая термостойкость и широкий температурный диапазон применения. По сравнению с промышленными бифункциональными катализаторами, устойчивы к реакциям коксообразования, имеют низкие эксплуатационные расходы и не нуждаются в использовании водородсодержащего газа.

Далее представлены некоторые наиболее известные ионные жидкости [17,18]:



$R_i = \text{H}$, алкил, арил, гетарил, аллил, и др., в том числе функциональные группы, $x = 1-4$, $m = 2,3$; $X^- = [\text{BF}_4]^-$, $[\text{PF}_6]^-$, $[\text{SbF}_6]^-$, $[\text{NO}_3]^-$, $[\text{NO}_2]^-$, $[\text{SO}_4]^-$, $[\text{AlkSO}_3]^-$, $[\text{ClO}_4]^-$, $[\text{CF}_3\text{SO}_3]^-$, $[\text{CH}_3\text{COO}]^-$, $[\text{CuCl}_2]^-$, $[\text{Cu}_2\text{Cl}_3]^-$, $[\text{Cu}_3\text{Cl}_4]^-$, $[\text{AlCl}_4]^-$, $[\text{AlBr}_4]^-$, $[\text{AlI}_4]^-$, $[\text{AlCl}_3\text{Et}]^-$, $[\text{Al}_2\text{Cl}_7]^-$, $[\text{Al}_3\text{Cl}_{10}]^-$, $(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2\text{N}^-$, $[\text{N}(\text{CN})_2]^-$, $[\text{Me}(\text{CO})_n]^-$ и др.

Изомеризация протекает по кислотному механизму, поэтому в качестве жидкофазного катализатора используется безводный $AlCl_3$ и гидрохлориды аминов.

Рассмотрим процесс изомеризации с использованием $2AlCl_3/Et_3NHCl$ в качестве ионной жидкости. Реакция конверсии легких углеводородов с использованием жидкофазных катализаторов проводилась при постоянных условиях: температуре $=50^\circ C$, соотношении ионной жидкости и н-гексана 1:1, давлении 0,5 МПа и постоянной скорости перемешивания равной 1500 об/мин. В таблице 1.2 приведены степень конверсии гексана, селективность и выход компонентов при варьировании времени контакта от 2 до 6 часов.

Таблица 1.2 – Показатели процесса изомеризации в зависимости от времени контакта [19]

Показатель	Выход, %		
	2 ч	4 ч	6 ч
изо - бутан	9,16	9,98	14,41
н - бутан	0,16	0,19	0,41
изо - пентан	14,67	16,47	19,20
н - пентан	1,53	1,94	3,08
2,2 - диметилбутан	3,30	4,20	6,09
2,3 - диметилбутан	3,17	3,43	3,47
2 - метилпентан	9,44	9,53	9,44
3 - метилпентан	4,41	4,55	4,40
н – гексан	34,43	24,89	11,62
Углеводороды C_7	9,64	11,86	13,80
Углеводороды C_8	5,20	6,68	7,26
Углеводороды C_{9+}	4,89	6,28	6,82
Конверсия н - гексана	65,57	75,11	88,38
Селективность изо - гексана	30,99	28,90	26,48
Селективность изо - парафинов	97,42	97,16	96,05
Выход жидких компонентов	90,68	89,83	85,18

При увеличении времени контакта увеличивается степень конверсии н-гексана, при этом происходит уменьшение селективности и снижается выход жидких компонентов. Это происходит из – за увеличения выхода н-бутана и

изо-бутана. Данные закономерности говорят о том, что увеличение времени контакта не является оптимальным методом для повышения эффективности изомеризации.

Для ускорения процесса изомеризации с использованием жидкофазных катализаторов используют изо-пентан при объемном отношении к н-гексану 30/70.

Реакция конверсии легких углеводородов с использованием жидкофазных катализаторов проводилась при постоянных условиях: температуре =50°C, соотношении ионной жидкости и н-гексана 1:1, давлении 0,5 МПа и постоянной скорости перемешивания равной 1500 об/мин. В таблице 1.3 приведены степень конверсии гексана, селективность и выход компонентов при варьировании времени контакта 15-60 минут.

Таблица 1.3 – Показатели процесса изомеризации в зависимости от времени контакта в присутствии изо – пентана [19]

Показатель	Выход, %			
	15 мни	30 мин	45 мин	60 мин
изо - бутан	3,88	5,91	19,23	29,48
н - бутан	0,11	0,20	0,55	0,86
изо - пентан	17,26	15,23	19,58	18,85
н - пентан	0,57	0,90	3,76	3,06
2,2 - диметилбутан	0,42	0,89	7,60	3,82
2,3 - диметилбутан	1,29	2,83	3,75	2,72
2 - метилпентан	4,23	8,26	10,35	8,41
3 - метилпентан	1,84	3,63	4,80	4,07
н – гексан	67,63	60,86	15,46	18,37
Углеводороды C ₇	0,76	1,03	12,44	8,92
Углеводороды C ₈	0,61	0,15	1,78	1,17
Углеводороды C ₉₊	1,35	0,04	0,56	0
Конверсия н - гексана	32,37	39,14	84,54	81,63
Селективность изо - гексана	24,03	39,88	31,35	23,30
Селективность изо - парафинов	97,74	97,01	94,74	94,87
Выход жидких компонентов	95,96	93,82	80,08	69,39

При увеличении времени контакта увеличивается выход газообразных алканов, так же возрастает степень конверсии гексана. При использовании изо-пентана в качестве компонента, ускоряющего скорость протекания реакций, максимальная степень конверсии составляет 84,54 % при времени контакта 45 минут. Выход жидких компонентов при этом времени составляет 80,08%. Селективность изомеризации без участия изо-пентана при времени контакта 6 часов составляет 96,05%, а выход жидких компонентов 85,18%. Это говорит о том, что конверсия н-гексана в присутствии изо-пентана протекает более эффективно.

Ионная жидкость является хорошим катализатором для процесса изомеризации при использовании дополнительных компонентов, ускоряющих скорость конверсии алканов. Данные вещества подбираются в зависимости от состава исходного сырья, с целью получения максимального выхода изомеризата с высокой степенью конверсии алканов нормального строения.

1.3 Технология процесса изомеризации C₇-C₈

Технология изомеризации нормальных парафинов с числом атомов углерода C₅-C₆, имеющих температуру кипения н.к.-62°C, получила широкое применение на крупных нефтеперерабатывающих предприятиях. При этом гептановая фракция, имеющая температуру кипения 70-105°C, отправляется на процесс компаундирования, без изменения структуры молекул. Процесс изомеризации углеводородов C₇ позволяет улучшить эксплуатационные характеристики фракции: повысить октановое число и уменьшить содержание углеводородов ароматического строения [20,21].

Технология ИЗОМАЛК-4, разработанная ООО «НПП Нефтехим» не имеет аналогичных проектов в мире. Данная технология позволяет повысить эффективность производства товарных бензинов, соответствующих экологическому классу Евро-5 [22-23].

Выделение гептановой фракции из прямогонных бензинов и их конверсия на установке каталитической изомеризации позволяет получить изомеризат с октановым числом 83-85 пунктов по исследовательскому методу.

Технология ИЗОМАЛК-4 имеет схожую технологическую схему с технологией ИЗОМАЛК-2. Колонна деизогептанализации позволяет повысить степень конверсии неразветвленных углеводородов гептанового ряда (рисунок 1.8).

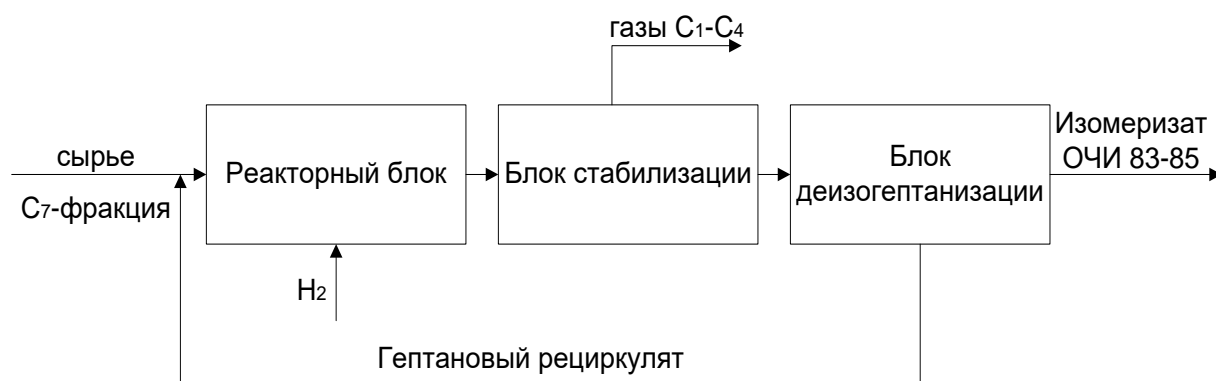


Рисунок 1.8 – Блок-схема процесса изомеризации С₇

В реакторном блоке происходит конверсия углеводородов на уникальном катализаторе СИ-4, обеспечивающем проведение процесса при температуре процесса 160-200°С. СИ-4 устойчив к воздействию каталитических ядов и имеет высокую активность, при этом использование данного катализатора не требует применения системы подачи дополнительных реагентов.

Внедрение процесса ИЗОМАЛК-4 на производство не требует специального лицензированного оборудования и дополнительных этапов подготовки сырья, подготовка осуществляется на установке гидроочистки стандартного типа. Осуществление процесса каталитической изомеризации возможно на модернизированных установках риформинга, существующих на предприятии [24].

Внедрение процесса изомеризации C_7-C_8 позволяет снизить долю бензола и других ароматических соединений в товарных бензинах, повысить долю высокооктановых компонентов неароматического строения и увеличить октановое число общего пула бензиновых фракций.

1.4 Изомеризация C_7-C_8 в присутствии различных катализаторов

Катализаторы, применяемые для изомеризации парафинов нормального строения с числом атомов углевода C_5-C_6 , на основе сульфатированного диоксида циркония имеют высокую активность и кислотность, но не могут быть применены в условиях изомеризации алканов гептан-октанового ряда. При использовании сульфатцирконевого катализатора в изомеризации C_{7+} наблюдается увеличение вклада побочных реакций крекинга, снижающих выход изомеризата [25].

В литературе опубликованы результаты исследований изомеризации *n*-гептана на различных каталитических системах: на основе цеолита, анион-модифицированного диоксида циркония, гетерополикислот и т.д.

Цеолитсодержащие катализаторы работают только при повышенных температурах, что негативно сказывается на выходе изомеризата за счет увеличения реакций образования низкомолекулярных алканов, вследствие реакций крекинга. Конверсия *n*-гептана в присутствии цеолитов Pt/HY и Pt/HZSM-5 составляет 70,0% при температуре процесса 400 °С, при этом селективность составляет порядка 50,0%. Проведение процесса при температуре 225 °С на катализаторе Pt/HY конверсия *n*-гептана возросла до 80,0 %, а селективность по изомерам 59,0 % [26-28].

Цеолитсодержащие катализаторы на основе морденита являются перспективной технологией для изомеризации *n*- C_7 . Морденит представляет собой кристаллический алюмосиликат состава $Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 10SiO_2 \cdot 6H_2O$.

Катализаторы на основе цеолита морденита в аммонийной форме с нанесенной платиной с силикатным модулем (Pt/MOR/ Al_2O_3) испытывали в

интервале температур 240- 340 °С в реакции изомеризации н-гептана в смеси с бензолом и толуолом. На рисунке 1.9 представлена температурная зависимость конверсии н-С₇ для катализатора Pt/MOR/Al₂O₃.

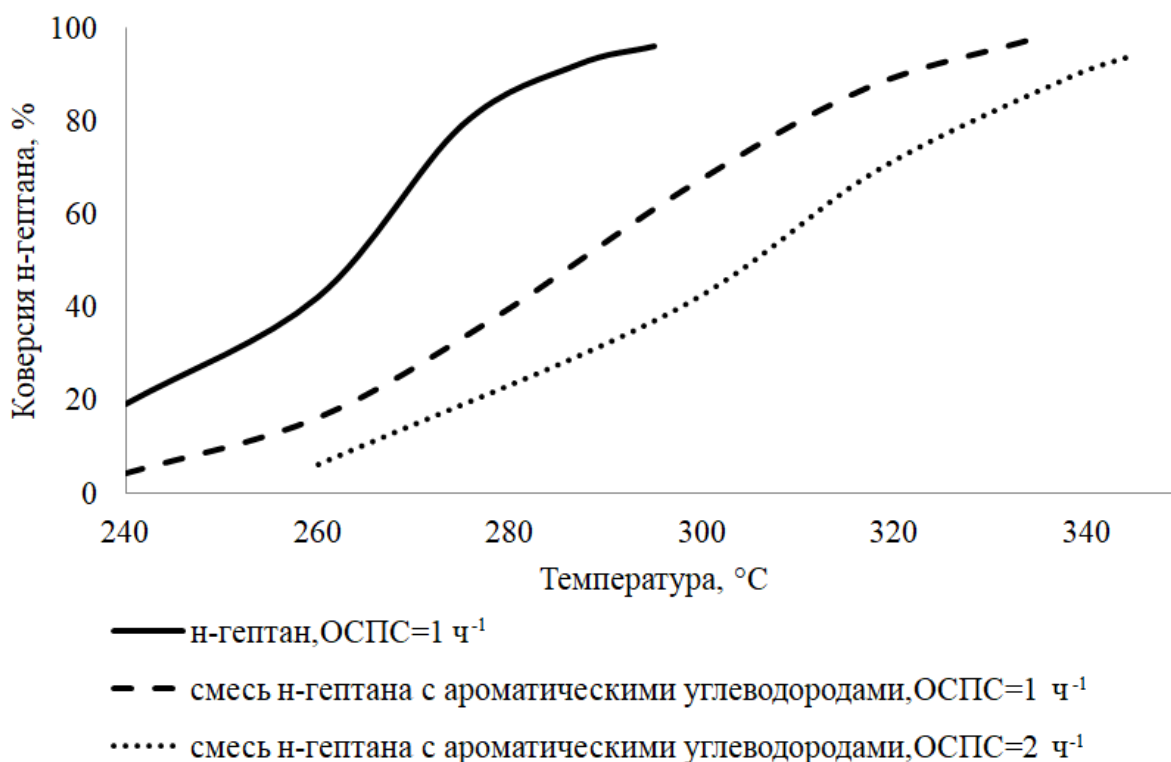


Рисунок 1.9 - Температурная зависимость конверсии н-С₇ для катализатора Pt/MOR/Al₂O₃ [29]

В смеси гептана нормального строения с ароматическими соединениями наблюдается сдвиг в сторону высоких температур на 20-30 °С, данное явление свидетельствует о том, что бензол и толуол препятствуют конверсии н-гептана. Ароматические соединения абсорбируются на активных центрах морденитовых катализаторов в аммонийной форме.

Катализаторы в H-MOR форме обладают меньшей коррозионной активностью. Морденит является цеолитом, поэтому ионы натрия легко обмениваются на другие катионы. H-форму морденита можно получить ионным обменом на катион аммония (NH₄⁺) с последующим температурным прокаливанием, при температурном воздействии происходит расширение пор

морденита до 8–9 Å. Преимуществом катализаторов данного типа является распространенность [30].

Катализаторы Pt/H-MOR тормозят коррозию и загрязнение окружающей среды, при этом они менее чувствительны к примесям исходного сырья, таким как вода и соединения серы. Однако, они обладают малой селективностью при изомеризации углеводородов C_{7+} [31-34].

Платиновые катализаторы, нанесенные на USY цеолиты, обладают более высокой селективностью, чем монозамещенные Pt/H-MOR, при изомеризации углеводородов нормального строения C_7 и C_8 . Но высокая стоимость Pt-содержащих катализаторов вызывает необходимость поиска альтернативных катализаторов, которые обладают схожими свойствами. Примером таких работ являются катализаторы с системами Pt-Ni, биметаллические катализаторы обладают большей каталитической активностью по сравнению с монометаллическими катализаторами на основе платины. На рисунке 1.10 показана активность изомеризации н-гептана в течение 3 часов Pt-Ni катализаторов, нанесенных на цеолит HMOR с различными соотношениями Pt / Ni и общим содержанием металла 180 ммоль/г катализатора.

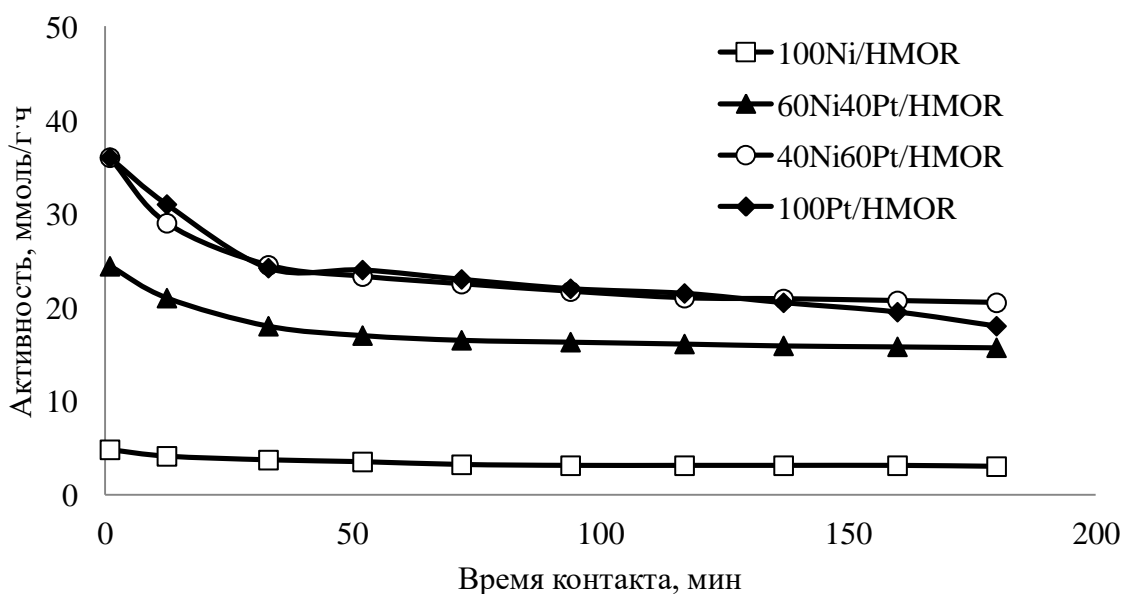


Рисунок 1.10 – Зависимость активности катализатора с различным содержанием Pt / Ni от времени контакта [35]

Исходя из данных, приведенных на рисунке 2, целесообразно использование катализаторов Ni-Pt/H-MOR с соотношением 40/60, показатели активности остаются на том же уровне, что и при применении Pt/H-MOR, при этом происходит уменьшение себестоимости катализатора и уменьшение коррозионной активности, вследствие уменьшения концентрации платины.

Второй металл вводят в систему с целью увеличения селективности и стабильности гидроизомеризации нормальных парафинов. Так же, в качестве второго металла возможно введение хрома и палладия [36].

Каталитические системы с анион-модифицированным диоксидом циркония проявляют активность в диапазоне температур 180-220 °С, что с точки зрения термодинамики благоприятно влияет на выход высокооктановых ди- и триметилзамещенных изомеров гептана (ДТМЗ) [37-39].

В качестве аниона-модификатора используются SO_4^{2-} и WO_4^{2-} . В таблице 1.4 приведена сравнительная характеристика Pt/ WO_4^{2-} /ZrO₂ и Pt/ SO_4^{2-} /ZrO₂ при температуре 170 °С и объемной скорости подачи исходного сырья 1 ч⁻¹.

Таблица 1.4 – Показатели изомеризации н-гептана на катализаторах Pt/ WO_4^{2-} /ZrO₂ и Pt/ SO_4^{2-} /ZrO₂ [40]

Образец	Pt/ WO_4^{2-} /ZrO ₂				Pt/ SO_4^{2-} /ZrO ₂
Концентрация анионов, мол %	5,9	12,9	17,6	21,9	6,5
Конверсия н-С ₇ , мас %	3,6	60,9	71,7	44,3	68,8
Селективность по изо-С ₇ , мас. %	86,3	82,2	87,6	87,7	20,3
Выход изомеров гептана, мас. %	3,1	50,0	62,8	38,8	14,0
Выход алканов С ₁ -С ₆ , мас. %	0,5	10,8	8,9	5,5	54,8
Соотношение С ₃ /С ₄ (мольное)	0,91	0,98	1,0	0,98	0,97

Сульфат - анионы обладают высокой степень конверсии при малой концентрации анионов (6,5 мол. %). При этом селективность обладает минимальными значениями, по сравнению со всем образцами.

Сульфатированные катализаторы подходят для изомеризации пентан - гексановой фракции, при использовании данного катализатора в процессе изомеризации н-гептана увеличивается скорость синтеза низкомолекулярных алканов, образование которых протекает в результате кислотного крекинга с выделением пропана и изобутана в соотношении, близком к 1.

При минимальном содержании анионов WO_4^{2-} (5,9 мол. %) выход изомеров гептана составляет всего 3,1 мас. %, при увеличении концентрации анионов до определенного значения увеличивается выход изомеров гептана, при этом увеличивается скорость побочных реакций образования углеводородов C_3 и C_4 , образующихся в результате крекинга молекулы C_7 по центральной связи по карбений-ионному механизму. Оптимальная концентрация WO_4^{2-} составляет 17,6 мол. % при этом эксперимент характеризуется максимальной конверсией н-гептана (71,7 мас. %) и селективностью (87,6 мас. %), при этом выход алканов C_1-C_6 составляет 8,9%.

Поэтому для конверсии углеводородов C_{7+} более выгодно применять катализаторы модифицированные вольфрамат – анионами. На рисунке 1.11 приведена зависимость изменения выхода моно- и диметилзамещенных изомеров гептана в зависимости от концентрации вольфрамат-аниона.

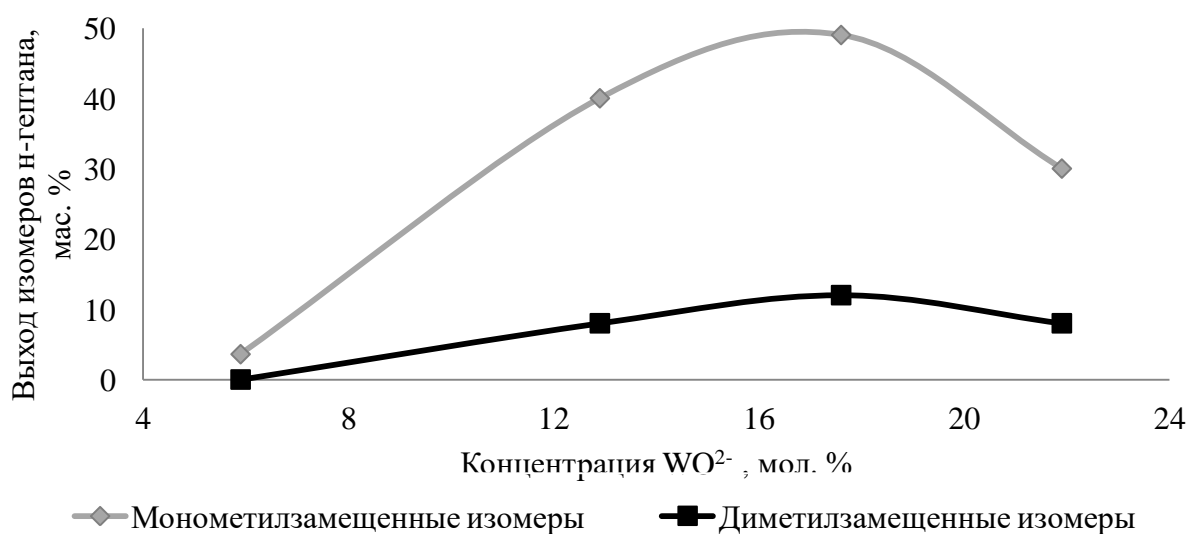


Рисунок 1.11 - Изменение выхода моно- и диметилзамещенных изомеров гептана в зависимости от концентрации WO_4^{2-} [41]

В составе продуктов изомеризации $n\text{-C}_7$ присутствуют в основном моно- и диметилзамещенные изомеры гептана. При увеличении концентрации вольфрамат-анионов возрастает доля монометилзамещенных изомеров.

В таблице 1.5 приведена сравнительная характеристика степени конверсии, селективности, выхода и глубины протекания процесса изомеризации гептана двух различных типов катализаторов: цеолитного катализатора (Pt/MOR/Al₂O₃) и анион – модифицированного диоксида циркония (Pt/WO₃/ZrO₂).

Таблица 1.5 - Показатели реакции изомеризации $n\text{-C}_7$ на катализаторах Pt/MOR/Al₂O₃ и Pt/WO₃/ZrO₂ [41]

Тип катализатора	Конверсия $n\text{-гептана}$, %	Селективность изомеризации, %	Выход, масс. %		Глубина изомеризации, %
			$\Sigma i\text{-C}_7$	ДТМЗ	
Pt/MOR/Al ₂ O ₃	80,6	74,6	60,1	20,9	26,3
Pt/WO ₃ /ZrO ₂	84,0	71,9	60,4	22,8	29,8

Примечание. Условия проведения реакций: $t = 280\text{ }^\circ\text{C}$ (Pt/MOR/Al₂O₃) и $t = 170\text{ }^\circ\text{C}$ (Pt/WO₃/ZrO₂), $P = 1,5\text{ МПа}$, водород : углерод = 3(мол.), объемная скорость подачи сырья = 1 ч^{-1}

При сравнении двух типов катализаторов Pt/MOR/Al₂O₃ и Pt/WO₃/ZrO₂ видно, что у катализаторов на основе диоксида циркония степень конверсии $n\text{-гептана}$ составляет 84,0 %, что превышает степень конверсии $n\text{-гептана}$ на цеолитном катализаторе. При этом цеолитные катализаторы обладают большей селективностью (74,6 %). Максимальная глубина изомеризации (29,8 %) была получена на Pt/WO₃/ZrO₂.

Исходя из данного сравнения, можно сделать вывод, что для процесса изомеризации $\text{C}_7\text{-C}_8$ более выгодно применять катализатор на основе диоксида циркония, модифицированного вольфрамат – анионом.

1.5 Математическое моделирование процесса изомеризации

На современном рынке математические модели изомеризации созданы для расчета конверсии пентан – гексановой фракции, при этом отсутствуют модели для описания превращений углеводородов C_7 - C_8 , учитывающие не только изменение технологического режима, но и колебания группового состава сырья, поступающего в реактор изомеризации.

Существует два основных подхода к моделированию процесса изомеризации C_5 - C_6 : традиционный метод и методология с использованием поверхностей отклика [42,43].

Используя данные с промышленной установки (состав сырья и продукта процесса) составляются основные реакции, протекающие в ходе процесса изомеризации, и затем определяются термодинамические характеристики, такие как энергия Гиббса и изменение энтальпии реакции. В данных разработках кинетическая модель записывается согласно закону действующих масс, а математическая модель представляет систему нелинейных дифференциальных уравнений.

Для решения обратной кинетической задачи используется метод параболического спуска, а для решения системы нелинейных дифференциальных уравнений применяется модифицированный метод Кутты – Мерсона пятого порядка точности [42].

Математические модели, в основе которых лежит данный метод, являются традиционными. Традиционные математические модели процесса изомеризации учитывают изменения температурного режима и давления в реакторе. При этом применение модели возможно только для потоков с небольшими колебаниями группового состава сырья, то есть модель разрабатывается для конкретного предприятия [43].

При использовании поверхностей отклика (программное обеспечение Design Expert) использовались данные за 4 - летний период с установки

Репех. Эти данные были использованы для прогнозирования протекания процесса конверсии C_5 - C_6 с учетом следующих параметров:

- состава сырья (содержание нафтенов и бензола);
- изменение температуры процесса;
- давления в реакторе;
- соотношение водорода и сырья;
- объемную скорость подачи исходных веществ;
- активность катализатора.

Данная математическая модель позволяет подобрать условия проведения процесса с учетом содержания нафтенов и ароматических углеводородов в составе исходного сырья.

Сравнивая две методологии, можно сделать следующие выводы. Применение метода наименьших квадратов позволяет построить модель, имея данные с промышленной установки за короткий период, при этом модель имеет узкое применение, для конкретного производства.

Модель, в основе которой лежит поверхность отклика, является более функциональной, при этом для ее построения необходим большой объем данных. Этот метод может подойти для описания конверсии углеводородов C_5 - C_6 , так как данные установки имеют широкое многолетнее применение, но не подходит для изомеризации C_7 - C_8 .

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 изомеризации углеводородов C₇-C₈.

Целевой рынок: промышленные предприятия нефтеперерабатывающей отрасли.

По результатам проведения сегментирования рынка были определены основные сегменты, а также были выбраны наиболее благоприятные сегменты (Таблица 4.1)

Таблица 4.1- Сегментирование рынка

		Вид услуги		
		Продажа программного продукта	Оказание услуг по исследованию и оптимизации	Продажа тренировочной версии
Размер компании	Крупные	■		■
	Средние	■	▨	
	Мелкие		▨	
	Образовательные учреждения	■		■
	Проектные организации	■	▨	

▨ Нуртотех Ltd, Канада ■ AspenTech, США ■ ChemFort, Россия

На таблице показано, какие ниши на рынке услуг по применению математической модели не заняты конкурентами и где уровень конкуренции низок:

– для мелких НПЗ необходим доступный по цене и эффективный продукт;

- данные фирмы предлагают общее программное обеспечение для химических процессов;
- компании занимаются в основном только продажей своего программного продукта.

4.2 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT- анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта. Он проводится в несколько этапов [59].

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 С2. Потенциал для повышения экологичности производства С3. Отсутствие аналогичных математических моделей по процессу С4. Потенциальное улучшение качества товарного бензина С5. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки	Сл1. Ограниченность экспериментальных данных с промышленной установки. Сл2. Отсутствие исчерпывающих данных для проверки адекватности модели Сл3. Стандартные методы продвижения на рынке Сл4. 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</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</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				
		C1	C2	C3	C4	C5
Возможности проекта	B1	+	+	-	-	-
	B2	-	+	+	+	+
	B3	+	0	+	+	+
	B4	+	+	-	0	+

В рамках третьего этапа должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа, которая приводится в бакалаврской 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 установкой.</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>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 установкой</p> <p>3. Разработка научного исследования</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	С и У: 1. Продвижение программы с целью создания спроса 2. Создание конкурентных преимуществ готового продукта 3. Поиск запасных источников финансирования, спонсоров в лице нефтеперерабатывающих предприятий, для которых может оказаться полезной данная разработка	Сл и У: 1. Необходима дальнейшая разработка модели и её уточнение 2. Дальнейший поиск теоретических законов и зависимостей, позволяющих повысить обоснованность модели 3. Заключение договорённостей с предприятиями о поставке данных для проверки модели
--	--	--

4.3 Структура работ в рамках научного исследования

В данном разделе составлен перечень этапов проведения работ в рамках проведения научного исследования, проведено распределение исполнителей по видам работ. Примерный порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в таблице 4.5.

Таблица 4.5 – перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	Бакалавр
	3	Проведение патентных исследований	Бакалавр
	4	Выбор направления исследований	Руководитель, Бакалавр
	5	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Бакалавр
Теоретические и экспериментальные исследования	6	Составление кинетической модели	Бакалавр
	7	Составление математической модели	Руководитель, Бакалавр
	8	Проведение теоретических расчетов	Бакалавр
Проведение ВКР			
Разработка технической документации и проектирование	9	Оценка эффективности производства и применения разработки	Бакалавр, консультант ЭЧ
	10	Разработка социальной ответственности по теме	Бакалавр, консультант СО
Оформление ВКР	11	Составление пояснительной записки	Бакалавр

4.4 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ожі}$ используется следующая формула[60]:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{mini} + 2t_{maxi}}{5}, \quad (1)$$

где $t_{ожі}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

t_{mini} – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка), чел.-дн.;

t_{maxi} – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка), чел.-дн.

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями.

$$T_{pi} = \frac{t_{ожі}}{Ч_i}, \quad (1)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ожі}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.

$Ч_i$ – численность исполнителей, чел.

4.5 Разработка графика проведения научного исследования

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни. Для этого необходимо воспользоваться следующей формулой [61]:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (3)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (4)$$

где $T_{\text{кал}}$ – количество календарных дней в году ($T_{\text{кал}}=365$);

$T_{\text{вых}}$ – количество выходных дней в году ($T_{\text{вых}}=52$);

$T_{\text{пр}}$ – количество праздничных дней в году ($T_{\text{пр}}=14$).

$$k_{\text{кал}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22$$

В таблице 4.6 приведены расчеты длительности отдельных видов работ.

Таблица 4.6- Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкость работ			Исполнители	Длительность работ в рабочих днях			
	t_{min} , чел-дни	t_{max} , чел-дни	$t_{\text{ожг}}$, чел-дни		T_{pi}		T_{ki}	
					Руководитель	Бакалавр	Руководитель	Бакалавр
Составление и утверждение технического задания	3	5	3,8	Руководитель	3,8	-	5	-

Продолжение таблицы 4.6

Подбор и изучение материалов по теме	10	14	11,6	Бакалавр	-	11,6	-	14
Проведение патентных исследований	4	6	4,8	Бакалавр	-	4,8	-	6
Выбор направления исследований	3	5	3,8	Руководитель, Бакалавр	1,9	1,9	3	3
Календарное планирование работ по теме	4	6	4,8	Руководитель, Бакалавр	2,4	2,4	3	3
Составление кинетической модели	3	5	3,8	Бакалавр	-	3,8	-	5
Составление математической модели	20	30	24	Руководитель, Бакалавр	12	12	15	15
Проведение теоретических расчетов	10	14	11,6	Руководитель, Бакалавр	5,8	5,8	7	7
Оценка эффективности производства и применения разработки	10	14	11,6	Бакалавр	-	11,6	-	14
Разработка социальной ответственности по теме	10	14	11,6	Бакалавр	-	11,6	-	14
Составление пояснительной записки	7	10	8,2	Бакалавр	-	8,2	-	10
Итого							31	91

На основе таблицы 4.6 строится календарный план-график. График строится для максимального по длительности исполнения на основании таблицы 4.7 работ в рамках научно-исследовательского проекта с разбивкой по месяцам и декадам за период времени дипломирования. При этом работы на графике следует выделить различной штриховкой в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу.

Таблица 4.7 - Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№	Вид работ	Исполнители	T_{ki} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ														
				янв	фев			мар			апр			май			июн	
				1	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
1	Составление ТЗ	НР	5	■														
2	Изучение литературы	Б	14		■	■												
3	Изучение патентов	Б	6			■												
4	Выбор направления	НР, Б	6				■											
5	Календарное планирование	НР, Б	6				■											
6	Создание кинет. модели	Б	5					■										
7	Создание мат. модели	НР, Б	30						■	■	■							
8	Проведение теор. расчетов	НР, Б	7										■	■				
9	Оценка эффективности	Б	14											■	■			
10	Разработка соц. ответственности	Б	14												■	■		
11	Составление ПЗ	Б	10													■		

■ Научный руководитель (НР) ■ Бакалавр (Б)

4.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением.

4.6.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле [60]:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m \Pi_i \cdot N_{\text{расч}i}, \quad (5)$$

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

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

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

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Материальные затраты, необходимые для данной разработки, занесены в таблицу 4.8.

Таблица 4.8- Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество			Цена за ед., руб.			Затраты на материалы, (Z_m), руб.		
		Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп. 1	Исп.2	Исп.3
Чернила для принтера	мл	100	150	50	4	4	4	480	720	240
Бумага	шт	50	55	60	0,85	0,85	0,85	51	56,2	61,2
Ручка	шт	3	2	4	10	10	10	36	24	48
Итого								567	800,2	349,2

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

Все расчеты по приобретению спецоборудования и оборудования, имеющегося в организации, но используемого для каждого исполнения конкретной темы, сводятся в табл. 4.9.

Таблица 4.9 - Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования

№ п/п	Наименование оборудования			Кол-во единиц оборудования			Цена единицы, тыс. руб.			Общая стоимость, тыс. руб.		
	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1.	Компьютер			1	1	1	30	30	30	10,8	10,8	10,8
Итого:										10,8	10,8	10,8

4.6.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Численность исполнителей принимается как $N_{рук}=1$, $N_{исп}=1$, общее число исполнителей – 2 человек. Баланс рабочего времени для каждого исполнителя представлен в таблице 4.10.

Таблица 4.10 -Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Бакалавр
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	44	48
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	56	28
- невыходы по болезни	-	-
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	275

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НИТ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (6)$$

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

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

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

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

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p, \quad (7)$$

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

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (8)$$

где $Z_{\text{м}}$ – 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;

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

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (9)$$

где $Z_{\text{тс}}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $Z_{\text{тс}}$);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5

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

Расчет основной заработной платы сводиться в таблицу 4.11.

Таблица 4.11 - Расчёт основной заработной платы

Исполнители	Разряд	$k_{\text{т}}$	$Z_{\text{тс}}$, руб.	$k_{\text{р}}$	$Z_{\text{м}}$, руб.	$Z_{\text{дн}}$, руб.	$T_{\text{р}}$, раб. дн.	$Z_{\text{осн}}$, руб.
Руководитель	Ассистент	-	17000,00	1,3	22100,00	915,7	31	28386,7
Инженер	-	-	26000,00	1,3	33800,00	1376,6	91	125270,6
Итого $Z_{\text{осн}}$								153657,3

4.6.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы учитывают величину предусмотренных Трудовым кодексом РФ доплат за отклонение от нормальных условий труда, а также выплат, связанных с обеспечением гарантий и компенсаций (при исполнении государственных и

общественных обязанностей, при совмещении работы с обучением, при предоставлении ежегодного оплачиваемого отпуска и т.д.).

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} \quad (10)$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0,12 – 0,15).

$$Z_{\text{доп}} = 0,12 * 153657,3 = 18438,9 \text{ руб}$$

4.6.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Рассчитываем отчисления на социальные нужды (Таблица 4.12):

$$Q_{\text{соц.н.}} = 0,271 * Z_{\text{осн}}, \text{ руб} \quad (11)$$

Таблица 4.12 – Заработная плата одного исполнителя НТИ

Исполнители	Заработная плата, руб	Социальные отчисления,руб
Руководитель	46074,7	12486,2
Бакалавр	11531,4	-
ИТОГО	57606,1	12486,2

4.6.6 Накладные расходы

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

$$Z_{\text{накл}} = (\text{сумма статей } 1 \div 7) \cdot k_{\text{нр}}, \quad (12)$$

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

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

4.6.7 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Расчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции. Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в Таблице 4.13.

Таблица 4.13 - Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.			Примечание
	Исп.1	Исп.2	Исп.3	
Материальные затраты НИИ	567	800,2	349,2	Пункт 2.4.1
Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	10800	10800	10800	Пункт 2.4.2
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	153657,3	153657,3	153657,3	Пункт 2.4.3
Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	18438,9	18438,9	18438,9	Пункт 2.4.4
Отчисления во внебюджетные фонды	12486,2	12486,2	12486,2	Пункт 2.4.5
Затраты на научные и производственные командировки	-	-	-	-
Контрагентские расходы	-	-	-	-
Накладные расходы	31351,9	31389,22	31317,06	16 % от суммы ст. 1-7
Бюджет затрат НИИ	227301,3	227571,8	227048,7	Сумма ст. 1- 8

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

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп. } i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (13)$$

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

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

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения.

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (14)$$

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 приводится в таблице 4.14.

Таблица 4.14 - Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
1. Способствует увеличению производительности НПЗ	0,1	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	0,15	4	3	4
ИТОГО	1	4,83	4,35	4,35

$$\text{Аналог 1} = 5 \cdot 0,1 + 5 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,2 + 5 \cdot 0,25 + 4 \cdot 0,15 = 4,83$$

$$\text{Аналог 2} = 5 \cdot 0,1 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,2 + 5 \cdot 0,25 + 3 \cdot 0,15 = 4,35$$

$$\text{Аналог 3} = 4 \cdot 0,1 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,25 + 4 \cdot 0,15 = 4,35$$

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

$$I_{исп.1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{финр.исп.1}}, \quad I_{исп.2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{финр.исп.2}} \text{ и т.д.} \quad (15)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (Таблица 4.15) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта (\mathcal{E}_{cp}):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}} \quad (16)$$

Таблица 4.15 - Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,997	1	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	0,89	0,90

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

Так же, оценены финансовые показатели разработки математической модели изомеризации, учитывающие стоимость материальных затрат и затраты на оплату труда.

Разработав критерии оценки модели, оценили интегральный показатель ресурсоэффективности модели в трех различных исполнениях. В результате работы определили сравнительную эффективность вариантов исполнения разработки. Наиболее оптимальным вариантом исполнения математической модели процесса каталитической изомеризации углеводородов C₇-C₈ был выбран вариант 1.

5 Социальная ответственность

Введение жестких экологических требований, предъявляемых к моторному топливу приводит к ограничению использования риформатов в производстве автомобильных бензинов. В связи с этим, возникает необходимость создания новых и интенсификации действующих нефтехимических процессов получения высокооктановых компонентов. Одним из таких процессов является изомеризация парафинов легких бензиновых фракций в разветвленные изоалканы.

Объектом исследования является технология производства изоалканов с высоким октановым числом. Исследование проводилось на математической модели процесса каталитической изомеризации углеводородов C_7-C_8 .

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 бакалаврской работы осуществлялась на персональном компьютере (далее ПК) при работе с различными программными обеспечениями на кафедре химической технологии топлива и химической кибернетики. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, кондиционирования воздуха. Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

В данном разделе рассмотрены специальные правовые нормы трудового законодательства и их особенности, применимые к условиям математического моделирования процесса изомеризации C_7-C_8 .

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

Согласно ТК РФ, N 197 -ФЗ каждый работник имеет право на[62]:

- рабочее место, соответствующее требованиям охраны труда;
- обязательное социальное страхование от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний в соответствии с федеральным законом;
- получение достоверной информации от работодателя, соответствующих государственных органов и общественных организаций об условиях и охране труда на рабочем месте, о существующем риске повреждения здоровья, а также о мерах по защите от воздействия вредных и (или) опасных производственных факторов;
- отказ от выполнения работ в случае возникновения опасности для его жизни и здоровья вследствие нарушения требований охраны труда, за исключением случаев, предусмотренных федеральными законами, до устранения такой опасности;
- обеспечение средствами индивидуальной и коллективной защиты в соответствии с требованиями охраны труда за счет средств работодателя;
- обучение безопасным методам и приемам труда за счет средств работодателя;
- внеочередной медицинский осмотр в соответствии с медицинскими рекомендациями с сохранением за ним места работы (должности) и среднего заработка во время прохождения указанного медицинского осмотра.

5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны

При выполнении математической модели процесса изомеризации, инженеру было предоставлено рабочее пространство, соответствующее

трудовому кодексу и ГОСТу 12.2.032-78 «Система стандартов безопасности труда» [63]:

- 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

5.2.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования

Согласно ГОСТу 12.0.002-2014 установлены специальные положения в сфере обеспечения безопасности трудовой и производственной деятельности необходимые для соблюдения [64].

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 [65-68].

Таблица 1 - Опасные и вредные факторы производства изомеризата

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
1.Отклонение показателей микроклимата;	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548-96
2.Повышенный уровень шума;	+	+	+	ГОСТ 12.4.011-89 (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация
3.Электрический ток;	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-81 Электрическая безопасность. Защитное заземление, зануление.
4.Утечка вредных веществ;			+	ГОСТ 4095-75 Изооктан технический. Технические условия;
5.Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	СНиП 23-05-95 Естественное и искусственное освещение

Используя данные таблицы, можно учесть опасные и вредные факторы теоретически могут возникнуть при работе с объектом исследования - производством изоалканов с высоким октановым числом на установке процесса каталитической изомеризации С₇.

5.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований

В процессе моделирования реактора каталитической изомеризации углеводородов гептан - октанового ряда может подвергаться влиянию вредных и опасных факторов, способствующих ухудшению здоровья, появлению профессиональных заболеваний.

Опасность поражения электрическим током. Вызвана она тем, что всё оборудование машинного зала питается от трехфазной сети переменного

тока (380/220 В, 50 Гц). В процессе эксплуатации или проведения профилактических работ человек может коснуться частей, находящихся под напряжением. Действие электрического тока на организм человека может вызвать травмы различной степени тяжести и даже смертельный исход. На долю поражений электрическим током приходится 40% несчастных случаев с летальным исходом.

Все помещения согласно ПУЭ делятся по степени поражения людей электрическим током на три класса:

- без повышенной опасности;
- с повышенной опасностью;
- особо опасные.

Место работы инженера программиста относится к помещениям первого класса (без повышенной опасности). Согласно классификации, это сухие, беспыльные помещения с нормальной температурой воздуха и с изолирующими полами.

Оборудование компьютерного класса должно соответствовать ГОСТ 12.1.019-79* «Электробезопасность. Общие требования».

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. О важности вопросов производственного освещения для вычислительного центра говорит и тот факт, что условия деятельности операторов в системе «человек-машина» связаны с явным преобладанием зрительной информации - до 90% общего объема.

Разряд зрительных работ в лаборатории ПК соответствует 3 категории и согласно [58] освещенность рабочего места при данном разряде зрительных работ не менее 300 лк (для газоразрядных ламп) при определенном

коэффициенте пульсаций и специальных нормах на контрастность и прямую и отраженную блескост, что обеспечивается правильным расположением ламп относительно рабочего места и экрана монитора.

При выборе уровня освещенности следует руководствоваться СНиП 23-05-95 «Естественное и искусственное освещение» учитывая, что разряд зрительных работ в лаборатории ПК соответствует категории 3 А. Яркость света при этом не должна превышать указанных норм.

Повышенный уровень шума на рабочем месте, обусловлен работой печатающих устройств, накопителей, кондиционеров и систем вентиляции. Сильный шум вызывает трудности в распознавании цветовых сигналов, снижает быстроту восприятия цвета, остроту зрения, зрительную адаптацию, нарушает восприятие визуальной информации, снижает способность быстро и точно выполнять координированные движения, уменьшает на 5-12% производительность труда; длительное воздействие шума с уровнем звукового давления 90 дБ снижает производительность труда на 30-40%. Медицинские обследования показали, что помимо снижения производительности труда высокие уровни шума приводят к ухудшению слуха и появлению тугоухости. Уровень шума не превышает норм для залов вычислительного центра установленных . Для вычислительных центров этот уровень не более 59 дБ.

Воздействие электромагнитного и мягкого рентгеновского излучений. Этот вредный фактор может привести к постепенному ухудшению зрения и другим профессиональным заболеваниям инженера-программиста. Источником мягкого рентгеновского излучения в вычислительном центре являются видеомониторы. В рассматриваемом зале вычислительного центра применяются мониторы, на кинескопы которых нанесено специальное покрытие, уменьшающее уровень такого излучения (так называемые Low Radiation мониторы). Тем не менее, необходимо соблюдать расстояние (не менее 50 см) до экрана видеомонитора. Для уменьшения электромагнитного излучения применяется экранирование

элементов, с которых происходит излучение. Оборудование компьютерного класса соответствует требованиям [60].

Большую часть времени инженер-программист, занимающийся разработкой математической модели, проводит сидя перед экраном монитора. Нерациональные конструкция и расположение элементов рабочего места вызывают необходимость поддержания вынужденной рабочей позы. Поэтому требуется обеспечить правильное положение тела человека, которое не будет вызывать перенапряжения определенных групп мышц вследствие статичности в процессе работы. Несоблюдение этих требований может привести к заболеваниям опорно-двигательного аппарата. Рабочее место инженера-программиста должно отвечать требованиям ГОСТ Р 50923- 96 «Дисплеи. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения» [69].

5.2.3 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов

Для обеспечения снижения влияния опасных и вредных факторов на работающих, обслуживающих установку каталитической изомеризации, могут быть предприняты следующие решения :

- Систематический осмотр помещения, в котором проводят исследование, на наличие вышедших из строя осветительных приборов;
- Осмотр систем отопления, проверка толщины стен, проверка утеплителя в холодное время года;
- Систематическая проверка влажности на предмет отклонения от допустимой нормы;
- Установка термометра для определения возможного отклонения от допустимых показателей температуры на рабочем месте;
- Систематическая проверка вентилятора и вытяжки на предмет некорректной работы.

5.3 Экологическая безопасность

В данном подразделе рассмотрено возможное воздействие процесса конверсии алканов на окружающую среду, с выявлением предполагаемых источников загрязнения.

Один из самых крупных источников загрязнения был и остается автомобильный транспорт. Выхлопные газы автомобилей работающих на бензинах содержат оксиды углерода, серы, а также сажу и канцерогенные полициклические углеводороды. При выделении вредные вещества и примеси могут раздражать органы дыхания, способствовать образованию кислотных дождей и другим разрушающим атмосферу факторам.

Нормы содержания вредных веществ выделяемых при работе двигателей внутреннего сгорания согласно ГОСТу 31967-2012:

- Удельный средневзвешенный выброс оксидов азота— 12 г/(кВт·ч);
- Удельный средневзвешенный выброс оксида углерода — 3,5 г/(кВт·ч);
- Удельный средневзвешенный выброс углеводородов — 1 г/(кВт·ч);

Основным решением проблемы загрязнения атмосферы стало направление экологизации нефтехимических производств, в частности достижение наиболее высокого качества автомобильных бензинов. Процесс изомеризации углеводородов с числом атомов углерода до C_8 позволяет получать высокооктановые компоненты товарных бензинов, соответствующие экологическим требованиям.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

В данном подразделе представлен анализ возможных чрезвычайных ситуаций, которые могут возникнуть при разработке математической модели процесса изомеризации или ее эксплуатации на производстве.

5.4.1. Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований.

Ниже представлены возможные чрезвычайные ситуации, которые может инициировать объект исследования:

- Техногенного характера (аварийная ситуации в лаборатории);
- Социального характера (террористический акт);

Наиболее типичной и опасной является ЧС техногенного характера.

Самый вероятный тип ЧС который может произойти в лаборатории – разлив и возгорание дизельного топлива при соприкосновении с огнем или реагентами для самовоспламенения.

5.4.2 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС

Мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций представлены ниже согласно РД 153-39.4-056-00 [70]:

- систематическая диагностика оборудования ;
- Обслуживание и ремонт оборудования;
- Наличие современных сигнализаций и приборов контроля;
- систематический инструктаж персонала;
- планы поддержания рабочего состояния лаборатории после чрезвычайной ситуации или катастрофы;
- план реагирования в случае террористических действий;
- план реагирования на биологические, химические и радиологические инциденты в лаборатории
- план эвакуации сотрудников в случае пожара в производственном помещении;

- наличие первичных средств пожаротушения, эвакуационных выходов и путей эвакуации.

5.5 Вывод по разделу

В данном разделе были подробно разобраны правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности сотрудников касательно проектирования оптимально комфортной рабочей зоны для моделирования процесса изомеризации. Произведен анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть в результате работы над исследованием процесса каталитической изомеризации с помощью математической модели. Также было показано, как предотвратить возникновение опасных факторов и теоретически возможных чрезвычайных ситуаций

Практическая значимость полученных нами данных о социальной ответственности состоит в понимании вредных и опасных факторов с которыми могут столкнуться работники, а также умение выйти из различных чрезвычайных ситуаций, которые могут возникнуть при проведении данного исследования или при его применении на производстве.

Выводы

В данном исследовании были определены термодинамические закономерности конверсии углеводородов C_{7+} , на основании которых составлена математическая модель процесса изомеризации алканов гептан – октанового ряда. Данная модель позволяет подобрать оптимальный технологический режим установки в соответствии с углеводородным составом перерабатываемого сырья с целью получения максимального октанового числа, при заданном выходе изомеризата.

Расчеты, проведенные на математической модели, выявили следующие закономерности корректировки технологического режима установки изомеризации в зависимости от качества перерабатываемого сырья:

- При содержании углеводородов C_{7+} более 50 мас. % целесообразно понижение температуры процесса до 185-190 °С с целью снижения вклада побочных реакций гидрокрекинга углеводородов C_{7+} , при этом выход изомеризата увеличивается на 3-4 мас. %, октановое число составляет 87 пунктов по исследовательскому методу.
- Для сырья, содержащего 35-45 мас. % углеводородов гексанового ряда, возможно увеличение температуры до 210 °С. Повышение температуры необходимо для увеличения конверсии нормальных алканов C_6 в соответствующие изоалканы, так как данные реакции характеризуются высокими значениями энергии активации (85 кДж/моль). При изменении температурного режима выход изомеризата изменяется незначительно, а октановое число возрастает на 2 пункта.
- Сырье, имеющее в составе 20-25 мас. % углеводородов ароматического и циклического строения, обладает высокими скоростями протекания реакций гидрирования до нормальных алканов, а переход нафтенев в изо- алканы требуется большее время контакта с катализатором либо более высокие температуры в интервале 215-225 °С.

Таким образом, применение разработанной математической модели процесса изомеризации позволяет определить технологические параметры, при которых достигается максимальный выход изоалканов в условиях переменного состава перерабатываемого сырья.

Также, в работе было рассмотрено внедрение процесса изомеризации C_7-C_8 в структуру действующего предприятия. Модернизация производства позволяет повысить степень использования низкооктановых фракций в процессе компаундирования товарных бензинов на 7-10 % от вырабатываемого количества. При этом повышение октанового числа данных фракций позволяет сократить долю дорогостоящих потоков МТБЭ на 9 % ,толуола более, чем на 3 % и алкилбензина на 15%. Данные изменения позволяют существенно сократить себестоимость товарных бензинов при сохранении их эксплуатационных характеристик.

Список литературы

1. Ахметов С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа: Учеб. Пособие для ВУЗов. - Уфа: Изд. - «Гилем», 2002. - 672 с.
2. Иванчина Э. Д. , Чеканцев Н. В. , Чузлов В. А. , Продан В. И. Математическое моделирование каталитического процесса изомеризации пентан-гексановой фракции прямогонных бензинов // Известия вузов. Химия и химическая технология. - 2014 - Т. 57 - №. 11. - С. 92-95.
3. Ахметов С.А., Ишмияров М.Х., Верёвкин А.П, Докучаев Е.С., Малышев Ю.М. Технология, экономика и автоматизация процессов переработки нефти и газа: Учеб. Пособие / Под ред. С.А. Ахметова. - М.: «Химия», 2005. - 736 с.
4. Мановян А.К. Технология переработки природных энергоносителей. - М.: Химия, КолосС, 2004. - 456 с
5. Иванчина Э. Д. , Чузлов В. А. , Чеканцев Н. В. , Молотов К. В. Математическое моделирование каталитических процессов изомеризации прямогонных бензинов // Нефтепереработка и нефтехимия. - 2014 - №. 10. - С. 20-25.
6. 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.
7. ОАО "НПП Нефтехим". <http://www.nefthim.ru>
8. Ясакова, Е.А. Тенденции развития процесса изомеризации в России и за рубежом / Е.А. Ясакова, А.В. Ситдикова, А.Ф. Ахметов // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2010. – № 1. – С. 24–42
9. Мириманян, А.А. Промышленный опыт работы установок изомеризации пентан-гексановой фракции / А.А. Мириманян, А.Г. Вихман, А.А. Мкртычев // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2006. – № 4. – С. 22–31.
10. Hanafi, S.A. Catalytic performance of dealuminated H-Y zeolite supported bimetallic nanocatalysts in Hydroisomerization of n-hexane and n-

heptane / S.A. Hanafi, H.M. Gobara, M.S. Elmelawy, S.A. Abo-El-Enein, A.A. Alkahlawy // *Egyptian Journal of Petroleum*. – 2014. – V. 23. – P. 119–133.

11. Бурсиан, Н.Р. Технология изомеризации парафиновых углеводородов / Н.Р. Бурсиан. – Л.: Химия, 1985. – 192 с.

12. Aleman-Vazquez L.O., Cano-Domingez J.L., Torres-Garcia E., Villagomez-Ibarra J.R., Industrial application of catalytic systems for n-heptane isomerization, *Molecules* 16 (2011) 5916–5927.

13. Михайлов, М.Н. Состояние металла и механизм превращения алканов на Pt-содержащих цеолитных катализаторах / М.Н. Михайлов, И.В. Мишин, Л.М. Кустов, А.Ю. Стахеев // *Нефтехимия*. – 2009. – Т. 49. – № 1. – С. 56–61.

14. В.А. Чузлов, Э.Д. Иванчина, Ю.А. Смольянова, К.В. Молотов Анализ эффективности эксплуатации катализаторов процесса изомеризации легких бензиновых фракций методом математического моделирования // *Химия в интересах устойчивого развития*. - 25. - 2017. - С. 449-456.

15. Föttinger, K. In situ IR investigation of n-hexane isomerization over Pt containing sulfated zirconia / K. Föttinger, G. Kinger, H. Vinek // *Applied Catalysis A: General*. – 2004. – V. 266. – P. 195–202.

16. Liu H., Meng X., Zhang R., Liu Z., Meng J., Xu C., Reaction performance and disappearance kinetics of n-pentane isomerization catalyzed by chloroaluminate ionic liquid, *Catal. Commun.* 12 (2010) 180–183.

17. Кустов Л.М., Васина М.В., Ксенофонтов В.А. Ионные жидкости как каталитические среды. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева)*, 2004, т. XLVIII, № 6, с. 13-35.

18. Liu H., Meng X., Zhang R., Liu Z., Meng J., Xu C. Reaction performance and disappearance kinetics of n-pentane isomerization catalyzed bichloroaluminate ionic liquid, *Catal. Commun.* 2010; 12: 180-183.

19. Shi Zhen-min, Wu Xiao-hui, Liu Zhi-chang, Meng Xiang-hai, Influence of initiators on isomerization of normal hexane catalyzed by ionic liquids, *J. Fuel Chem. Technol.* 36 (3) (2008) 306–310.

20. Капустин, В.М. Инновационное развитие нефтепереработки и нефтехимии в России / В.М. Капустин // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний. – 2011. – № 6. – С. 3–7.

21. Иванчина Э. Д. , Чеканцев Н. В. , Чузлов В. А. , Смольянова Ю. А. Оптимизация состава углеводородного сырья в процессе изомеризации пентан-гексановой фракции с использованием комплексной математической модели HYSYS-IZOMER // Известия Томского политехнического университета. - 2012 - Т. 321 - №. 3. - С. 130-132.

22. Чеканцев Н. В. Оптимизация реакторного оборудования и условий промышленной эксплуатации процесса изомеризации пентан-гексановой фракции // дисс. канд. техн. наук.

23. Шакун, А.Н. Способ изомеризации легких бензиновых фракций, содержащих C7–C8 парафиновые углеводороды / А.Н. Шакун, М.Л. Федорова // Патент РФ. – Приоритет от 20.07.2009. – № 2408659.

24. Aboul-Gheit, A.K. Hydroconversion and diffusion of n-heptane on mordenite catalysts / A.K. Aboul-Gheit, M.F. Menoufy, A.K. El-Morsi, S.M. Abdel-Hamid // Zeolites. – 1987. – V. 7. – P. 353–359.

25. Volkova G.G., Reshetnikov S.I., Shkuratova L.N., Budneva A.A., Paukshtis E.A., nhexane skeletal isomerization over sulfated zirconia catalysts with different Lewis acidity, Chem. Eng. J. 134 (2007) 106–110.

26. Смоликов, М.Д. Изучение роли состояния платины в катализаторах Pt/SO₄/ZrO₂/Al₂O₃ для изомеризации н-гексана / М.Д. Смоликов, В.Б. Гончаров, Е.М. Садовская, К.В. Казанцев, Е.В. Затолокина, Д.И. Кирьянов, Е.А. Паукштис, Б.С. Бальжинимаев, А.С. Белый // Катализ в промышленности. –2013. – № 6. – С. 51–60.

27. Смоликов, М.Д. Исследование изомеризации н-гексана на Pt/SO₄/ZrO₂/Al₂O₃ катализаторах. Влияние состояния Pt на каталитические и адсорбционные свойства / М.Д. Смоликов, К.В. Казанцев, Е.В. Затолокина, Д.И. Кирьянов, Е.А. Паукштис, А.С. Белый // Кинетика и Катализ. – 2010. – Т. 51. – № 4. – С. 608–618.

28. Кузнецов, П.Н. Новые катализаторы на основе диоксида циркония для изомеризации алканов нефтяных фракций / П.Н. Кузнецов, В.П. Твердохлебов, Л.И. Кузнецова, А.В. Казбанова, Д.А. Мельчаков, Н.Н. Довженко // Журнал Сибирского Федерального университета. Серия: Техника и технологии. – 2011. – Т. 4. – № 4. – С. 438–452.
29. Valyon, J. The hydroconversion of n-heptane over reduced and oxidized Pt/Hzeolite catalysts / J. Valyon, J. Engelhardt, F. Lonyi, Z. Sándor // Studies in Surface Science and Catalysis. – 1999. – V. 125. – P. 375–382.
30. Лавренов А.В, Басова И.А., Казаков М.О., Финевич В.П., Бельская О.Б., Булучевский Е.А., Дуплякин В.К Катализаторы на основе анион-модифицированных оксидов металлов для получения экологически чистых компонентов моторных топлив. Рос. хим. ж., 2007, т. II, №4.
31. Föttinger, K. In situ IR investigation of n-hexane isomerization over Pt containing sulfated zirconia / K. Föttinger, G. Kinger, H. Vinek // Applied Catalysis A: General. – 2004. – V. 266. – P. 195–202.
32. Yoshioka CMN, Jordão MH, Zanchet D, Garetto TF, Cardoso D. A new activation process of bimetallic catalysts and application to the n-hexane isomerization. Appl Catal A Gen 2009;355(1-2):20-26.
33. Hanafi, S.A. Catalytic performance of dealuminated H-Y zeolite supported bimetallic nanocatalysts in Hydroisomerization of n-hexane and n-heptane / S.A. Hanafi, H.M. Gohara, M.S. Elmelawy, S.A. Abo-El-Enein, A.A. Alkahlawy // Egyptian Journal of Petroleum. – 2014. – V. 23. –P. 119–133
34. Lugstein, A. Hydroconversion of n-heptane over bifunctional HZSM5 zeolites influence of the metal concentration and distribution on the activity and selectivity / A. Lugstein, A. Jentys, H. Vinek // Applied Catalysis A: General. – 1998. – V. 166. – P. 29–38.
35. Hidalgo JM, Kaucký D, Bortnovsky O, Sobalík Z, Černý R. Tailoring of the structure of Pt/WO₃-ZrO₂ catalyst for high activity in skeletal isomerization of C₅-C₆ paraffins under industrially relevant conditions. Res Chem Intermed 2015;41(12):9425-37.

36. Hanafi, S.A. Catalytic performance of dealuminated H-Y zeolite supported bimetallic nanocatalysts in Hydroisomerization of n-hexane and n-heptane / S.A. Hanafi, H.M. Gohara, M.S. Elmelawy, S.A. Abo-El-Enein, A.A. Alkahlawy // *Egyptian Journal of Petroleum*. – 2014. – V. 23. – P. 119–133.
37. Morterra, C. On the Acid-Catalyzed Isomerization of Light Paraffins over a ZrO₂/SO₄ System: The Effect of Hydration / C. Morterra, G. Cerrato, F. Pinna, M. Signoretto, G. Strukul // *Journal of Catalysis*. – 1994. – V. 149. – P. 181–188.
38. Løften T., Blekkan E.A., Isomerisation of n-hexane over sulphated zirconia modified by noble metals, *Appl. Catal. A: Gen.* 299 (2006) 250–257. January 157.
39. Comelli, R.A. Influence of ZrO₂ Crystalline Structure and Sulfate ion Concentration on the Catalytic Activity of SO₄²⁻–ZrO₂ / R.A. Comelli, C.R. Vera, J.M. Parera // *Journal of Catalysis*. – 1995. – V. 151. – P. 96–101.
40. Matsushashi, H. Skeletal isomerization mechanism of alkanes over solid superacid of sulfated zirconia / H. Matsushashi, H. Shibata, H. Nakamura, K. Arata // *Applied Catalysis A: General*. – 1999. – V. 187. – P. 99–106.
41. Chao, K. Skeletal Isomerization of n-Butane on Zeolites and Sulfated Zirconium Oxide Promoted by Platinum: Effect of Reaction Pressure / K. Chao, H. Wu, L. Leu // *Journal of Catalysis*. – 1995. – V. 157. – P. 289–293.
42. Ahmed, M. Modeling of an industrial naphtha isomerization reactor and development and assessment of a new isomerization process / M.Ahmed, T.Jarullah, M.Abed, M.Mujtaba // *Chemical Engineering Research and Design*. – 2018. – P. 33 – 46.
43. Shehata, W.M. Monitoring and modelling of variables affecting isomerate octane number produced from an industrial isomerization process / W.M. Shehata, M.F. Mohamed, F.K. Gad // *Egyptian Journal of Petroleum*. – 2018 – P. 945 – 953.
44. Технологический регламент установки Л-30-11/300 ООО «ПО Киришинефтеоргсинтез». – 2012. – 458 с.

45. Технологический регламент установки изомеризации ОАО «Газпромнефть-ОНПЗ». – 2012. – 538 с.
46. Технологический регламент установки изомеризации ОАО «РН-Комсомольский НПЗ». – 2011. – 423 с.
47. Смирнов В.К., Талисман Е.Л., Капустин В.М., Бабаева И.А. Промышленный опыт среднетемпературной изомеризации легкой бензиновой фракции // Нефтепереработка и нефтехимия. - 2005. - № 2. - С. 14-17
48. Атарщиков С.В., Мириманян А.А., Мкртычев А.А. Среднетемпературный изомеризат - высокооктановый компонент автомобильного бензина // Химия и технология топлив и масел. - 2005. - №5. - С. 23-26.
49. Чузлов В. А. , Иванчина Э. Д. , Долганов И. М. , Храпов Д. В. , Короткова Н. В. , Есипенко Р. В. Прогнозирование влияния состава перерабатываемого сырья и технологических режимов на эффективность работы промышленной установки изомеризации с использованием математической модели // Нефтепереработка и нефтехимия. - 2016 - №. 2. - С. 15-21.
50. Кузьмина Р.И., Ливенцев В.Т., Севостьянов В.П. Каталитические процессы нефтехимии. - Саратов: Изд-во СГУ, 2003 - 180 с. бензинов // Катализ в промышленности. - 2003. - №2. - С. 86-88.
51. Koncsag, C.I., Tutun, I.A., Safta, C., Study of C5/C6 isomerization on Pt/H-zeolite catalyst in industrial conditions, Ovidius Univ. Annal. Chem. 22 (2) (2011) 102–106.
52. Aleman-Vazquez L.O., Cano-Dominguez J.L., Torres-Garcia E., Villagomez-Ibarra J.R., Industrial application of catalytic systems for n-heptane isomerization, Molecules 16 (2011) 5916–5927.
53. Лapidус А.Л., Ментюков Д.А., Дергачев А.А. и др. Изомеризация n-гексана на Pt-содержащих цеолитах L и эрионите. // Нефтепереработка и нефтехимия. -2005. -№ 7. - С. 9-12.

54. Гоев М.М., Цветков А.С. — Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт.—2016.— № 3.—С. 17-19.
55. Боруцкий, П.Н. Процессы изомеризации углеводородов (к 90-летию со дня рождения Н.Р. Бурсиан) / П.Н. Боруцкий // Катализ в промышленности. – 2009. – № 2. – С. 65–77.
56. Капустин, В.М. Инновационное развитие нефтепереработки и нефтехимии в России / В.М. Капустин // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний. – 2011. – № 6. – С. 3–7.
57. Кривцов А. В., Иванчина Э.Д., Смышляева Ю.А. Математическое моделирование процесса компаундирования товарных бензинов с учетом реакционной способности компонентов смеси; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. 131 с.
58. ГОСТ 32513-2013 Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия. - М.: Стандартиформ, 2013, 12 с.
59. Скворцов Ю.В. Организационно-экономические вопросы в дипломном проектировании: Учебное пособие. – М.: Высшая школа, 2006. – 399 с.
60. Основы функционально-стоимостного анализа: Учебное пособие / Под ред. М.Г. Карпунина и Б.И. Майданчика. - М.: Энергия, 1980. - 175 с.
61. Кузьмина Е.А, Кузьмин А.М. Методы поиска новых идей и решений "Методы менеджмента качества" №1 2003 г.
62. Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 28.12.2013)
63. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.
64. ГОСТ 12.0.003-74 ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация

65. СН 2.2.4/2.1.8.562-96 «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки»
66. ГОСТ 12.4.011-89 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация
67. ГОСТ 12.1.030-81 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление
68. СНиП 23-05-95 Естественное и искусственное освещение
69. ГОСТ Р 50923- 96 Дисплеи. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения
70. РД 153-39.4-056-00 Правила технической эксплуатации магистральных нефтепроводов