

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология (Химическая технология топлива и газа)

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

### МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
<b>Математическое моделирование цеоформинга парафинов C5-C7</b>

УДК 65.637.7:665.642:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Марданов Канан Эльшад-оглы		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Киргина Мария Владимировна	к.т.н.		

Консультант

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Инженер ОХИ ИШПР	Алтынов Андрей Андреевич	—		

### КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

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

### ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

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

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

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология (Химическая технология топлива и газа)

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

\_\_\_\_\_ Ивашкина Е.Н.

(Подпись)    (Дата)    (Ф.И.О.)

### ЗАДАНИЕ

#### на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

<b>Магистерской диссертации</b>
(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ92	Марданову Канану Эльшад-оглы

Тема работы:

<b>Математическое моделирование цеоформинга парафинов C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub></b>	
Утверждена приказом директора ИШПР (дата, номер)	от 02.02.2021 г. № 33-24/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01.06.2021 г.
------------------------------------------	---------------

#### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<b>Исходные данные к работе</b>	Н-пентан (XЧ), н-гексан (XЧ), н-гептан (XЧ), цеолитный катализатор марки КН-30.
<b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b>	1 Литературный обзор 1.1 Легкое углеводородное сырье 1.2 Цеолитсодержащие катализаторы 1.2.1 Процесс Цеоформинг 1.3 Математическое моделирование процессов переработки легкого углеводородного сырья на цеолитных катализаторах 2 Объект и методы исследования 2.1 Объект исследования 2.2 Лабораторная реализация цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> 2.3 Методы исследования 2.3.1 Методика проведения квантово-химических расчетов с помощью программного пакета Gaussian 2.3.2 Методика расчета предэкспоненциальных

	множителей 3 Расчеты и аналитика 3.1 Результаты определения состава продуктов цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> 3.2 Формирование списка теоретически возможных реакций цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> 3.3 Разработка формализованной схемы цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> 4 Результаты исследования 4.1 Расчет первичного набора предэкспоненциальных множителей 4.2 Кинетическая математическая модель цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> 5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 6 Социальная ответственность
--	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

<b>Перечень графического материала</b>	Нет
----------------------------------------	-----

**Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы**

Раздел	Консультант
«Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	Рыжакина Татьяна Гавриловна, к.э.н., доцент ОСГН ШБИП
«Социальная ответственность»	Пашков Евгений Николаевич, к.т.н., доцент ООТД ШБИП
«Иностранный язык»	Терре Дина Анатольевна, к.фил.н., доцент ОИЯ ШБИП

**Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:**

Литературный обзор

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	01.02.2021 г.
-------------------------------------------------------------------------------------------------	---------------

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Киргина М.В.	к.т.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Марданов Канан Эльшад-оглы		

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология (Химическая технология топлива и газа)

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

Период выполнения весенний семестр 2020/2021 учебного года

Форма представления работы:

Магистерская диссертация

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

### КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01.06.2021 г.
------------------------------------------	---------------

Дата контроля	Название раздела (модуля)/ вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2021 г.	Введение	10
15.03.2021 г.	Литературный обзор: легкое углеводородное сырье; цеолитсодержащие катализаторы; процесс Цеоформинг; математическое моделирование процессов переработки легкого углеводородного сырья на цеолитных катализаторах	15
01.04.2021 г.	Объект и методы исследования: образцы химически чистых н-пентана, н-гексана и н-гептана, цеолитный катализатор КН-30; методика проведения квантово-химических расчетов с помощью программного пакета Gaussian; методика расчета предэкспоненциальных множителей.	15
15.04.2021 г.	Расчеты и аналитика: результаты определения состава продуктов цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> ; формирование списка теоретически возможных реакций цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> ; разработка формализованной схемы цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub>	20
01.05.2021 г.	Результаты проведенного исследования: расчет первичного набора предэкспоненциальных множителей; разработка кинетической математической модели цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub>	20
20.05.2021 г.	Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». Раздел «Социальная ответственность». Раздел «Иностранный язык»	10
01.06.2021 г.	Выводы	10

**СОСТАВИЛ:****Руководитель ВКР**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Киргина М.В.	К.Т.Н.		

**СОГЛАСОВАНО:****Руководитель ООП**

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

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

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
2ДМ92	Марданову Канану Эльшад-оглы

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

**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 и инновационного потенциала НТИ	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования.
2. Разработка устава научно-технического проекта	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.
3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НТИ
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Проведение оценки экономической эффективности исследования свойств и применения стабильного газового конденсата.

**Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):**

1. «Портрет» потребителя результатов НТИ
2. Сегментирование рынка
3. Оценка конкурентоспособности технических решений
4. Матрица SWOT
5. График проведения и бюджет НТИ
6. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
-------------------------------------------------------------	--

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Доцент ОСГН ШБИП	Рыжакина Т.Г.	К.Э.Н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
2ДМ92	Марданов Канан Эльшад-оглы		

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ92	Марданову Канану Эльшад-оглы

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

Тема ВКР:

<b>Математическое моделирование цеоформинга парафинов С5-С7</b>	
<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p><b>Объектом</b> исследования является процесс цеоформинга парафинов С5-С7.</p> <p><b>Рабочая зона</b> – лаборатория второго корпуса ТПУ.</p> <p><b>Рабочее место</b> – зона около вытяжного шкафа.</p> <p><b>Область применения:</b> нефтеперерабатывающая и нефтехимическая промышленность.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p><b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 20.04.2020)</li> <li>– Федеральный закон от 22.07.2013 г. №123 – ФЗ, Технический регламент о требованиях пожарной безопасности.</li> <li>– ПНД Ф 12.13.1-03. Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения).</li> <li>– ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.</li> </ul>
<p><b>2. Производственная безопасность:</b></p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<p><b>Анализ вредных факторов:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Отклонение показателей микроклимата;</li> <li>– Недостаточная освещенность рабочей зоны;</li> <li>– Повышенный уровень электромагнитных излучений;</li> <li>– Повышенный уровень шума на рабочем месте;</li> <li>– Перенапряжение зрительного анализатора;</li> <li>– Умственное перенапряжение.</li> </ul> <p><b>Анализ опасных факторов:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Пожарная безопасность;</li> <li>– Горючесть, взрывоопасность и токсичность применяемых веществ;</li> <li>– Наличие электротехнических устройств высокого напряжения;</li> <li>– Статическое электричество;</li> <li>– Термические опасности.</li> </ul> <p><b>Основные средства защиты:</b> халаты, перчатки, защитные очки, респираторы.</p>
<p><b>3. Экологическая безопасность:</b></p>	<p>Основным загрязнителем <b>атмосферы</b> является повышенное содержание паров исходных веществ и продуктов их переработки. <b>Гидросферу</b> загрязняют постоянные, так и периодические стоки, содержащие</p>



	вредные вещества. На <b>литосферу</b> оказывают влияние загрязнение почв исходными химическими веществами и продуктами реакции, а также отходы, образующиеся при выполнении работ: макулатура, пластик, отработанные люминесцентные лампы и т.д.
<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b>	Возникновение чрезвычайных ситуаций, требующих обеспечения электро- и пожаро-взрывобезопасности на рабочем месте: – пожар; – взрыв; – утечка реагентов.

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

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООТД ШБИП	Пашков Е.Н.	к.т.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Марданов Канан Эльшад-оглы		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 173 страницы, 28 рисунков, 40 таблиц, 55 источника, 5 Приложений.

Ключевые слова: парафины  $C_5-C_7$ , цеолитный катализатор, цеоформинг, термодинамические и кинетические параметры, формализованная схема превращения, математическое моделирование.

Работа представлена введением, 6 разделами и выводами, приведен список использованных источников.

Объект исследования – процесс цеоформинга легкого углеводородного сырья на примере парафинов  $C_5-C_7$ . Предмет исследования – направления превращений парафинов  $C_5-C_7$  на цеолитном катализаторе, а также термодинамические и кинетические параметры протекающих реакций.

Цель работы – разработка математической модели цеоформинга парафинов  $C_5-C_7$  (н-пентана, н-гексана и н-гептана).

В ходе работы на лабораторной каталитической установке реализован цеоформинг н-пентана, н-гексана и н-гептана, определен углеводородный состав полученных продуктов; сформирован перечень теоретически возможных реакций; проведен термодинамический анализ и определены реакции, протекание которых в условиях цеоформинга термодинамически возможно; разработана формализованная схема превращений парафинов  $C_5-C_7$  на цеолитном катализаторе; осуществлен расчет предэкспоненциальных множителей и разработана кинетическая математическая модель цеоформинга парафинов  $C_5-C_7$ .

Экономическая эффективность/значимость работы: математическая модель цеоформинга легкого углеводородного сырья, созданная на основе разработанных формализованной схемы превращения и кинетической модели цеоформинга парафинов  $C_5-C_7$ , позволит исследовать физико-химические закономерности процесса; прогнозировать состав, свойства и выход целевого продукта в соответствии с изменениями условий ведения процесса.

# ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	14
1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР .....	18
1.1 Легкое углеводородное сырье.....	18
1.2 Цеолитсодержащие катализаторы .....	23
1.2.1 Процесс Цеоформинг.....	26
1.3 Математическое моделирование процессов переработки легкого углеводородного сырья на цеолитных катализаторах .....	30
2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	36
2.1 Объект исследования .....	36
2.2 Лабораторная реализация цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> .....	38
2.3 Методы исследования .....	42
2.3.1 Методика проведения квантово-химических расчетов с помощью программного пакета Gaussian .....	42
2.3.2 Методика расчета предэкспоненциальных множителей .....	47
3 РАСЧЕТЫ И АНАЛИТИКА.....	50
3.1 Результаты определения состава продуктов цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> .....	50
3.2 Формирование списка теоретически возможных реакций цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> .....	52
3.3 Разработка формализованной схемы цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> ....	56
4 РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	58
4.1 Расчет первичного набора предэкспоненциальных множителей.....	59
4.2 Кинетическая математическая модель цеоформинга парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>7</sub> .	60
5 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.....	64
5.1 Предпроектный анализ .....	65
5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования .....	65

5.1.2	Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения .....	66
5.1.3	SWOT-анализ .....	67
5.1.4	Оценка готовности проекта к коммерциализации .....	69
5.1.5	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования .....	71
5.2	Инициация проекта .....	71
5.3	Планирование управления научно-техническим проектом .....	73
5.3.1	Иерархическая структура работ проекта .....	73
5.3.2	Контрольные события проекта .....	74
5.3.3	План проекта .....	75
5.3.4	Бюджет научного исследования .....	77
5.3.4.1	Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты .....	77
5.3.4.2	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ .....	78
5.3.4.3	Основная заработная плата .....	78
5.3.4.4	Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала .....	80
5.3.4.5	Отчисления на социальные нужды .....	81
5.3.4.6	Накладные расходы .....	81
5.3.5	Организационная структура проекта .....	82
5.3.6	Матрица ответственности .....	83
5.3.7	План управления коммуникациями проекта .....	84
5.3.8	Реестр рисков проекта .....	84
5.4	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования .....	85
5.4.1	Оценка абсолютной эффективности исследования .....	85
5.4.1.1	Чистая текущая стоимость (NPV) .....	85
5.4.1.2	Индекс доходности (PI) .....	87
5.4.1.3	Внутренняя ставка доходности (IRR) .....	87

5.4.1.4	Дисконтированный срок окупаемости.....	89
5.4.2	Оценка сравнительной эффективности исследования .....	90
6	СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....	94
6.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	94
6.2	Производственная безопасность.....	97
6.2.1	Анализ выявленных вредных и опасных факторов.....	98
6.2.1.1	Отклонение показателей микроклимата помещения .....	98
6.2.1.2	Недостаточная освещенность помещения.....	100
6.2.1.3	Повышенный уровень электромагнитных излучений .....	102
6.2.1.4	Повышенный уровень шума .....	103
6.2.1.5	Умственное и зрительное перенапряжение.....	103
6.2.1.6	Пожарная безопасность .....	104
6.2.1.7	Химически опасная среда.....	106
6.2.1.8	Электробезопасность .....	107
6.2.1.9	Термические опасности .....	107
6.3	Экологическая безопасность .....	108
6.3.1	Воздействие на атмосферу .....	108
6.3.2	Воздействие на гидросферу .....	109
6.3.3	Воздействие на литосферу .....	110
6.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....	110
	ВЫВОДЫ.....	112
	СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СТУДЕНТА.....	114
	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	116
	Приложение А .....	122
	Приложение Б.....	136
	Приложение В.....	161
	Приложение Г .....	166
	Приложение Д.....	171

## ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время проблема ресурсоэффективного использования легкого углеводородного сырья становится особенно актуальной как с экологической, так и с экономической точек зрения. Потребление моторных топлив имеет устойчивую тенденцию роста, в то время как запасы углеводородного сырья истощаются. В связи с этим возникает необходимость создания высокоэффективных технологий переработки альтернативных источников углеводородного сырья, таких как стабильные газовые конденсаты, попутные нефтяные газы и отходящие нефтезаводские газы с целью получения продуктов нефтепереработки, соответствующих современным стандартам.

Принципиально новые возможности использования легкого углеводородного сырья в качестве энергетического топлива и сырья для малотоннажного производства светлых нефтепродуктов для удовлетворения собственных потребностей в энергии и тепле для большинства удаленных регионов добычи нефти, газового конденсата и газа, открывают разработки экологически чистых и безотходных каталитических процессов с применением цеолитсодержащих катализаторов на базе малогабаритных блочных установок.

В связи с этим весьма актуальными становятся исследования, направленные на выявление физико-химических закономерностей превращения углеводородов, протекающих на поверхности цеолитных катализаторов, с образованием высокооктановых компонентов бензинов.

В настоящее время в нефтеперерабатывающей промышленности все более актуальным становится использование математических моделей химико-технологических процессов на физико-химической основе. Для построения математической модели цеоформинга легкого углеводородного сырья, на примере модельных реакций конверсии *n*-парафинов  $C_5$ - $C_7$ , необходимо понимание химизма процесса, т.е. основных протекающих реакций, а также знание термодинамических и кинетических параметров данных реакций.

Таким образом, **целью** данной работы является разработка математической модели цеоформинга парафинов  $C_5-C_7$  (н-пентана, н-гексана и н-гептана).

Для достижения поставленной цели необходимо решить **задачи**:

1. Реализовать цеоформинг н-пентана, н-гексана и н-гептана на лабораторной каталитической установке в условиях варьирования температур. Методом газовой хроматографии определить углеводородный состав полученных продуктов;

2. Определить направления превращений парафинов  $C_5-C_7$  на цеолитном катализаторе типа ZSM-5. Сформировать перечень теоретически возможных реакций, протекающих в процессе цеоформинга парафинов  $C_5-C_7$ ;

3. Осуществить расчет термодинамических параметров теоретически возможных реакций, протекающих в процессе цеоформинга парафинов  $C_5-C_7$ . Провести термодинамический анализ и определить реакции, протекание которых в условиях цеоформинга термодинамически возможно;

4. Осуществить агрегирование компонентов по реакционной способности и разработать формализованную схему превращений парафинов  $C_5-C_7$  на цеолитном катализаторе;

5. Осуществить расчет предэкспоненциальных множителей реакций, включенных в формализованную схему превращений парафинов  $C_5-C_7$  на цеолитном катализаторе;

6. Разработать кинетическую математическую модель цеоформинга парафинов  $C_5-C_7$ .

**Объектом исследования** в данной работе является процесс цеоформинга легкого углеводородного сырья на примере парафинов  $C_5-C_7$ .

**Предметом исследования** являются направления превращений парафинов  $C_5-C_7$  на цеолитном катализаторе, а также термодинамические и кинетические параметры протекающих реакций.

### **Научная новизна работы:**

1. Установлено что основными направлениями превращений парафинов  $C_5-C_7$  являются изомеризация и крекинг с образованием олефинов, в также последующее перераспределение водорода в олефинах с образованием ароматических углеводородов.

2. Показано, что степень превращения *n*-парафинов  $C_5-C_7$  увеличивается с повышением температуры. В низкотемпературной области до  $400\text{ }^\circ\text{C}$  на цеолитах типа ZSM-5 преобладает реакция изомеризации. С увеличением температуры до  $425\text{ }^\circ\text{C}$  возрастает содержание в жидком продукте ароматических углеводородов при снижении селективности реакции крекинга. Установлено, что наиболее интенсивно образование высокооктановых ароматических углеводородов идет из *n*-гептана, наименее интенсивно из *n*-пентана.

3. По результатам термодинамического анализа установлено, что в условиях процесса цеоформинга термодинамически возможно протекание 777 реакций из 865 теоретически возможных;

4. Осуществлено агрегирование компонентов по реакционной способности и разработана формализованная схема превращений парафинов  $C_5-C_7$  на цеолитном катализаторе, основанная на детальном анализе направлений превращения индивидуальных углеводородов. Формализованная схема включает в себя 140 химических реакций, связывающих между собой 50 индивидуальных веществ и псевдокомпонентов;

5. Осуществлен расчет предэкспоненциальных множителей и разработана кинетическая математическая модель цеоформинга парафинов  $C_5-C_7$ .

### **Практическая значимость работы:**

Разработанная математическая модель представляет значительный практический интерес для исследования превращений такого легкого углеводородного сырья как стабильные газовые конденсаты, нефтезаводские газы и прямогонные бензиновые фракции в ценные высокооктановые компоненты моторных топлив и сырье нефтехимической промышленности.



Разработанные в ходе работы формализованная схема превращения и кинетическая математическая модель цеоформинга парафинов  $C_5-C_7$  послужат основой для математической модели цеоформинга легкого углеводородного сырья на высококремнистых цеолитах, а также компьютерной программы, способной прогнозировать направления превращения данных углеводородов, свойства и выход целевого продукта в соответствии с изменениями условий протекания реакций, что позволит выбирать оптимальные параметры ведения процесса цеоформинг.

**Апробация работы:**

Основные положения и результаты работы были представлены на XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке» имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 125-летию со дня основания Томского политехнического университета; XXV Международном научном симпозиуме студентов и молодых ученых имени академика М.А. Усова «Проблемы геологии и освоения недр».

# 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

## 1.1 Легкое углеводородное сырье

Современные тенденции стратегического развития нефте- и газоперерабатывающей промышленности, а также нефтехимической отрасли, связанные с увеличением глубины переработки углеводородного сырья, ростом доли новых процессов и технологий, ужесточением требований стандартов на моторные топлива, предусматривающих повышение их экологичности, обуславливают повышенные требования к ресурсоэффективному использованию легкого углеводородного сырья, в частности, стабильных газовых конденсатов (СГК), попутного нефтяного газа (ПНГ) и прямогонных бензиновых фракций, играющих ключевую роль в процессах нефтепереработки и нефтехимии.

На сегодняшний день легкое углеводородное сырье (СГК и ПНГ) используют нерационально – смешивают с товарной нефтью для улучшения её реологических свойств, хотя требуются значительные материальные и временные затраты на его извлечение. В последние годы, в северных районах Сибири, Дальнего Востока и других нефтегазодобывающих регионах России, около 20-60 млрд. м<sup>3</sup> ПНГ и СГК из которого можно производить товарный нефтепродукт [1], по разным оценкам, по-прежнему ежегодно подлежит факельному сжиганию или закачиванию обратно в пласт.

Основные нефтегазодобывающие районы, находящиеся на расстоянии 2000-4000 км от крупных городов страны, не имеющих собственных нефтеперерабатывающих заводов не имеют возможности для индустриального развития, т.к. транспортировка добываемого газового конденсата на уже функционирующие предприятия экономически не оправдана. Такие районы находятся в полной зависимости от поставок моторных топлив из промышленно развитых регионов.

Отличительной чертой нефтеперерабатывающих мощностей Российской Федерации является относительно большая доля (порядка 60 %) заводов с

производительностью 15-25 млн. тонн в год, в то время как, в США и Канаде доля таких заводов составляет лишь порядка 16 %. Количество малотоннажных заводов (от 3 млн. тонн в год и меньше) в России составляет 2 %, по сравнению с Северной Америкой, где малотоннажное производство топлива, равномерно расположенное по площади нефтедобывающих регионов, составляет около 30 % [2].

Из-за не комплексной переработки и отсутствия рентабельных технологий, 30-40 % добываемого углеводородного сырья в стране ежегодно утилизируется, загрязняя окружающую среду [3]. На ряду с этим сокращаются мировые запасы углеводородного сырья и возникает необходимость в увеличении глубины переработки нефти.

По данным Минэнерго Российской Федерации, глубина переработки нефти и газового конденсата по итогам 2018 года составила 83,4 %, в 2017 году этот показатель не превышал 81,3 %, а в 2010 – 70,9 %. Таким образом, отмечается заметный рост глубины переработки нефти и газового конденсата. Тем не менее в США, для сравнения, глубина переработки нефти составила 90-95 %, а на самых современных американских НПЗ данный показатель доходит до 98 %, в странах – членах ОПЕК – 85 %, в Европе 85-90 % [4].

Большая отдаленность районов добычи нефти, газа и газового конденсата, а также трудоемкость и высокая стоимость поставки моторного топлива на месторождения ставит задачу перед отраслью в обеспечении собственных нужд моторным топливом непосредственно на месторождении.

Решением этой задачи является строительство непосредственно в местах добычи малотоннажных модульных установок с применением эффективных технологий, основанных на использовании цеолитов в качестве катализаторов. Используя мини-НПЗ, можно обеспечить приближенную к потребителям комплексную переработку легкого углеводородного сырья и существенно снизить цены на различные моторные топлива, в том числе благодаря уменьшению затрат на их транспортировку.

Авторами работы [5] описывается решение проблемы снабжения моторным топливом труднодоступных регионов Российской Федерации путем ввода в эксплуатацию малотоннажных производств нефтепродуктов (мини-НПЗ), с применением аппаратов атмосферной перегонки и процессов получения двух высокооктановых компонентов из различных бензиновых фракций и газового конденсата. Предлагаемая технология основывается на процессах ароматизации и изомеризации различных фракций в рамках одного производства, позволяющая получать высокооктановые компоненты бензинов в присутствии, модифицированных металлами цеолитных катализаторов в условиях безводородной среды.

В работе [6] авторами предлагается технология мягкого парового риформинга (МПР) ПНГ, посредством каталитической конверсии углеводородов  $C_{2+}$  на цеолитном катализаторе, содержащем в своем составе в качестве активного компонента не более 20 % мас. никеля в различной комбинации с оксидами алюминия, кремния, переходных, редкоземельных элементов, щелочных или щелочноземельных металлов. Данная технология реализуется при температуре 450 °С и позволяет получать дешевое и качественное моторное топливо для обеспечения нужд производственной техники, независимо от состава исходного ПНГ. Процесс реализуют в блочно-модульных установках, которые можно транспортировать на удаленные месторождения.

Авторами работы [7] разработана и внедрена в производство установка прямой конверсии газового конденсата. Преимущества способа позволяют успешно перерабатывать на одной и той же технологической установке по WR-технологии (вихревая ректификация от англ. Whirl Refinery) лёгкие и тяжёлые нефти, газовые конденсаты и смеси углеводородного сырья в реакторе с неподвижным слоем цеолитного катализатора при температуре 320-420 °С.

В работе научных сотрудников Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН совместно с ООО «Плазмохим» был разработан процесс одностадийной переработки средних дистиллятов или нестабильных газовых

конденсатов в высокооктановые бензины [8]. Процесс осуществляется на цеолитном катализаторе ИК-30-БИМТ, который не содержит благородные металлы, в реакторах со стационарным слоем катализатора при температуре 350-450 °С и давлении процесса  $\leq 2$  МПа. Проведенные опытные испытания показали возможность получения бензина марок АИ-80 и АИ-92 с выходом жидких продуктов 86-88 % мас.

Квалифицированное использование газового конденсата и улучшение его свойств представляет важную практическую задачу.

СГК – жидкость, состоящая из тяжелых углеводородов, в которой растворено не более 2-3 % мас. пропан-бутановой фракции или других компонентов. Получают из нестабильного конденсата путем его дегазации.

Плотность газового конденсата варьируется в зависимости от углеводородного состава в пределах от 700 до 840 кг/м<sup>3</sup>.

Групповой углеводородный состав конденсата разнообразен и зависит от месторождения, где газовый конденсат добывается. Авторы патента [9] разработали способ переработки на цеолитном катализаторе типа ZSM-5 легкого углеводородного сырья, а именно Нижневартковского газового конденсата с характеристиками и групповым составом, представленным в таблице 1.1.

Таблица 1.1 – Характеристики и групповой состав газового конденсата [9]

Сырье	Плотность при 20 °С, г/см <sup>3</sup>	Фракционный состав, % об. выкипает при температуре, °С						Содержание серы, % мас.	Групповой состав, % мас.			ОЧИ/ОЧМ
		н.к.	10	30	50	90	к.к.		н-парафины	Нафтены	Ароматические углеводороды	
Газоконденсат 49-142 °С	0,702	49	61	77	86	105	142	0,008	58,1	38,7	3,2	56/62
Газоконденсат н.к.-205 °С	0,747	44	71	115	147	195	204	0,091	76,5	13,9	9,6	54/57
Газоконденсат 58-140 °С	0,696	58	–	–	85	117	140	–	44,0	49,7	6,3	64/67

Анализируя результаты, представленные в таблице 1.1 можно видеть, что в составе газового конденсата преобладают парафиновые углеводороды, а также нафтеновые соединения, при этом группой, представленной минимальным содержанием, являются ароматические углеводороды.

Как уже отмечалось ранее, качество автомобильных бензинов строго регламентируется. Международные экологические стандарты существенно ограничивают применение в качестве высокооктановых добавок ароматических углеводородов, в частности бензола и толуола, а также метилтретбутилового эфира (МТБЭ). Поэтому для получения высокооктановых компонентов бензина практическое значение приобретают реакции углеводородов  $C_5-C_7$  с получением разветвленных продуктов с высокими октановыми числами. Эти соединения могут быть получены в результате цеоформинга нормальных парафинов путем переработки СГК, содержащего в основном *n*-пентаны, *n*-гексаны и *n*-гептаны на катализаторе с повышенной молекулярно-ситовой избирательностью по отношению к конверсии *n*-парафиновых углеводородов и высокой стабильностью каталитического действия. Катализатором с подобными характеристиками является цеолит типа ZSM-5.

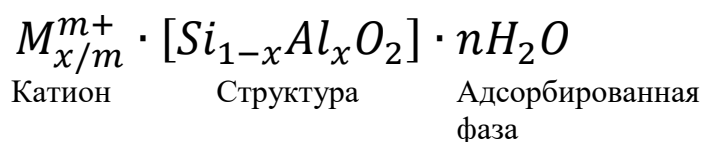
Способ получения высокооктанового бензина с применением процесса цеоформинга низкооктановых прямогонных бензиновых фракций с температурой начала кипения 180 °С и газового конденсата с диапазоном кипения 85-180 °С на цеолитсодержащих катализаторах структурного типа ZSM-5 был рассмотрен авторами работы [10]. Результаты испытаний показали, что концентрация бензола в бензинах, образующихся в процессе переработки на цеолите не превышает 0,9 % об. при суммарном содержании в них ароматических углеводородов 35-38 % об. и октановом числе продукта по исследовательскому методу (ОЧИ) 88-89 пунктов.

Таким образом, полученные результаты испытаний катализаторов, приготовленных на основе цеолита структурного типа ZSM-5, свидетельствуют о перспективности их применения в процессах переработки прямогонных бензиновых фракций различного происхождения.

## 1.2 Цеолитсодержащие катализаторы

Современный уровень эффективности нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности в значительной степени основан на использовании высокоактивных, селективных долговечных и экологически безопасных цеолитов, используемых в качестве катализаторов.

Цеолиты – это микропорозные кристаллические алюмосиликаты, основными структурными единицами которых являются правильные тетраэдры  $\text{SiO}_4$  и  $\text{AlO}_4$ , взаимосвязанные между собой атомами кислорода. Угол связи О-Т-О, где Т – атомы кремния или алюминия, отклоняется от правильного тетраэдрического угла ( $109^\circ 28'$ ) на  $2-3^\circ$  [11]. Состав цеолитов можно описать следующим образом: наличие внешнего катиона, каркас и сорбированная фаза. Химическая формула цеолита представлена в виде:



Свойства цеолитов зависят от топологии его каркаса, размера, формы и доступности его свободных каналов, а также от заряда катионов, расположенных в порах цеолита. На рисунке 1.1 показаны способы изображения содалитовой ячейки – элементарной структурной единицы, входящей в каркас цеолита, а также строение каркаса содалита SOD, цеолитов типа А, X и Y, ZSM-5 [12].

Каждый ион кремния имеет заряд +4 уравновешенный четырьмя ионами кислорода в вершинах тетраэдра, поэтому кремнекислородные тетраэдры имеют электрически нейтральный заряд. Алюмосиликатные тетраэдры, в свою очередь, имеют остаточный отрицательный заряд -1, так как  $\text{Al}^{+3}$  имеет координационное число равное четырем. Поэтому для полной нейтральности самого алюмосиликата отрицательный заряд в  $\text{AlO}_4$  должен быть сбалансирован наличием внешних катионов.

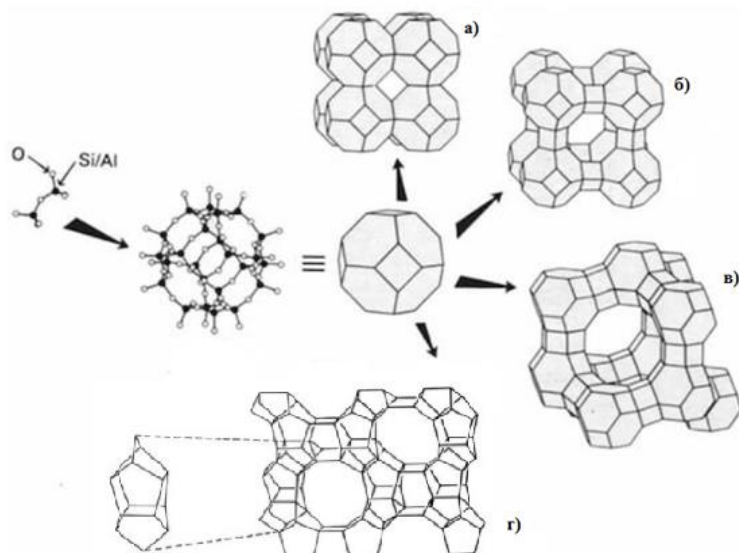


Рисунок 1.1 – Способы изображения содалитовых ячеек некоторых цеолитов:

а – содалит (SOD); б – цеолит типа А (LTA);

в – цеолит типа X, Y (FAU); г – цеолит типа ZSM-5 (MFI)

В качестве катионов выступают одно- и двухзарядные щелочные, щелочноземельные, редкоземельные и органические катионы, которые вводятся в структуру цеолита в процессе его приготовления [13].

Данные катионы являются взаимозаменяемыми ионами, и в зависимости от вида катиона, придают цеолитсодержащим материалам те или иные химические свойства. Так, например, когда ионы  $\text{Na}^+$  заменяются ионами  $\text{Ca}^{2+}$ , увеличивается доступ к порам. Когда примерно одна треть ионов  $\text{Na}^+$  заменена, многие углеводороды с прямой цепью могут адсорбироваться, в то время как разветвленные углеводороды становятся слишком большими для проникновения. Этот процесс используется в промышленности для отделения низкооктановых углеводородов с прямой цепью при производстве бензина.

В зависимости от способа приготовления, цеолиты не проявляют тенденции к изменению каталитической активности. Каталитическая активность цеолитов объясняется наличием кислотных центров, происходящих от тетраэдрических звеньев  $\text{AlO}_4$  в структуре. Они могут действовать как кислотные центры Бренстеда, так и Льюиса [14], представленные на рисунке 1.2.



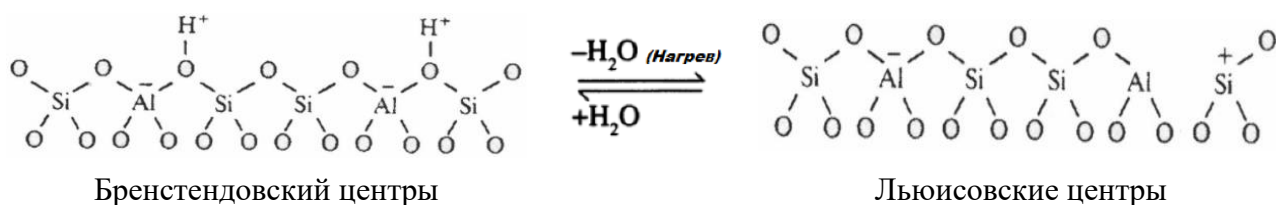


Рисунок 1.2 – Схема взаимодействия протона с алюмосиликатом

Таким образом, поверхность цеолита может иметь как кислотные центры Бренстеда, так и Льюиса. Бренстедовские центры преобразуются в Льюисовские центры при температурах выше 600 °С. Также по мере увеличения отношения Si/Al содержание катионов уменьшается и цеолиты демонстрируют большую гидротермальную стабильность, более низкую плотность кислотных центров, но с увеличением силы отдельных кислотных центров.

На сегодняшний день известно более 130 цеолитов с различным структурным строением [15]. На рисунке 1.3 показаны каркасы и размеры пор, наиболее распространенных в промышленности цеолитных систем. Кристаллический характер каркаса обеспечивает регулярность пористой структуры, что позволяет достичь высокой селективности в катализе. Возможность действовать как молекулярные сита позволяет выбирать молекулы, которые могут получить доступ к активной содалитовой ячейке цеолита (избирательность формы).

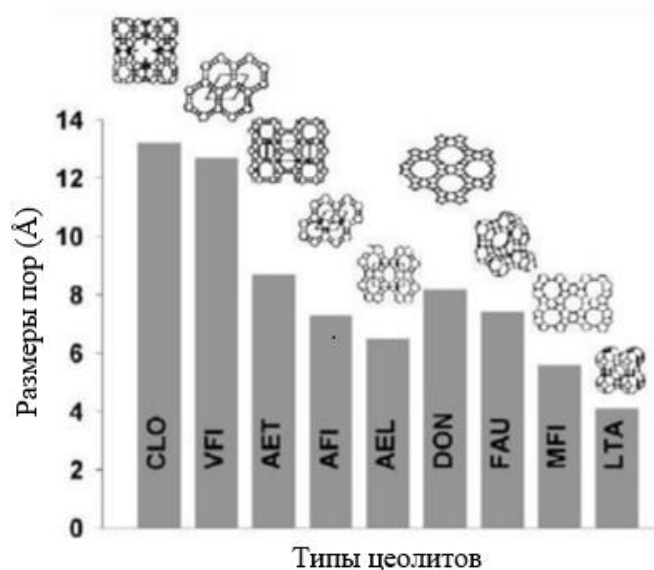


Рисунок 1.3 – Размеры пор различных классов цеолитов [15]

В отличие от других каталитических систем, в которых активность ограничена внешней поверхностью, в цеолитах все атомы участвуют в процессах. Типичная площадь поверхности цеолитов составляет от 300 до 700 м<sup>2</sup>/г [16]. Размеры отверстий, регулирующих доступ к внутренним порам, зависят от количества атомов Т и О в кольцах и варьируется от 2 Å до 15 Å.

Согласно [17], с точки зрения размеров пор, цеолиты могут быть разделены на:

- узкопористые цеолиты, содержащие микропоры малых размеров 0,30-0,45 нм (цеолит А);
- цеолиты со средним размером пор, обычно образованных 10-членными кольцами (0,4-0,6 нм, пентасилы, ZSM-5);
- крупнопористые цеолиты с порами размеров 0,6-0,8 нм, образованными 12-членными кольцами (фожазиты);
- цеолиты с порами экстрабольших (более 0,8 нм) размеров (морденит).

Как правило, внутренние поры цеолитов заняты водой (сорбированная фаза), образующаяся в процессе их синтеза. Адсорбированная вода и некоторые органические катионы могут быть удалены путем тепловой обработки в присутствии воздуха, что освобождает регулярную систему каналов и полостей, объемы пор которых могут варьироваться от 0,10 до 0,35 см<sup>3</sup>/г [18]. Структурная целостность цеолитов сохраняется даже после удаления воды из адсорбированной фазы, что отличает их от других пористых гидратов, в которых потеря кристаллизационной воды сопровождается значительными структурными изменениями.

### **1.2.1 Процесс Цеоформинг**

Разработка новых катализаторов и процессов, которые позволят производить автомобильные бензины с достаточно высоким октановым числом при удовлетворении современных потребностей в практически безотходной,

экологически безвредной и экономически целесообразной технологии весьма актуальна.

Примером такого процесса производства неэтилированного высокооктанового бензина из углеводородного сырья различного происхождения, является процесс Цеоформинг, основанный на использовании нового искусственно синтезированного цеолитсодержащего катализатора марки КН-30, типа ZSM-5.

Новая технология Цеоформинг, разработанная и запатентованная в Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН и НИЦ «Цеосит» ОИК СО РАН, применяется для переработки СГК, низкооктановых углеводородных фракций нефти (прямогонные бензины), ПНГ и другого легкого углеводородного сырья, с температурой конца кипения до 200 °С с содержанием серы до 1,5 % об. [19].

Основой технологии является процесс, сущность которого составляет каталитическая конверсия низкооктановых углеводородов в высокооктановые на цеолитосодержащих катализаторах без введения каких-либо добавок и дополнительного компаундирования.

Специально созданный эффективный цеолитный катализатор марки КН-30 типа ZSM-5 на основе экологически чистой системы не содержит благородных и тяжелых металлов. Высококремнистые синтетические цеолиты типа ZSM-5 (MFI) семейства пентансилов представляют особый практический интерес.

Цеолит ZSM-5 (MFI) нашел широкое применение в нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности благодаря свойствам своей пористой структуры, широкому диапазону отношений Si/Al, гидрофобности и высокой термической устойчивости.

Пористая структура цеолита ZSM-5 (MFI), представленная на рисунке 1.4, образована пересекающимися прямыми и синусоидальными каналами с сечением эллиптической формы с размером поперечников около 5.5 Å [20].

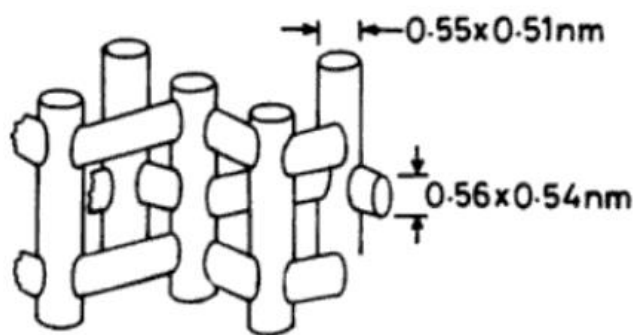


Рисунок 1.4 – Структура каналов цеолита типа ZSM-5 (MFI) [20]

К реакциям, протекающим на цеолитах типа ZSM-5 (MFI), относятся крекинг, изомеризация, перераспределение водорода, олигомеризация, ароматизация, алкилирование, диспропорционирование и другие реакции.

Процесс цеоформинга легкого углеводородного сырья различного происхождения становится все более перспективным по сравнению с традиционным каталитическим риформингом на алюмоплатиновых или полиметаллических катализаторах. Отличительной особенностью цеолитных катализаторов является то, что они созданы на основе экологически чистой высококремнезёмистой цеолитной системы, не содержат благородных металлов, поэтому они более дешевые, но при этом высокоэффективные и не чувствительны к повышенному содержанию серы в сырье.

Принципиальная технологическая схема процесса цеоформинга представлена на рисунке 1.5.

Исходное низкооктановое сырье (прямогонная бензиновая фракция нефти или СГК) с помощью насоса Н1 под давлением 1,0-1,2 МПа прокачивается через рекуперативный теплообменник Т, где нагревается за счет тепла продуктов реакции, затем в печи П1 до температуры 350 °С и в паровом состоянии поступает в трубное пространство реактора Р1 или Р2, работающих поочередно – в рабочем режиме и в режиме регенерации.

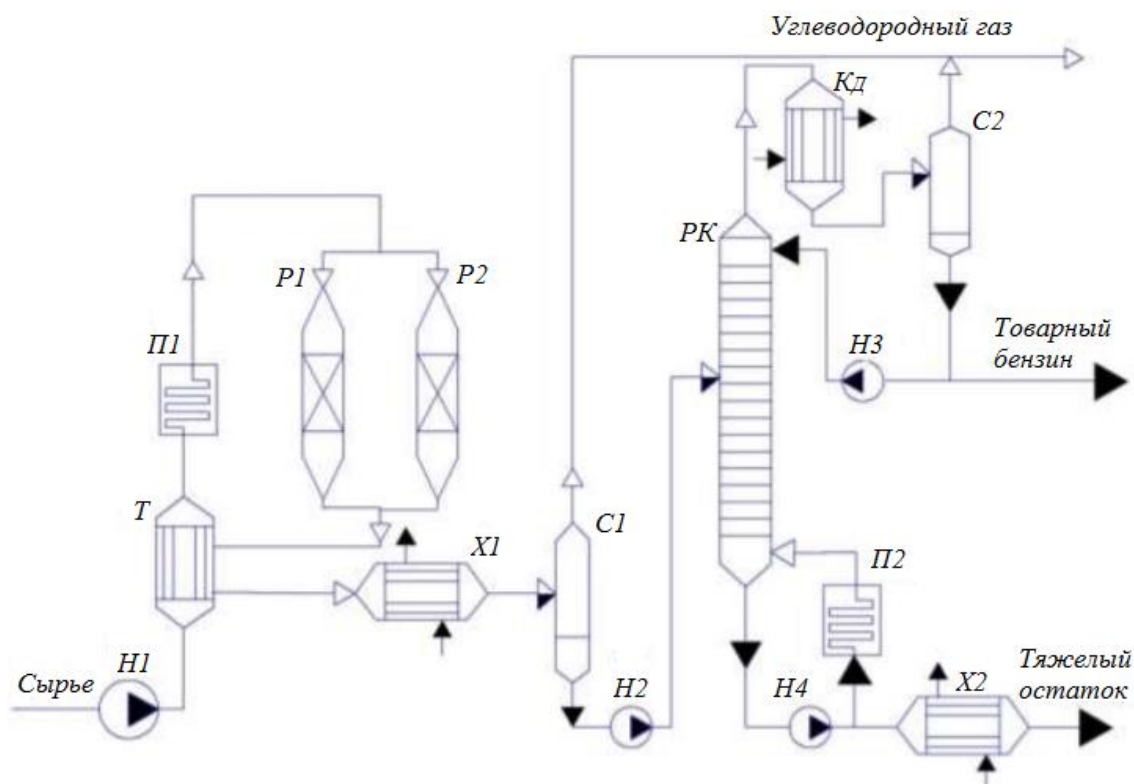


Рисунок 1.5 – Принципиальная технологическая схема процесса цеоформинг:

Н1-Н4 – насосы; Р1, Р2 – реакторы; Х1, Х2 – холодильники; С1, С2 – сепараторы;  
 П1, П2 – печи; РК – ректификационная колонна; Кд – конденсатор-холодильник

В реакторе на цеолитсодержащем катализаторе марки КН-30 происходит каталитическая конверсия низкооктановых компонентов сырья в высокооктановые и газообразные углеводороды. После реактора катализат проходит через рекуперативный теплообменник Т, холодильник Х1 и в сепараторе С1 разделяется на газ и конденсат, который с помощью насоса Н2 прокачивается в ректификационную колонну РК. В колонном узле, оборудованном конденсатором-холодильником Кд, сепаратором С2, насосами Н3 и Н4, а также печью П2 и холодильником Х2, происходит разделение катализата на товарный высокооктановый бензин, тяжелый остаток (мазуты) и газы сепарации.

В ходе процесса происходит постепенная дезактивация катализатора коксовыми отложениями, что приводит к снижению селективности процесса и к уменьшению октанового числа получаемого бензина. Для поддержания постоянного уровня активности катализатора, по мере ее падения, температуру

реакции повышают на 5-15 °С до конечной 450 °С, поддерживая состав (качество) бензина на одном уровне [22].

После 200-300 часов работы реактор переводится в режим регенерации. В период регенерации, продолжительность которого составляет 70-90 часов, для установления непрерывного режима работы производства включается параллельный реактор. Регенерация проводится обратным током смесью инертного газа и воздуха. Общий срок службы катализатора составляет 4500 ч.

### **1.3 Математическое моделирование процессов переработки легкого углеводородного сырья на цеолитных катализаторах**

Проведение экспериментальных исследований на промышленных установках на уровне, обеспечивающем надежность результатов достаточно трудоемко и затратно. Наиболее эффективным решением задач оптимизации может служить разработка адекватной математической модели на основе физико-химических закономерностей протекающих реакций с высоким прогностическим потенциалом.

Разработка математической модели процессов переработки нефти и газа включает несколько этапов. На начальном этапе построения математического описания необходимо изучить теоретические и экспериментальные закономерности процесса, а также определить групповой состав используемого сырья и получаемых продуктов. Затем необходимо выполнить термодинамический анализ предполагаемых реакций, протекающих на катализаторе. По результатам анализа сделать вывод о вероятности протекания той или иной реакции и составить формализованную схему превращений углеводородов.

Составление формализованной схемы превращений углеводородов и оценка их реакционной способности являются важным этапом развития математического описания, так как точность модельных расчетов зависит от уровня детализации механизма протекающих химических превращений.

Получение высокооктановых бензинов в процессе цеоформинга на цеолитсодержащих катализаторах марки КН-30 типа ZSM-5 включает серию последовательно-параллельных реакций кислотного-основного типа, которые протекают в соответствии с карбоний-ионным механизмом.

Превращение углеводородов происходит в две основные стадии. На первой, лимитирующей стадии данного процесса, за счёт разрыва С-С связи в парафиновых углеводородах, образуются промежуточные олефины, а на второй стадии, путем перераспределения водорода в олефинах образуются парафиновые и ароматические углеводороды [23]. В дополнение к этим фундаментальным реакциям также имеют место реакции изомеризации парафинов и нафтенов; алкилирование изопарафиновых и ароматических углеводородов промежуточными олефинами; диспропорционирование ароматических углеводородов (рисунок 1.6).

Реакции дегидрирования незначительны. Выход бензина цеоформинга с фиксированным значением октанового числа (ОЧ) во многом зависит от углеводородного состава сырья. Бензины с требуемым ОЧ могут быть получены из одного и того же сырья путем изменения температуры реакции при постоянном рабочем давлении и объемной скорости подачи сырья.

Изомеризация линейных парафинов – это термодинамически контролируемый процесс, равновесие которого зависит от температуры. Общая тенденция состоит в том, что реакции изомеризации замедляются с повышением температуры. Поэтому с термодинамической точки зрения удобно работать при минимально возможной температуре. Таким образом, роль катализатора заключается в увеличении скорости реакции, позволяя ей достичь равновесия при минимально возможной температуре.

Молекулы сероводорода и промежуточных олефинов образуются в результате разрыва связей С-S на первой стадии превращения меркаптанов, сульфидов и их производных. Затем промежуточные олефины превращаются в парафиновые и ароматические углеводороды, а сероводород отделяется вместе с побочными продуктами процесса – газами С<sub>1</sub>-С<sub>4</sub> [24].



Рисунок 1.6 – Одновременно протекающие элементарные реакции в процессе цеоформинга на катализаторе типа ZSM-5

На цеолитсодержащих катализаторах протекает большое количество последовательно-параллельных реакций превращения и синтеза углеводородов C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>. Поскольку в качестве сырья используется СГК, а полученный бензин представляет собой смесь тех же углеводородов, но разного состава, катализатор для получения высокооктанового бензина должен удовлетворять ряду требований.

Одним из основных требований является преобразование низкооктановых компонентов исходного сырья (н-парафины) в высокооктановые компоненты (изопарафиновые и ароматические углеводороды) не подвергая последних разрушению, т.е. иметь определенные свойства молекулярного сита.

Специально разработанные для этого процесса цеолитсодержащие катализаторы марки КН-30 имеют эти свойства и специфический состав активных участков. Структура пор цеолита представляет собой стерическое ограничение, и это обеспечивает цеолиту ведущую роль в избирательности химических реакций [25]:



– селективность по реагентам: только молекулы с размерами меньше критического значения могут проникать в поры и достигать активных центров. Например, линейный углеводород может адсорбироваться, а разветвленный – нет как показано на рисунке 1.7а.

– селективность продукта: только продукты определенного размера могут покидать активные центры и диффундировать по каналам, как показано на рисунке 1.7б для случая ксилола. В полостях цеолита могут образовываться три изомера, но только одна параформа может улетучиваться.

– селективность в переходном состоянии: некоторые реакции не происходят, так как переходное состояние требует больше места, чем доступно в полостях. Примером является то, что показано на рисунке 1.7в – трансалкилирование диалкилбензолов.

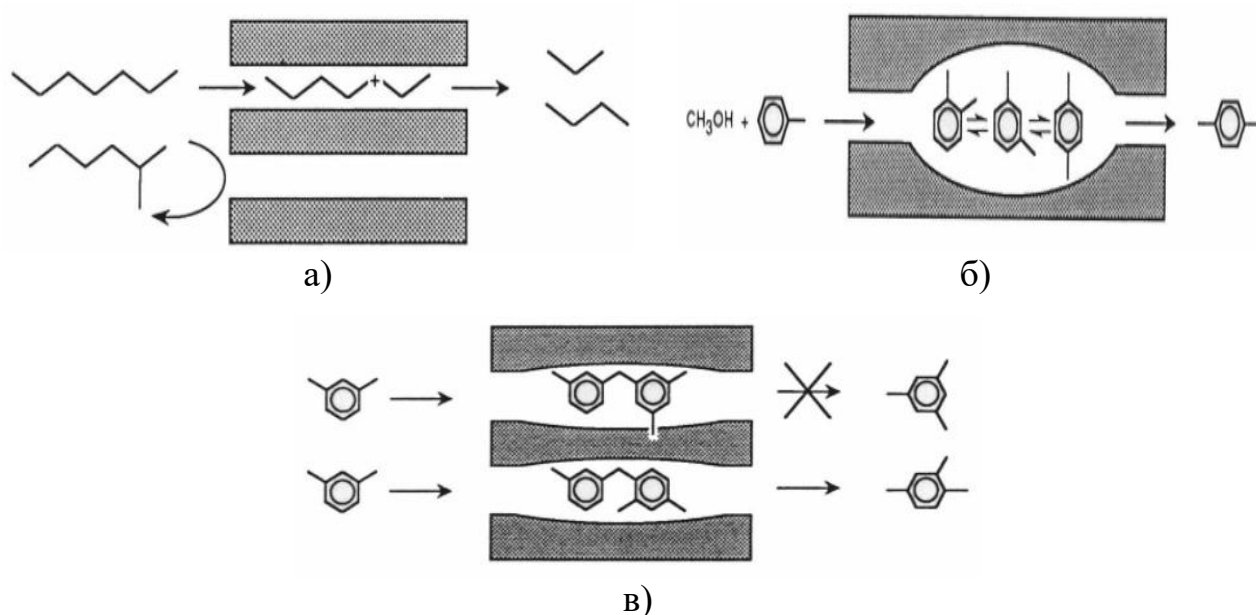


Рисунок 1.7 – Типы форма-селективного катализа [25]

В современной литературе определенное количество работ посвящено моделированию и оптимизации процесса цеоформинг.

Предложенная авторами [26] схема превращения углеводородного сырья на цеолитных катализаторах, которая представлена на рисунке 1.8, учитывает превращения парафиновых углеводородов C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub>. Однако, в бензиновых фракциях, помимо парафинов, присутствует весомое количество нафтеновых и ароматических углеводородов. Следовательно, ароматические и нафтеновые

углеводороды являются не только промежуточными продуктами, но и основными компонентами сырья.

В то же время в схеме не было учтено образование высокомолекулярных углеводородных соединений, а также легких углеводородных газов.

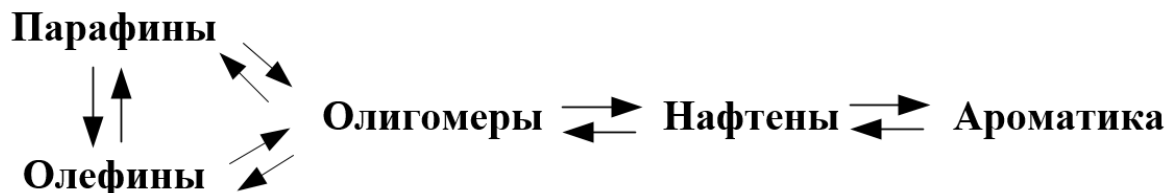


Рисунок 1.8 – Схема превращений углеводородного сырья на цеолитном катализаторе [26]

Авторы работы [27] предлагают схему превращения углеводородов на поверхности высококремнистых цеолитов, представленную на рисунке 1.9, где вместе с основными реакциями также протекают реакции алкилирования промежуточными олефиновыми фрагментами изопарафинов и ароматических углеводородов, реакции изомеризации парафинов и нафтенов, реакции диспропорционирования и изомеризации ароматических углеводородов.

В работе [28] рассматривается схема превращений агрегированных компонентов, представленная на рисунке 1.10, которая составлена исходя из технологических особенностей процесса переработки газовых конденсатов и имеющихся экспериментальных данных.

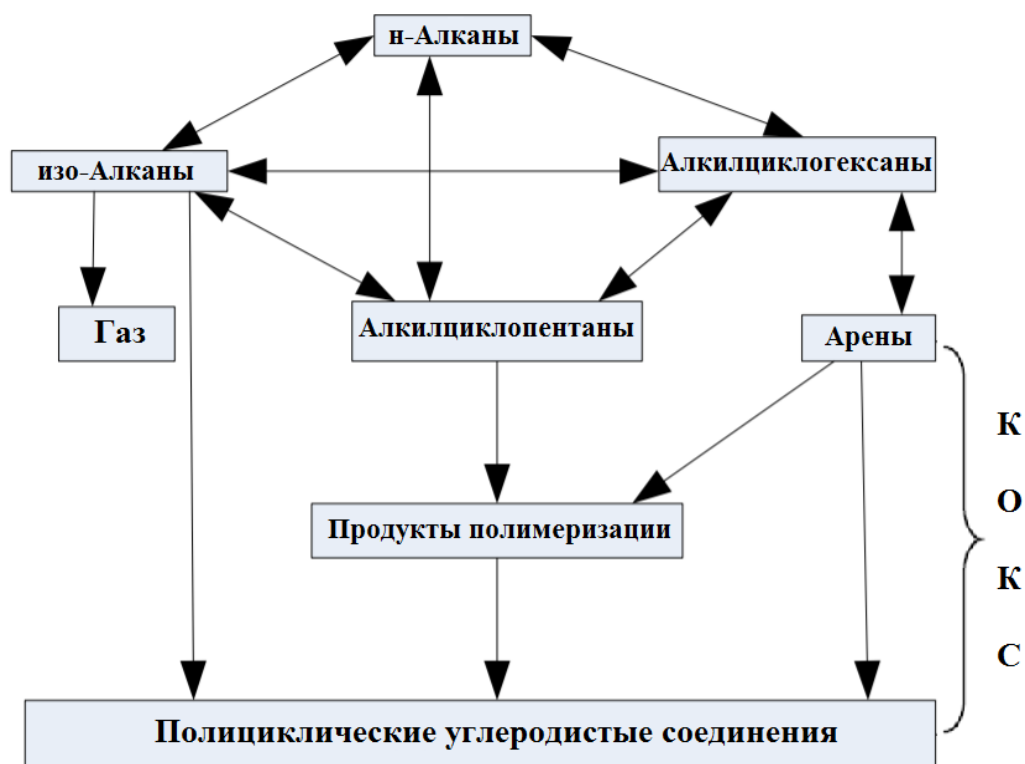


Рисунок 1.9 – Схема превращения углеводородов на цеолитных катализаторах

[27]

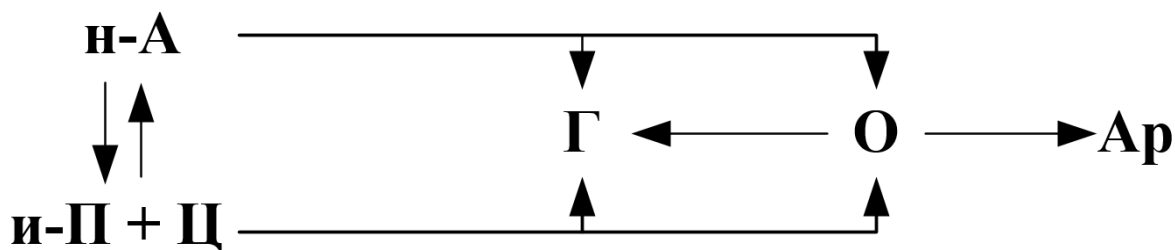


Рисунок 1.10 – Схема превращения углеводородов на цеолитных катализаторах

[28]:

н-А – н-парафины, и-П – изопарафины, Ц – циклопарафины,

Г – углеводородные газы ( $C_2-C_4$ ), О – олефины, Ар – ароматические углеводороды

Таким образом, превращение углеводородов на цеолитах представляет собой многомаршрутный процесс, состоящий из ряда последовательно-параллельных реакций. Анализ литературных источников показал отсутствие математических моделей процесса цеоформинга легкого углеводородного сырья, базирующихся на детальной, включающей превращения индивидуальных углеводородов, формализованной схеме превращений.

## 2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

### 2.1 Объект исследования

В качестве объекта исследования в работе выбраны химически чистые (ХЧ) н-пентан, н-гексан, н-гептан (парафины  $C_5-C_7$ ) и продукты их переработки на цеолитном катализаторе.

Выбор в качестве модельных реакций превращения данных углеводородов обусловлен проведенными исследованиями составов СГК, полученных с различных месторождений Западной Сибири [29]. Согласно результатам газовой хроматографии, парафиновые углеводороды в составе СГК представлены в основном углеводородами  $C_5-C_7$ , доля которых в среднем составляет от 15 до 30 % об. (Рисунок 2.1). Кроме того, парафины  $C_5-C_7$  в значительном количестве содержатся и в других типах легкого углеводородного сырья – ПНГ, прямогонных бензиновых фракциях.

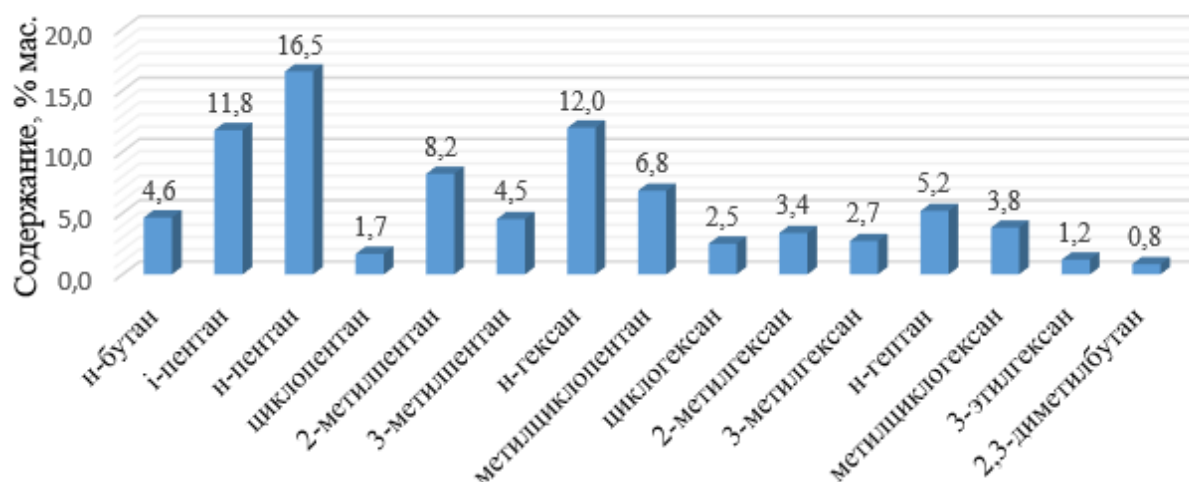


Рисунок 2.1 – Компонентный состав СГК

Также данные н-парафины способны образовывать бензол и другие ароматические соединения, содержание которых в моторном топливе на сегодняшний день строго ограничивается в соответствии с требованиями [30, 31].

С точки зрения химизма превращений н-парафинов, выбор данных углеводородов связан с числом атомов углерода в структуре соединений, так как превращениям при одних и тех же условиях проведения конверсии гораздо

легче подвергаются длинноцепочные углеводороды, являющиеся аналогом сырья промышленной установки цеоформинга.

Для реализации цеоформинга парафиновых углеводородов  $C_5-C_7$  в работе использован цеолитный катализатор структурного типа ZSM-5, марки КН-30, производства ПАО «Новосибирский завод химконцентратов» [32]. Катализатор разработан на основе экологически чистой высококремнеземистой цеолитной системы, не содержит тяжелых металлов, не обладает взрывоопасными и пирофорными свойствами, относится к малоопасным веществам. Катализатор обладает повышенной стойкостью к закоксовыванию из-за пониженной крекирующей активности за счет обедненной атомами алюминия поверхности. Цеолитный катализатор марки КН-30 нашел широкое применение в переработке углеводородного сырья широкого фракционного состава. Отработанный катализатор экологически безопасен.

Основные характеристики катализатора КН-30 представлены в Таблице 2.1.

Таблица 2.1 – Характеристики катализатора КН-30

Структурная форма (тип)	ZSM-5
Массовая доля цеолита, %	$\geq 80$
Диаметр гранул, мм	3,0-4,3
Удельная поверхность, $m^2/g$	$\geq 300$
Насыпная плотность, $g/cm^3$	0,6-0,86
Механическая прочность на раздавливание, МПа	$\geq 4,2$
Массовая доля в порошке цеолита, %:	
Оксид кремния ( $SiO_2$ )	90,0-97,6
Оксид алюминия ( $Al_2O_3$ )	1,4-2,7
Оксид натрия ( $Na_2O$ )	$\leq 0,1$
Оксид железа ( $Fe_2O_3$ )	0,35-1,25
Срок пробега до регенерации, ч	150-300

## 2.2 Лабораторная реализация цеоформинга парафинов C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>

Лабораторные испытания проводились на каталитической установке «САТАСОН». Экспериментальная установка, технологическая схема которой представлена на рисунке 2.2, позволяет проводить исследования каталитических процессов при максимальном давлении 9,0 МПа и максимальной температуре 700 °С.

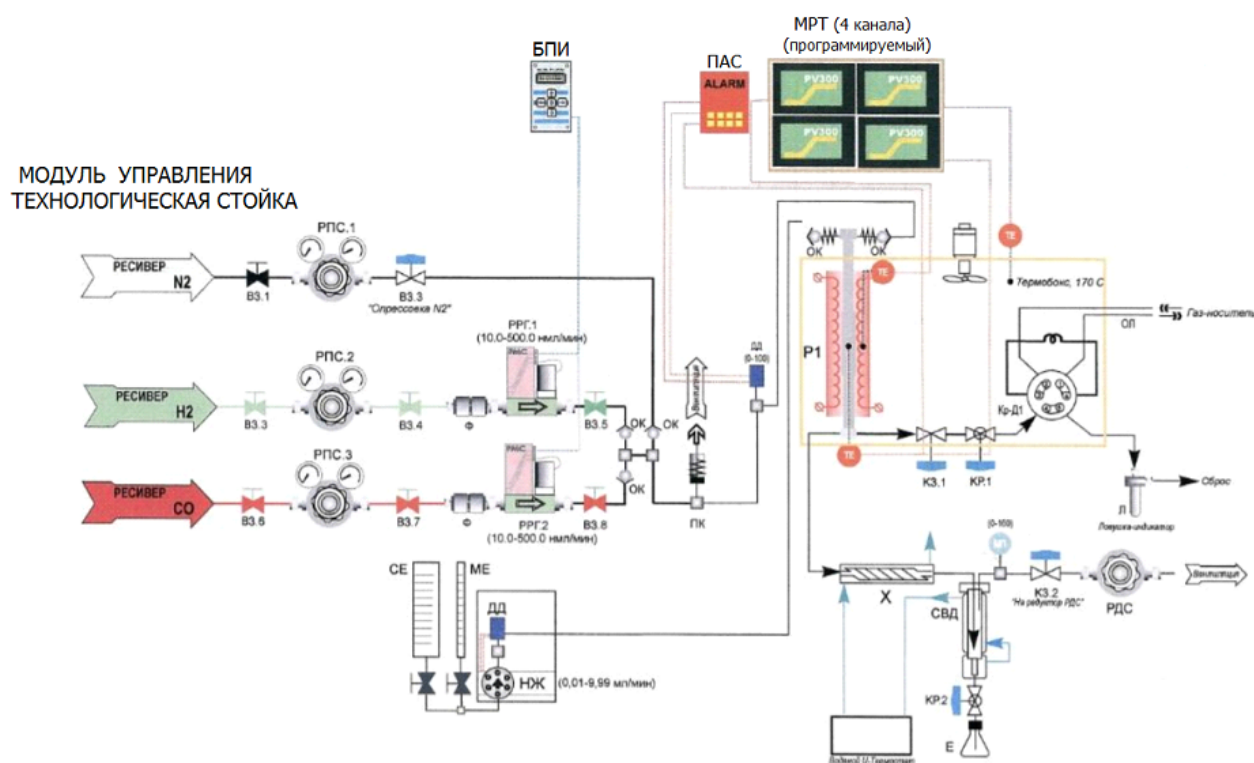


Рисунок 2.2 – Технологическая схема установки «САТАСОН»:

ВЗ – вентиль запорный; РПС – регулятор давления газа «после себя»;  
 СЕ – сырьевая емкость; МЕ – мерная емкость; НЖ – насос жидкостной дозировочный;  
 Ф – противопыльный фильтр; РРГ – регулятор расхода газа; ОК – обратный клапан;  
 М – манометр показывающий; МК – манометр контактный; ПК – предохранительный  
 клапан; ТЕ – термоэлектрический преобразователь термопара хромель-алюмель;  
 Р – реактор высокого давления; Х – трубчатый холодильник; СВД – сепаратор высокого  
 давления; КЗ – клапан запорный; КР – клапан регулирующий; МП – манометр  
 показывающий; ДД – датчик давления; Е – емкость приемная; РДС – регулятор давления  
 газа «до себя»; БПИ – блок питания/ управления/ индикации; ПАС – прибор аварийной  
 сигнализации; МРТ – микропроцессорный регулятор температуры

Для проверки системы на герметичность, удаления остаточных соединений и разбавления реакционной смеси используется инертный газ – азот или аргон. Азот (аргон) подается из баллона, и с помощью ручки регулятора давления РПС.1 устанавливается необходимое давление, которое контролируется манометрами, расположенными в корпусе регулятора, а затем через запорный вентиль ВЗ.3 («Опрессовка N<sub>2</sub>») подается в систему реактора.

Для обеспечения безопасности проведения процесса, линии подачи газов оснащены цифровым датчиком давления ДД, в котором предусмотрено ограничение по верхнему и нижнему пределу давления, при достижении значений которых подача газа прекращается.

В случае какой-либо нештатной ситуации на установке, прибор аварийной сигнализации ПАС отключает подачу электроэнергии на установку, а регуляторы расхода газа РРГ.1,2 перекрывают подачу газов, тем самым предотвращая аварийную ситуацию. Пружинный предохранительный клапан ПК необходим для предотвращения аварийной ситуации при условии, когда давление в системе реактора превышает 10 МПа.

Сырье подается в реактор жидкостным насосом НЖ из сырьевой СЕ или мерной МЕ емкостей.

Реакторный блок состоит из реактора, электропечи и системы обратных клапанов. Реактор представляет собой цилиндр из нержавеющей стали, с внутренним диаметром 12 мм, снабженный нагревательным элементом, позволяющим поддерживать температуру по всей длине реактора с погрешностью  $\pm 5$  °С, а также термопарами для контроля и регулирования, которые расположены в слое катализатора и в печи реактора соответственно.

Блок разделения продуктов состоит из прямоточного холодильника и сепаратора высокого давления. Продукты процесса на выходе из реактора охлаждаются в трубчатом холодильнике Х и разделяются на газовую и жидкую фазы в сепараторе высокого давления СВД, откуда конденсат сливается через регулирующий клапан КР.2 в приемник конденсата Е, а газовые продукты

выходят через боковой штуцер, клапан запорный КЗ.2, редуктор обратного давления РДС в вытяжную вентиляцию и в систему аналитического контроля.

Технические характеристики каталитической установки «САТАСОН» представлены в таблице 2.2.

Таблица 2.2 – Технические характеристики каталитической установки «САТАСОН»

Наименование параметра	Особенности
Тип реактора	проточный
Максимальное рабочее давление на установке, МПа	9
Диапазон температур реактора, °С	50-700
Размер зерен катализатора, мм	0,5-2,0
Внутренний диаметр реактора, мм	12,0
Максимальный объем загружаемого катализатора, см <sup>3</sup>	7,0
Диапазон регулирования расходов по водороду, н.мл/мин	10-500
Диапазон регулирования расходов по жидкости, н.мл/мин	0,01-9,99
Напряжение питания, В	220

Основным технологическим узлом установки является реактор с печью. В данной установке смонтирован специальный проточный реактор, позволяющий работать при повышенных давлениях, с навесками катализатора до 5,0 см<sup>3</sup>. Конструкция реактора представлена на рисунке 2.3.



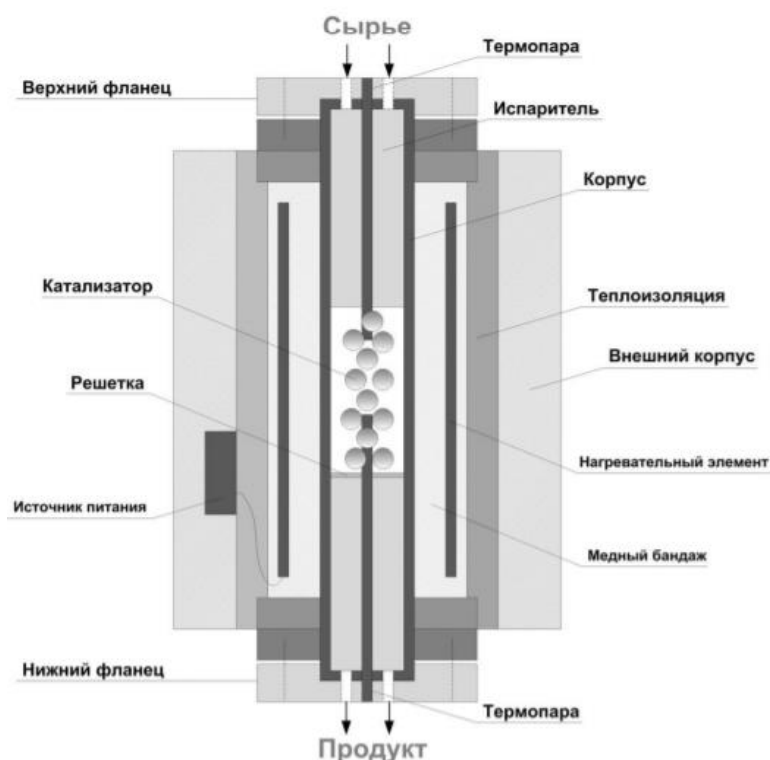


Рисунок 2.3 – Конструкция проточного реактора установки «САТАСОН»

Верхняя секция корпуса реактора используется для предварительного нагрева, испарения и подготовки исходной реакционной смеси. Для лучшей теплопередачи от стенки реактора к сырью в испарителе предусмотрены специальные каналы, которые увеличивают поверхность теплообмена для испарения, нагрева и смешения исходных реагентов. Катализатор размещается в средней зоне реактора. Катализатор загружается через верхний фланец реактора, а выгружается через нижний фланец.

В ходе работы осуществлялась переработка н-пентана, н-гексана и н-гептана. Для этого в реактор лабораторной каталитической установки был загружен цеолитный катализатор марки КН-30, объемом 10 см<sup>3</sup>. На этапе предварительной подготовки катализатор был подвергнут измельчению в ступке и просеян через сита для отбора фракции 0,5-1,0 мм.

После этапа измельчения до нужного размера «свежий» катализатор загружался в реактор. Следующим подготовительным этапом являлась активация катализатора, необходимая для удаления адсорбированной влаги и органических веществ с поверхности катализатора. В ходе активации,

катализатор КН-30 прокаливался в течении восьми часов при температуре 500 °С в токе азотовоздушной смеси.

Испытания осуществлялись при следующих технологических параметрах (таблица 2.3.)

Таблица 2.3 – Технологические параметры реализации процесса цеоформинга легкого углеводородного сырья на лабораторной каталитической установке

Испытание	Температура, °С	Давление, МПа	Расход, мл/мин
1	375	0,25	0,33
2	400		
3	425		

Углеводородный состав полученных продуктов определяли методом газожидкостной хроматографии на хроматографе Хроматэк-Кристалл 5000 (ЗАО СКБ «ХРОМАТЭК» с кварцевой капиллярной колонкой 25 м × 0,22 мм, стационарная фаза – SE-54, газ-носитель – гелий), согласно методике, представленной в [33].

## **2.3 Методы исследования**

### **2.3.1 Методика проведения квантово-химических расчетов с помощью программного пакета Gaussian**

Программный пакет Gaussian предназначен для расчета структуры и свойств молекулярных систем в газофазном и конденсированном состоянии, включающий большое разнообразие методов вычислительной химии, квантовой химии, молекулярного моделирования.

Gaussian – это универсальный пакет электронной структуры для использования в вычислительной химии. С помощью сложных вычислений он может предсказывать энергии, молекулярные структуры, частоты колебаний молекул и переходных состояний, ИК- и рамановские спектры, термодимические свойства, энергии связи и реакций, пути реакций, молекулярные орбитали, заряды атомов и другие молекулярные свойства [34].

Именно поэтому Gaussian ценен, т.к. химия имеет дело с мелкомасштабными частицами, которые не всегда можно наблюдать экспериментально.

GaussView 5.0 [35] – это графический пользовательский интерфейс, используемый для построения молекул, чтобы лучше понять их структуру и предназначенный для использования Gaussian, чтобы сделать вычисления проще, быстрее и эффективнее.

В качестве метода расчета выбран неэмпирический метод DFT – Density Functional Theory (теория функционала плотности). Теоретическим приближением являлась модель B3LYP (теория функционала плотности Беке (B3), использующая электронную корреляцию Ли Янга и Пара (LYP)), базис 3-21G.

Основное преимущество выбранного метода перед другими неэмпирическими методами состоит в том, что модели DFT учитывают эффект электронной корреляции, т.е. тот факт, что электроны в молекуле отталкиваются друг от друга в результате взаимодействий. Также преимуществом неэмпирических методов перед полуэмпирическими является более высокая точность расчетов без каких-либо ограничений путем применения систематических приближений, что приводит к эффективным вычислительным схемам, которые на несколько порядков быстрее [36].

Для оценки термодинамических характеристик реакций цеоформинга n-парафинов C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub> были применены квантово-химические методы расчета. Расчет термодинамических характеристик осуществлялся по следующему алгоритму:

- 1) Запустить программу Gaussian, после чего на экране появляется главное окно программы. Рабочее окно программы представлено на рисунке 2.4.

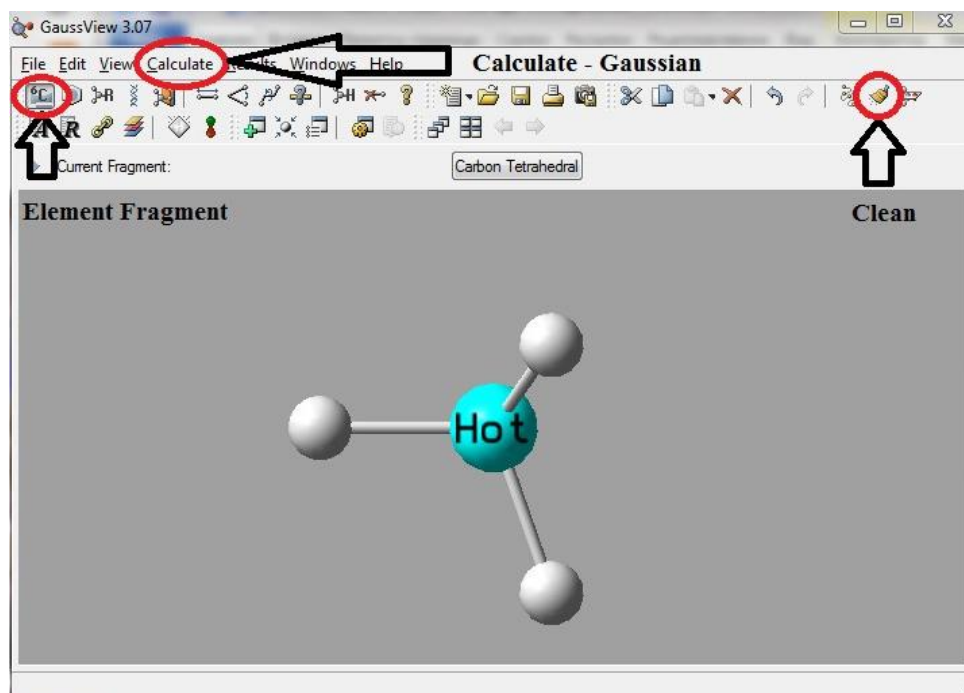


Рисунок 2.4 – Рабочее окно программы Gaussian

Выбираем необходимый элемент и в окне «G1:M1:V1-New» рисуем структуру молекулы. При нажатии кнопки «Clean» на панели инструментов структура молекулы оптимизируется.

2) На панели инструментов нажимаем кнопку «Calculate» и в открывшейся вкладке выбираем строку «Gaussian Calculation Setup», далее задаем входные параметры задачи.

В открывшемся окне «G1:M1:V1-Gaussian Calculation Setup» во вкладке «Job Type» (тип работы) выбираем тип вычислений «Opt+Freq» (Opt – означает, что необходимо провести оптимизацию конфигурации молекулы, Freq – означает требование расчета инфракрасных и рамановских спектров и т.п.). Рабочее окно «G1:M1:V1-Gaussian Calculation Setup» представлено на рисунке 2.5.

3) Во вкладке «Method» выбираем метод вычислений «DFT» и «B3LYP». В строке «Additional Keywords» задаем значения температуры (K) и давления (атм.). При нажатии клавиши «Submit» в открывшемся окне выбираем кнопку «Save», далее вводим имя файла на английском языке, в строке «Save as» выбрать «Gaussian Input File». Нажимаем «Save».

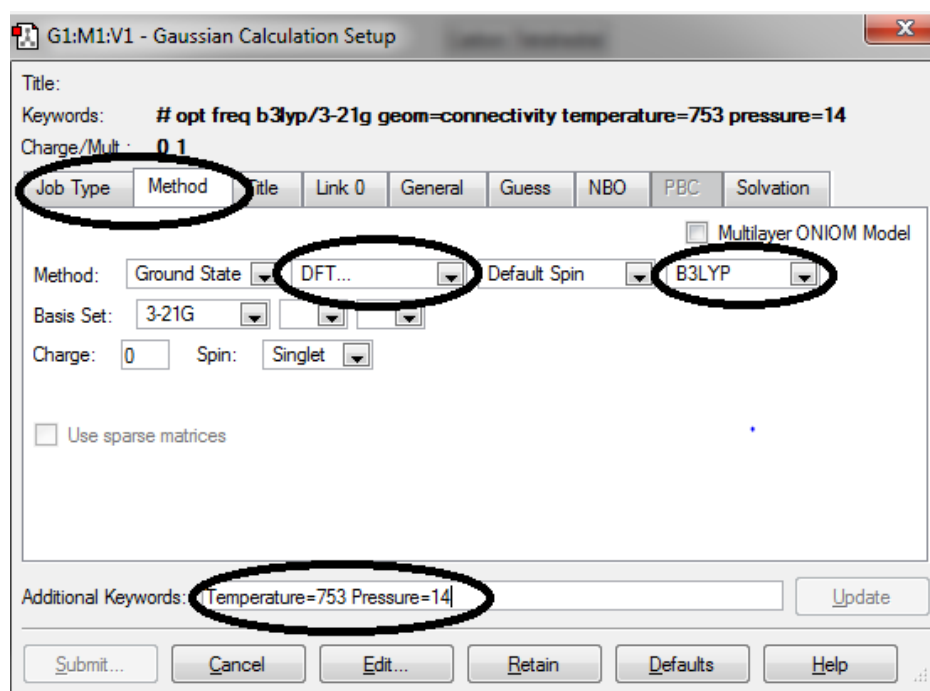


Рисунок 2.5 – Рабочее окно «G1:M1:V1-Gaussian Calculation Setup»

4) После сохранения файла появится окно «Run Gaussian». Нажав кнопку «Ок», запустится программа Gaussian 09 Revision-A.02-SMP (рисунок 2.6).

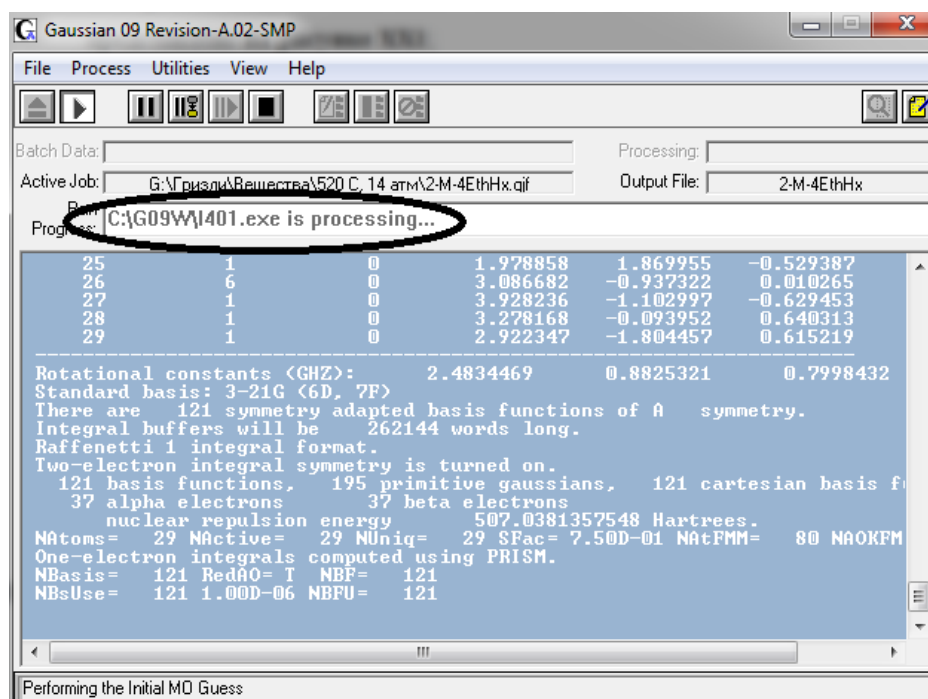


Рисунок 2.6 – Рабочее окно программы Gaussian 09 Revision-A.02-SMP

Начинается расчет молекулы. Время расчета зависит от сложности строения молекулы, «...is processing» означает, что расчет идет.

Фразы «Processing Complete» и «Finalizing Calculation and Output» означают, что расчет окончен. Появится окно «Gaussian 09», где необходимо нажать «Да», возвращаемся в программу Gaussian View, где в появившемся окне «Gaussian Job» необходимо нажать «No».

5) Далее в папке, где сохранен Gaussian Input File, необходимо найти файл с результатами Gaussian Output File «Название файла» и открыть его с помощью программы «Блокнот». Рабочее окно Gaussian Output File в программе «Блокнот» представлено на рисунке 2.7.

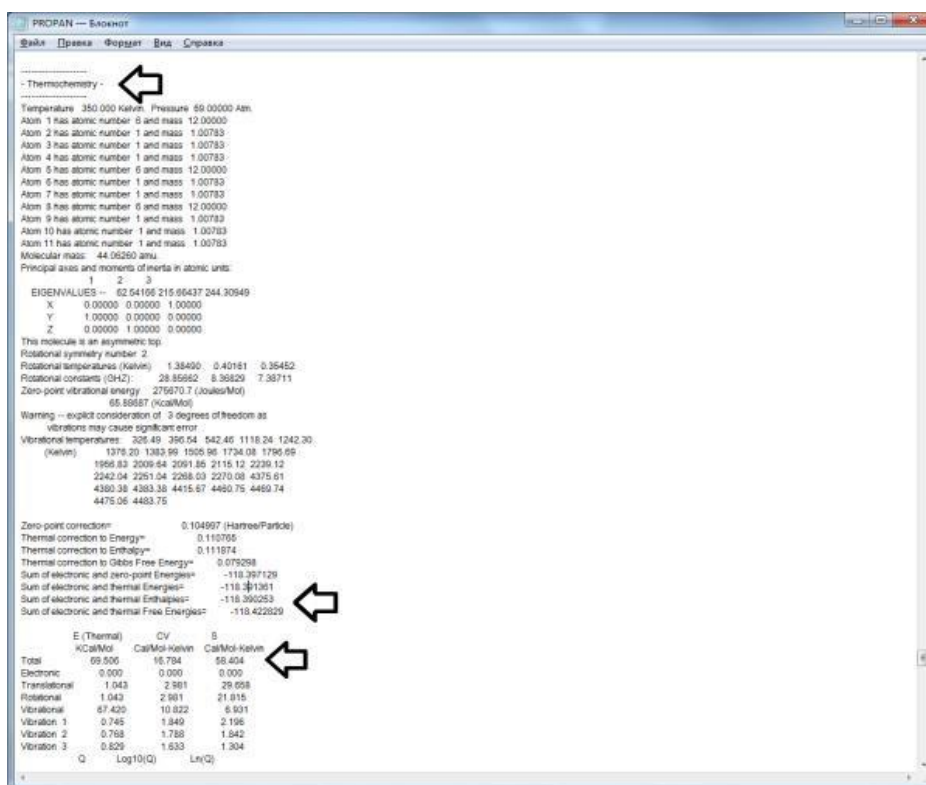


Рисунок 2.7 – Рабочее окно Gaussian Output File в программе «Блокнот»

В текущем файле найти раздел «Thermochemistry». В данном разделе найти необходимые значения:

- Sum of electronic and thermal Enthalpies (Энтальпия ( $H$ ), единица измерения: Хартри-Фок);
- Sum of electronic and thermal Free Energies (Энергия Гиббса ( $G$ ), единица измерения: Хартри-Фок);
- $S$ , Cal/Mol-Kelvin (Total) (Энтропия ( $S$ ), единица измерения: кал/(моль·К)).

б) Расчет термодинамических параметров продолжаем в программе Microsoft Excel. Чтобы перевести Хартри-Фок в кДж/моль, нужно число (в Хартри-Фок) умножить на 2626,71. Чтобы перевести кал/(моль·К) в Дж/(моль·К) нужно число (в кал/(моль·К)) умножить на 4,19. Рабочее окно программы Microsoft Excel представлено на рисунке 2.8.

№	Реакция	T, K	P, атм	ΔH, кДж/моль	ΔS, кДж/моль·К	ΔG, кДж/моль	
21	Реакция	2626,713					
22	4 н-СВН14+С2Н6+н-бутен-2			71,74	148,07	-24,21	
23							
24							
25							
26							
27	Реакция	2626,713	2,5 атм				
28	3 н-СВН14+С2Н6+С3Н6			82,76	159,39	-20,51	
29							
30							
31							
32							
33	Реакция	2626,713	2,5 атм				
34	6 н-СВН14+СН10+С2Н4			95,52	145,41	1,29	
35							
36							
37							
38	<b>673К (400°С)</b>						
39	Реакция	673 К	2,5 атм				
40	1 н-СВН14+СН4+пентен-1			70,47	143,65	-20,20	
41							
42							
43							
44							
45	Реакция	673 К	2,5 атм				
46	2 н-СВН14+СН4+пентен-2			65,39	146,65	-33,30	
47							
48							
49							
50							
51							
52	Реакция	673 К	2,5 атм				
53	3 н-СВН14+С2Н6+н-бутен-1			83,69	151,41	-18,21	
54							
55							
56							

Рисунок 2.8 – Рабочее окно программы Microsoft Excel

Расчет величин изменения энтальпии ( $\Delta H$ ), энтропии ( $\Delta S$ ) и энергии Гиббса ( $\Delta G$ ) в ходе реакции проводим по следующим формулам:

$$\Delta H = \left( \sum H_{\text{продуктов}} - \sum H_{\text{реагентов}} \right) * 2626,71 \quad [\text{кДж/моль}] \quad (2.1)$$

$$\Delta S = \left( \sum S_{\text{продуктов}} - \sum S_{\text{реагентов}} \right) * 4,19 \quad [\text{Дж/моль} \cdot \text{К}] \quad (2.2)$$

$$\Delta G = (\Delta H * 1000 - T * \Delta S) / 1000 \quad [\text{кДж/моль}] \quad (2.3)$$

### 2.3.2 Методика расчета предэкспоненциальных множителей

Термодинамический анализ позволяет прогнозировать компонентный состав и рассчитывать равновесные концентрации компонентов в продуктах реакций в зависимости от условий проведения каталитического процесса. Однако, компонентный состав и концентрации продуктов химических реакций

в реальных промышленных процессах не всегда совпадают с результатами термодинамических расчетов.

При математическом моделировании принято пользоваться кинетическими закономерностями химических реакций. На основе термодинамического анализа устанавливается в целом наиболее благоприятная, с точки зрения выхода целевого продукта, область протекания химических реакций. Химическая же кинетика позволяет в термодинамически разрешенной области рассчитать кинетические концентрации продуктов реакций для оптимизации технологических параметров процесса [37].

Термодинамика принимает во внимание только условия равновесия системы и ничего не говорит о скорости, с которой это равновесие достигается. Даже реакции со значительным отрицательным изменением энергии Гиббса могут протекать исключительно медленно. Поэтому наряду с термодинамическим анализом возможных стадий при формализации схемы реакций учитывается механизм и кинетика химических превращений.

Для лучшего описания механизма химических реакций, протекающих на поверхности цеолитного катализатора, проведена кинетическая обработка полученных результатов термодинамических расчетов ( $\Delta H$ ,  $\Delta S$ ,  $\Delta G$ ). В основе кинетических расчетов использована математическая модель превращения реагента в реакторе проточного типа.

Расчет первичного набора предэкспоненциальных множителей производили по формуле (2.4) при этом использовалось положение о том, что предэкспоненциальный множитель является функцией изменения энтропии при образовании промежуточного соединения [38]:

$$k_0 = \chi \cdot \frac{k_B \cdot T}{h} \cdot e^{\frac{\Delta S^\ddagger}{R}} \quad (2.4)$$

где  $\chi$  – трансмиссионный коэффициент, который принимается равным единице (допущение);  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К – постоянная Больцмана;  $T = 648$  К – значение температуры, при которых осуществляли расчет;  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – постоянная Планка;  $R = 8,314$  Дж/(моль·К) – универсальная газовая постоянная;



$\Delta S^\ddagger$  – изменение энтропии при образовании промежуточного соединения (в качестве допущения используется энтропия реакции).

Это выражение связано с приближением теории столкновений, в которой  $k_0$  обуславливается числом столкновений в газе, а столкновения приводят к уменьшению энтропии, поскольку при столкновении происходит объединение двух частиц и поэтому уменьшается неупорядоченность системы.

## **5 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ**

Перспективность научного исследования определяется коммерческой ценностью разработки, что является необходимым условием при поиске источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов.

В настоящее время в связи с ростом спроса на нефтепродукты высокого качества и ужесточением экологических требований к высокооктановым бензинам с повышенным содержанием изоалканов и ограниченным содержанием ароматических углеводородов, особое внимание уделяется совершенствованию технологий по переработки легкого углеводородного сырья и разработке более эффективных многокомпонентных систем, обеспечивающих получение моторных топлив оптимального состава. К таким процессам можно отнести цеоформинг – процесс переработки легкого углеводородного сырья (стабильный газовый конденсат, попутный нефтяной газ, прямогонные бензиновые фракции) на цеолитсодержащих катализаторах.

Цель исследования состоит в разработке математической модели, путем установления взаимосвязи между составом, физико-химическими свойствами высококремнистых цеолитов и термодинамическими закономерностями реакций углеводородов, протекающих на их поверхности.

Исследование имеет достаточно высокий коммерческий потенциал и является ресурсосберегающей технологией. Использование газового конденсата при производстве автомобильных бензинов увеличивает сырьевую базу производства и позволяет эффективно утилизировать газовый конденсат.

Поэтому целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является обоснование целесообразности разработки модели процесса, которая будет отвечать требованиям ресурсоэффективности.

## 5.1 Предпроектный анализ

### 5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Каждое предприятие стремится с минимальными затратами получить как можно больше автомобильного бензина, отвечающего современным требованиям.

В связи с этим, целевым рынком для результатов исследования будут Российские НПЗ. Сегментируем рынок услуг по разработке оптимального процесса по следующим критериям: размер НПЗ и вид продукции, на который направлена его деятельность. Карта сегментирования представлена на рисунке 5.1.

		Вид целевой продукции		
		Бензин	Дизель	Сжиженный газ
Размер компании	Крупные			
	Средние			
	Мелкие			

Рисунок 5.1 – Карта сегментирования рынка услуг по разработке оптимального процесса облагораживания бензинов:

ОАО «ТомскНИПИнефть»	ООО «Томскнефтепроект»	ООО «ТюменНИИгипрогаз»

В результате сегментирования выявили, что основными сегментами рынка являются НПЗ среднего и мелкого размера, основная деятельность которых направлена на производство бензина, а также крупные и средние предприятия, которые производят дизельное топливо и сжиженный газ соответственно.

Поскольку особенности процесса цеоформинг обуславливают существенное уменьшение, по сравнению с известными процессами, капитальных затрат (до 30-50 %) и эксплуатационных расходов (до 30-40 %) и позволяют создавать рентабельные производства моторных топлив мощностью,

начиная с пяти тысяч тонн в год и выше [40], то основной сегмент рынка, на который мы будем ориентироваться – это НПЗ средней и малой мощности, производящие преимущественно бензин. В будущем же станет актуален вопрос применения данной разработки и для крупных НПЗ.

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

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения. Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты, которая приведена в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>
1	2	3	4	5	6	7	8
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>							
1. Повышение производительности труда пользователя	0,05	5	3	3	0,25	0,15	0,15
2. Удобство в эксплуатации	0,05	5	4	4	0,25	0,20	0,20
3. Качество продукта	0,10	5	4	3	0,50	0,40	0,30
4. Энергоэкономичность	0,15	5	4	4	0,75	0,60	0,60
5. Надежность	0,10	4	4	4	0,40	0,40	0,40
6. Простота эксплуатации	0,10	5	4	4	0,50	0,40	0,40
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>							
1. Конкурентоспособность продукта	0,10	5	4	4	0,50	0,40	0,40
2. Уровень проникновения на рынок	0,10	4	4	4	0,40	0,40	0,40
3. Цена	0,15	5	3	2	0,75	0,45	0,30
4. Срок выхода на рынок	0,05	4	4	4	0,20	0,20	0,20
5. Наличие сертификации разработки	0,05	5	5	5	0,25	0,25	0,25
<b>Итого</b>	<b>1</b>	<b>52</b>	<b>43</b>	<b>41</b>	<b>4,75</b>	<b>3,85</b>	<b>3,60</b>

Согласно оценочной карте для сравнения конкурентных технических решений, продукт является достаточно конкурентоспособным. К конкурентным преимуществам можно отнести цену, энергоэкономичность и простоту в

эксплуатации. К основным недостаткам можно отнести уровень проникновения на рынок и срок выхода продукта на рынок.

### 5.1.3 SWOT-анализ

SWOT – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта (Таблица 5.2). Применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта. Анализ проводится в три этапа.

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.

Таблица 5.2 – Матрица SWOT-анализа

<p style="text-align: center;"><b>Сильные стороны</b></p> <p>С1. Низкая цена проекта. С2. Отсутствие аналогичных математических моделей по процессу. С3. Наличие бюджетного финансирования С4. Эффективное использование топливно-энергетических ресурсов.</p>	<p style="text-align: center;"><b>Слабые стороны</b></p> <p>Сл1. Отсутствие необходимого оборудования для построения лабораторной установки. Сл2. Отсутствие прототипа научной разработки. Сл3. Погрешность методов анализа Сл4. Для реализации исследования необходимо привлечение большого массива информации</p>
<p style="text-align: center;"><b>Возможности</b></p> <p>В1. Расширение сферы участия в проектах, реализуемых в рамках программ ТПУ В2. Появление дополнительного спроса на исследования В3. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ. В4. Внедрение на Российский НПЗ процесса и соответственно повышение спроса на разрабатываемую модель.</p>	<p style="text-align: center;"><b>Угрозы</b></p> <p>У1. Создание подобной модели на рынке в более быстрые сроки У2. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства У3. Отсутствие спроса на новые технологии. У4. Внедрение других моделей на предприятия отечественных НПЗ</p>

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

Интерактивная матрица проекта представлена в таблице 5.3. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-».

Таблица 5.3 – Интерактивная матрица проекта

Возможности проекта	Сильные стороны проекта				
		С1	С2	С3	С4
	В1	0	+	+	+
	В2	+	+	+	+
	В3	+	+	+	0
	В4	-	-	+	0
	Слабые стороны проекта				
		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	В1	+	-	0	+
	В2	+	+	0	+
	В3	-	-	+	-
В4	-	-	-	0	
Угрозы	Сильные стороны проекта				
		С1	С2	С3	С4
	У1	+	-	+	+
	У2	+	-	+	+
	У3	-	-	-	-
	У4	0	-	-	+
	Слабые стороны проекта				
		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	У1	+	+	+	+
	У2	+	+	+	-
	У3	-	+	0	-
У4	+	+	-	-	

В рамках третьего этапа составлена итоговая матрица SWOT-анализа (Таблица 5.4).

Таблица 5.4 –SWOT-анализ

	<p><b>Сильные стороны</b></p> <p>С1. Низкая цена проекта.</p> <p>С2. Отсутствие аналогичных математических моделей по процессу.</p> <p>С3.Наличие бюджетного финансирования</p> <p>С4. Эффективное использование топливно-энергетических ресурсов.</p>	<p><b>Слабые стороны</b></p> <p>Сл1. Отсутствие необходимого оборудования для построения лабораторной установки.</p> <p>Сл2. Отсутствие прототипа научной разработки.</p> <p>Сл3. Погрешность методов анализа</p> <p>Сл4. Для реализации исследования необходимо привлечение большого массива информации</p>
--	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

#### Продолжение таблицы 5.4

<p><b>Возможности</b></p> <p>В1. Расширение сферы участия в проектах, реализуемых в рамках программ ТПУ</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса на исследования</p> <p>В3. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ.</p> <p>В4. Внедрение на Российский НПЗ процесса и соответственно повышение спроса на разрабатываемую модель.</p>	<p>Введение метода в вузы для обучения;</p> <p>Быстрое продвижение исследования в связи с преимуществами данного исследования;</p> <p>Дополнительный спрос может появиться за счет универсальности исследования.</p>	<p>По причине долгого срока разработки модели в связи с поставками необходимых для исследований материалов, возможно отставание от конкурентов с последующим падением спроса на продукцию.</p>
<p><b>Угрозы</b></p> <p>У1. Создание подобной модели на рынке в более быстрые сроки</p> <p>У2. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства</p> <p>У3. Отсутствие спроса на новые технологии.</p> <p>У4. Внедрение других моделей на предприятия отечественных НПЗ</p>	<p>Экологичность выбранной технологии, а также низкая по стоимости технология производства, способны ослабить влияние этих угроз.</p>	<p>Из-за относительной длительности проведения эксперимента могут возникнуть проблемы с продвижением данного исследования.</p>

#### 5.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

В данном разделе была оценена степень готовности научной разработки к коммерциализации и определен уровень собственных знаний для ее проведения. Для этого была составлена таблица, содержащая показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта. Перечень вопросов приведен в таблице 5.5.

Таблица 5.5 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1	Определен имеющийся научно-технический задел	5	4

Продолжение Таблицы 5.5

2	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	5	4
3	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	5
4	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	5
5	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	3
6	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	3	3
7	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	4
8	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	2
9	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	4	4
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	5	5
11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	2
12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	1	1
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	3	3
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	3	2
15	Проработан механизм реализации научного проекта	4	4
<b>ИТОГО БАЛЛОВ</b>		<b>56</b>	<b>51</b>

Поскольку значение получилось от 56 до 51, то перспективность проекта можно считать выше средней. Для увеличения уровня перспективности необходимо, в первую очередь, проработать вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок, а также вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот, для этого возможно необходимо привлечь сторонних специалистов.



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

Задачей данного раздела магистерской диссертации является выбор метода коммерциализации объекта исследования и обоснование его целесообразности.

Для разработанной модели превращений углеводов на цеолитах методом коммерциализации был выбран инжиниринг.

Инжиниринг выделяют как самостоятельный вид коммерческих операций, который предполагает предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной (консультант), другой стороне (заказчику), комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг, связанных с проектированием и вводом объекта в эксплуатацию, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика, усовершенствованием имеющихся производственных процессов вплоть до внедрения изделия в производство и даже сбыта продукции [41].

Данный вид коммерциализации поможет в продвижении продукта на рынок товаров и услуг, и в случае успеха у одних, другие компании и организации могут заинтересоваться произведенной продукцией, тем самым возможно расширение рынка потребителей.

### **5.2 Инициация проекта**

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или новой фазы уже существующего. В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать между собой и влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в Уставе проекта магистерской диссертации, и он должен иметь следующую структуру:

1) Цели и результаты проекта – привести информацию о заинтересованных лицах проекта (Таблица 5.6), а также иерархию целей проекта и критерии достижения целей (Таблица 5.7).

Таблица 5.6 – Заинтересованные стороны проекта

<b>Заинтересованные стороны проекта</b>	<b>Ожидания заинтересованных сторон</b>
Научное объединение направления (студенты, магистранты, аспиранты, преподаватели)	Освоение принципиально новой (для научной группы) области исследования; Коммерческое продвижение проекта; Развитие и укрепление связей с отраслью промышленности (производственные компании, заводы) в области совместных научных разработок.
Представители промышленности (компании, заводы)	Получение проекта, способствующего оптимизации, энерго- и ресурсосбережению действующего производства; Развитие и укрепление связей с научным объединением (университет) в области совместных научных разработок.
Университет, к которому относится научное объединение	Продвижение статуса учебного заведения, повышение научного престижа.
Научные объединения сторонние (конкурирующие)	Опасения в связи с появлением конкурентоспособного проекта.

Таблица 5.7 – Цели и результат проекта

<b>Цели проекта:</b>	Разработка математической модели процесса цеоформинг для переработки легкого углеводородного сырья на цеолитных катализаторах.
<b>Ожидаемые результаты проекта:</b>	Получение результатов по работе с математической моделью.
<b>Критерии приемки результата проекта:</b>	Адекватность полученных результатов. Универсальность.
<b>Требования к результату проекта:</b>	<b>Требование:</b>
	Максимальное соответствие критериям приемки результата проекта.
	Стандартизация готового продукта.

2) Организационная структура проекта отражает состав рабочей группы, роль каждого участника, функции и трудозатраты в проекте (Таблица 5.8).

Таблица 5.8 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, час (за 1 год)
1	Киргина М.В. Доцент ОХИ ИШПР	Руководитель проекта	Разработка линейного графика выполнения работ. Консультирование, контроль выполнения индивидуального плана магистерской диссертации.	87
2	Марданов К.Э. магистрант ОХИ ИШПР	Исполнитель по проекту	Сбор и анализ литературных данных, составление и организация этапов текущей работы, выполнение научной работы.	264
3	Рыжакина Т.Г. Доцент ОСГН ШБИП	Эксперт проекта	Консультант ЭЧ	36
4	Пашков Е.Н. Доцент ООТД ШБИП	Эксперт проекта	Консультант СО	23
<b>ИТОГО:</b>				<b>410</b>

3) Ограничения и допущения проекта (Таблица 5.9).

Таблица 5.9 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
Бюджет проекта	2919572,2 руб.
Источник финансирования	НИ ТПУ
Сроки проекта	01.09.2020 – 31.05.2021
Дата утверждения плана управления проектом	01.09.2020
Дата завершения проекта	31.05.2021

## 5.3 Планирование управления научно-техническим проектом

### 5.3.1 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта (Рисунок 5.2).



Рисунок 5.2 – Иерархическая структура работ

### 5.3.2 Контрольные события проекта

В рамках данного раздела необходимо определить ключевые события проекта, определить их даты и результаты, которые должны быть получены по состоянию на эти даты (Таблица 5.10).

Таблица 5.10 – Контрольные события проекта

№ п/п	Контрольное событие	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Составление и утверждение технического задания	05.09.2020	Бланк заданий на выполнение магистерской диссертации
2	Проведение литературного обзора, изучение материалов	09.12.2020	Литературный обзор
3	Формирование и расчет математической модели	12.02.2021	Расчетная часть
4	Обсуждение результатов и выводов по проделанной работе	02.03.2021	Выводы по работе
5	Оценка эффективности производства и применения проектируемого процесса	08.04.2021	Раздел экономической эффективности проекта
6	Разработка социальной ответственности по теме	02.05.2021	Раздел социальная ответственность
7	Оформление ВКР	31.05.2021	Магистерская диссертация

### 5.3.3 План проекта

Для выполнения научных исследований сформирована рабочая группа, в состав которой входят научный руководитель, магистрант, консультант по экономической части (ЭЧ) и консультант по социальной ответственности (СО) магистерской диссертации.

Составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, провели распределение исполнителей по видам работ. Примерный порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в таблице 5.11.

Таблица 5.11 – Календарный план проекта

Название	Период, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Составление и утверждение технического задания	4	01.09.2020	05.09.2020	Киргина М.В
Проведение литературного обзора, изучение материалов	94	06.09.2020	09.12.2020	Марданов К.Э.
Формирование и расчет математической модели	65	10.12.2020	12.02.2021	Марданов К.Э. Киргина М.В.
Обсуждение результатов и выводов по проделанной работе	18	13.02.2021	02.03.2021	Киргина М.В. Марданов К.Э.
Оценка эффективности производства и применения проектируемого процесса	36	03.03.2021	08.04.2021	Марданов К.Э. Рыжакина Т.Г.
Разработка социальной ответственности по теме	23	09.04.2021	02.05.2021	Марданов К.Э. Пашков Е.Н.
Оформление ВКР	28	03.05.2021	31.05.2021	Марданов К.Э.

Так же была построена диаграмма Ганта для реализуемого проекта, представленного в таблице 5.12. Диаграмма Ганта – это тип столбчатых диаграмм (гистограмм), который используется для иллюстрации календарного плана проекта, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

График строится в виде таблицы с разбивкой по месяцам и декадам за период времени выполнения научного проекта.

Таблица 5.12 – Календарный план-график проведения магистерской диссертации

Вид работ	Исполнители	Т <sub>к</sub> , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ																										
			Сентябрь			Октябрь			Ноябрь			Декабрь			Январь			Февраль			Март			Апрель			Май		
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
Составление и утверждение тех. задания	Руководитель	4	■																										
Проведение лит. обзора	Магистрант	94		■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
Формирование и расчет мат. модели	Руководитель	65										■	■	■	■	■	■	■											
	Магистрант												■	■	■	■	■	■	■										
Обсуждение результатов и выводов по проделанной работе	Руководитель	18																	■	■	■	■							
	Магистрант																			■	■	■	■						
Оценка эффективности производства и применения проектируемого процесса	Магистрант	36																				■	■	■	■	■	■	■	■
	Консультант ЭЧ																						■	■	■	■	■	■	■
Разработка соц. ответственности по теме	Магистрант	23																								■	■	■	■
	Консультант СО																									■	■	■	■
Оформление ВКР	Магистрант	28																										■	■

Руководитель	Магистрант	Консультант ЭЧ	Консультант СО
■	■	■	■

### 5.3.4 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты должны быть сгруппированы по статьям. В данном исследовании выделены следующие статьи:

1. Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты;
2. Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ;
3. Основная заработная плата;
4. Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала;
5. Отчисления на социальные нужды;
6. Накладные расходы.

#### 5.3.4.1 Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты

В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по теме проводимого исследования. Расчет стоимости материальных затрат производился по действующим прейскурантам и ценам с учетом НДС.

Результаты расчета затрат на сырье, материалы и покупные изделия в процессе проведения НИР представлены в таблице 5.13.

Таблица 5.13 – Расчет затрат по статье «Сырье и материалы»

Наименование	Кол-во, шт	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Баллон СО	1	22000	22000
Баллон N <sub>2</sub>	1	2900	2900
Баллон He	1	4000	4000
Бутылка стекло, 1л Пентан (ХЧ)	1	400	400
Бутылка стекло, 1л Гексан (ХЧ)	1	600	600
Бутылка стекло, 1л Гептан (ХЧ)	1	700	700
Бумага, формат А4	1	180	180
Всего за материалы			30780
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)			1231
<b>Итого по статье С<sub>м</sub></b>			<b>32011</b>

### 5.3.4.2 Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включены все затраты, связанные с использованием специального оборудования, необходимого для проведения работ по теме исследования. В нашем случае, стоимость оборудования, используемого при выполнении научного проекта, учитывается в виде амортизационных отчислений, так как все необходимое оборудование уже имеется в организации.

Амортизацию имеющего оборудования рассчитывается по формуле:

$$\text{Амортизация оборудования} = \frac{\text{Стоимость оборудования} \cdot \text{Срок использования}}{\text{Срок эксплуатации} \cdot 365}$$

Результаты расчета амортизационных отчислений приведены в таблице 5.14.

Таблица 5.14 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во ед. оборуд-я	Цена ед. оборуд-я, тыс.руб.	Срок экспл.оборуд-я, год	Срок испол-я, дни	Амортизация оборуд-я, руб.
1	Каталитическая установка «САТАСОН»	1	2880000	5	3	4735
2	Хроматограф "ХроматэкКрис талл-5000"	1	1107500	5	3	1821
3	Компьютер	1	26500	2	365	13250
<b>Итого по статье</b>						<b>19806</b>

### 5.3.4.3 Основная заработная плата

Для расчета основной заработной платы используем месячный оклад руководителя, магистранта и консультантов. Статья заработной платы исполнителей темы включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением научно-технического исследования, (включая премии и доплаты) и дополнительную заработную плату. Также включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20-30 % от тарифа или оклада:

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп} \quad (5.1)$$

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

$Z_{доп}$  – дополнительная заработная плата.



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

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}, \quad (5.2)$$

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

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (5.3)$$

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.

В таблице 5.15 приведен баланс рабочего времени каждого работника научно-технического исследования.

Таблица 5.15 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистрант	Консультант ЭЧ	Консультант СО
Календарное число дней	365	365	365	365
Количество нерабочих дней				
- выходные дни	119	119	119	119
- праздничные дни				
Потери рабочего времени				
- отпуск	28	0	28	28
- невыходы по болезни	0	0	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	218	246	218	218

Месячный должностной оклад работника определяем по формуле:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} \quad (5.4)$$

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

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

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

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

Согласно информации сайта Томского политехнического университета, должностной оклад (ППС) доцента кандидата наук с 2020 года без учета РК составляет 33664 руб., а руководитель работает на 0,5 ставки, то оклад равен 16832.

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 5.16.

Таблица 5.16 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_{б}$ , руб.	$k_{пр}$	$k_{д}$	$k_{р}$	$Z_{м}$ , руб.	$Z_{дн}$ , руб.	$T_{р}$ , раб. дн.	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель	16832	1	0,02	1,3	22319,2	1064,8	218	232126,4
Магистрант	1988	0	0	1,3	2584,4	109,3	246	26887,8
Консультант ЭЧ	33664	1	0,02	1,3	44638,5	2129,5	218	464231
Консультант СО	33664	1	0,02	1,3	44638,5	2129,5	218	464231
<b>ИТОГО</b>								<b>1187476,2</b>

#### **5.3.4.4      Дополнительная      заработная      плата      научно- производственного персонала**

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

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

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн} \quad (5.5)$$

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

$k_{доп}$  – коэффициент дополнительной зарплаты;

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

В таблице 5.17 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 5.17 – Заработная плата исполнителей НИИ

Заработная плата	Руководитель	Магистрант	Консультант ЭЧ	Консультант СО
Основная зарплата	232126,4	26887,8	464231	464231
Дополнительная зарплата	34818,9	4033,2	69634,7	69634,7
Зарплата исполнителя	266945,3	30921	116065,7	116065,7

### 5.3.4.5 Отчисления на социальные нужды

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из формулы:

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) \quad (5.6)$$

где  $k_{\text{внеб}}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

С 2016 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 № 212 – ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона № 212 – ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность с 2014 года водится пониженная ставка – 27,1%.

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 5.18.

Таблица 5.18 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель	232126,4	34818,9
Магистрант	26887,8	4033,2
Консультант ЭЧ	464231	69634,7
Консультант СО	464231	69634,7
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,3	
<b>Итого:</b>	<b>409679,3</b>	

### 5.3.4.6 Накладные расходы

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) \quad (5.7)$$

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

На основании полученных данных по отдельным статьям затрат составляется калькуляция плановой себестоимости НИ, которая представлена в таблице 5.19.

Таблица 5.19 – Группировка затрат по статьям

Затраты по статьям						
Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (эксперимент) работ	Основная З.П.	Доп. З.П.	Отчисления на социальные нужды	Накладные расходы	Итого плановая себестоимость
32011	19806	1187476,2	178121,5	409679,3	1092478,2	<b>2919572,2</b>
35000	20000	1200000	180000	410000	1095000	<b>2940000</b>

Согласно таблице 5.19, основные затраты научно-технического исследования приходятся на выплату заработной платы работников, участвующих в выполнение темы проекта.

### 5.3.5 Организационная структура проекта

В качестве организационной структуры проекта была выбрана проектная структура, так как основными критериями отнесения данной работы к этому виду структуры было: высокие обязательства по срокам исполнения работы, уникальность технологии и высокая взаимосвязь между отдельными частями проекта.

Схема проектной организационной структуры научного проекта приведена на рисунке 5.3.

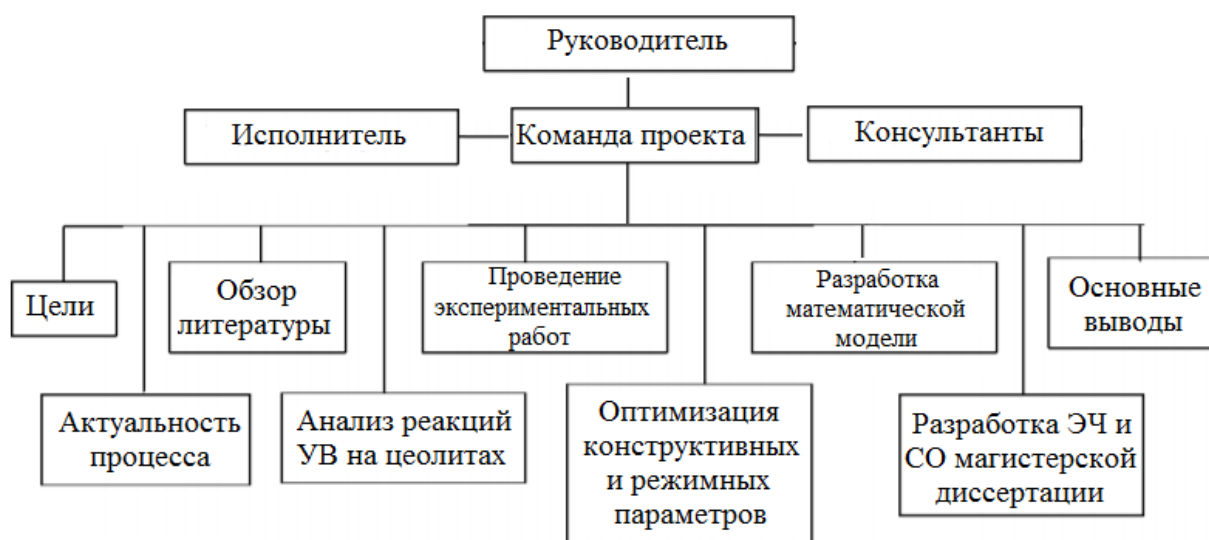


Рисунок 5.3 – Проектная структура

### 5.3.6 Матрица ответственности

Для распределения ответственности между участниками проекта, сформирована матрица ответственности, которая представлена в таблице 5.20.

Таблица 5.20 – Матрица ответственности

Этапы проекта	Руководитель	Магистрант	Консультант ЭЧ	Консультант СО
Составление и утверждение технического задания	О, И	С	О, И	О, И
Проведение литературного обзора, изучение материалов	С	О, И	-	-
Формирование и расчет математической модели	О, С	О, И	-	-
Обсуждение результатов и выводов по проделанной работе	С	О, И	-	-
Оценка эффективности производства и применения проектируемого процесса	-	О, И	С	-
Разработка социальной ответственности по теме	-	О, И	-	С
Оформление ВКР	С	О, И	-	-

Степень участия в проекте характеризуется следующим образом:

Ответственный (О) – лицо, отвечающее за реализацию этапа проекта и контролирующее его ход.

Исполнитель (И) – лицо (лица), выполняющие работы в рамках этапа проекта.

Утверждающее лицо (У) – лицо, осуществляющее утверждение результатов этапа проекта (если этап предусматривает утверждение).

Согласующее лицо (С) – лицо, осуществляющее анализ результатов проекта и участвующее в принятии решения о соответствии результатов этапа требованиям.

### 5.3.7 План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта. План управления коммуникациями приведен в таблице 5.21.

Таблица 5.21 – План управления коммуникациями

№ п/п	Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
1	Статус проекта	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Еженедельно
2	Обмен информацией о текущем состоянии проекта	Исполнитель проекта	Руководителю/ Консультантам проекта	Еженедельно
3	Документы и информация по проекту	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Не позже сроков графиков и контрольных точек
4	О выполнении контрольной точки	Исполнитель проекта	Руководителю/ Консультантам проекта	Не позже дня контрольного события по графику

### 5.3.8 Реестр рисков проекта

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

Информация по возможным рискам сведена в таблицу 5.22.

Таблица 5.22 – Реестр рисков

№	Риск	Вероятность наступления	Влияние риска	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Неточность метода анализа	2	5	Низкий	Внешний и внутренние анализы	Низкая точность метода анализа
2	Погрешность расчетов	3	5	Средний	Пересчет, проверка	Невнимательность
3	Отсутствие интереса к результатам исследования	2	5	Низкий	Привлечение предприятий, публикация результатов	Отсутствие результатов исследования

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

### **5.4.1 Оценка абсолютной эффективности исследования**

В основе проектного подхода к инвестиционной деятельности предприятия лежит принцип денежных потоков (cashflow). Особенностью является его прогнозный и долгосрочный характер, поэтому в применяемом подходе к анализу учитываются фактор времени и фактор риска. Для оценки общей экономической эффективности используются следующие основные показатели:

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

#### **5.4.1.1 Чистая текущая стоимость (NPV)**

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

Расчёт NPV осуществляется по следующей формуле:

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{опt}}{(1+i)^t} - I_0 \quad (5.8)$$

где ЧДП<sub>опt</sub> – чистые денежные поступления от операционной деятельности;

$I_0$  – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году;

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

$n$  – горизонт расчета;

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

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

Расчет чистой текущей стоимости представлен в таблице 5.23.

При расчете рентабельность проекта составляла 20 %, амортизационное отчисления 10 %.

Таблица 5.23 – Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб.	0	3503486,64	3503486,64	3503486,64	3503486,64
2	Итого приток, руб.	0	3503486,64	3503486,64	3503486,64	3503486,64
3	Инвестиционные издержки, руб.	-2919572,2	0	0	0	0
4	Операционные затраты, руб.	0	1021850,27	1021850,27	1021850,27	1021850,27
5	Налогооблагаемая прибыль	0	2481636,37	2481636,37	2481636,37	2481636,37
6	Налоги 20 %, руб.	0	496327,27	496327,27	496327,27	496327,27
7	Итого отток, руб.	-2919572,2	1518177,54	1518177,54	1518177,54	1518177,54
8	Чистая прибыль, руб.	0	1985309,1	1985309,1	1985309,1	1985309,1
9	Чистый денежный поток (ЧДП), руб.	-2919572,2	2277266,32	2277266,32	2277266,32	2277266,32
10	Коэффициент дисконтирования (КД)	1	0,833	0,694	0,578	0,482
11	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб.	-2919572,2	1896962,85	1580422,83	1316259,93	1097642,37
12	$\sum$ ЧДД		5891287,98			
13	Итого NPV, руб.		2971715,78			



Коэффициент дисконтирования рассчитан по формуле:

$$КД = \frac{1}{(1 + i)^t} \quad (5.9)$$

где:  $i$  – ставка дисконтирования, 20 %;

$t$  – шаг расчета.

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 2971715,78 рублей, что позволяет судить об его эффективности.

#### 5.4.1.2 Индекс доходности (PI)

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

$$PI = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_t}{(1+i)^t} / I_0 \quad (5.10)$$

где ЧДД – чистый денежный поток, руб.;

$I_0$  – начальный инвестиционный капитал, руб.

Таким образом PI для данного проекта составляет:

$$PI = \frac{5891287,98}{2919572,2} = 2,02$$

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

#### 5.4.1.3 Внутренняя ставка доходности (IRR)

Значение ставки, при которой **NPV** обращается в ноль, носит название «внутренней ставки доходности» или IRR. Формальное определение «внутренней ставки доходности» заключается в том, что это та ставка дисконтирования, при которой суммы дисконтированных притоков денежных средств равны сумме дисконтированных оттоков или **NPV** = 0. По разности между IRR и ставкой дисконтирования  $i$  можно судить о запасе экономической прочности инвестиционного проекта.

Чем ближе IRR к ставке дисконтирования  $i$ , тем больше риск от инвестирования в данный проект.

$$\sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{опт}}{(1+IRR)^t} = \sum_{t=0}^n \frac{I_t}{(1+IRR)^t} \quad (5.11)$$

Между чистой текущей стоимостью (NPV) и ставкой дисконтирования  $i$  существует обратная зависимость. Эта зависимость представлена в таблице 5.24 и на рисунке 5.4.

Таблица 5.24 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№	Наименование показателя	0	1	2	3	4	NPV, руб.
1	Чистые денежные потоки, руб.	-2919572,2	2277266,32	2277266,32	2277266,32	2277266,32	
2	Коэффициент дисконтирования						
	0,1	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	0,2	1	0,833	0,694	0,578	0,482	
	0,3	1	0,769	0,592	0,455	0,350	
	0,4	1	0,714	0,510	0,364	0,260	
	0,5	1	0,667	0,444	0,295	0,198	
	0,6	1	0,625	0,390	0,244	0,153	
	0,7	1	0,588	0,335	0,203	0,112	
	0,8	1	0,556	0,309	0,171	0,095	
	0,9	1	0,526	0,277	0,146	0,077	
	1	1	0,500	0,250	0,125	0,062	
3	Дисконтированный денежный поток, руб.						
	0,1	-2919572,2	2070035,1	1881022,0	1710227,0	1555372,9	4297084,8
	0,2	-2919572,2	1896962,8	1580422,8	1316259,9	1097642,4	2971715,8
	0,3	-2919572,2	1751217,8	1348141,7	1036156,2	797043,2	2012986,6
	0,4	-2919572,2	1625968,2	1161405,8	828924,9	592089,2	1288816,0
	0,5	-2919572,2	1518936,6	1011106,2	671793,6	450898,7	733163,0
	0,6	-2919572,2	1423291,5	888133,9	555653,0	348421,7	295927,8
	0,7	-2919572,2	1339032,6	762884,2	462285,1	255053,8	-100316,5
	0,8	-2919572,2	1266160,1	703675,3	389412,5	216340,3	-343984,0
	0,9	-2919572,2	1197842,1	630802,8	332480,9	175349,5	-583097,0
	1,0	-2919572,2	1138633,2	569316,6	284658,3	141190,5	-785773,7

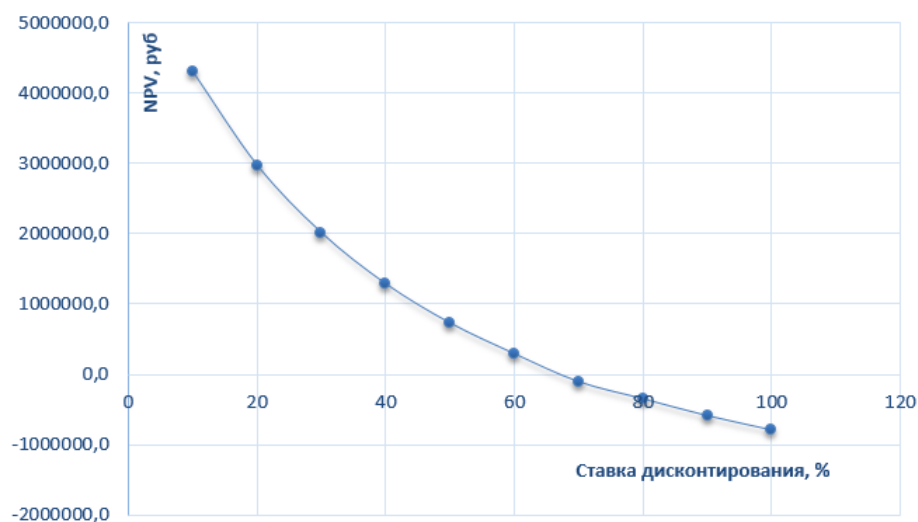


Рисунок 5.4 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Из таблицы и графика следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Значение ставки, при которой NPV обращается в ноль, носит название «внутренней ставки доходности» или «внутренней нормы прибыли». Из графика получаем, что IRR составляет 0,68.

Запас экономической прочности проекта:  $68\% - 20\% = 48\%$

#### 5.4.1.4 Дисконтированный срок окупаемости

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

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

Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (Таблица 5.25).

Таблица 5.25 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток ( $i = 0,20$ ), руб.	-2919572,2	1896962,8	1580422,8	1316259,9	1097642,4

Продолжение Таблицы 5.25

2	То же нарастающим итогом, руб.	-2919572,2	-1022609,2	557813,6	1874073,4	2971715,8
3	Дисконтированный срок окупаемости	$PP_{дск} = 1 + 1022609,2 / 1580422,8 = 1,65$ года				

Социальная эффективность научного проекта (Таблица 5.26) учитывает социально-экономические последствия осуществления научного проекта для общества в целом или отдельных категорий населения или групп лиц, в том числе как непосредственные результаты проекта, так и «внешние» результаты в смежных секторах экономики: социальные, экологические и иные внеэкономические эффекты.

Таблица 5.26 – Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Выброс парниковых газов, в результате сжигания ПНГ на факелах	Рациональное использование природных ресурсов, производство моторных топлив в Северных районах страны
Зависимость компаний и частных лиц от монополии нефтегазовых компаний.	Как и другие альтернативные источники энергии, цеформинг снижает зависимость компаний и частных лиц от монополии нефтегазовых компаний, т.е. создает конкуренцию

#### 5.4.2 Оценка сравнительной эффективности исследования

Эффективность научного ресурсосберегающего проекта включает в себя социальную эффективность, экономическую и бюджетную эффективность. Показатели общественной эффективности учитывают социально-экономические последствия осуществления инвестиционного проекта как для общества в целом, в том числе непосредственные результаты и затраты проекта, так и затраты, и результаты в смежных секторах экономики, экологические, социальные и иные внеэкономические эффекты.

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

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} \quad (5.12)$$

где  $I_{\phi}^p$  – интегральный финансовый показатель разработки;

$\Phi_{pi}$  – стоимость  $i$ -го варианта исполнения;

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

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в размах (значение меньше единицы, но больше нуля).

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

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a, \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p \quad (5.13)$$

где  $I_m$  – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов;  $a_i$  – весовой коэффициент  $i$ -го параметра;

$b_i^a$ ,  $b_i^p$  – балльная оценка  $i$ -го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

$n$  – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя приведен в таблице 5.27.

Таблица 5.27 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии \ Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
Способствует росту производительности труда пользователя	0,1	5	5	4
Удобство в эксплуатации	0,15	4	4	2
Качество продукта	0,15	5	4	4
Простота эксплуатации	0,20	4	4	4
Длительность производственного цикла	0,25	5	4	4
Энергосбережение	0,15	4	3	4
<b>Итого:</b>	1	4,5	4,25	3,7

$$I_{\text{ТП}} = 5 * 0,1 + 4 * 0,15 + 5 * 0,15 + 4 * 0,2 + 5 * 0,25 + 4 * 0,15 = 4,5;$$

$$I_{\text{Аналог 1}} = 5 * 0,1 + 4 * 0,15 + 4 * 0,15 + 4 * 0,2 + 4 * 0,25 + 3 * 0,15 = 3,95;$$

$$I_{\text{Аналог 2}} = 4 * 0,1 + 2 * 0,15 + 4 * 0,15 + 4 * 0,2 + 4 * 0,25 + 4 * 0,15 = 3,7.$$

Текущий проект – это цеоформинг бензина на цеолитсодержащем катализаторе.

Аналог 1 – это риформинг бензина на алюмоплатиновом катализаторе.

Аналог 2 – это риформинг бензина на платинорениевом катализаторе.

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p}, \quad I_{\text{финр}}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a} \quad (5.14)$$

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

Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^a} \quad (5.15)$$

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

$I_{m^p}^p$  – интегральный показатель разработки;

$I_{тэ}^a$  – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 5.28 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,986	1	0,991
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,5	3,95	3,7
3	Интегральный показатель эффективности	4,56	3,95	3,73
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,87	0,82

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет понять и выбрать более эффективный вариант решения поставленной в магистерской работе технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности. Таким образом, видно, что использование цеолитсодержащего катализатора при переработке легкого углеводородного сырья при производстве автомобильных бензинов позволяет понизить себестоимость продукта без существенных потерь качества, а также эффективно утилизировать газовый конденсат и попутный нефтяной газ.

Также в ходе выполнения раздела финансового менеджмента определена чистая текущая стоимость NPV, равная 2971715,78 руб.; индекс доходности  $PI = 2,02$ ; внутренняя ставка доходности  $IRR = 68 \%$ , срок окупаемости  $PP_{дск} = 1,65$  года. Таким образом мы имеем ресурсоэффективный проект с высоким запасом финансовой прочности и коротким сроком окупаемости.

## 6 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Социальная ответственность – это ответственность, которую несет каждый инженер или исследователь за результаты своей деятельности перед обществом. В первую очередь, особое значение имеет безопасность применения тех технологий, которые создаются на основе достижений науки, а также предотвращение или минимизация возможных негативных последствий их применения, обеспечение безопасного как для испытуемых, так и для остального населения, и для окружающей среды проведения исследований.

Цель работы: моделирование процесса каталитического цеоформинга с помощью методов математического моделирования.

Объектом исследования данной работы является установка цеоформинга стабильного газового конденсата на примере n-парафинов C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>.

Цеоформинг обеспечивает повышение детонационной стойкости бензина, при этом, в отличие от каталитического риформинга, становится возможным отказаться от дорогостоящего платинового катализатора и циркуляции водородсодержащего газа.

Область применения – нефтеперерабатывающая и нефтехимическая промышленности.

Потребителями результата данной научно-исследовательской работы являются работники установки цеоформинга, которые с помощью разработанной модели могут отслеживать возможные результаты и последствия изменения состава сырья, технологических параметров процесса, а также подбирать оптимальные параметры работы, что позволит уменьшить риски возникновения чрезвычайных и опасных ситуаций на производстве, следовательно, травмирования работников и возможных аварий.

### 6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Высшей силой и основой правового законодательства по охране труда является Конституция РФ. Трудовой Кодекс РФ содержит основные



требования, направленные на урегулирование и создание безопасных условий труда. В трудовом кодексе РФ содержатся основные положения отношений между организацией и сотрудниками, включая оплату и нормирование труда, выходных, отпуска и так далее.

Согласно данному Кодексу, каждый работник имеет право на [42]:

- обеспечение средствами индивидуальной и коллективной защиты в соответствии с требованиями охраны труда за счёт работодателя [Статья 221];
- повышенную оплату труда работников, занятых на работах с вредными условиями труда в соответствии с Федеральным законом (4 % тарифной ставки) [Статья 147];
- сокращение продолжительности рабочего времени для работников, условия труда на рабочих местах, которых по результатам специальной оценки условий труда отнесены к вредным условиям труда 3 или 4 степени, или опасным условиям труда – не более 36 часов в неделю [Статья 92];
- предварительные и периодические медицинские осмотры [Статья 213];
- установления работникам гарантий и компенсаций [Статья 57];
- ежегодный дополнительный оплачиваемый отпуск [Статья 117];
- защиту персональных данных [Статья 86].

Данная дипломная работа выполнялась изначально в химической лаборатории инженерной школы природных ресурсов отделения химической инженерии.

Основы безопасной работы в химической лаборатории регламентированы ПНД Ф 12.13.1-03 «Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения)» и включает в себя как общие положения, так и список требований и рекомендаций по следующим аспектам: правила пожарной и электробезопасности, правила хранения и безопасного обращения с химическими реактивами, а также способы оказания первой помощи при несчастных случаях.

Лаборатория обеспечена вентиляцией, водоснабжением и канализацией. Полы выполнены из негорючей и не впитывающей жидкости плитки. Столы

имеют гладкие поверхности из материалов, мало сорбирующих вредные вещества, и легко поддаются очистке. Работа с вредными и легколетучими веществами производится в вытяжных шкафах, обеспечивающих изоляцию работающих от опасной среды. Помещение хорошо освещено в светлое время суток, а при недостатке освещения используется искусственное освещение.

Персонал допускается к работе только в спецодежде и средствах индивидуальной защиты. На рабочем месте должны быть запасы сырья и материалов, не превышающие сменную потребность. Необходимо знать специфические свойства применяемых веществ и соблюдать установленные правила работы с ними. Производственный процесс должен быть организован так, чтобы не допускать выделения в воздух производственного помещения пыли и вредных веществ.

Помещения опытно-производственной лаборатории обеспечиваются первичными средствами пожаротушения согласно действующим нормам. Все работники должны уметь пользоваться средствами пожаротушения и уметь оказывать первую помощь при несчастном случае. Не допускается загромождения рабочих мест, проходов, выходов из помещений и здания, доступа к противопожарному оборудованию.

Затем анализ полученных данных осуществлялся на персональном компьютере в аудитории 133, расположенной на первом этаже учебного корпуса номер два Томского политехнического университета. Аудитория 133 оборудована 12 ЭВМ. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления и кондиционирования воздуха. Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного.

Правильная организация рабочего места за компьютером прямо сказывается на производительности труда [43]. Помещение должно быть просторным, хорошо проветриваемым и в меру светлым. Яркий солнечный свет порождает блики на мониторе, поэтому нужно предусмотреть жалюзи.

Помещение в целом и рабочее место должны быть освещены достаточно и равномерно.

Экран видеомонитора должен находиться от глаз пользователя на оптимальном расстоянии 600-700 мм, но не ближе 500 мм с учетом размеров алфавитно-цифровых знаков и символов.

Уровень глаз при вертикально расположенном экране должен приходиться на центр или 2/3 высоты экрана. Линия взора должна быть перпендикулярна центру экрана и оптимальное её отклонение от перпендикуляра, проходящего через центр экрана в вертикальной плоскости, не должно превышать 5 градусов, допустимое 10 градусов. Рабочее место должно быть оборудовано подставкой для ног, имеющей ширину не менее 300 мм, глубину не менее 400 мм, регулировку по высоте в пределах до 150 мм и по углу наклона опорной поверхности подставки до 20 градусов.

## **6.2 Производственная безопасность**

Производственная безопасность – система организационных мероприятий и технических средств, предотвращающих или уменьшающих вероятность воздействия на работающих опасных травмирующих производственных факторов, возникающих в рабочей зоне в процессе трудовой деятельности.

Необходимо выявить вредные и опасные производственные факторы, которые могут возникать при разработке и эксплуатации математической модели процесса цеоформинга основных компонентов (н-парафины C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>) стабильного газового конденсата.

Для идентификации потенциальных факторов использовался ГОСТ 12.0.003-2015 ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. Перечень опасных и вредных факторов, характерных для проектируемой производственной среды представлены в таблице 6.1.

Таблица 6.1 – Перечень опасных и вредных факторов при выполнении экспериментальной части бакалаврской работы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015 ССБТ)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [44].
Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*. [45].
Повышенный уровень электромагнитных излучений	+	+	+	ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности [46].
Повышенный уровень шума	+	+	+	ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности [47].
Зрительное перенапряжение	+	+	+	ГОСТ Р ИСО 9355-2-2009. Эргономические требования к проектированию дисплеев и механизмов управления. Часть 2. Дисплеи. [48].
Умственное перенапряжение	+	+	+	СП 2.2.3670-20. Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда [49].
Пожарная безопасность	+	+	+	Федеральный закон от 22.07.2013г. №123-ФЗ, Технический регламент о требованиях пожарной безопасности [50].
Химически опасная среда	+	+	+	ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности. [51].
Поражение электрическим током		+	+	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов [52].
Термические опасности		+	+	ГОСТ 12.1.010-76 ССБТ. Взрывобезопасность. Общие требования [53].

## 6.2.1 Анализ выявленных вредных и опасных факторов

### 6.2.1.1 Отклонение показателей микроклимата помещения

Оценка микроклимата проводится на основе измерений его параметров (температура, влажность воздуха, скорость его движения, тепловое излучение)

на всех местах пребывания работника в течение смены и сопоставления с нормативами, согласно [44].

Показатели микроклимата должны обеспечивать сохранение теплового баланса человека с окружающей средой и поддержание оптимального или допустимого теплового состояния организма. Если измеренные параметры соответствуют требованиям [44], то условия труда по показателям микроклимата характеризуются как оптимальные (1 класс) или допустимые (2 класс). В случае несоответствия – условия труда относят к вредным и устанавливают степень вредности, которая характеризует уровень перегревания или охлаждения организма человека.

Оптимальные микроклиматические условия, представленные в таблице 6.2, установлены по критериям оптимального теплового и функционального состояния человека. Они обеспечивают общее и локальное ощущение теплового комфорта в течение 8 часовой рабочей смены при минимальном напряжении механизмов терморегуляции, не вызывают отклонений в состоянии здоровья, создают предпосылки для высокого уровня работоспособности и являются предпочтительными на рабочих местах, применительно к выполнению работ различных категорий в холодный и теплый периоды года.

Таблица 6.2 – Оптимальные величины показателей микроклимата на рабочих местах производственных помещений

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до 139)	22-24	21-25	60-40	0,1
	Iб (140-174)	21-23	20-24	60-40	0,1
Теплый	Ia (до 139)	23-25	22-26	60-40	0,1
	Iб (140-174)	22-24	21-25	60-40	0,1

Микроклимат характеризуется температурой воздуха, его и скорость движения, а также интенсивностью теплового излучения. Длительное вредное воздействие на человека неблагоприятных метеорологических условий резко ухудшает его самочувствие, снижает производительность труда и приводит к заболеваниям.

### 6.2.1.2 Недостаточная освещенность помещения

Работа с компьютером предполагает постоянный зрительный контакт с дисплеем и занимает 80 % от рабочего времени. Недостаточное освещение рабочего места затрудняет длительную работу, вызывает повышенное утомление и способствует развитию близорукости. Излишне яркий свет снижает зрительные функции, приводит к перевозбуждению нервной системы, снижает работоспособность.

С целью обеспечения требуемых норм освещенности произведём расчёт искусственной освещенности горизонтальной рабочей поверхности методом коэффициента светового потока. Для расчета используем параметры помещения: длина  $A = 6$  м, ширина  $B = 5$  м, высота  $H = 5$  м. Высота рабочей поверхности

$h_{\text{рп}} = 0,8$  м. Нормируемая минимальная освещенность при использовании ЭВМ при одновременной работе с документами должна быть равна  $E_{\text{н}} = 300$  лк.

Выбираем светильники с люминесцентными лампами типа ШОД-2-80 (две лампы, мощностью по 80 Вт каждая). Длина светильника равна 1530 мм, ширина 284 мм. Интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина  $\lambda$ , для люминесцентных светильников с защитной решёткой лежит в диапазоне  $\lambda \in [1,1-1,3]$ .

Тогда высота светильника над рабочей поверхностью при  $h_c = 0,6$  равна:

$$h = H - h_c - h_{\text{рп}} = 5 - 0,6 - 0,8 = 3,6 \text{ м} \quad (6.1)$$

где  $H$  – высота помещения, м;

$h_c$  – расстояние светильников от перекрытия (свес);

$h_{\text{рп}}$  – высота рабочей поверхности, м.

Расстояние между соседними светильниками или рядами определяется по формуле:

$$L = \lambda * h = 1,2 * 3,6 = 4,3 \text{ м} \quad (6.2)$$

Расстояние от крайнего ряда светильников до стены:

$$L / 3 = 4,3 / 3 = 1,4 \text{ м} \quad (6.3)$$

Определяем количество рядов светильников и количество светильников в ряду:

$$n_{\text{ряд}} = \frac{(B - \frac{2}{3}L)}{L} + 1 = \frac{(5 - \frac{2}{3} * 4,3)}{4,3} + 1 \approx 2 \quad (6.4)$$

$$n_{\text{св}} = \frac{(A - \frac{2}{3}L)}{l_{\text{св}} + 0,5} = \frac{(6 - \frac{2}{3} * 4,3)}{1,53 + 0,5} \approx 2 \quad (6.5)$$

Светильники в аудитории размещены в 2 ряда по 2 в каждом. Общее число ламп – 8. Схема размещения представлена на рисунке 6.1.

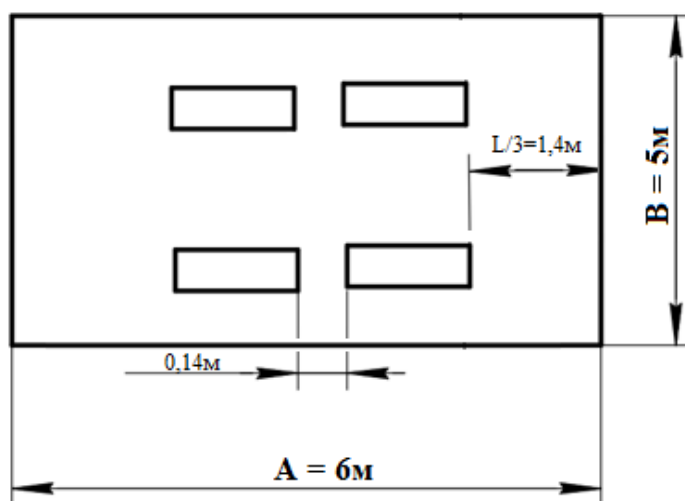


Рисунок 6.1 – План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами

Находим индекс помещения

$$i = S/h(A + B) = 30,5/(3,6 * (6 + 5)) = 0,77 \quad (6.6)$$

Данное помещение относится к типу помещения с малым выделением пыли, в связи с этим  $K_s = 1,5$ ;

Состояние потолка – свежепобеленный, поэтому значение коэффициента отражения потолка  $p_n = 70\%$ ;

Состояние стен – побеленные бетонные стены, поэтому значение коэффициента отражения стен  $p_{ст} = 50\%$ .

Коэффициент использования светового потока, показывающий какая часть светового потока ламп попадает на рабочую поверхность, для светильников типа ШОД с люминесцентными лампами при  $p_n = 70\%$ ,  $p_{ст} = 50\%$  и индексе помещения  $i = 0,77$  равен  $\eta = 0,36$ .

Тогда световой поток лампы определяется по формуле:

$$\Phi = \frac{E_H * S * K_3 * Z}{N_L * \eta} = \frac{300 * 30,5 * 1,5 * 1,1}{8 * 0,36} = 4966 \text{ лм} \quad (6.7)$$

По справочным данным выбираем ближайшую стандартную лампу – ЛХБ 80 Вт с величиной светового потока в 5000 лм. Делаем проверку выполнения условия:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{\text{л.станд}} - \Phi_{\text{л.расч}}}{\Phi_{\text{л.станд}}} * 100\% \leq +20\% \quad (6.8)$$

$$-10\% \leq 0,68 \leq +20\%$$

Определяем электрическую мощность осветительной установки:

$$P = 8 * 80 = 640 \text{ Вт}$$

Таким образом необходимый световой поток светильника типа ШОД-2-80 в аудитории №133 второго корпуса ТПУ не выходит за пределы требуемого диапазона.

### 6.2.1.3 Повышенный уровень электромагнитных излучений

Одним из вредных факторов, влияющих на здоровье человека, является ЭМП. Превышении допустимых уровней ЭМП приводит к вредному воздействию на иммунную, эндокринную, нервную системы человека. Влиянию ЭМП подвержены кровеносная система, иммунная и половая системы, головной мозг, глаза.

Согласно [46] допустимые уровни ЭМП, создаваемых электронной техникой на рабочем месте пользователя представлены в таблице 6.3.

Таблица 6.3 – Временные допустимые уровни ЭМП, создаваемые ЭВМ на рабочем месте

Наименование параметров		ВДУ
Напряженность электрического поля	в диапазоне частот 5Гц - 2Гц	25 В/м
	в диапазоне частот 2 кГц - 400кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	в диапазоне частот 5Гц - 2Гц	250 нТл
	в диапазоне частот 2 кГц - 400 кГц	25 нТл
Напряженность электрического поля		15 В/м

Мощность экспозиционной дозы в соответствии с [46] мягкого рентгеновского излучения в любой точке на расстоянии от экрана 0,05 м не



превышает 100 мкР/ч, что соответствует нормативам. Исходя из того, что полное исключение воздействия ЭМП электронной техники невозможно, можно максимально его снизить, путем рационального размещения рабочих мест.

#### **6.2.1.4 Повышенный уровень шума**

Производственные процессы в химической лаборатории сопровождаются значительным шумом.

Воздействие шума длительное время приводит к снижению остроты слуха и зрения, повышению кровяного давления, утомлению центральной нервной системы, ослаблению внимания, увеличению количества ошибок в действиях рабочего, снижению производительности труда. Воздействие шума приводит к появлению профессиональных заболеваний и может явиться причиной несчастного случая.

Для химической лаборатории характерны следующие виды шумов [47]:

- механический шум (при трении, биении узлов и деталей машин делительных воронок, механической мешалки);
- аэрогидродинамический шум (возникает в аппаратах при больших скоростях движения газа или жидкости и при резких направлениях их движения и давления);
- электродинамический шум – обусловлен действием электро- или магнитодинамических сил, электрической дуги или коронного разряда.

В качестве средств индивидуальной защиты для органов слуха от шума и вибрации в лаборатории применяют наушники, вкладыши, шлемы, костюмы.

Наушники понижают негативное воздействие в диапазоне от 7 до 38 дБ с частотой от 125 до 8000 Гц. Вкладыши закрывают слуховой проход. Этот вид дешев, компактен, но не всегда результативен, т.к. снижает уровень негативного воздействия всего на 5-20 дБ.

#### **6.2.1.5 Умственное и зрительное перенапряжение**

Для предупреждения перенапряжения зрительных анализаторов, преждевременной утомляемости, пользователям ПЭВМ рекомендуется

организовывать перерывы, во время которых следует выполнять специальную гимнастику для глаз [48].

Частая и продолжительная работа за компьютером может привести к нервно-психическим перегрузкам.

Для профилактики от нервно-психических перегрузок рекомендуется убрать из рабочей зоны или отдалить все объекты, которые издают шум: принтер, факс, копировальный аппарат и пр. Шумовое загрязнение также влияет на психоэмоциональное состояние работника.

В документе [49] рекомендуются пешие прогулки до и после работы за компьютером по 40-50 минут. Также будут полезны перерывы в работе. При трудовой деятельности за персональным компьютером требуется после каждого часа устанавливать перерывы.

#### **6.2.1.6 Пожарная безопасность**

Лаборатория отделения химической инженерии по степени пожароопасности относится к пониженной пожароопасности (категория «Д»), производства, связанные с обращением с легковоспламеняющимися жидкостями, а также обработкой несгораемого материала согласно [50].

Взрывоопасная среда в лаборатории может образоваться вследствие пролива растворителей. Легковоспламеняющиеся жидкости нельзя нагревать на открытом огне, также держать вблизи открытого огня, поэтому жидкости нагревают на водяной бане. Огнеопасные вещества нельзя сливать в канализацию, слив производится в специальные сосуды.

При возникновении пожара необходимо принять все меры по его локализации и тушению. Для этого обеспечен проход между лабораторными столами, выходы не загромождены различными предметами. При возникновении возгорания все сотрудники должны действовать четко, в соответствии с заранее разработанной программой согласно инструкции.

Для тушения возможного загорания и пожаров лаборатория оснащена специально оборудованным щитом, на котором установлены:

1. Огнетушитель углекислотный газовый типа ОУ-5 для тушения всех видов горючих веществ и электроустановок, кроме веществ, горящих без доступа воздуха;

2. Порошковый огнетушитель ОП-5, предназначенный для тушения небольших очагов возгорания щелочных металлов;

3. Асбестовое одеяло, которое используется при тушении обесточенных электропроводов, горячей одежды;

4. Ящик с песком для тушения обесточенных горящих на горизонтальной поверхности проводов.

Работа с персональными компьютерами связана с рисками возгорания электрического оборудования, в связи с чем в зданиях должны быть предусмотрены конструктивные, объемно-планировочные и инженерно-технические решения, обеспечивающие в случае пожара [50]:

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

- возможность спасения людей;

- возможность доступа личного состава пожарных подразделений и подачи средств пожаротушения к очагу пожара, а также проведения мероприятий по спасению людей и материальных ценностей;

- нераспространение пожара на рядом расположенные здания, в том числе при обрушении горящего здания;

- ограничение прямого и косвенного материального ущерба, включая содержимое здания и само здание, при экономически обоснованном соотношении величины ущерба и расходов на противопожарные мероприятия, пожарную охрану и ее техническое оснащение.

### 6.2.1.7 Химически опасная среда

Характеристики токсикологических свойств веществ, обращающихся в производстве, а также предельно допустимые концентрации (ПДК) веществ в воздухе рабочей зоны, приведены в таблице 6.4 [51].

Таблица 6.4 – Класс опасности и ПДК веществ, используемых в работе

Наименование вещества, продукта	ПДК вредных веществ в воздухе рабочей зоны, мг/м <sup>3</sup>	Класс опасности по ГОСТ 12.1.005	Токсические свойства (характер вредного воздействия на организм человека)
Бензин прямогонный	100	IV	Пары действуют наркотически, при больших концентрациях вызывают удушье вследствие недостатка кислорода. Возможно раздражение верхних дыхательных путей, слизистой оболочки глаз и кожи человека. Постоянный контакт с бензином может вызвать острые воспаления и хронические экземы.
Бензин высокооктановый	100	IV	
Углеводородные газы сепарации	300	IV	Пары действуют наркотически. При больших концентрациях вызывают удушье вследствие недостатка кислорода. Быстро накапливаются в организме при вдыхании и столь же быстро выводятся через легкие, в организме человека не кумулируются.
Углеводородные газы стабилизации	300	IV	
Сжиженный газ	300	IV	При попадании на тело вызывают обморожение, напоминающее ожог. Пары действуют наркотически, при больших концентрациях вызывают удушье вследствие недостатка кислорода. Пары газов быстро накапливаются в организме при вдыхании и столь же быстро выводятся через легкие, в организме человека не кумулируются.

Продолжение Таблицы 6.4

Азот	–	–	Не опасен до содержания в смеси с кислородом до 21%. С ростом содержания вызывает недостаток кислорода и отдышку, при больших концентрациях вызывает удушье вследствие недостатка кислорода.
Цеолитный катализатор	–	IV	При попадании на кожу сушит её.

### 6.2.1.8 Электробезопасность

Работа проводилась в химической лаборатории, где находится следующее электрооборудование: сушильные шкафы, муфельные печи, электрические плитки, термостаты. Это оборудование может вызвать опасность поражения электрическим током.

Источниками электрической опасности являются оголенные части проводов или отсутствие изоляции, отсутствие заземления, замыкания, статическое напряжение. Для протекания непрерывного технологического процесса его обеспечивают безопасным электрическим оборудованием, а также создают благоприятные условия труда для человека, связанного с электричеством [52]. При нарушении технического регламента по эксплуатации или неисправности электрооборудования возникает опасность воздействия электрического тока на человека.

### 6.2.1.9 Термические опасности

Источником термической опасности в производственном помещении являются теплообменное оборудование и реактор превращений углеводородов.

Повышенная температура поверхностей оборудования может привести к возникновению пожара, повышенное давление в оборудовании к взрывам, а нарушение герметичности оборудования к ожогам.

Пожарная профилактика представляет собой комплекс организационных и технических мероприятий, направленных на обеспечение безопасности, на

предотвращение пожара, ограничения его распространения, а также создания условий для успешного тушения пожара.

По [53] к опасным факторам пожара, воздействующим на людей и имущество, относятся: 1) пламя и искры; 2) тепловой поток; 3) повышенная температура окружающей среды; 4) повышенная концентрация токсичных продуктов горения и термического разложения; 5) пониженная концентрация кислорода; 6) снижение видимости в дыму.

### **6.3 Экологическая безопасность**

Химическая лаборатория не является особо опасным объектом воздействия на окружающую среду. В данном случае существует несколько подходов к проблеме защиты окружающей среды:

- путем максимально эффективной очистки;
- создать замкнутую безотходную технологическую систему.

В ходе исследовательской работы использовались персональный компьютер, принтер, бумага, канцелярские товары и т.д.

Бумажный мусор составляет большую часть отходов, образующихся в результате работы студента. Бумага загрязняет окружающую среду, ведь в процессе ее разложения выделяется метан. Решение вопроса утилизации бумаги является сбор макулатуры с целью вторичной переработки.

То же самое относится и к предметам из пластика, которые наносят огромный вред окружающей среде. Необходима правильная сортировка пластиковых отходов.

Аудитория, в которой осуществлялась разработка проекта, оснащена люминесцентными лампами, которые необходимо утилизировать как ртутьсодержащие лампы.

#### **6.3.1 Воздействие на атмосферу**

Так как в условиях лаборатории выбросы в атмосферу характеризуются незначительным содержанием вредных газов и паров, то можно ограничиться только адсорбцией. Для этого в лаборатории на выходе вентиляционных труб

установлены перегородки, поверх которых уложен слой адсорбента. В качестве адсорбента наиболее часто используют активированный уголь. Воздушный поток, пройдя через слой адсорбента, очищается от вредных газов и паров.

Составы и классификация организованных выбросов в атмосферу приведены в таблице 6.5.

Таблица 6.5 – Составы и классификация организованных выбросов в атмосферу

Наименование газообразных выбросов	Составы организованных выбросов, % об.		Классификация выбросов вредных веществ по ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ
Газы регенерации	N <sub>2</sub> : 77 ÷ 99 Ar: 0,01 ÷ 0,92 O <sub>2</sub> : 0 ÷ 21 CO <sub>2</sub> : 0 ÷ 1,0	H <sub>2</sub> O: 0 ÷ 0,7 CO <sub>2</sub> : 0 ÷ 0,001 SO <sub>2</sub> : 0 ÷ 0,00004	A.01.0.1 A.02.0.1
Газы активации	N <sub>2</sub> : 79 ÷ 99,5 Ar: 0,01 ÷ 0,92 O <sub>2</sub> : 0,5 ÷ 21	H <sub>2</sub> O: 0 ÷ 1 CO <sub>2</sub> : 0 ÷ 1	–
Газы продувки от кислорода (перед пуском, после регенерации)	N <sub>2</sub> : 79 ÷ 99,5 Ar: 0,01 ÷ 0,92 O <sub>2</sub> : 0,5 ÷ 21	–	–
Газы продувки от углеводородов (перед остановкой, перед регенерацией)	В начале – углеводороды, затем – азот с примесью парафино-нафтеновых и ароматических углеводородов		Изменяется в ходе продувки от А.12.0.3. до А.12.0.1.

### 6.3.2 Воздействие на гидросферу

Все выбросы в канализацию также необходимо подвергать обезвреживанию и очистке. Отработанные органические сливы собираются в специальную герметически закрытую тару, которую по мере заполнения отправляют на обезвреживание и утилизацию [54].

Попадание жидких углеводородов на грунт и рабочие площадки возможно только в результате аварийного разлива нефтепродуктов. Жидкие отходы производства образуются в процессе эксплуатации установки – при проведении текущих и капитальных ремонтов оборудования, аппаратов и трубопроводов.

### **6.3.3 Воздействие на литосферу**

Согласно, отчета «Санитарно-токсикологическая оценка цеолитного катализатора марки КН-30» Новосибирского областного центра государственного санитарно-эпидемиологического надзора от 15.09.94г. отработанный и регенерированный катализатор токсикологическими свойствами не обладает – IV класс опасности (малоопасные вещества). Допустим вывоз отработанного катализатора на промышленные свалки и его хранение на площадках промтоходов.

Возможно использование отработанного катализатора в дорожном строительстве – в качестве наполнителя для бетонных покрытий, не несущих больших нагрузок – бетонные дорожки, площадки и т.п.

Твердые отходы (люминесцентные лампы и макулатура), которые могут отрицательно влиять на литосферу собираются в специальные контейнеры, которые вывозятся автотранспортом на городской полигон для захоронения промышленных отходов. Данные операции проводятся специализированными и аттестованными компаниями, имеющими лицензию на данный вид деятельности.

### **6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях**

В лаборатории наиболее вероятной чрезвычайной ситуацией является разлив нефтепродукта и его компонентов и, как следствие, пожар.

Наиболее вероятная чрезвычайная ситуация, которая может возникнуть при работе с персональным компьютером – пожар, так как в современных ЭВМ очень высокая плотность размещения элементов электронных схем, в непосредственной близости друг от друга располагаются соединительные провода и кабели, при протекании по ним электрического тока выделяется значительное количество теплоты, при этом возможно оплавление изоляции и возникновение возгорания.

В связи с этим, участки, на которых используется компьютерная техника, по пожарной опасности относятся к категории пожароопасных «В».



При пожаре люди должны покинуть помещение в течение минимального времени согласно плану эвакуации.

В помещениях с компьютерной техникой, недопустимо применение воды и пены ввиду опасности повреждения или полного выхода из строя дорогостоящего электронного оборудования.

Для тушения пожаров необходимо применять углекислотные и порошковые огнетушители, которые обладают высокой скоростью тушения, большим временем действия, возможностью тушения электроустановок, высокой эффективностью борьбы с огнем. Воду разрешено применять только во вспомогательных помещениях [55].

Помещение офиса должно быть оборудовано пожарными извещателями, которые позволяют оповестить дежурный персонал о пожаре.

При работе с персональным компьютером возникновение других видов ЧС – маловероятно.

#### **Вывод:**

Таким образом, можно заключить, что лаборатория и аудитория отделения химической инженерии в полном объеме соответствует требованиям, предъявляемым в области пожарной и производственной безопасности.

Рабочее место, где проводились работы при написании магистерской диссертации, отвечает всем требованиям, предъявляемым к нормам освещения, шума и микроклимата.

Так же важно отметить, что при надлежащем обращении с отходами и правильной их утилизации объект исследования и деятельность лаборатории не представляют опасности для экологии.

Работа выполнена в соответствии с нормативными документами и требованиями.

# СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СТУДЕНТА

№	Наименование работы, ее вид	Характер работы	Выходные данные	Объем, стр.	Соавторы
<b>Публикации в ведущих научных изданиях, входящих в базы Scopus или Web of Science: 1</b>					
1	Directions of transformation of the stable gas condensate hydrocarbons on a zeolite catalyst under zeoforming conditions	Печатная	Petroleum and Coal, 2020, Vol. 62, № 3, pp. 792-798.	7	Bogdanov I.A. Altynov A.A. Kirgina M.V.
<b>Публикации в ведущих рецензируемых научных Российских и зарубежных журналах и изданиях, входящих в перечень ВАК: 1</b>					
1	Направления превращений углеводородов стабильного газового конденсата на цеолитном катализаторе в условиях проведения цеоформинга	Печатная	Ползуновский вестник, 2020, № 3, с. 60-65.	8	Богданов И.А. Алтынов А.А. Киргина М.В.
<b>Доклады и тезисы докладов, опубликованные в материалах российской, международной (всероссийской) конференции: 6</b>					
1	Расчет термодинамических характеристик реакций перераспределения водорода в олефинах в процессе цеоформинга н-гексана	Печатная	Труды XXIV Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых учёных, посвященного 75-летию Победы в Великой Отечественной войне, Томск, 2020, Т. 2, с. 291-292.	2	Богданов И.А. Киргина М.В.
2	Оценка термодинамической вероятности протекания реакций крекинга н-парафинов в условиях проведения цеоформинга стабильного газового конденсата	Печатная	Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, Томск, 2020, с. 385-387.	2	Богданов И.А.
3	Оценка термодинамической вероятности протекания реакций образования ароматических углеводородов в условиях проведения цеоформинга н-гексана	Печатная	Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, Томск, 2020, с. 383-385.	2	Богданов И.А.
4	Assessment the thermodynamic probability of aromatic hydrocarbon formation reactions occurrence under the conditions of n-hexane zeoforming	Печатная	Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, Томск, 2020, с. 531-532.	2	Bogdanov I.A.
5	Формализованная схема превращения углеводородов в процессе переработки парафинов C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> на цеолите	Печатная	Химия нефти и газа: материалы XI Международной конференции, посвящённой 50-летию Института химии нефти СО РАН, Томск, 2020, с. 168.	1	Богданов И.А. Киргина М.В.

6	Расчет термодинамических характеристик реакций изомеризации и крекинга н-гексана в условиях проведения процесса цеоформинга	Печатная	XXIII Всероссийская конференция молодых учёных-химиков, Нижний Новгород, 2020, с. 505	1	Богданов И.А. Киргина М.В.
7	Оценка термодинамической вероятности протекания реакций перераспределения водорода в олефинах с образованием диолефинов	Печатная	XXIV Всероссийская конференция молодых учёных-химиков, Нижний Новгород, 2021, с. 237	1	Багдасарян Н.С.
8	Формализованная схема образования ксилолов и этилбензола перераспределением водорода в олефинах при переработке на цеолите	Печатная	Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, Томск, 2021, с. 67-68.	2	Алтынов А.А.
9	Formalized scheme for the formation of xylenes and ethylbenzene by hydrogen transfer reactions in olefins during processing on zeolites	Печатная	Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, Томск, 2021, с. 208-209.	2	Altynov A.A.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Снытников П.В., Потемкин Д.И., Усков С.И. и др. Подходы к использованию факельных газов на нефтяных и газовых месторождениях: обзор. Катал. Инд. 2018. – № 10. – С. 202-216.
2. Степанов В.Г., Ионе К.Г. Цеоформинг – перспективный процесс производства неэтилированных автомобильных бензинов. Химия и технология топлив и масел, 2000. – № 1. – С. 8-12.
3. Малахов В.М., Сенич В.Н. Тепловое загрязнение окружающей среды промышленными предприятиями: Аналит. обзор / СО РАН ГПНТБ; АООТ НПФ «Техэнергохимпром»; ООО «Химмашэкология». – Новосибирск, 1997. – 69 с.
4. Тенденции российской нефтеперерабатывающей отрасли. ФГБУ «РЭА» Минэнерго России [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: [https://www.cdu.ru/tek\\_russia/articles/2/556/](https://www.cdu.ru/tek_russia/articles/2/556/) – Дата обращения 02.04.2021.
5. Савенкова И.В., Овчаров С.Н. Комплексное облагораживание бензиновых фракций. Вестник АГТУ, 2007 – № 6. – С. 41.
6. Устройство подготовки попутных нефтяных газов для использования в энергоустановках Rusneb.ru [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: <https://sciact.catalysis.ru/ru/public/patent/1684> – Дата обращения 03.04.2021.
7. Научно-производственное объединение ЭТН – Циклон. [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: <http://nppetn.tomsk.ru/WR-Tehnology%20NPO%20ETN-Cyclone%20RUS.pdf> – Дата обращения 03.04.2021.
8. Ечевский Г.В. Новая энерго- и ресурсосберегающая технология получения высококачественных моторных топлив из средних нефтяных дистиллятов и газовых конденсатов – БИМТ / Г.В. Ечевский, О.В. Климов, О.В. Кихтянин, Д.Г. Аксенов, Е.Г. Коденев, М.Р. Яруллин, Г.Г. Гарифзянова, Г.Г. Гарифзянов // Катализ в промышленности. – 2013. – № 2. – С. 60-66.
9. Способ переработки легкого углеводородного сырья FinfPatent.ru [Электронный ресурс]. –

Электрон. дан. URL: <https://findpatent.ru/patent/204/2041918.html> – Дата обращения 12.04.2021.

10. Восмериков А.В., Терентьев А.И., Барбашин Я.Е., Хлытин А.Л. Катализаторы гидрооблагораживания низкооктановых бензиновых фракций. ВЦК, 2015 – № 7. – С. 85-86.

11. Крылов О.В. Гетерогенный катализ. – М.: Академкнига. – 2004. – 756 с.

12. Раздаточные материалы Chemistry-online.it [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: <https://www.chimica-online.it/materiali/immagini/gabbia-della-sodalite> – Дата обращения 05.04.2021.

13. Lassinanti M. Synthesis, characterization and properties of zeolite films and membranes // Micropores and Mesopores Materials. – 2001. – P. 25-63.

13. Применение цеолитов [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: <http://www.chimdocet.it/solido> – Дата обращения 25.03.2021.

14. Baerlocher C. Database of zeolite structures / C. Baerlocher, L.B. McCusker. [Electronic resource]. - Electron. dan. URL: <http://www.iza-structure.org/databases-> Accessed on 31.03.2021.

15. Weitkamp J. Zeolite and catalysis / J. Weitkamp // Solid State Ionics. – V. 131. – N. 1-2. – 2000. – P. 175-188.

16. Голубева О.Ю. Пористые алюмосиликаты со слоистой и каркасной структурой: синтез, свойства и разработка композиционных материалов на их основе для решения задач медицины, экологии и катализа: Автореф. дис. д.х.н. / О.Ю. Голубева, 2016. – 25 с.

17. Treacy M.M.J., Higgins J.B. Collection of simulated XRD Powder patterns for zeolites: Elsevier B.V., 2007. – P. 477-485.

18. Жданов С.П., Феоктистова Н.Н., Козлова Н.И. и др. Силикаты и их термическая стабильность. [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: <https://doi.org/10.1007/BF00953007> – Дата обращения 06.04.2021.

19. Инженерная экология [Текст]: монография. В 3 т. Т. 1 / В.М. Малахов, А.Г. Гриценко, С.В. Дружинин. – Новосибирск: СГГА. – 2012. – 290 с.

20. Szostak R. Molecular sieves. Principles of synthesis and identification / R. Szostak // London: Thomson Science, 1992. – 359 p.

21. Машина В.В. Моделирование оптимального режима выделения товарного продукта процесса цеоформинга // Материалы VI Международной студенческой научной конференции «Студенческий научный форум» [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: <https://scienceforum.ru/2014/article/2014001781> – Дата обращения: 14.04.2021.

22. Хомяков Иван Сергеевич. Переработка легкого углеводородного сырья на алюмо- и железосиликатном высококремземном цеолите // ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет. – 2016 – № 4. – С. 41-43.

23. Величкина Л.М. Отечественные технологии безводородной переработки низкооктановых бензиновых фракций на цеолитсодержащих катализаторах // Химическая технология. – 2008. – № 4. – С. 1580-165.

24. Schenk M. Understanding Zeolite Catalysis: Inverse Shape Selectivity Revised / M. Schenk, S. Calero, T.L.M. Maesen, L.L. van Benthem, M.G. Verbeek, B. Smit // Angewandte Chemie International Edition. – 2002. – V. 41. – 2500 p.

25. Ровенская С.А., Островский Н.М. Кинетическая модель процесса превращения сырья различного состава на цеолитах в условиях «Цеоформинга» // Омский научный вестник – 2003. – № 1. – С. 31-33.

26. Заикин М.А. Превращение n-алканов на модифицированных цеолитных катализаторах: Автореф. дис. канд. хим. наук: 02.00.04 / Заикин Михаил Алексеевич. – М., 2019. – 98 с.

27. Хомяков И.С. Превращение бензиновой фракции в высокооктановые компоненты бензина на модифицированных цеолитных катализаторах: Автореф. дис. канд. хим. наук: 02.00.13 / Хомяков Иван Сергеевич. – Томск – 2014. – 36 с.

28. Алтынов А.А., Богданов И., Темирболат А.М., Белинская Н.С., Киргина М.В. // Нефтепереработка и нефтехимия. 2019. № 11. С. 9-14.

29. Технический регламент Таможенного союза ТР ТС 013/2011 «О требованиях к автомобильному и авиационному бензину, дизельному и судовому топливу, топливу для реактивных двигателей и мазуту (с изменениями на 2 декабря 2015 года)» [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru>.

30. ГОСТ 32513-2013 «Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия». М.: Стандартинформ, 2014 – 16 с.

31. ПАО «Новосибирский завод химконцентратов» [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: [http://www.nccp.ru/products/zeolite\\_catalysts/](http://www.nccp.ru/products/zeolite_catalysts/). свободный – Дата обращения 17.04.2021 г.

32. ГОСТ 32507-2013 «Бензины автомобильные и жидкие углеводородные смеси. Определение индивидуального и группового углеводородного состава методом капиллярной газовой хроматографии».

33. Моделирование и методы расчета физико-химических свойств углеводородных систем / Фу Фан и др. // Известия Томского политехнического университета [Известия ТПУ]. – 2010. – Т. 316, № 3: Химия. – С. 58-62.

34. Boston University Information Services and Technology [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: <https://www.bu.edu/tech/support/research/software-and-programming/gaussian/>. свободный – Дата обращения 18.04.2021 г.

35. Ochterski J.W. Thermochemistry in Gaussian. 2000. 19 p.

36. Полещук О.Х., Кижнер Д.М. Химические исследования методами расчета электронной структуры молекул: Учебное пособие. – Томск: Изд-во ТГПУ, 2006. – 146 с.

37. Технология переработки нефти, газа и твердых горючих ископаемых: Учебное пособие / С.А. Ахметов, М.Х. Ишмияров, А.А. Кауфман; Под ред. С.А. Ахметова. – СПб.: Недра, 2009. – 832 с.

38. Воробьев Б.Л. Кинетика ароматизации легких алканов на высококремнистых цеолитных катализаторах / Б.Л. Воробьев, А.В. Кравцов, Ю.Н. Кошелев // Нефтехимия. – 1992. – Т. 32. – № 3. – С. 306-314.

39. Колинко П.А., Козлов Д.В. Химическая кинетика в курсе физической

- химии: Учебно-методическое пособие. – Новосибирск: Изд-во НГУ, 2013. – 72 с.
40. Алов А. «Цеоформинг» – обыкновенное чудо / А. Алов // Портал рекламистов Новосибирска. – 2016. – № 10. – Режим доступа: URL: <http://www.gorn.pro/archive/2016/10/1977613/> (Дата обращения: 29.04.2021).
41. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / Н.А. Гаврикова, Л.Р. Тухватулина, И.Г. Видяев, Г.Н. Серикова, Н.В. Шаповалова; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 73 с.
42. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 20.04.2020).
43. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.
44. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений: санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.2.4.548-96: утверждены Постановлением Госкомсанэпиднадзора России от 1 октября 1996 г., № 21. Москва.
45. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95\*.
46. ГОСТ 12.1.002-84 ССБТ. Электрические поля промышленной частоты. Допустимые уровни напряженности и требования к проведению контроля на рабочих местах. М.: ИПК Издательство стандартов, 2002. – 8 с.
47. ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности.
48. ГОСТ Р ИСО 9355-2-2009. Эргономические требования к проектированию дисплеев и механизмов управления. Часть 2. Дисплей.
49. СП 2.2.3670-20. Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда.
50. Федеральный закон от 22 июля 2008 г. № 123-ФЗ Технический регламент о требованиях пожарной безопасности [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: [http://www.consultant.ru/document/cons\\_doc\\_LAW\\_148963/](http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_148963/). свободный. – Дата обращения: 27.04.2021 г.



51. ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.

52. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов. – М.: Стандартиформ, 2008. – 20 с.

53. ГОСТ 12.1.010-76. Взрывобезопасность. Общие требования. – М.: ИПК Издательство стандартов, 2003. – 7 с.

54. ГОСТ 17.1.3.13-86. Охрана природы. Гидросфера. Общие требования к охране поверхностных вод от загрязнений.

55. ГОСТ Р 22.0.01-2016. Безопасность в ЧС. Основные положения.

# Приложение А

(справочное)

## Mathematical modeling of C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub> paraffin zeoforming

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Марданов К.Э.		

Руководитель ВКР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Киргина М.В.	к.т.н.		

Консультант-лингвист отделения иностранных языков ШБИП:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Терре Д.А.	к.фил.н.		

## 1.1 Light hydrocarbon feedstock

Modern trends in the strategic development in oil and gas processing industry and petrochemical industry are associated with increasing the depth of processing of raw materials, increase in the share of new processes and technologies, as well as the toughening of requirements due to introduction of the new standards for motor fuels, provided to increase environmental safety; setting new, stricter requirements for light hydrocarbons, in particular, to stable gas condensate (SGC), associated petroleum gas (APG) and straight-run gasoline fractions, which play a key role in the processes of oil refining and petrochemistry.

Today, light hydrocarbon feedstock is used irrationally – it is mixed with commercial oil to improve its rheological properties, although significant material and time costs are required for its extraction. Over the recent years, according to various estimates, in the northern regions of Siberia, the Far East and other oil-producing areas of Russia, about 20-60 billion m<sup>3</sup> of APG and SGC are produced [1], they are still subject to annual flaring or injection back into the well, though commercial oil products can be manufactured from this raw material.

New oil and gas producing areas located at a distance of 2000-4000 km from major cities of the country that do not have their own oil refineries do not have the opportunity for industrial development, since the transportation of extracted gas condensate to existing operating enterprises is not economically justified. Such areas are completely dependent on the supply of motor fuels from industrially developed areas.

A distinctive feature of oil refining capacity in Russia is a relatively large share (~60 %) of plants with production rate of 15-25 million tons per year, while in the United States and Canada, the share of such plants is ~16 %. However, the number of low-tonnage production plants (from 3 million tons per year and less) in Russia is 2 %, compared to North America, where low-tonnage fuel production accounts for about 30 %, with regions evenly distributed over the area [2].

Due to incomplete processing and lack of cost-effective technologies, 30-40 % of hydrocarbons produced in the country are burned annually or disposed of,

polluting the environment [3]. Along with this, the world's hydrocarbon reserves are decreasing and there is the need to increase the depth of oil refining.

According to the Ministry of Energy of the Russian Federation, the crude oil and gas condensate refining capacity in 2018 was 83.4 %, in 2017 this indicator did not exceed 81.3 %, and in 2010 – 70.9 %. Thus, there is a noticeable increase in the processing of oil and gas condensate. Compared to the situation in Russia, in the United States the depth of oil refining was 90-95 %, and at the most modern American refineries, this values reaches 98 %, in OPEC countries – 85%, in Europe 85-90 % [4].

A significant increase in the consumption of motor fuels in difficult-to-access areas of oil, gas and gas condensate production sets the task of providing high-quality motor fuels for the needs of these areas.

The solution to this problem is the construction of low-tonnage production modular installations directly in the production sites using efficient technologies based on the use of zeolites as catalysts. Using mini-refineries, it is possible to provide comprehensive processing of light hydrocarbon feedstock close to consumers and significantly reduce prices for various motor fuels, including the cost of their transportation.

The authors in [5] describe a solution for supplying motor fuel to difficult-to-access regions of Russia by putting low-tonnage oil production facilities (mini-refineries) into operation, using devices which include atmospheric distillation apparatuses and processes for obtaining two high-octane components from different gasoline fractions and gas condensate. The proposed technology is based on the processes of aromatization and isomerization of various fractions in a single production, which makes it possible to obtain high-octane components of gasoline using metal-modified zeolite catalysts in an anhydrous environment.

In [6], the authors propose a technology for soft steam reforming (MPR) of associated petroleum gas by catalytic conversion of all contained hydrocarbons above  $C_{2+}$  on a zeolite catalyst containing nickel (no more than 20 % by weight) as the active component in various combinations with oxides of aluminum, silicon,

transition, rare earth elements, alkaline or alkaline earth metals. This technology requires the process temperature of 450 °C and makes it possible to obtain cheap and high-quality motor fuel to meet the needs of production equipment, regardless of the composition of the initial associated petroleum gas (APG). The processing is carried out in block-modular installations that can be transported to remote fields.

The authors in [7] developed and put into production a direct gas condensate conversion unit. This method makes it possible to successfully process light and heavy oils, gas condensates and mixtures of hydrocarbon feedstock in a reactor with a fixed layer of zeolite catalyst at a process temperature of 320-420 °C on the same technological installation using WR technology (derived from English Whirl Refinery).

Based on the research carried out by G.K. Boreskova in Institute of Catalysis SB RAS together with OJSC «Plazmokhim», a single-stage technique for processing medium distillates or unstable gas condensates into high-octane gasoline was developed [8]. The method makes use of IK-30-BIMT zeolite catalyst, which does not contain precious metals, in reactors with a stationary layer at a temperature of 350-450 °C and a pressure of  $\leq 2$  MPa. The conducted experimental tests have confirmed the possibility of obtaining AI-80 and AI-92 gasolines with a yield of liquid products of 86-88 % by weight.

The efficient use of gas condensate and improvement of its properties is an important practical task.

A stable condensate is a liquid consisting of heavy hydrocarbons, in which no more than 2-3 % of the mass of the propane-butane fraction or other components are dissolved, and which is obtained from unstable condensate by degassing.

The density of gas condensate varies depending on the hydrocarbon composition in the range from 700 to 840 kg/m<sup>3</sup>.

The group composition of the condensates is diverse and depends on the field conditions where gas condensate is produced.

As it has been mentioned above, the quality of automobile gasoline is strictly regulated. International environmental standards significantly restrict the active use

of aromatic hydrocarbons as high-octane additives, in particular benzene and toluene, as well as methyltertiarybutyl ester (MTBE). Therefore, for the production of high-octane components of gasoline, the C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub> reactions resulting in the production of branched products with a high octane number acquire practical importance. These compounds can be obtained as a result of zeoforming normal paraffins through processing stable gas condensate, which mainly contains n-pentanes, n-hexanes and n-heptanes, using a catalyst with increased molecular-sieve selectivity for the conversion of n-paraffin hydrocarbons and high stability of the catalytic action. The zeolite catalyst with similar characteristics can be of ZSM-5 type.

A method for producing high-octane gasoline based on zeoforming low-octane straight-run gasoline fractions with the boiling point of 180 °C and a fraction with a boiling range of 85-180 °C of gas condensate using zeolite-containing catalysts of ZSM-5 structure was considered in [10]. The test results have showed that the concentration of benzene in gasoline, formed during the refinement of these gasoline fractions, does not exceed 0.9 % by volume, with the total content of aromatic hydrocarbons being 35-38 % by volume, and the octane number according to the research method is 88-89 points.

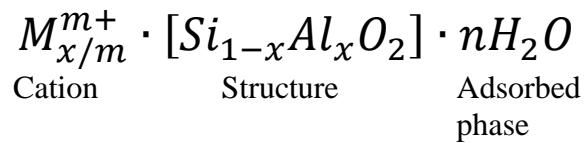
Thus, the obtained test results of catalysts prepared on the basis of ZSM-5 zeolite indicate the prospects of their application to the refining of straight-run gasoline fractions of various origins.

## **1.2 Zeolite-containing catalysts**

The current efficiency of oil refining and petrochemical production is largely based on the use of highly active, selective, long lasting and environmentally friendly zeolites used as catalysts.

Zeolites are microporous crystalline alum inosilicates, the main structural units of which are regular SiO<sub>4</sub> and AlO<sub>4</sub> tetrahedron interconnected by oxygen atoms. The O-T-O bond angle, where T – atoms of silicon or aluminum, deviates from the regular tetrahedral angle (109°28') by 2-3° [11]. The composition of zeolites can be

described as follows: the external cation, the framework, and the sorbed phase. The chemical formula of zeolite is shown below:



The properties of zeolites depend on the topology of its framework, the size, shape and availability of its free channels, as well as on the charges of cations, located in the pores of the zeolite. Figure 1.1 shows the representations of a sodalite cell – an elementary structural unit included in the zeolite framework, as well as the structure of the sodalite framework SOD; A, X and Y, and ZSM-5 zeolites [12].

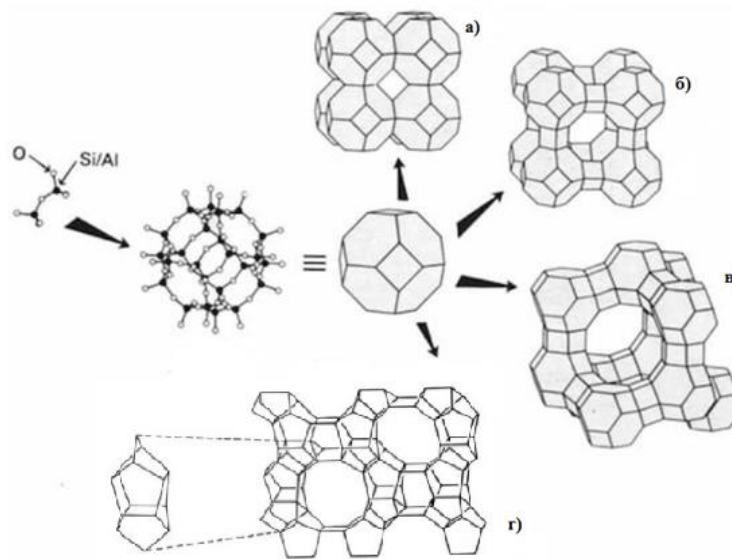


Figure 1.1 – Representations of zeolite sodalite cells:

A – sodalite (SOD); b – A zeolite (LTA);

c – X, Y zeolite (FAU); d – ZSM-5 zeolite (MFI)

Each silicon ion has a +4 charge balanced by four oxygen ions at the vertices of the tetrahedron, so silicon-oxygen tetrahedra have an electrically neutral charge. Aluminosilicate tetrahedra, in turn, have a residual negative charge of -1, since  $Al^{+3}$  have a coordination number of four. Therefore, for the complete neutrality of the aluminosilicate itself, the base charge in  $AlO_4$  must be balanced by the presence of external cations.

The cations, single- and double-charged alkaline, alkaline earth, rare earth, and organic cations, are introduced into the zeolite structure during its preparation [13].

These cations are interchangeable ions, and depending on the type of cation, they impart certain chemical properties to zeolite-containing materials. For example, when  $\text{Na}^+$  ions are replaced by  $\text{Ca}^{2+}$  ions, access to pores increases. When approximately one-third of the  $\text{Na}^+$  ions is replaced, many straight-chain hydrocarbons can be adsorbed, while branched hydrocarbons become too large to penetrate the pores. This process is used in industry to separate straight chain low-octane hydrocarbons in gasoline production.

Zeolites do not change their catalytic activity depending on the preparation method. The catalytic activity of zeolites is due to acid centers originating from tetrahedral  $\text{AlO}_4$  units in the structure. They can act as both Bronsted and Lewis acid centers [14], which is shown in Figure 1.2.

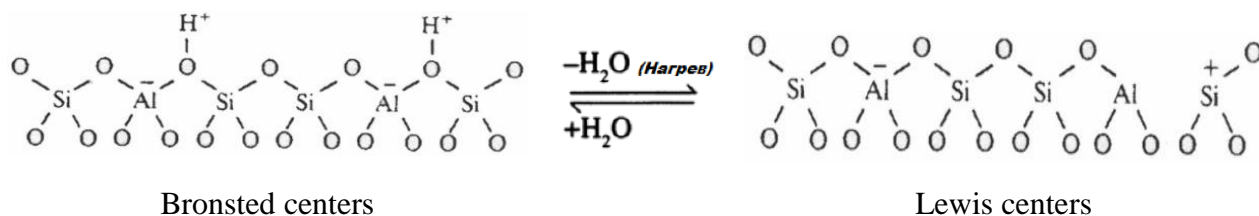


Figure 1.2 – Scheme of proton-alumosilicate interaction

Thus, the zeolite surface can have both Bronsted and Lewis acid centers. The Bronsted centers transform into the Lewis centers at temperatures above 600 °C. Also, as the Si/Al ratio increases, the cation content decreases and zeolites show greater hydrothermal stability, lower density of acid centers, but with an increase in the strength of individual acid centers.

More than 130 zeolites with different structures are currently known [15]. Figure 1.3 shows the scaffolds and pore sizes of the most common industrial zeolite systems. The crystalline nature of the framework ensures the regularity of the porous structure, which makes it possible to achieve high selectivity in catalysis. The ability to act as molecular sieves allows the selection of molecules that can access the active sodalite cell of the zeolite (shape selectivity).



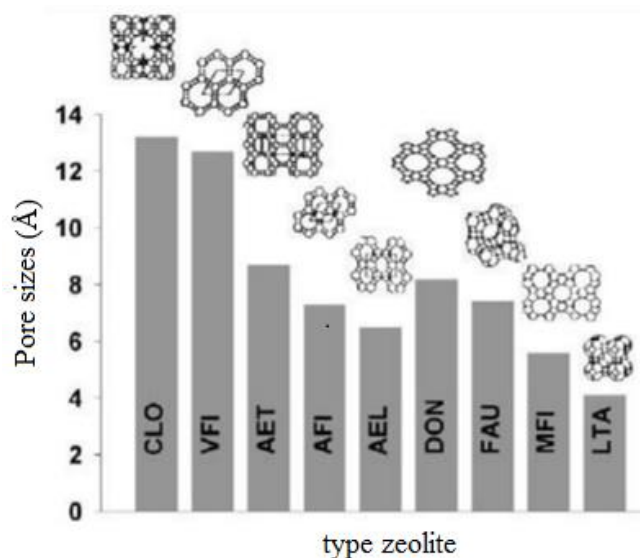


Figure 1.3 – Pore sizes of different zeolites [15]

Unlike other catalytic systems, in which activity is limited to the outer surface, in zeolites all atoms participate in the processes. The typical surface area of zeolites is from 300 to 700 m<sup>2</sup>/g [16]. The size of the holes that regulate access to the inner pores depends on the number of T and O atoms in the rings and varies from 2Å to 15Å.

According to [17], based on pore sizes, zeolites can be divided into:

- narrow-pore zeolites containing small micropores of 0.3-0.45 nm (A zeolite);
- zeolites with average pore size, usually formed by 10-membered rings (0.4-0.6 nm, pentasyll, ZSM-5);
- coarse-pore zeolites with pore sizes of 0.6-0.8 nm formed by 12-partrings (faujasites);
- zeolites with extra-large (>0,8 nm) pore sizes (mordenite).

As a rule, the internal pores of zeolites are occupied by water (sorbed phase), formed during their synthesis. Adsorbed water and some organic cations can be removed by heat treatment in the presence of air, which frees up a regular system of channels and cavities, the pore volumes of which can vary from 0.1 to 0.35 cm<sup>3</sup>/g [18]. The structural integrity of zeolites is preserved even after the removal of water from the adsorbed phase, which distinguishes them from other porous hydrates, in which the loss of crystallization water is accompanied by significant structural changes.

The development of new catalysts and processes that will produce automobile gasoline with a sufficiently high octane rating, which can meet modern needs for a virtually waste-free, environmentally friendly and economically viable technology, is very relevant.

One of the new processes for the production of high-octane unleaded gasoline from hydrocarbon feedstock of various origins is zeoforming, which is based on the use of a new artificially synthesized ZSM-5 zeolite-containing KN-30 catalyst.

New technology, referred to as "Zeoforming", developed and patented at the Institute of catalysis of SB RAS and SIC "Zeosit" of the OIC SB RAS, is used for the processing of stable gas condensate (SGC), low-octane hydrocarbon fractions of crude oil (straight-run gasoline), associated gas and other light hydrocarbons, with the end point of 200 °C and a sulfur content up to 1.5 % [19].

The technology is based on the catalytic conversion of low-octane hydrocarbons to high-octane ones on zeolite-containing catalysts without the introduction of any additives and additional compounding.

The environmentally friendly system of specially created effective KN-30 catalyst corresponding to ZSM-5 zeolite does not contain noble metals or heavy ones. High-silicon synthetic ZSM-5 zeolites (MFI) of the pentasil family are of particular practical interest.

This particular type of zeolite is considered in the present research, as it is the common catalyst in gas condensate processing. ZSM-5 zeolite (MFI) is widely used in the oil refining and petrochemical industries due to its porous structure, wide range of Si/Al ratios, hydrophobicity and high thermal stability.

The porous structure of ZSM-5 zeolite (MFI), shown in Figure 1.4, is formed by intersecting straight and sinusoidal channels with an elliptical cross-section with a diameter of about 5.5Å [20].

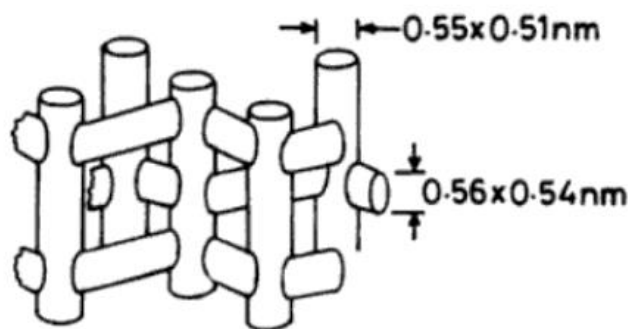


Figure 1.4 - Structure of ZSM-5 (MFI) zeolite channels [20]

More than 50 chemical reactions take place on the zeolite as the main component of the catalyst. The hydrocarbon reactions based on ZSM-5 (MFI) zeolites include cracking, isomerization, hydrogen redistribution, oligomerization, aromatization, alkylation, disproportionation, and other reactions.

The zeoforming of light hydrocarbon feedstock of various origins using zeolite-containing catalysts becomes more promising in small-scale production, compared to traditional catalytic reforming on aluminum-platinum or polymetallic catalysts. A distinctive feature of zeolite catalysts is that they are created on the basis of an environmentally friendly high-silica zeolite system, and as they do not contain noble metals, they are cheaper, but at the same time highly efficient and are not sensitive to the increased content of sulfur in the raw material.

### **1.3 Mathematical modeling of light hydrocarbon feedstock processing using zeolites**

Conducting experimental studies in industrial installations to the extent that ensures the reliability of research is time-consuming, costly and does not guarantee any results of practical significance. The most effective solution to this problem of optimizing the operation of the reactor and heat exchange equipment can be the development of an adequate mathematical model based on the physico-chemical regularities of technological reactions with a high prognostic potential.

The development of a mathematical model of the oil and gas refining process includes several stages of implementation. At the initial stage of constructing a mathematical description of the process, it is necessary to study the theoretical and

experimental regularities of the process, as well as determine the group composition of the raw materials used and the products of its processing. Then it is necessary to perform a thermodynamic analysis of the expected reactions, occurring on the catalyst. Based on the results of the analysis, one can make a conclusion about the probability of a particular reaction and draw up a formalized scheme of hydrocarbon transformations.

Drawing up a formalized scheme for the transformation of hydrocarbons and evaluating their reactivity is an important stage in the development of mathematical description, since the accuracy of model calculations depends on the level of detail of the mechanism of chemical reactions.

The emission of high-octane gasolines in the process of zeoforming on ZSM-5 zeolite-containing KN-30 catalysts involves a number of series-parallel acid-base reactions that proceed in accordance with the carbon-ion mechanism.

The conversion of hydrocarbons takes place in two main stages. At the first, limiting stage of this process, intermediate olefins are formed by breaking the C-C bond in paraffin hydrocarbons, and at the second stage paraffin and aromatic hydrocarbons are formed by hydrogen redistribution in olefins [23]. In addition to these fundamental reactions, there are also reactions of isomerization of paraffins and naphthenes; alkylation of isoparaffin and aromatic hydrocarbons with intermediate olefins; disproportionation of aromatic hydrocarbons (Figure 1.6).

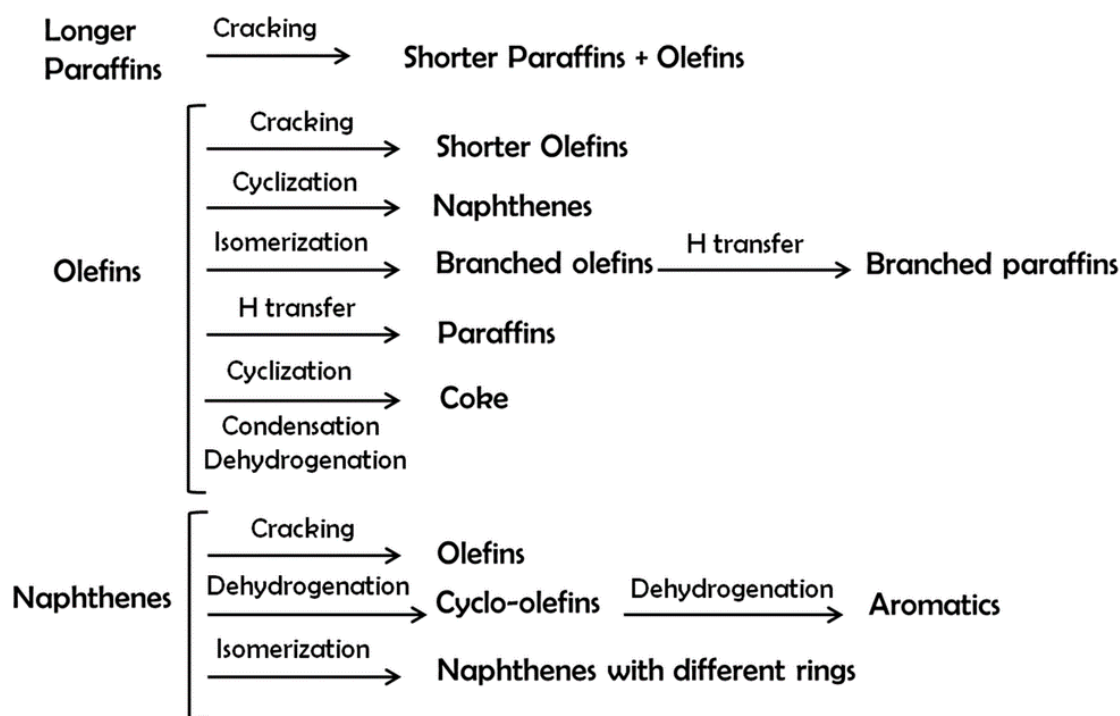


Figure 1.6 – Simultaneously occurring elementary reactions in zeoforming with ZSM-5 catalyst

Dehydrogenation reactions are insignificant. If zeoforming applied, the yield of gasoline with a fixed octane number largely depends on the hydrocarbon composition of the raw material. Gasolines with the required octane number can be obtained from the same feedstock by varying the reaction temperature at a constant operating pressure and volumetric feed rate.

Isomerization of linear paraffins is a thermodynamically controlled process, and its equilibrium composition depends on temperature. The general trend is that isomerization reactions slow down with increasing temperature. Therefore, from a thermodynamic point of view, it is convenient to work at the lowest possible temperature. Thus, the role of the catalyst is to increase the reaction rate, allowing the reaction to reach equilibrium at the lowest possible temperature.

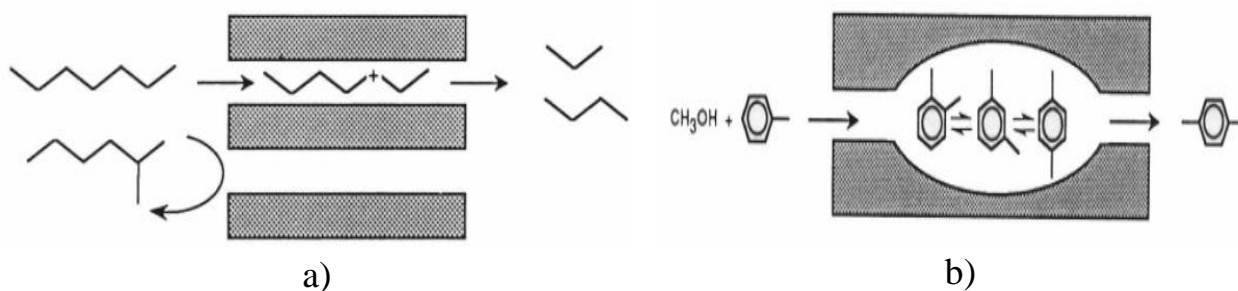
Hydrogen sulfide molecules and intermediate olefins are formed as a result of breaking C-S bonds at the first stage of transformation of mercaptans, sulfides, and their derivatives. Then the intermediate olefins are converted into paraffinic and aromatic hydrocarbons, and hydrogen sulfide is separated together with the by-products of the process C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> gases [24].

A large number of series-parallel reactions of conversion and synthesis of C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub> hydrocarbons take place on zeolite-containing catalysts. Since stable gas condensate is used as a raw material, and the resulting gasoline is a mixture of the same hydrocarbons, but of different composition, the catalyst for producing high-octane gasoline must meet a number of requirements.

One of the main requirements is the conversion of low-octane components of the feedstock (n-paraffins) into high-octane components (isoparaffinic and aromatic hydrocarbons) without subjecting the latter to destruction, i.e. to have certain properties of a molecular sieve.

Specifically developed for this process, zeolite-containing KN-30 catalysts have these properties and a specific composition of active sites. The structure of its pores is a steric constraint, and this feature determines selectivity of chemical reactions [25]:

- reagent selectivity: only molecules with sizes smaller than the critical value can penetrate the pores and reach the active sites. For example, a linear hydrocarbon can be activated, but a branched – one cannot (Figure 1.7a).
- product selectivity: only products of a certain size can leave the active sites and diffuse through the channels, as shown in Figure 1.7b as in case of xylene. Three isomers can form in zeolite cavities, but only one paraform can escape.
- transition state selectivity: some reactions do not occur because the transition state requires more space than is available in the cavities. An example is transalkylation of dialkylbenzenes which is shown in Figure 1.7.



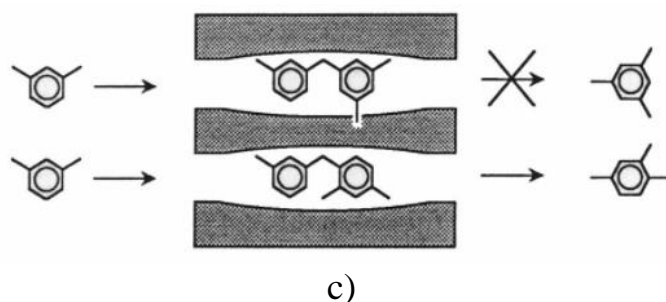


Figure 1.7 – Types of form-selective catalysis [25]

In the current literature, a small number of works are devoted to modeling and optimization of the zeoforming process.

The author in [27] proposes a scheme for the transformation of hydrocarbons on the surface of high-silicon zeolites, shown in Figure 1.9, where the main reactions also include the alkylation of alkanes and arenes by intermediate olefin fragments, the isomerization of alkanes and cycloalkanes, and the disproportionation and isomerization of arenes.

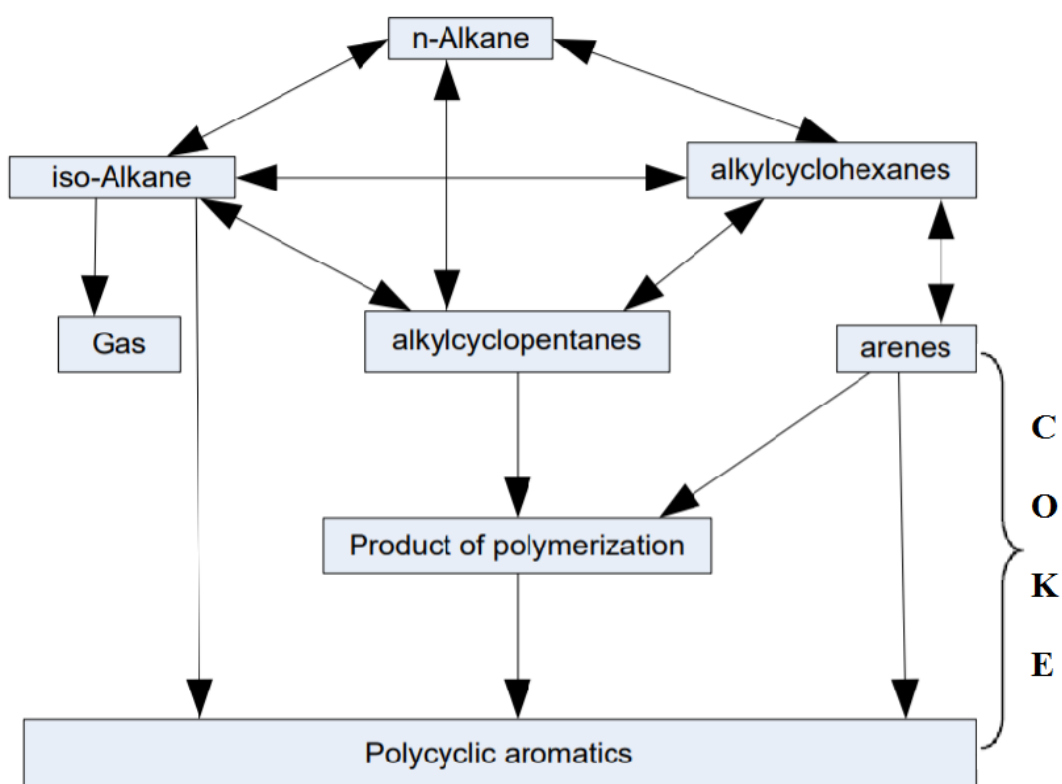


Figure 1.9 – Scheme of hydrocarbon conversion using zeolite catalysts [27]

Thus, the conversion of hydrocarbons on zeolites is a multi-route process consisting of a number of series-parallel reactions.