

Школа **Инженерная школа природных ресурсов**
 Направление подготовки **18.03.01 Химическая технология**
 Отделение школы (НОЦ) **Отделение химической инженерии**

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Математическое моделирование процесса каталитического крекинга

УДК 665.644:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д7В	Бобу Анатолий Григорьевич		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Юрьев Е.М.	К.Т.Н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Спицына Л.Ю.	К.Э.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Гуляев М.В.	-		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Юрьев Е.М.	К.Т.Н.		

**ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП
18.03.01 Химическая технология**

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС ВПО, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р1	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ПК-1, 2, 3, 19, 20), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), СДИО (пп. 1.1, 4.1, 4.3, 4.8)
Р2	Применять знания в области современных химических технологий для решения производственных задач.	Требования ФГОС (ПК-7, 11, 17, 18, ОК-8), Критерий 5 АИОР (пп. 1.1, 1.2), СДИО (пп. 1.1, 3.2, 4.2, 4.3, 4.5, 4.6)
Р3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии.	Требования ФГОС (ПК-1, 5, 8, 9, ОК-2,3), Критерий 5 АИОР (п. 1.2), СДИО (пп. 1.2, 2.1, 4.5)
Р4	Разрабатывать <i>новые</i> технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии, <i>проектировать объекты химической технологии в контексте предприятия, общества и окружающей среды.</i>	Требования ФГОС (ПК-11, 26, 27, 28), Критерий 5 АИОР (п. 1.3), СДИО (пп. 1.3, 4.4, 4.7)
Р5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий.	Требования ФГОС (ПК-4, 21, 22, 23, 24, 25, ОК-4,6), Критерий 5 АИОР (п. 1.4), СДИО (п. 2.2)
Р6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, <i>выводить на рынок новые материалы</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.	Требования ФГОС (ПК-6, 10, 12, 13, 14, 15, ОК-6, 13, 15), Критерий 5 АИОР (п. 1.5), СДИО (пп. 4.1, 4.7, 4.8, 3.1, 4.6)

Общекультурные компетенции		
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-5, 9, 10, 11), Критерий 5 АИОР (пп. 2.4, 2.5), CDIO (п. 2.5)
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1, 2, 7, 8, 12), Критерий 5 АИОР (п. 2.6), CDIO (п. 2.4)
P9	<i>Активно</i> владеть <i>иностраным языком</i> на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-14), Критерий 5 АИОР (п. 2.2), CDIO (пп. 3.2, 3.3)
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, <i>демонстрировать лидерство в инженерной деятельности и инженерном предпринимательстве</i> , ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.	Требования ФГОС (ОК-3, 4), Критерий 5 АИОР (пп. 1.6, 2.3), CDIO (пп. 4.7, 4.8, 3.1)

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

Инженерная школа природных ресурсов
 Отделение химической инженерии
 Направление 18.03.01 Химическая технология
 Профиль «Химическая технология подготовки и переработки нефти и газа»

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

**ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

бакалаврской работы

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

Студенту:

Группа	ФИО
2Д7В	Бобу Анатолий Григорьевич

Тема работы:

Математическое моделирование процесса каталитического крекинга	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	33-23/с от 02.02.2021 г.

Срок сдачи студентом выполненной работы:

	01.06.2021 г.
--	----------------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объект исследования – установка каталитического крекинга. Сырьём установки является вакуумный дистиллят.</p> <p>Режим работы – непрерывный.</p> <p>Установка каталитического крекинга предназначена для производства компонентов бензина, дизельного топлива, тяжёлого газойля, жирного газа, являющегося сырьём для нефтехимических процессов.</p>
---	--

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>1 Введение</p> <p>2 Анализ современного состояния технологии каталитического крекинга</p> <p>2.1 Современные технологии каталитического крекинга нефтяного сырья</p> <p>2.2 Современные каталитические композиции для крекинга высокомолекулярных нефтяных фракций</p> <p>2.3 Физико-химические основы процесса крекинга нефтяного сырья</p> <p>2.4 Моделирование процесса каталитического крекинга нефтяного сырья</p> <p>3 Объект и методы исследования</p> <p>4 Разработка и применение математической модели процесса каталитического крекинга, ориентированной на прогнозирование состава бензина и газов каталитического крекинга</p> <p>4.1 Формирование кинетической схемы процесса каталитического крекинга с образованием газов крекинга</p> <p>4.2 Определение кинетических параметров процесса каталитического крекинга</p> <p>4.3 Валидация математической модели</p> <p>4.4 Влияние состава сырья и параметров технологического режима проведения выход на выход и состав продуктов крекинга с учетом дезактивации катализатора</p> <p>5 Заключение</p>
--	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент ОСГН ШБИП, к.э.н., Спицына Л.Ю.
Социальная ответственность	Старший преподаватель ООД ШБИП, Гуляев М.В.

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д7В	Бобу Анатолий Григорьевич		

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

Студенту:

Группа	ФИО
2Д7В	Бобу Анатолию Григорьевичу

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

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

<i>1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Бюджет проекта – не более 800 000 руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 500 000 руб.</i>
<i>2. Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Норма амортизации, нормы расходования ресурсов. Минимальное значение показателя интегральной ресурсоэф-фективности – 3,80.</i>
<i>3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Отчисления во внебюджетные фонды – 30 %.</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<i>• Оценка коммерческого потенциала, перспективности с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Анализ конкурентных технических решений, оценка готовности проекта к коммерциализации. Выполнение SWOT-анализа проекта.</i>
<i>• Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	<i>Определение этапов и трудоёмкости работ.. Определение бюджета НИИ.</i>
<i>• Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>Рассчитаны интегральный финансовый показатель, интегральный показатель ресурсоэффективности, интегральный показатель эффективности.</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет НИ
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Спицына Любовь Юрьевна	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д7В	Бобу Анатолий Григорьевич		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
2Д7В	Бобу Анатолий Григорьевич

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	18.03.01 «Химическая технология»

Тема ВКР:

Математическое моделирование процесса каталитического крекинга	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объектом исследования является математическое моделирование процесса каталитического крекинга Область применения: прогнозирование состава и выхода целевых продуктов процесса каталитического крекинга при переработке различного сырья. Рабочая зона: компьютерная аудитория 133 2-го корпуса ТПУ.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:	Рассмотреть специальные правовые нормы трудового законодательства; Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.
2. Производственная безопасность:	Анализ потенциально возможных вредных и опасных факторов проектируемой производственной среды. Разработка мероприятий по снижению воздействия вредных и опасных факторов: <ul style="list-style-type: none"> – недостаточное освещение; – напряжённость труда; – неудовлетворительный микроклимат; – поражение электрическим током; – статические физические нагрузки. Выводы на соответствие допустимым условиям труда согласно специальной оценке условий труда.
3. Экологическая безопасность:	<ul style="list-style-type: none"> – анализ воздействия объекта на атмосферу, гидросферу и литосферу. – решение по обеспечению экологической безопасности.

<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<ul style="list-style-type: none"> – анализ возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий; – пожаровзрывоопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).
---	--

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Гуляев Милий Всеволодович	-		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д7В	Бобу Анатолий Григорьевич		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа включает 90 с., 23 рис., 29 табл., 49 источников, 17 прил.

Ключевые слова: каталитический крекинг, состав сырья, математическое моделирование, крекинг-газ, кинетическая схема.

Объектом исследования является установка каталитического крекинга.

Цель работы – разработка математической модели процесса каталитического крекинга, позволяющая прогнозировать состав получаемого крекинг-газа в зависимости от состава исходного сырья.

В процессе исследования определены термодинамические параметры реакций каталитического крекинга с образованием газовых компонентов с использованием справочных данных и квантово-химических методов расчета. Разработана кинетическая модель процесса каталитического крекинга, ориентированная на прогнозирование индивидуальных компонентов газа крекинга. С применением модели определено влияние состава сырья на выход и состав продуктов процесса, а также степень дезактивации катализатора. Определены температуры каталитического крекинга, необходимые для увеличения выходов бензина и газов каталитического крекинга до 58,3 и 51 % мас. соответственно.

Область применения: промышленные предприятия топливной и нефтехимической отрасли.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, СОКРАЩЕНИЯ, НОРМАТИВНЫЕ ДОКУМЕНТЫ

В настоящей работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. ГОСТ 12.1.005-88 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.
2. СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
3. Федеральный закон Российской Федерации от 28 декабря 2013 г. N 426-ФЗ «О специальной оценке условий труда».
4. Федеральный закон от 22.07.2008 N 123-ФЗ (ред. от 13.07.2015) "Технический регламент о требованиях пожарной безопасности".
5. СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы».
6. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	15
1 Анализ современного состояния технологии каталитического крекинга.....	17
1.1 Современные технологии каталитического крекинга нефтяного сырья ...	17
1.1.1 Технология каталитического крекинга "Orthoflow" компании KBR (Kellogg Brown & Root)	18
1.1.2 Технология каталитического крекинга MAXOFIN (MAXimize OleFINs) с максимальным выходом пропилена компаний KBR и Exxon-Mobil.....	20
1.1.3 Технология каталитического крекинга остаточного сырья R2R (Residual Cracking) с двумя регенераторами компании Axens.....	21
1.2 Современные каталитические композиции для крекинга высокомолекулярных нефтяных фракций.....	23
1.2.1 Структура, состав и типы цеолитов.....	25
1.2.2 Матрица, наполнитель и связующее вещество.....	27
1.3 Физико-химические основы процесса крекинга нефтяного сырья	28
1.4 Моделирование процесса каталитического крекинга нефтяного сырья....	34
2 Объект и методы исследования	41
2.1 Характеристика объекта исследования	41
2.2 Методы исследования.....	43
3 Разработка и применение математической модели процесса каталитического крекинга, ориентированной на прогнозирование состава бензина и газов каталитического крекинга	46
3.1 Формирование кинетической схемы процесса каталитического крекинга с образованием газов крекинга.....	47

3.2	Определение кинетических параметров процесса каталитического крекинга	52
3.3	Валидация математической модели.....	56
3.4	Влияние состава сырья и параметров технологического режима проведения выход на выход и состав продуктов крекинга с учетом дезактивации катализатора	59
4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	63
4.1	Потенциальные потребители результатов исследования	63
4.2	Анализ конкурентных технических решений.....	64
4.3	SWOT-анализ.....	65
4.4	Планирование исследовательских работ.....	67
4.5	Бюджет научно-технического исследования	67
4.5.1	Расчёт материальных затрат НИИ.....	68
4.5.2	Расчёт затрат на специальное оборудование	68
4.5.3	Основная заработная плата исполнителей проекта.....	69
4.5.4	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	70
4.5.5	Накладные расходы	70
4.5.6	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта .	71
4.6	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	71
5	Социальная ответственность	74
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	74
5.2	Производственная безопасность	76
5.2.1	Анализ опасных и вредных производственных факторов.....	76

5.2.2 Выводы на соответствие допустимым условиям труда согласно специальной оценке условий труда	80
5.3 Экологическая безопасность.....	80
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	81
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	83
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	85
ПРИЛОЖЕНИЯ.....	91

ВВЕДЕНИЕ

Учитывая мировую тенденцию к утяжелению нефтяного сырья и увеличению потребности в автомобильном бензине, дизельном топливе и газах, используемых в нефтехимических целях, становится всё более очевидной необходимость в развитии процессов глубокой переработки нефтяного сырья. Одним из наиболее крупнотоннажных и активно развивающихся процессов углубленной переработки нефтяного сырья является каталитический крекинг.

Традиционно технология каталитического крекинга в различных вариантах обеспечивает производство значительной доли бензина, нефтехимического сырья и легкого газойля при переработке тяжелых нефтяных фракций. Одним из наиболее важных продуктов процесса каталитического крекинга является пропилен, который используется в производстве сжиженного нефтяного газа и полипропилена. По состоянию на 2000 год примерно 34 % всего производства пропилена приходилось на процесс каталитического крекинга. Однако последние данные показывают, что доля производимого на установках каталитического крекинга пропилена снизилась до 25–30 % ввиду развития процессов, направленных непосредственно на получение пропилена, как главного продукта. Тем не менее, каталитический крекинг продолжает занимать одну из лидирующих позиций в сфере производства пропилена.

Другим важным газовым продуктом процесса является фракция ББФ, используемая в топливной промышленности для производства алкилата – добавки, используемой для повышения октанового числа продуктового бензина.

В этой связи, актуальными являются исследования по влиянию состава сырья на выход и состав продуктов крекинга, включая газовые компоненты, особенно для нефтехимического варианта процесса. Для исследования таких сложных и многокомпонентных процессов переработки высокомолекулярного

нефтяного сырья широко используемыми являются методы математического и кинетико-термодинамического моделирования с учетом состава сырья. Однако в литературе имеется ограниченное число исследований по моделированию процесса с учетом прогнозирования индивидуального состава крекинг-газов, группового состава бензиновой фракции и кокса.

Целью данной работы является разработка математической модели процесса каталитического крекинга, позволяющей прогнозировать выход и состав продуктов процесса, включая газовые компоненты, в зависимости от состава сырья.

1 Анализ современного состояния технологии каталитического крекинга

1.1 Современные технологии каталитического крекинга нефтяного сырья

Назначением процесса каталитического крекинга нефтяного сырья на НПЗ является конвертация тяжёлого высококипящего сырья в более лёгкие фракции и индивидуальные вещества. Продуктами процесса являются: бензиновая и дизельная фракции, сжиженные углеводородные газы, газы олефинов и другие. Более того, как будет подробно рассмотрено далее, процесс каталитического крекинга занимает второе место по получению пропилена. То есть, можно сказать, что целевыми продуктами процесса являются высокооктановый автомобильный бензин и пропилен [1].

Обычно сырьё процесса каталитического крекинга подразделяется на традиционное и нетрадиционное. К традиционному сырью относятся нефть и её отдельные фракции, в особенности вакуумный газойль и тяжёлые нефтяные остатки. К нетрадиционному или неконвенциональному типу сырья относят различные растительные масла, парафины, получаемые в процессе Фишера-Тропша, спирты и другие вещества.

Анализируя таблицу 1, в которой представлены содержания компонентов в продуктах каталитического крекинга в зависимости от используемого сырья, можно прийти к выводу, что выбор подходящего сырья играет ключевую роль в качестве и количестве получаемых веществ.

Таблица 1 – Влияние качества сырья на выход продуктов крекинга [2]

Продукты крекинга	Выход продуктов, % об., на сырье		
	Парафиновом	Нафтеновом	Ароматическом
Сухой газ (C ₁ , C ₂ , C ₃)	2,6	3,2	3,4
Сжиженный газ (C ₃ –C ₄)	34,5	27,5	24,3
Бензин (C ₅ –221 °С)	73,0	70,0	54,2
Газойль лёгкий	5,0	10,0	20,0
Газойль тяжёлый	2,0	5,0	10,0
Кокс	4,8	5,4	6,3

Процесс каталитического крекинга нефтяного сырья проводится на установках, в которых катализатор в реакторно-регенераторном узле находится в непрерывной циркуляции, участвуя в стадиях, протекающих в следующей последовательности: нагрев сырья и катализатора; непосредственно сам каталитический крекинг загруженного сырья; десорбирование органических соединений, которые были адсорбированы на катализаторе; окислительная регенерация отработанного катализатора; последующее фракционирование продуктов крекинга.

Классификация используемых в настоящее время в промышленности технологий каталитического крекинга нефтяного сырья выглядит следующим образом:

- a. со стационарным слоем катализатора;
- b. с движущимся слоем шарикового катализатора;
- c. с движущимся слоем микросферического катализатора.

Технологические схемы установок каталитического крекинга с неподвижным слоем катализатора, в отличие от технологий каталитического крекинга с движущимся слоем катализатора, не получили дальнейшего развития в промышленности, так как будучи первыми представителями аппаратов для проведения процесса, их основными недостатками являются: сложное аппаратное оформление (Приложение А), долговременные простои в работе, связанные с заменой отработанного катализатора.

1.1.1 Технология каталитического крекинга "Orthoflow" компании KBR (Kellogg Brown & Root)

Принципиальная схема технологического процесса "Orthoflow" изображена в приложении Б.

Установка "Orthoflow" фирмы KBR состоит из многоярусной системы, состоящей из реактора, отпарной колонны-регенератора и разгрузочного подъёмника катализатора. Основным преимуществом данной конструкции реакторно-регенераторного блока является значительная экономия пространства.

Реакция крекинга протекает в вертикальном реакторе (Приложение Б), в котором происходит контакт потока жидкости и предварительно разогретого микросферического катализатора. В результате контакта с раскалённым катализатором нефтяное сырьё испаряется и движется вверх по реактору сквозь слой катализатора. В результате протекает реакция крекинга, приводящая к образованию более лёгких продуктов из тяжёлого сырья. Полученные продукты реакции крекинга через верх реактора поступают в ректификационную колонну на дальнейшее разделение на более узкие фракции, в то время как отработанный (закоксованный) катализатор поступает в регенератор для выжигания кокса с его поверхности.

Основным отличием "Orthoflow" от технологии каталитического крекинга с "кипящим" слоем катализатора, представленной в приложении Б, является соосное расположение реактора и регенератора.

Модернизация технологии "Orthoflow" привела к тому, что в схеме вместо реактора, представленного в приложении Б, стал использоваться лифт-реактор (Приложение Г).

1.1.2 Технология каталитического крекинга MAXOFIN (MAXimize OleFINs) с максимальным выходом пропилена компаний KBR и Exxon-Mobil

Повышение выхода пропилена, так необходимо в производстве полимеров, в продуктах каталитического крекинга является одной из основных задач нефтепереработки.

Для решения данного вопроса компаниями KBR и Exxon-Mobil была разработана технология MAXOFIN, применение которой позволяет достичь достаточно высокого выхода пропилена (до 18,4 % масс.). Большая доля пропилена в продуктах процесса каталитического крекинга достигается за счёт введения каталитической присадки MAXOFIN-3, обладающей высоким содержанием цеолита ZSM-5, а также введением в процесс второго высокопроизводительного лифт-реактора, предназначение которого заключается в последующем крекировании полученной бензиновой фракции для повышения количества получаемого пропилена.

Схема реакторно-регенераторного блока, используемого в технологии MAXOFIN, представлена в приложении Д.

Сырьём процесса является вакуумный газойль, который предварительно подвергается нагреванию, а затем поступает в основной лифт-реактор 1, где смешивается с катализатором. В сепарационной секции реактора 8 продукты каталитического крекинга отделяются от закоксованного катализатора и поступают на ректификацию, в то время как катализатор самотёком попадает в регенератор.

Второй же лифт-реактор 3 предназначен для крекирования бензиновых фракций, в том числе и тех, которые получены в первом лифт-реакторе.

Анализируя таблицу 2, в которой представлено сравнение технологии MAXOFIN с другими широко используемыми технологиями, можно заметить, что выход пропилена выше примерно на 4-6 %, в сравнении с остальными технологиями, но при этом значительно ниже выход бензина, что обусловлено введением бензина, получаемого в основном лифт-реакторе в дополнительный для проведения дальнейшего крекинга, этим же и объясняется повышенный выход сухого газа и других лёгких продуктов.

Таблица 2 – Сравнение режимов и составов продуктов используемых технологий с максимизацией выхода пропилена [6]

Параметр	PetroFCC (UOP)	DCC (Axens)	MAXOFIN (KBR)	MILOS (Shell GS)
Температура, °С	550–600	575–600	550	575–600
Конструкция реакторного блока	1 лифт-реактор		2 лифт-реактора	
Выход продуктов, % (мас.)				
сухой газ	3,0	5,8	7,6	2,3
этилен	6,0	6,1	4,3	3,1
пропан	2,0	3,0	5,2	2,1
пропилен	21,0	21,0	18,4	18,1
ΣC ₄	19,0	18,8	23,7	17,4
бензин	28,0	26,6	18,8	28,2
лёгкий газойль	9,5	6,6	8,6	15,8
тяжёлый газойль	6,0	6,1	5,2	8,0
кокс	5,5	6,0	8,2	5,0
Всего	100,0	100,0	100,0	100,0

1.1.3 Технология каталитического крекинга остаточного сырья R2R (Residual Cracking) с двумя регенераторами компании Axens

Отличительной особенностью технологии R2R является наличие двух регенераторов в аппаратном оформлении процесса. Принцип их действия практически сходен принципу работы двухступенчатого регенератора (описанного в предыдущей технологии): регенерация катализатора осуществляется в две стадии. Первая стадия - частичный отжиг катализатора при температуре примерно 700 °С, вторая - уже полный освобождение поверхности катализатора от кокса при 900 °С.

Существует несколько вариаций аппаратного оформления процесса каталитического крекинга тяжёлого нефтяного сырья, отличительной особенностью одного из них является наличие двухступенчатого регенератора. То есть регенерация катализатора осуществляется в две стадии: первая – частичный выжиг кокса с поверхности, вторая – полный. Данная технология позволяет снизить количество кокса на поверхности катализатора до 0,05 % мас.

Схему процесса можно увидеть в приложении Е.

Как можно видеть по таблице 3, то основным преимуществом использования технологии R2R является повышенный выход бензина.

Таблица 3 – Выход продуктов процесса R2R [10]

Продукт	Содержание
сухой газ + H ₂ S, % мас.	4,7
сумма C ₃ –C ₄ , % об.	28,4
бензин (н.к.–220 °С), % об.	60,9
лёгкий газойль (220–343 °С), % об.	12,1
тяжёлый газойль (выше 343 °С), % об.	5,7
кокс, % мас.	7,5

Также необходимо отметить, что технологии и с двухступенчатой регенерацией, и с двумя регенераторами позволяют более полно избавлять поверхность отработанного катализатора от кокса, что способствует долговечности использования одного и того же катализатора, то есть повышается рентабельность процесса.

Таким образом, в качестве сырья процесса каталитического крекинга может быть использовано различные нефтяные фракции. При этом преимущественно процессу подвергаются вакуумный газойль и тяжёлые нефтяные остатки. Также имеет место смешение различных нефтяных фракций (остатки вторичных процессов, масляного производств, атмосферной и вакуумной перегонки, мазуты) для получения сырья оптимального состава, то есть позволяющего получать целевые продукты. Так, например, могут быть смешаны вакуумные газойли, полученные из разных нефтей (с разных

месторождений), равным образом в процесс могут быть задействованы смеси вакуумного и атмосферного остатков. Стоит отметить, что выбор одной из вариаций существующих технологических процессов зависит от выбранных целевых продуктов (МАХОFIN для производства пропилена) и свойств и состава исходного сырья. Поэтому в связи с увеличением веса нефтяного сырья особый интерес вызывают исследования, направленные на изучение процессов глубокой конверсии с использованием сырья различной природы и состава [12].

1.2 Современные каталитические композиции для крекинга высокомолекулярных нефтяных фракций

Крекинг нефтяных фракций может протекать в присутствии различных каталитических композиций как природного, так и синтетического происхождения, при этом высокого выхода целевых продуктов можно добиться только в присутствии цеолитов (гидратированных алюмосиликатов).

Традиционное сырьё процесса каталитического крекинга нефтяного сырья (газойли и тяжёлые остатки) содержат большое количество металлических примесей, присутствие которых в сырье требует предварительной подготовки сырья либо использования катализаторов, обладающих устойчивостью к загрязнению. Помимо этого, катализатор крекинга должен обладать высокой гидротермической стабильностью, чтобы стойко переносить процессы, осуществляемые в регенераторе и сводить термическое разрушение каталитической композиции к минимуму.

В настоящий момент разработаны технологии, позволяющие производить катализаторы, способные не только достигать высоких степеней конверсии исходного сырья, но и поддерживать собственную активность на высоком уровне в присутствии различных примесей.

За долгие годы применения каталитического крекинга в промышленности состав катализаторов был существенно модернизирован. Первые катализаторы были основаны на натуральной глине и имели низкую активность, селективность, а также пониженную термическую и структурную стабильность. Далее начали применяться синтетические катализаторы на основе кремния и алюминия, которые обладали высокой активностью в отличие от предыдущего типа катализаторов, при этом не были термически и структурно стабильны.

Следующим этапом в развитии каталитических композиций для процесса крекинга стало изобретение катализаторов, имеющих в качестве основы цеолит типа ZSM-5, который использовался больше, как добавка к основному катализатору. ZSM-5 позволил увеличить селективность процесса по отношению к лёгким олефинам (например, пропилену) и достигнуть высоких значений октанового числа, производимого в процессе автомобильного бензина.

Так как стремление повысить рентабельность и эффективность процесса стимулирует компании к совершенствованию существующих и созданию новых каталитических композиций, то совсем недавно были разработаны катализаторы типов ITQ-21 и ZSM-20, которые по своему структурному строению напоминают катализаторы Y-типа. Если сравнивать типы ZSM-20 и Y, то первый обладает большей устойчивостью к термическим воздействиям, но меньшей каталитической активностью.

Постоянное развитие каталитических технологий для достижения высокой эффективности и высокого выхода целевых продуктов является свидетельством растущей актуальности процесса каталитического крекинга в области современной нефтепереработки.

Далее будет подробно рассмотрена структура цеолитных катализаторов каталитического крекинга, а также её влияние на состав получаемых продуктов.

Современный катализатор на основе цеолита имеет следующую структуру:

- активный компонент (цеолит);
- матрица (носитель);
- наполнитель;
- связующее вещество.

1.2.1 Структура, состав и типы цеолитов

Цеолит является ключевым компонентом в составе современных катализаторов процесса каталитического крекинга нефтяного сырья. Благодаря ему итоговая каталитическая композиция обладает высокой селективностью (в зависимости от типа и качества используемого цеолита) и активностью, которая определяется выходом целевого продукта – высокооктанового бензина.

По своей сути цеолит представляет собой молекулярное сито, представляющее собой тетраэдр, состоящий из атомов кремния, алюминия и кислорода (Рисунок 1).

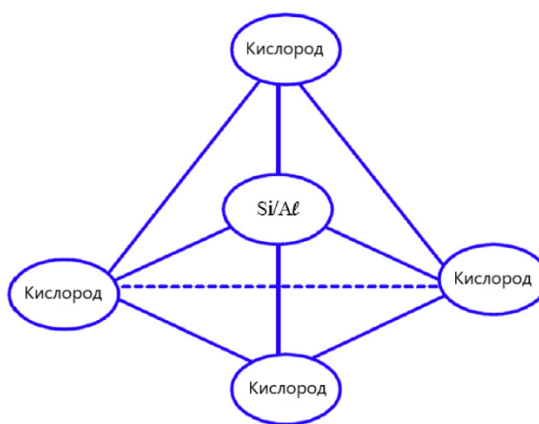


Рисунок 1 – Структура тетраэдрической молекулы цеолита [7]

Поры в цеолитной решётке имеют достаточно маленькие размеры, но их диаметр, опять же, зависит от типа применяемого цеолита. Например, диаметр

пор цеолита Y составляет в среднем примерно 8 Å, в то время как у цеолита X показатель колеблется около 10 Å. При этом площадь его внутренней поверхности может достигать 600 м² на грамм цеолита.

Цеолиты, вовлечённые в процесс каталитического крекинга, являются синтетическими версиями природных соединений (фожазиты), структура которых представлена на Рисунок 2.

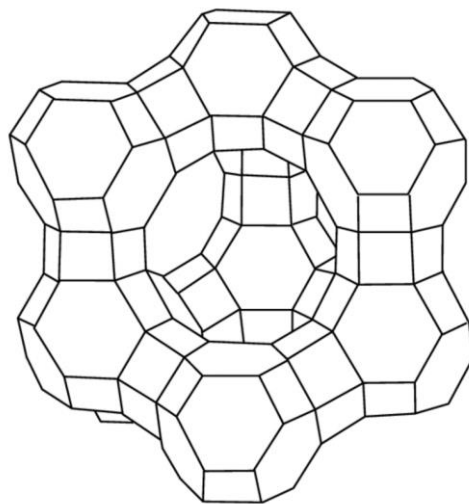


Рисунок 2 – Структура алюмосиликатной решётки фожазита [13]

На данный момент известно более 232 различных видов цеолитов, но коммерческое применение нашли только некоторые из них: цеолиты X, Y, ZSM и ZSM-5.

Цеолиты X и Y по большей части обладают одинаковой кристаллической решёткой, но при этом цеолит X имеет более низкое соотношение кремний-алюминий, по сравнению с цеолитом Y. Также цеолит X отличается меньшими термической и гидротермической стабильностями.

Использование катализатора ZSM-5 позволяет увеличить выход олефинов и октановое число получаемых в процессе автомобильных бензинов.

Далее можно наблюдать сравнительную таблицу, содержащую характеристики используемых сегодня синтетических цеолитов (Таблица 4):

Таблица 4 – Сравнительный характеристики основных видов цеолитов [7]

Тип цеолита	Размеры пор	Соотношение кремний-алюминий	Применения
Цеолит А	4,1	2–5	Производство моющих средств
Фожазит	7,4	3–6	Каталитический крекинг и гидрокрекинг
ZSM-5	5,2 x 5,8	30–200	Изомеризация ксилола, алкилирование бензола, каталитический крекинг, каталитическая депарафинизация, конверсия метанола
Морденит	6,7 x 7,0	10–12	Гидроизомеризация, депарафинизация

1.2.2 Матрица, наполнитель и связующее вещество

В структуре каталитической композиции матрица катализатора также обладает высокой активностью наряду с активным компонентом – цеолитом.

Большинство активных матриц в составе катализаторов представляют собой аморфные вещества, основу которых составляет алюминий. Кроме того, могут встречаться алюминиевые матрицы, имеющие кристаллическую структуру.

Активная матрица катализатора вносит значительный вклад в ход протекания процесса каталитического крекинга. Так как поры цеолита слишком малы и не подходят для крекинга крупных углеводородных молекул, то активная матрица, обладающая необходимыми каталитическими центрами и порами большего диаметра, позволяет крекировать молекулы, которые не могут достигнуть активных центров цеолита.

Помимо всего описанного, активная матрица может служить ловушкой, пассивирующей примесные металлы (никель, ванадий и т. д.), влияние которых на работу катализатора отражено в приложении Ж.

Резюмируя всё вышесказанное, можно сделать заключение, что развитие производства катализаторов для каталитического крекинга, а также изучение каталитической активности цеолитов являются наиболее передовыми областями в развитии процесса каталитического крекинга нефтяного сырья в

мире. Это объясняется тем, что только лишь за счёт катализатора можно значительно интенсифицировать процесс крекирования путём повышения степени превращения сырья, уменьшением скорости коксообразования и повышением селективности процесса. Учитывая многокомпонентность сырья процесса на поверхности катализатора, протекает большое число как целевых, так и побочных реакций процесса.

1.3 Физико-химические основы процесса крекинга нефтяного сырья

Значительное число реакций протекают в результате контакта между нефтяным сырьём (вакуумным газойлем) и разогретым до 650–760 °С катализатором. Распределение продуктов при этом зависит от множества факторов, среди которых и природа и активность кислотных центров на поверхности катализатора. Несмотря на то, что большинство протекающих реакций в процессе – каталитические, протекание химических реакций также имеет место быть. Реакции термического крекинга происходят вследствие жёстких условий крекирования, низкого качества нефтяного сырья, свойств катализатора, плохого контакта сырья и катализатора на дне лифт-реактора, долго времени пребывания нефтяного сырья в реакторе.

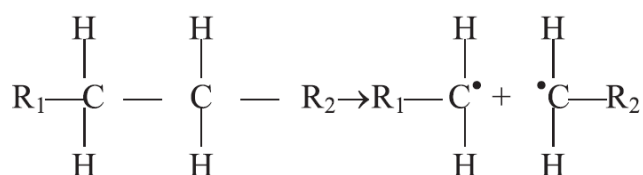
Далее в главе будут рассмотрены следующие вопросы:

- химизм процесса каталитического крекинга;
- роль катализатора в процессе, а в особенности катализаторов на основе цеолитов.

До открытия каталитического крекинга нефтяного сырья термический крекинг был основным процессом, позволявшим получить из тяжёлого сырья более лёгкие ценный продукты. На нефтеперерабатывающих заводах до сих пор используются такие термические процессы, как замедленное коксование и висбрекинг для крекирования остаточных углеводородов.

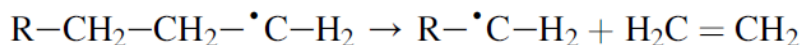
Реакция термического крекинга происходит, когда углеводороды без контакта с каталитической композицией находятся под воздействием высоких температур диапазоном 425–650 °С.

Иницирующая стадия данного процесса заключается в образовании свободных радикалов, которые формируются путём разрыва С-С-связей. Далее представлен процесс формирования свободных радикалов при термическом крекинге молекулы парафина:



Свободные радикалы чрезвычайно активны и имеют короткое время существования. Они могут претерпевать следующие превращения: альфа-разрыв, бета-разрыв и полимеризация.

В результате бета-разрыва образуется олефин и новый свободный радикал, имеющий на два атома углерода меньше:



Образовавшийся свободный радикал может также быть подвергнут реакции бета-разрыва.

Механизм каталитического крекинга нефтяного сырья уже долгие годы является предметом активного обсуждения среди исследователей. Но все сходятся во мнении, что иницирование каталитического крекинга происходит путём образования карбениевых и карбониевых ионов. Следующий Рисунок 3 демонстрирует возможные пути образования карбениевых и карбониевых ионов в ходе процесса каталитического крекинга:

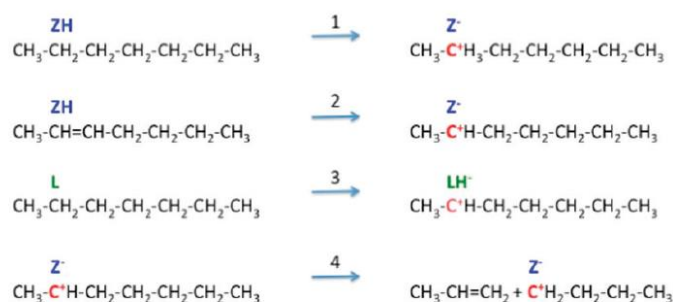


Рисунок 3 –Схема реакций, протекающих на цеолитном катализаторе:

1 – отщепление протона с бренstedовского кислотного центра, результирующий в образование карбониевого иона; 2 – формирование карбениевого иона в результате отщепления протона с поверхности цеолита;

3 – образование карбениевого иона в результате реакции переноса водорода от алкана к кислотному центру катализатора; 4 – бета-разрыв карбениевого иона с образованием нового карбениевого иона и олефина

Вопрос о том, какой вид кислотных центров оказывает большее влияние на инициирование реакции каталитического крекинга, льюисовские или бренstedовские активные центры (Рисунок 4), до сих пор остаётся открытым. Проводились исследования, изучающие зависимость между числом льюисовских и бренstedовских кислотных центров и активностью катализатора. При этом линейная зависимость активности катализатора от числа активных центров наблюдалась только в случае, когда учитывали оба вида кислотных центров – бренstedовских и льюисовских. Из чего логично предположить, что и тот и другой вид вносят одинаково важный вклад в протекание процесса каталитического крекинга нефтяного сырья.

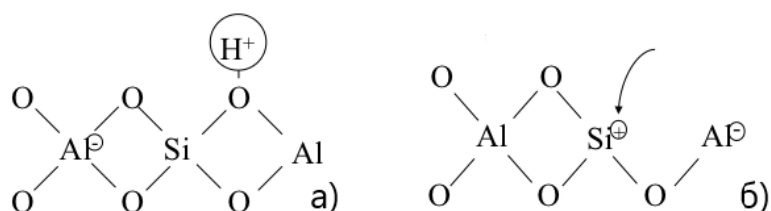


Рисунок 4 – Структура брэнстедовского и льюисовского активных центров на поверхности катализатора:

а) брэнстедовский кислотный центр; б) льюисовский кислотный центр

Одним из основных преимуществ процесса каталитического крекинга является формирование третичных, более стабильных ионов, из первичных и вторичных.

После образования карбениевые и карбониевые ионы могут участвовать в широком спектре различных реакций, перечисленных в Таблица 5, но первостепенными среди них остаются:

- реакции крекинга С-С-связи;
- реакции изомеризации;
- реакции переноса водорода.

Таблица 5 – Основные реакции, протекающие в процессе каталитического крекинга нефтяного сырья

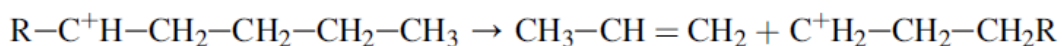
Реакции крекинга:	
• крекинг парафинов до олефина и более лёгкого парафина	$C_{10}H_{22} \rightarrow C_4H_{10} + C_6H_{12}$
• крекинг олефина до более лёгких олефинов	$C_9H_{18} \rightarrow C_4H_8 + C_5H_{10}$
• крекинг алкильного заместителя ароматического углеводорода	$ArC_{10}H_{21} \rightarrow ArC_5H_9 + C_5H_{12}$
• крекинг циклопарафинов до олефина и более лёгкого циклического соединения	$цикло-C_{10}H_{20} \rightarrow C_6H_{12} + C_4H_8$
Реакции изомеризации:	
• изомеризация двойной связи в молекуле олефина	$1-C_4H_8 \rightarrow транс-2-C_4H_8$
• изомеризация нормального олефина в изоолефин	$n-C_5H_{10} \rightarrow изо-C_5H_{10}$
• изомеризация нормального парафина в изопарафин	$n-C_4H_{10} \rightarrow изо-C_4H_{10}$
• изомеризация циклогесана в циклопентан	$C_6H_{12} \rightarrow C_5H_9CH_3$
Реакции переноса водорода:	нафтен + олефин \rightarrow Ароматический УВ + парафин

Продолжение таблицы 5

циклоароматизация	$C_6H_{12} + 3C_5H_{10} \rightarrow C_6H_6 + 3C_5H_{12}$
Реакции транс-алкилирования/перемещения алкильной группы	$C_6H_4(CH_3)_2 + C_6H_6 \rightarrow 2C_6H_5CH_3$
Реакции циклизации олефинов до нафтенов	$C_7H_{14} \rightarrow CH_3\text{-цикло-}C_6H_{11}$
Реакции дегидрирования	$n\text{-}C_8H_{18} \rightarrow C_8H_{16} + H_2$
Реакции деалкилирования	$\text{изо-}C_3H_7\text{-}C_6H_5 \rightarrow C_6H_6 + C_3H_6$
Реакции конденсации	$Ar\text{-}CH=CH_2 + R_1CH=CHR_2 \rightarrow Ar\text{-}Ar + 2H$

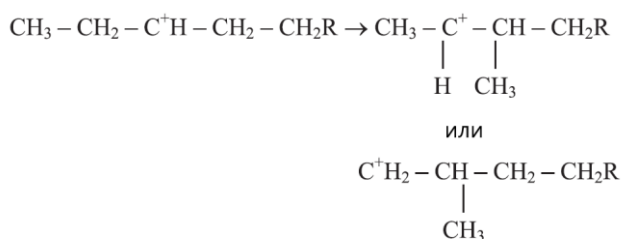
Реакция крекинга или бета-разрыв С-С-связи представляет собой разделение двух атомов углерода у положительного заряженного иона – карбониевого или карбениевого иона. Причиной высокой вероятности разрыва именно бета-связи молекулы является то, что по сравнению с альфа-разрывом, бета-разрыв требует меньше энергии, что является также причиной того, что углеводороды с короткой цепочкой обладают меньшей реактивностью, в сравнении с длинноцепочечными.

В результате бета-разрыва образуются олефин и новый карбениевый ион:



Образовавшийся в результате бета-разрыва карбениевый ион запускает цепочку превращений, которая приводит либо к ещё одному бета-разрыву нового карбениевого иона (если это длинноцепочечная молекула), либо карбениевый ион передаёт свой положительный заряд другой, более длинной молекуле, обладающей большей активностью.

В процессе каталитического крекинга карбениевый ион, образовавшийся в результате разрыва бета-связи, часто подвергается реакции изомеризации, которая перегруппировывает ион из первичного или вторичного в третичный, более стабильный:



Протекание реакций изомеризации в процессе каталитического крекинга нефтяного сырья обладает рядом преимуществ:

- так как изопарафины обладают большим октановым числом, по сравнению с молекулами углеводородов, имеющих прямую цепь, то реакция изомеризации оказывает положительное влияние на получаемую бензиновую фракцию, повышая её октановое число, образовавшимися изопарафинами;
- образующиеся изопарафины понижают точку помутнения в получаемой дизельной фракции;
- формирующиеся в результате реакции изомеризации изопарафины C_3/C_4 являются высокоценным сырьём в топливной промышленности и используются для получения МТБЭ (метил-трет-бутиловый эфир) и ТАМЭ (метил-трет-амиловый эфир – добавки в топливо, повышающие октановое число и уменьшающие выбросы).

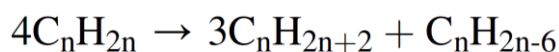
Реакция переноса водорода или реакция переноса гидридного иона – бимолекулярная реакция, в которой в качестве реагента выступает алкен. В реакции могут участвовать как два олефина, так и олефин с нафтенем.

Реакция, в которой участвуют два олефина состоит из следующих стадий:

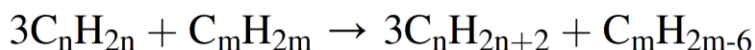
1. Адсорбция молекул олефинов на близко расположенных кислотных центрах.
2. Перенос гидридного от одного олефина к другому, в результате которого донор иона превращается в циклоалкен, а акцептор – в алкан.
3. Полученный циклоалкен становится донором гидридного иона для другой молекулы олефина, в результате чего сам превращается в циклодиен и образуется новый алкан.
4. Следующей стадией циклодиен так же, как и в двух предыдущих стадиях, становится донором гидрид-иона для олефина-акцептора, который затем превращается в молекулу алкана, а сам циклоалкен

переходит в ароматическое соединение, на чём цепочка превращений обрывается, так как ароматическое соединение является стабильным.

В общем виде данную реакцию можно записать следующим образом:



Стехиометрическая реакция между олефином и нафтенем, где нафтен является донором гидридного иона, будет иметь следующий вид:



На катализаторах, в состав которых входят редкоземельные металлы, вероятность протекания реакции переноса водорода значительно повышается, за счёт образования так называемых «мостиков» между двумя или тремя кислотными центрами, на которых в последствии и будут адсорбироваться молекулы олефинов и нафтенем. Из-за образования молекул алканов можно сделать вывод, что протекание реакций переноса водорода повышает выход и стабильность бензиновой фракции. Учитывая многофакторность процесса каталитического крекинга, для исследования таких сложных процессов с участием высококипящих нефтяных фракций широко используют методы математического моделирования.

Для установления кинетических закономерностей реакций процесса каталитического крекинга, а также прогнозирования состава и свойств продуктов процесса широко применяются различные математические модели, основанные на формализованном механизме реакций процесса нефтепереработки.

1.4 Моделирование процесса каталитического крекинга нефтяного сырья

Моделированию процесса крекинга посвящено огромное количество работ, каждая из которых вносит значительный вклад в понимание

многокомпонентных процессов, происходящих в каталитических реакторах, и оптимизацию промышленных предприятий.

Значительное число исследователей занимаются разработкой кинетических моделей процесса каталитического крекинга, используя метод математического агрегирования, или «лампинг-анализ», связанный с добавлением в схему псевдокомпонентов. Большинство моделей, разработка которых проводилась в XX веке, достаточно точно описывают процесс каталитического крекинга, если сырьём является вакуумный газойль. Нередко в разработке кинетической модели процесса используется подход, предполагающий использование конкретных нефтяных фракций в качестве псевдокомпонентов. Так, например, в работах [15–23] в роли лампингов выступают бензиновая, дизельная фракции (часто встречающиеся), легкий и тяжёлый газойли. Использование таких псевдокомпонентов в схеме превращений процесса каталитического крекинга позволяет значительно упростить кинетическую модель, при этом не учитывает множество реакций, протекающих в процессе. Другими словами, при использовании лампингового подхода с разделением псевдокомпонентов по продуктам процесса (сырьё, бензин, газ, кокса) реакция превращения сырья в бензин ограничено одной реакцией, в то время как использование группового подхода при формировании схемы превращений позволяет учитывать множество реакций, в которых участвуют конкретные классы соединений или индивидуальные вещества, входящие в состав этих псевдокомпонентов (бензин, дизель, крекинг-газ). То есть применение данного подхода к составлению схемы превращений упрощает математическую модель, но не даёт полного представления о ходе процесса, а также не может прогнозировать состав получаемых продуктов.

Такие сложности также наблюдаются для моделей, в которых в качестве сырья выступают более тяжёлые нефтяные компоненты. Данный тип моделей требует детального анализа состава сырья, что затруднительно в условиях

заводской лаборатории ввиду отсутствия необходимого оборудования и трудоёмкости определения группового состава.

Различные подходы к формализации схем обусловлены необходимой прогнозирующей способностью модели [24,25].

Наибольший интерес среди моделей процесса каталитического крекинга вакуумного газойля данного типа представляют последние публикации, а в частности работа [26], отличительной особенностью которой является наличие формализованной схемы превращений, состоящей из 12 компонентов.

Далее в разделе будут рассмотрены кинетические модели процесса каталитического крекинга нефтяного сырья, представляющие наибольший интерес для данной научной работы, поскольку они обеспечивают прогнозирование состава газов крекинга.

В данной работе [27] авторы разработали кинетическую схему процесса каталитического крекинга вакуумного газойля, состоящую из девяти псевдокомпонентов. Разработанная кинетическая схема представлена на рисунке 5.

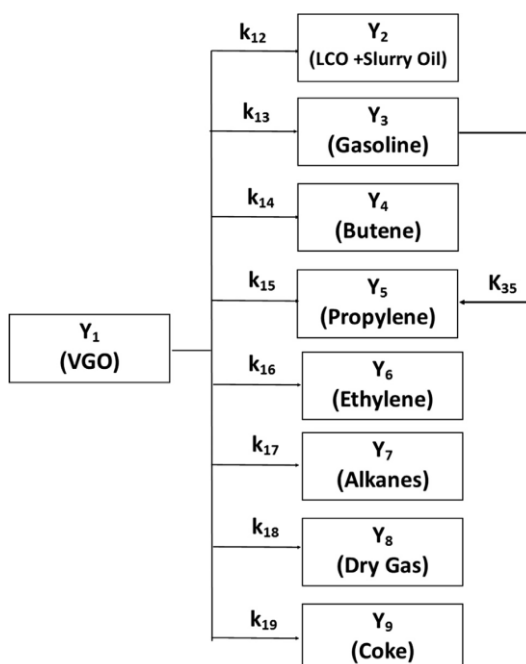


Рисунок 5 – Формализованная схема превращений процесса каталитического крекинга нефтяного сырья:

VGO – вакуумный газойль, LCO – лёгкий рецикловый газойль, Slurry Oil – нефтяная суспензия, Gasoline – бензин, Butene – бутен, Propylene – пропилен, Ethylene – этилен, Alkanes – алканы, Dry Gas – сухой газ, Coke – кокс

В качестве катализатора в исследовании использовался E-Cat с добавлением ZSM-5 и MCM-41. Характеристика используемого катализатора представлена в таблице 6. Технологические параметры, при которых проводилось моделирование процесса представлены в таблице 7.

Таблица 6 – Характеристика используемого катализатора E-Cat [27]

Параметр	Значение
Площадь активной поверхности, м ² /г	210
Содержание Al ₂ O ₃ , % мас.	40
Содержание SiO ₂ , % мас.	55,5
Содержание Re ₂ O ₃ , % мас.	3,0–4,5
Содержание Na, % мас.	0,15
Содержание Fe, % мас.	0,40
Потеря веса при прокаливании (900 °С, 3 ч)	13
Объём пор, см ³ /г	0,35
Насыпная плотность, г/см ³	0,7–0,8

Продолжение таблицы 6

Распределение частиц по размерам:	
0–20 мкм	2
0–40 мкм	10–20
0–80 мкм	70–80

Таблица 7 – Технологические параметры процесса [27]

Параметр	Значение
Температура в реакторе, °С	500–620
Масса загруженного сырья, г	1,0–1,5
Соотношение катализатор/сырьё, $\Gamma_{\text{кат}}/\Gamma_{\text{сырьё}}$	2,6–4
Объёмная скорость, ч^{-1}	12
Продолжительность нахождения сырья в реакторе, с	90

Кинетические параметры представлены в таблице 8.

Таблица 8 – Предэкспоненциальные множители и энергии активации, входящих в кинетическую схему реакций [27]

	Предэкспоненциальный множитель, k_0	Энергия активации, E_a , кДж/моль
k_{12}	3,353	6,101
k_{13}	67,081	22,331
k_{14}	111,665	40,052
k_{15}	5644,856	63,312
k_{16}	5333,164	63,690
k_{17}	10,678	18,693
k_{18}	3300,073	57,866
k_{19}	32695,738	75,332
k_{35}	300,846	55,505

Авторам модели удалось создать математическую модель процесса каталитического крекинга, погрешность которой не превышает 20,6 %.

Разработанная модель учитывает образование индивидуальных компонентов газов крекинга из вакуумного газойля: сухой газ, этилен, пропилен, бутен, что является ценным при прогнозировании работы установки по нефтехимическому варианту. Кроме того, разработанная схема превращений не учитывает образование изобутана и изобутилена, являющихся ценным сырьем для нефтехимии. В то же время, кинетическая схема не учитывает состав перерабатываемого вакуумного газойля, что ограничивает ее

применение в целях прогнозирования влияния состава сырья и оптимизации работы установки в зависимости от содержания в сырье смол, насыщенных, ароматических и углеводородов.

Изменение состава сырья вызывает значительную дезактивацию катализатора, снижая эффективность и ухудшая состав и выход желаемого продукта. В [28] показано, что характеристики исходного сырья оказывают существенное влияние на селективность продуктов FCC; скорость и константы разложения катализатора коррелировали в зависимости от общего содержания серы и азота, и распределения углерода, оцененного методом $n - d - M$.

В другом исследовании [26] разработана кинетическая схема, включающую в себя 12 псевдокомпонентов (Рисунок 6).

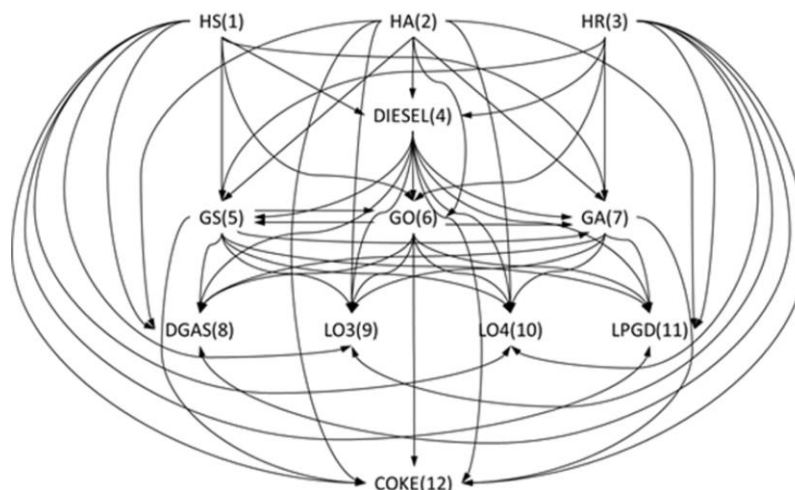


Рисунок 6 – 12-компонентная кинетическая схема процесса каталитического крекинга тяжёлого нефтяного сырья:

HS – насыщенные углеводороды сырья, HA – ароматические углеводороды сырья, HR – нефтяные смолы сырья, DIESEL – дизельная фракция, GS – насыщенные углеводороды полученного бензина, GO – алкены полученного бензина, GA – ароматические углеводороды полученного бензина, DGAS – сухой газ, LO3 – пропилен, LO4 – бутен, LPGD – алканы в составе сжиженного газа, COKE – кокс

Исследование процесса каталитического крекинга проводилось при следующих параметрах технологического режима (Таблица 9):

Таблица 9 – Технологические параметры процесса [26]

Параметр	Значение
Температура в реакторе, °С	514–534
Температура регенерированного катализатора, °С	690
Расход сырья, г/ч	1000
Соотношение катализатор/сырьё, $G_{кат}/G_{сырьё}$	7,95–9,81
Продолжительность нахождения сырья в реакторе, с	3

Полученная схема превращений включает в себя 54 реакционных путей, кинетические параметры реакций схемы превращений представлены в приложении 3.

Существенным преимуществом разработанной модели является учёт состава сырья (насыщенные углеводороды сырья, ароматические соединения сырья, нефтяные смолы сырья), что обеспечивает прогнозирование количества различных классов соединений в продукте, а также количества индивидуальных компонентов с учетом изменения состава нефтяного сырья (насыщенные и ароматические углеводороды сырья, нефтяные смолы сырья).

Следовательно, прогноз производительности промышленной установки каталитического крекинга следует проводить с учетом состава сырья и анализа структурных групп. Кроме того, моделирование работы промышленного предприятия при изменении условий процесса должно основываться на реальных данных промышленного предприятия и катализатора.

Таким образом, разработка математической модели, способной прогнозировать состав не только получаемой бензиновой фракции, но и состав индивидуальных компонентов получаемого крекинга-газа, является актуальной задачей для исследований в области каталитического крекинга.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Данный раздел посвящён оценке коммерческого потенциала и перспективности проводимого исследования, а также определению его возможных альтернатив, планированию научно-исследовательских работ и оценке ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

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

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

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

В качестве критериев сегментирования для данной научной разработки будем использовать следующие критерии: размер компании-заказчика, вид продукции.

Включим в карту сегментирования такие виды продукции, как компьютерные моделирующие системы (КМС) для промышленной подготовки нефти, КМС для нефтеперерабатывающих заводов (НПЗ) и КМС для нефтехимических производств.

В данном случае карта сегментирования будет выглядеть следующим образом (Приложение К).

Анализируя полученную карту сегментирования, можно сделать вывод, что целевой рынок разработки достаточно широк и что наиболее перспективными сегментом являются мелкие НПЗ, эксплуатирующие установки каталитического крекинга.

4.2 Анализ конкурентных технических решений

Для того, чтобы как можно успешнее противостоять соперникам на рынке, необходимо на основе анализа конкурирующих разработок внести соответствующие коррективы в научное исследование. Подобный анализ необходимо проводить систематически, так как рынки находятся в постоянном движении и нужно постоянно подстраиваться под новые условия.

Чтобы грамотно оценить преимущества конкурентных продуктов и собственной разработки необходимо составить оценочную карту, в которой будут наглядно отражены сильные и слабые стороны как конкурентов, так и предлагаемой научной разработки.

На данный момент лидирующими компаниями, предлагающими КМС являются «KVC Advanced Technologies» и «Aspen Tech». В приложении Л представлена оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок).

Как можно видеть по представленной оценочной карте, предлагаемая разработка лидирует по таким весовым критериям как «Повышение производительности труда пользователя», «Удобство в эксплуатации», «Качество интеллектуального интерфейса», «Простота эксплуатации» и «Цена».

4.3 SWOT-анализ

Далее для определения сильных и слабых сторон предлагаемой разработки, а также возможностей и угроз, которые могут появиться при выведении на рынок, проводится SWOT-анализ, где S – Strengths (сильные стороны), W – Weaknesses (слабые стороны), O – Opportunities (возможности) и T – Threats (угрозы). SWOT представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Матрица SWOT-анализа представлена в таблице 18.

Таблица 18 – Матрица SWOT-анализа

Сильные стороны (С)	Слабые стороны (Сл)
<ol style="list-style-type: none"> 1. Экономичность и энергоэффективность технологии. 2. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями. 3. Наличие бюджетного финансирования. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров. 2. Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца. 3. Отсутствие инжиниринговой услуги, способной обучить работать в рамках проекта.
Возможности (В)	Угрозы (У)
<ol style="list-style-type: none"> 1. Использование инновационной инфраструктуры НИ ТПУ. 2. Появление дополнительного спроса на новый продукт. 3. Повышение стоимости конкурентных разработок. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Появление более эффективных разработок у конкурентов. 2. Развитая конкуренция технологий производства. 3. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции.

Второй этап анализа состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. В соответствии с этим была построена интерактивная матрица проекта, представленная в таблице 19.

Таблица 19 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта				
Возможности проекта		C1	C2	C3
	B1	+	+	+
	B2	+	+	0
	B3	+	+	+
Сильные стороны проекта				
Угрозы проекта		C1	C2	C3
	У1	+	+	0
	У2	+	+	0
	У3	0	+	0

Продолжение таблицы 19

Слабые стороны проекта				
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3
	B1	-	-	+
	B2	-	-	-
	B3	-	-	-
Слабые стороны проекта				
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3
	У1	0	+	-
	У2	-	-	-
	У3	-	-	-

В результате анализа интерактивной матрицы проекта, представленной в таблице 4.3, были определены следующие сильные коррелирующие стороны и возможности: B1C1C2C3; B2C1C2 и B3C1C2C4.

Корреляция сильных сторон и угроз: У1С1С2; У2С1С2 и У3С2.

Корреляция слабых сторон проекта и его возможностей: B1Сл3.

Корреляция слабых сторон и угроз: У1Сл2.

Третьим этапом анализа была составлена итоговая матрица SWOT-анализа, приведённая в приложении М.

В результате проведения SWOT-анализа установили, что проектируемый продукт обладает рядом достоинств, среди которых основными являются повышенная эффективность, относительно разработок конкурентов, а также низкая цена. Таким образом, в ходе продвижения продукта на рынке необходимо постоянно совершенствовать предлагаемую разработку путём постоянных вложений в научные исследования, но при этом придерживаться ценовой политики, позволяющей потребителям приобретать продукт по доступной цене. Сохранению относительно низкой цены способствует вовлечение в исследования бюджетных средств.

Слабые же стороны разработки возможно компенсировать только постоянным анализом внешней и внутренней среды, в соответствии с которым и разрабатывать стратегию продвижения продукта на рынке. Сохранение низкой цены на продукт для потребителя является основным, в данном случае,

путём зарекомендовать разработку на рынке КМС – низкая цена привлекает потребителя.

4.4 Планирование исследовательских работ

В данном разделе подробно рассматривает план проведения этапов и работ, составляющих научное исследование, а также представляется распределения данных работ между исполнителями.

Примерный порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведён в приложении Н.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}},$$

где $T_{\text{кал}}$ – общее количество календарных дней в году;

$T_{\text{вых}}$ – общее количество выходных дней в году;

$T_{\text{пр}}$ – общее количество праздничных дней в году.

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - (T_{\text{вых}} + T_{\text{пр}})} = \frac{365}{365 - 118} = 1,48$$

Временные показатели проведения научного исследования представлены в приложении Р.

На основе таблицы временных показателей проведения научного исследования был построен календарный план-график проведения НИОКР по теме (Приложение П). Для удобства месяца в диаграмме были разбиты на декады (10 дней).

4.5 Бюджет научно-технического исследования

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

процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей системы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- затраты на научные и производственные командировки;
- контрагентные расходы;
- накладные расходы.

4.5.1 Расчёт материальных затрат НТИ

Сумма и составляющие материальных затрат представлены в таблице 20.

Таблица 20 – Материальные затраты на реализацию НТИ

Материал	Количество единиц материала, $N_{расх.i}$	Цена материала за единицу, C_i , руб.	Затраты, Z_m , руб.
Тетрадь, шт.	3	30	108
Ручка, шт.	2	20	48
Карандаш, шт.	2	10	24
Картридж для принтера, мл	200	4	960
Бумага, листы	100	0,5	60
Итого:			1200

4.5.2 Расчёт затрат на специальное оборудование

Затраты, связанные с приобретением специального оборудования, необходимого для проведения работ по теме исследования, приведены в таблице 21.

Таблица 21 – Расчёт бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Количество единиц оборудования, $N_{расх,i}$	Цена оборудования за единицу, C_i , руб.	Стоимость, C , руб.
ПО MicrosoftOffice	1	2 500	2 500
Персональный компьютер	1	60 000	60 000
Итого:			62 500

Также необходимо провести расчёт амортизационных отчислений. Расчёт проводится по следующей формуле:

$$Z_a = \frac{H_a \cdot C}{365} \cdot T = \frac{0,33 \cdot 60\,000}{365} \cdot 248 = 13\,453,$$

где C – балансовая стоимость оборудования, руб.;

$$H_a = \frac{1}{n} = \frac{1}{3} = 0,33 \text{ – годовая норма амортизации;}$$

T – время в днях, выделенное на выполнение работы (248 дней).

4.5.3 Основная заработная плата исполнителей проекта

В данном разделе приводится расчёт основной заработной платы исполнителей исследования (Таблица 22).

Таблица 22 – Расчёт основной заработной платы

Исполнитель	$Z_{тс}$, руб	$k_{пр}$	k_d	k_p	Z_m , руб	$Z_{дн}$, руб	T_p , раб.дн	$Z_{осн}$, руб
Руководитель	30 000	0,3	0,2	1,3	58 500	2 586	96	248 256
Студент	12 000	0,3	0,2	1,3	23 400	1 175	140	164 500
Итого:								412 756

Дополнительная заработная плата определяется по формуле:

$$Z_{дон} = Z_{осн} \cdot k_{дон},$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы, принимаем равным 0,14.

Для руководителя: $Z_{\text{доп}} = 248\,256 \cdot 0,14 = 34\,756$ руб.

Для студента: $Z_{\text{доп}} = 96350 \cdot 0,14 = 23\,030$ руб.

4.5.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Данная статья расходов включает в себя отчисления, установленные нормами законодательства Российской Федерации, в фонд государственного социального страхования (ФСС), пенсионный фонд (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС).

Величина отчислений определяется по формуле:

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

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд ОМС и социальное страхование), равный 0,30.

Для руководителя: $Z_{\text{внеб}} = 0,30 \cdot (248\,256 + 34\,756) = 84\,850$ руб.

Для студента: $Z_{\text{внеб}} = 0,30 \cdot (164\,500 + 23\,030) = 56\,259$ руб.

5.5.5 Накладные расходы

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

$$Z_{\text{накл}} = \sum (1 \div 5)_{\text{статья}} \cdot k_{\text{нр}},$$

где $k_{\text{нр}} = 0,16$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Сумма накладных расходов представлена в таблице 24.

4.5.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Итоговая таблица формирования бюджета исследовательского проекта представлена ниже (Таблица 23):

Таблица 23 – Расчёт бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		Примечание
	Руководитель	Студент	
1. Материальные затраты	1 200		Таблица 4.9
2. Затраты на специальное оборудование (амортизация)	13 453		Пункт 4.5.2
3. Затраты по основной заработной плате	248 256	164 500	Таблица 4.10
4. Затраты по дополнительной заработной плате	34 756	23 030	Пункт 4.5.3
5. Отчисления во внебюджетные фонды	84 850	56 259	Пункт 4.5.4
6. Накладные расходы	98 034		16 % от суммы статей 1÷5
Бюджет НИИ	724 338		Сумма статей 1÷6

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

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

Сравнение происходит между двумя вариантами исполнения разработки: разработка математической модели с использованием программной среды Delphi и разработка математической модели с использованием среды программирования Python.

Таким образом, $\Phi_{p1} = 710\ 745$ руб. – стоимость разработки математической модели процесса каталитического крекинга нефтяного сырья с использованием ПО Delphi (исначальная разработка). $\Phi_{p2} = 715\ 632$ руб. –

стоимость разработки математической модели процесса каталитического крекинга нефтяного сырья с помощью Python.

$\Phi_{p \max} = 800\ 000$ руб. – максимальная стоимость исполнения разработки.

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп1}} = \frac{724\ 338}{800\ 000} = 0,90;$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп2}} = \frac{729\ 225}{800\ 000} = 0,91.$$

Сравнительная оценка характеристик различных разработок представлена в таблице 24.

Таблица 24 – Сравнительная оценка характеристик различных разработок

Критерии \ Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2	$I_{p-\text{исп.1}}$	$I_{p-\text{исп.2}}$
1. Способствует росту производительности труда	0,10	5	3	0,50	0,30
2. Удобство в эксплуатации	0,15	5	3	0,75	0,45
3. Энергосбережение	0,15	4	4	0,60	0,60
4. Надежность	0,20	5	3	1	0,60
5. Воспроизводимость	0,25	5	5	1,25	1,25
6. Материалоёмкость	0,15	5	4	0,75	0,6
Итого:	1			4,85	3,8

В представленной таблице 24 исполнение 1 обозначает использование при разработке математической модели среды программирования Delphi, а исполнение 2 предполагает использование среды программирования Python. Отличие в цене обусловлено ценой на лицензионные продукты данных программных обеспечений, а также ценой на платные дополнительные модули перечисленных программ.

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

$$I_{\text{исп.}i} = \frac{I_{p-\text{исп.}i}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}},$$

$$I_{\text{исп.1}} = \frac{4,85}{0,89} = 5,45; \quad I_{\text{исп.2}} = \frac{3,80}{0,90} = 4,22.$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (Таблица 25) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{\text{ср}}$):

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{исп.1}}}{I_{\text{исп.2}}};$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{5,45}{4,22} = 1,29.$$

Таблица 25 – Сравнительная эффективность разработки

№	Показатели	Исполнение 1	Исполнение 2
1.	Интегральный финансовый показатель разработки	0,89	0,90
2.	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,85	3,80
3.	Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки	5,45	4,22

Анализируя результаты сравнения показателей двух разработок, можно сделать вывод, что изначально предлагаемая разработка является более эффективной.

Вывод по экономическому разделу

В данном разделе был выполнен анализ сильных и слабых сторон разработанной математической модели процесса каталитического крекинга нефтяного сырья, выявление возможностей и опасностей для реализации на существующем предприятии, оценили конкурентоспособность разработки в сравнении с уже существующими разработками.

В результате выполненного анализа, можно сделать вывод, что разработка не уступает аналогам, поэтому является пригодной к исполнению.

5 Социальная ответственность

Целью раздела «Социальная ответственность» является анализ вредных и опасных факторов, которым может быть подвержен работник, прогнозирование потенциально возможных чрезвычайных ситуаций, а также разработка соответствующих мероприятий и описание способов защиты, которые необходимы для профилактики данных ситуаций.

Экспериментальная часть данной бакалаврской работы выполнялась на персональном компьютере. В ходе её осуществления были использованы разного рода специализированные компьютерные программы, которыми обеспечено отделение химической инженерии. Объектом исследования в данном случае выступал процесс каталитического крекинга нефтяного сырья. Целью же данной работы являлось нахождение кинетических параметров, позволяющих осуществлять моделирование процесса каталитического крекинга нефтяного сырья.

Для достижения вышеупомянутой цели была выделена рабочая зона. В данном случае рабочая зона представляла собой аудиторию, оснащённую необходимым оборудованием (персональный компьютер), оборудованную системой отопления, кондиционирования воздуха, а также естественным и искусственным освещением. Рабочее место – стационарное.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Так как основная работа над проектом проводилась за персональным компьютером, то логично предположить, что правовые нормы и рекомендации, предусмотренные законодательством, будут изложены в разделах, посвящённых рабочим местам, где работа проводится сидя.

Основными документами, регламентирующими правила работы компьютером, являются соответствующие пункты трудового кодекса РФ, СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, ТОИ Р-45-084-01, а также ГОСТ 12.2.032-78.

Соблюдение предписаний, указанных в нормативных документах, перечисленных в предыдущем абзаце, является обязательным, так как игнорирование специфики условий, в которых проводятся работы (работа с персональным компьютером), может привести к ухудшению здоровья сотрудников: частые головные боли, потеря аппетита, болевые ощущения в области шеи и поясницы и т. д.

Согласно 1 разделу в Приложении 7 СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 процесс моделирования каталитического крекинга нефтяного сырья по виду трудовой деятельности можно отнести к группе В – творческая работа в режиме диалога с ПЭВМ.

Часто ухудшения состояния работника при работе с компьютером связаны с недостаточной, а то и вовсе отсутствующей, эргономикой рабочего пространства, то есть всего того, что связано с организацией рабочего места сотрудника. Данные показатели регламентируются СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 и ГОСТ 12.2.032–78, анализ выполнения которых при работе над данным проектом представлен в приложении С.

Помимо эргономики крайне важное положение занимает организация режима работы: максимально возможное время работы за смену не должно превышать 6 часов; должны быть предусмотрены перерывы продолжительностью 10 минут после каждых 45 минут работы; продолжительность непрерывной работы за компьютером по СанПиН не должна превышать 1 час или 2 часа (по ТОИ).

Таким образом, все требования, касающиеся организации рабочего места и режима работы, представленные в нормативных документах, были соблюдены.

5.2 Производственная безопасность

Возможные опасные и вредные факторы, согласно ГОСТ 12.0.003-2015, связанные с работой на персональном компьютере (ПЭВМ), приведены в приложении С.

5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

1) Недостаточное освещение

Отсутствие или недостаток освещённости способны пагубно сказаться на работе зрительного аппарата трудящегося и повлиять на его самочувствие и трудоспособность, например, привести к головным болям.

Согласно 4 разделу СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 эксплуатировать ПЭВМ в помещениях, в которых отсутствует естественное освещение, возможно только при наличии соответствующих расчётов, обосновывающих соответствие нормам освещения и безопасность их деятельности для здоровья работников. В противном же случае, естественное и искусственное освещение должно соответствовать действующей нормативной документации, то есть СП 52.13330.2016.

Основные нормируемые показатели по СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 представлены в таблице 26.

Таблица 26 – Нормируемые показатели освещения

Показатель	Значение
Освещённость на поверхности стола	300–500 лк
Освещённость поверхности экрана	не более 300 лк
Яркость светящихся поверхностей, находящихся в поле зрения	не более 200 кд/м ²
Яркость бликов на экране ПЭВМ	не более 40 кд/м ²
Яркость потолка	не более 200 кд/м ²
Яркость светильников в зоне углов излучения от 50 до 90°	не более 200 кд/м ²

Продолжение таблицы 26

Коэффициент запаса (K _з) для осветительных установок общего освещения	1,4
Коэффициент пульсации	не более 5 %

Условия труда по световому фактору в рабочем помещении (учебной аудитории) соответствуют допустимым.

2) Напряжённость труда

Монитор персонального компьютера является источником постоянного излучения, которое имеет вредоносное влияние на зрительную функцию трудящегося. Для снижения вреда для работника от данного фактора СанПиН предусмотрены допустимые параметры экрана, которые отражены в таблице 27.

Таблица 27 – Допустимые визуальные параметры устройств отображения информации

Параметр	Допустимое значение
Яркость белого поля	не менее 35 кд/м ²
Неравномерность яркости рабочего поля	не более 20 %
Контрастность (для монохромного режима)	3:1
Пространственная нестабильность изображения (непреднамеренное изменение положения фрагментов изображения экрана)	не более 2*10L-4L, где L – расстояние наблюдения

Также для минимизации перегрузки зрительного аппарата необходимо учитывать нормы освещённости и расположения персонального компьютера, которые перечислены в разделе «Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности».

Источниками нервно-психических нагрузок при работе на персональном компьютере могут быть любые факторы: несоблюдение норм микроклимата, монотонность труда, умственное перенапряжение, связанное с высокой информационной нагрузкой и т. д.

Для предупреждения перечисленных факторов СанПиН устанавливает обязательные перерывы при работе, которые входят в общее рабочее время: при продолжительности рабочего дня 8 часов сумма времени на перерывы составляет от 50 минут, если же рабочее время составляет более 12 часов, то время, отведённое на перерывы, – от 80 до 140 минут.

3) Неудовлетворительный микроклимат

В перечень регулируемых метеорологических факторов, оказывающих влияние на человека и его работоспособность, относятся: температура, относительная влажность воздуха и скорость движения воздуха.

Оптимальные значения показателей микроклимата, регламентируемые СанПин, представлены в таблице 28.

Таблица 28 – Оптимальные характеристики микроклимата

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
Тёплый	Ia (до 139)	23–25	22–26	60–40	0,1
	Iб (140–174)	22–24	21–25	60–40	0,1

Указанные выше условия возможно осуществить применением систем вентиляции, кондиционирования и обогрева помещения.

Условия труда по микроклимату соответствуют допустимым.

4) Поражение электрическим током

Аудитория, согласно ПУЭ (правила устройства электроустановок), относится к классу без повышенной опасности.

Источниками электрической опасности в данном случае могут быть:

- оголённые части проводов, находящихся под напряжением
- отсутствие заземления;
- электростатическое напряжение.

Меры, способные свести к минимуму вероятность поражения работника электрическим током:

1. Защитное заземление;
2. Изоляция, ограждение и обеспечение недоступности токоведущих частей;
3. Применение малого напряжения и двойной изоляции;
4. Использование предупреждающей сигнализации, надписей и плакатов;
5. Устройства защитных отключений питания.

Условия труда в аудитории по электробезопасности соответствуют всем требованиям.

5) Статические физические перегрузки

Так как работа на персональном компьютере связана с продолжительными статическими нагрузками – работник находится в сидячем положении длительное время – то СанПиН выдвигает следующие требования, касающиеся эргономики рабочего места и минимальной физической нагрузки:

– конструкция рабочего стула (кресла) должна позволять изменять рабочую позу работнику с целью снижения статического напряжения мышц шейно-плечевой области и спины;

– тип рабочего стула (кресла) необходимо подбирать согласно росту пользователя, а также характера и продолжительности работы с ПЭВМ;

– рабочий стул (кресло) должен быть подъёмно-поворотным, а также регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки;

– рабочий стул (кресло) должен быть оснащён полумягким сиденьем и спинкой, выполненными из нескользящего и слабо электризующегося материала.

5.2.2 Выводы на соответствие допустимым условиям труда согласно специальной оценке условий труда

Таким образом, в результате проверки рабочего пространства, а именно аудитории 133 аудитории 2-го корпуса ТПУ, можно сделать вывод, что основные требования, касающиеся эргономики рабочего места, были соблюдены.

В аудитории присутствуют необходимое оборудование (кондиционер, система вентиляции, отопительная система), которое обеспечивает все перечисленные требования к микроклимату.

Все рабочие места обеспечены высококачественным вычислительным оборудованием, а именно безопасными для зрительного аппарата ЖК-мониторами. Рабочие кресла также соответствуют необходимым требованиям: оборудованы удобными для работы сиденьями и спинками, которые позволяют изменять угол наклона, а следовательно, и рабочую позу.

5.3 Экологическая безопасность

В данном разделе представлен анализ факторов, который могут оказывать воздействие на окружающую среду. Так как рабочий процесс предусматривает использование персонального компьютера, принтера, бумаги и различных пишущих устройств (шариковые ручки, карандаши и т. д.), то основное влияние на окружающую среду будет оказывать процесс их утилизации. Так, например, наиболее целесообразным решением будет утилизация бумаги путём сдачи её в макулатуру с целью дальнейшей переработки.

В результате анализа возможных факторов, влияющих на экологию, был рассмотрен процесс утилизации вышедшей из строя вычислительной техники. Так как данные отходы относятся к IV классу опасности, то они подлежат

специальной утилизации. Процедура утилизации должна соответствовать всем требованиям, указанным в ГОСТ Р 53692-2009 Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Этапы технологического цикла отходов.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Наиболее типичной чрезвычайной ситуацией при работе с персональным компьютером является возникновение пожара. Пожары в офисных помещениях с ПК представляют особую опасность, так как сопряжены с большими материальными потерями.

Горючими компонентами в аудитории могут выступать строительные материалы, изоляции кабелей, двери, перегородки и т. д.

Источником зажигания могут выступить различные приборы, применяемые в целях технического обслуживания, электрические схемы ПЭВМ, устройства кондиционирования воздуха и электропитания, где в результате каких-либо нарушений возникают перегретые элементы, дуги и электрические искры, которые могут вызвать возгорания горючих материалов.

Учитывая всё вышесказанное, аудитория, оснащённая персональными компьютерами, относится к категории пожароопасных «В».

Так как в помещениях, оснащённых электрическими приборами, недопустимо использование воды и пены ввиду опасности повреждения или полного выхода из строя дорогостоящего электронного оборудования, то аудитория должна быть оснащена исправными углекислотными (ОУ-3 – 1 шт.) и порошковыми огнетушителями (ОП-3 – 1 шт.). Документом, регулирующим положения, касающиеся пожарной безопасности рабочего помещения, выступает ГОСТ 12.4.009-83.

Рабочее помещение также должно быть оборудовано пожарными извещателями, которые в случае возникновения пожара, могут оповестить

работников о его появлении. В качестве извещателей могут быть использованы дымовые и фотоэлектрические извещатели, характеризующиеся высокой скоростью и надёжностью срабатывания.

Вывод по разделу социальная ответственность

В данном разделе ВКР в данном разделе рассмотрели опасные и вредные производственные факторы на рабочем месте. В разделе проработана нормативная база основанная, на материалах по охране труда и окружающей среды, а также безопасности в чрезвычайных ситуациях. Проанализировав данные можно сделать вывод, что рабочее место соответствует всем требованиям, представленным в нормативных документах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате данной работы был проведён термодинамический анализ реакций процесса каталитического крекинга, приводящих к образованию газовых компонентов ($\Delta G^{\circ}_{810} = -(3,43-146,67)$ кДж/моль). Было установлено, что наибольшей термодинамической вероятностью характеризуются реакции переноса водорода ($\Delta G^{\circ}_{cp} = -162$ кДж/моль) с образованием газовых продуктов.

Основываясь на результатах термодинамического анализа, была составлена формализованная схема превращений, включающая в себя компоненты крекинг-газа (сухой газ, этилен, пропан, пропилен, бутан, изобутан, бутилен и изобутилен).

Разработана кинетическая модель процесса каталитического крекинга и определены кинетические параметры реакций, входящих в формализованную схему превращений углеводородов. Реакции переноса водорода ($k_0 = 7,0 \cdot 10^7 - 1,1 \cdot 10^{11}$), крекинга алканов ($k_0 = 2,6 \cdot 10^7 - 7,2 \cdot 10^7$), деалкилирования аренов ($k_0 = 1,0 \cdot 10^7$) и циклоалканов ($k_0 = 9,0 \cdot 10^6$), конденсации и образования кокса ($k_0 = 2,5 \cdot 10^8$), характеризуются наибольшей скоростью, что подтверждается значениями констант скоростей реакций.

На основе полученной кинетической модели была разработана адекватная модель процесса каталитического крекинга, чувствительная к изменению состава сырья и основным параметрам технологического режима параметрам, с максимальной величиной абсолютной погрешности не более 0,4 % по составу газов крекинга.

С помощью разработанной математической модели процесса каталитического крекинга было исследовано влияние состава сырья и параметров технологического режима на выход и состав продуктов крекинга. Определено, что наиболее благоприятным сырьем является вакуумный дистиллят из Западно-Сибирской нефти, который характеризуется большим

содержанием насыщенных углеводородов (61,3 % мас.) и меньшим содержанием смолистых компонентов (3,2 % мас.), относительно смесового сырья. Вовлечение в переработку смеси вакуумного и атмосферного газойля с остаточным сырьем на исследуемом объекте возможно с целью углубления переработки нефтяного сырья, однако в таком случае потребуются корректировка технологического режима с целью снижения нагрузки по коксу на регенератор.

В дальнейшем применение модели обеспечит прогнозирование оптимальных условий процесса каталитического крекинга при переработке сырья различного состава с целью увеличения выхода целевых продуктов – бензиновой фракции и газов крекинга.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Капустин В. М. Технология переработки нефти. В 4-х частях. Часть вторая. Физико-химические процессы. – М.:Химия, 2015. – 400 с.
- 2 Багдасаров Л.Н. Популярная нефтепереработка. – М.: «ЦСП «Платформа», 2016. – 111 с.
- 3 Р. А. Мейерс (ред.). Основные процессы нефтепереработки. Справочник: пер. с англ. 3-го изд. / [Р. А. Мейерс и др.]; под ред. О. Ф. Глаголевой, о. П. Лыкова. – СПб.: ЦОП «Профессия», 2011. – 944 с., ил.
- 4 Солодова Н. Л., Терентьева Н. А. Современное состояние и тенденции развития каталитического крекинга нефтяного сырья [Текст] / Солодова Н. Л., Терентьева Н. А. // Проблемы нефтедобычи, нефтехимии, нефтепереработки и применения нефтепродуктов. – 2011
- 5 Соляр Б. З. Каталитический крекинг остаточного нефтяного сырья [Текст] / Соляр Б. З., Аладышева Э. З., Галиев Р. Г., Ховкин В. А. // Технология нефти и газа. – 2009. – № 1. – с. 3–11.
- 6 Заботин Л. И. Химия и технология вторичных процессов переработки нефти: Учеб. Пособие / Л. И. Заботин. – Самара: Самар. Гос. Техн. ун-т, 2014. – 332 с.: 86 ил.
- 7 Р. Задегбейджи Каталитический крекинг в псевдооживленном слое катализатора. Справочник по эксплуатации, проектированию и оптимизации установок ККФ : пер. с англ. яз. 3-го изд; под ред. О. Ф. Глаголевой. – СПб. : ЦОП «Профессия», 2014. – 384 с., ил.
- 8 С. Паркаш Справочник по переработке нефти / пер. с англ. яз. – М.: ООО «Премимум Инжиниринг», 2012. – 776 с., ил. – (Промышленный инжиниринг)

9 Х. Анчита Переработка тяжёлой нефти. Реакторы и моделирование процессов : пер. с англ. яз. под ред. О. Ф. Глаголевой, В. А. Винокурова. – СПб. : ЦОП «Профессия», 2015. – 592 с., ил.

10 Крекинг нефтяных фракций на цеолитсодержащих катализаторах / Под ред. С. Н. Хаджиева. – М.: Химия, 1982. – 280 с., ил.

11 Б. Гейтс Химия каталитических процессов: пер. с англ. яз. Под ред. А. Ф. Платэ. – М.: «Мир», 1981. – 552 с., ил.

12 Ганцев А. В. Современное состояние и перспективы развития процесса каталитического крекинга нефтяного сырья [Текст] / Ганцев А. В. // *Universum: Химия и биология*. – 2019. – № 12.

13 Vogt, Eelco & Weckhuysen, Bert. (2015). Fluid catalytic cracking: recent developments on the grand old lady of zeolite catalysis. *Chemical Society reviews*. 44. 10.1039/c5cs00376h.

14 Peng Bai, Ubong Jerome Etim, Zifeng Yan, Svetlana Mintova, Zhongdong Zhang, Ziyi Zhong & Xionghou Gao (2018): Fluid catalytic cracking technology: current status and recent discoveries on catalyst contamination, *Catalysis Reviews*, DOI: 10.1080/01614940.2018.1549011

15 Ghashghaee, M., Shirvani, S., & Kegnaes, S. (2019). Steam catalytic cracking of fuel oil over a novel composite nanocatalyst: Characterization, kinetics and comparative perspective. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 138, 281-293. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2019.01.010>

16 John, Yakubu & Mustafa, Mustafa & Patel, Rajnikant & Mujtaba, Iqbal. (2019). Parameter estimation of a six-lump kinetic model of an industrial fluid catalytic cracking unit. *Fuel*. 235. 1436-1454. 10.1016/j.fuel.2018.08.033.

17 Yang, Fan & Dai, Chaonan & Tang, Jianquan & Xuan, Jin & Cao, Jun. (2020). A hybrid deep learning and mechanistic kinetics model for the prediction of fluid catalytic cracking performance. *Chemical Engineering Research and Design*. 155. 10.1016/j.cherd.2020.01.013.

18 Junfeng You, Fangfang Ma & Fusheng Ouyang (2018) Prediction of the product yield from catalytic cracking (MIP) process by an 8-lump kinetic model combined with neural network, *Petroleum Science and Technology*, 36:13, 930-936, DOI: 10.1080/10916466.2018.1454951

19 Ebrahimi, A., H. Mousavi, H. Bayesteh and J. Towfighi. "Nine-lumped kinetic model for VGO catalytic cracking; using catalyst deactivation." *Fuel* 231 (2018): 118-125.

20 Cabrales-Navarro, Fredy & Pereira-Almao, Pedro. (2017). Catalytic Steam Cracking of Deasphalted Vacuum Residue Using a Ni/K Ultradispersed Catalyst. *Energy & Fuels*. 31. 10.1021/acs.energyfuels.6b03004.

21 Jiang, Hongbo & Huang, Shuai. (2016). Lump Reaction Kinetic Model for the Maximizing Isoparaffin Process for Cleaning Gasoline and Enhancing Propylene Yield. *Energy & Fuels*. 30. 10770-10776. 10.1021/acs.energyfuels.6b02208.

22 O. Fusheng, W. Yongqian & L. Qiao (2016) A lumped kinetic model for heavy oil catalytic cracking FDFCC process, *Petroleum Science and Technology*, 34:2, 192-199, DOI: 10.1080/10916466.2015.1124891

23 Xiong, Kai & Lu, Chunxi & Wang, Zhifeng & Gao, Xionghou. (2014). Kinetic study of catalytic cracking of heavy oil over an in-situ crystallized FCC catalyst. *Fuel*. 142. 10.1016/j.fuel.2014.10.072.

24 C. I. C. Pinheiro, J. L. Fernandes, L. Domingues, A. J. S. Chambel, I. Graça, N. M. C. Oliveira, H. S. Cerqueira, F. R. Ribeiro, Fluid Catalytic Cracking (FCC) Process Modeling, Simulation and Control, *Ind. Eng. Chem. Res.* 51(1) (2012) 1–29 <https://doi.org/10.1021/ie200743c>.

25 J. Ancheyta-Juarez, F. Lopez-Isunza, E. Aguilar-Rodrigueza, 5-Lump kinetic model for gas oil catalytic cracking, *App. Catal., A: Gen.* 177 (2) (1999) 227–235. [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(98\)00262-2](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(98)00262-2).

26 Yang Chen , Wei Wang , Zhifeng Wang , Kaijun Hou , Fusheng Ouyang

& Dun Li (2020): A 12-lump kinetic model for heavy oil fluid catalytic cracking for cleaning gasoline and enhancing light olefins yield, *Petroleum Science and Technology*, DOI: 10.1080/10916466.2020.1796701

27 Ali Afshar Ebrahimi, Hadis Mousavi, Hamid Bayesteh, Jafar Towfighi, Nine-lumped kinetic model for VGO catalytic cracking; using catalyst deactivation, *Fuel*, Volume 231, 2018, Pages 118-125, DOI: 10.1016/j.fuel.2018.04.126.

28 J. Ancheyta-Juarez, F. Lopez-Isunza, E. Aguilar-Rodríguez, Correlations for Predicting the Effect of Feedstock Properties on Catalytic Cracking Kinetic Parameters, *Ind. Eng. Chem. Res.* 37 (12) (1998) 4637–4640. <https://doi.org/10.1021/ie980138e>.

29 D.R. Stull, E.F. Westrum, G.C. Sinke 1969 *The Chemical Thermodynamics of Organic Compounds* (New York, J. Wiley), 1969.

30 E. Ivanchina, E. Ivashkina, G. Nazarova, Mathematical modelling of catalytic cracking riser reactor, *Chem. Eng. J.*, 329 (2017) 262–274. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.04.098>.

31 Z. G. Sabo *Chemical kinetics and chain reactions*. Nauka, 1960.

32 I. V. Yakupova, E. S. Chernyakova, E. D. Ivanchina, A. S. Belyi, M. D. Smolikov, Performance prediction of the catalyst PR-81 at the production unit using mathematical modeling method, *Procedia Engineering*, 113 (2015) 51–56. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2015.07.288>

33 N. Agrawal, G. P. Rangaiah, A. K. Ray, S. K. Gupta, Multi-objective Optimization of the Operation of an Industrial Low-Density Polyethylene Tubular Reactor Using Genetic Algorithm and Its Jumping Gene Adaptations, *Ind. Eng. Chem. Res.* 45 (9) (2006) 3182–3199. <https://doi.org/10.1021/ie050977i>

34 Y. Nakasaka, T. Okamura, H. Konno, T. Tago, T. Masuda, Crystal size of MFI-type zeolites for catalytic cracking of n-hexane under reaction-control conditions, *Microporous Mesoporous Mater.* 182 (2013) 244–249. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2013.04.010>.

35 Y. Hong, V. Gruver, J.J. Fripiat, Pentane Conversion on Dealuminated H-Y and HZSM-5, *J. Catal.* 161 (1996) 766–775. <https://doi.org/10.1006/jcat.1996.0239>.

36 H. Konno, R. Ohnaka, J. Nishimura, T. Tago, Y. Nakasaka, T. Masuda, Kinetics of the catalytic cracking of naphtha over ZSM-5 zeolite: effect of reduced crystal size on the reaction of naphthenes, *Catal. Sci. Technol.* 4(12) (2014) 1–9. <https://doi.org/10.1039/C4CY00733F>

37 H. Konno, T. Okamura, T. Kawahara, Y. Nakasaka, T. Tago, T. Masuda, Kinetics of n-hexane cracking over ZSM-5 zeolites – Effect of crystal size on effectiveness factor and catalyst lifetime, *Chem. Eng. J.* 207–208 (2012) 490–496. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.06.157>.

38 L. YanFeng, Z. JiQin, L. Hui, H. Peng, W. Peng, T. HuiPing, Theoretical study of 1-hexene activation over La/ZSM-5 zeolite, *Journal of Beijing University of Chemical Technology (Natural Science Edition)*, 3 (2011) 6–11.

39 C. Liang, Z. Danhong, X. Shuangying, L. Xin, Reaction Mechanism of Ethylene Aromatization over HZSM-5 Zeolite: From C4 to C6 Intermediates, *Chinese Journal of Catalysis*, 31 (2010) 645–650. <https://doi.org/10.3724/SP.J.1088.2010.91121>.

40 X. Xian, G. Liu, X. Zhang, L. Wang, Z. Mi, Catalytic cracking of n-dodecane over HZSM-5 zeolite under supercritical conditions: Experiments and kinetics, *Chem. Eng. Sci.* 65 (2010) 5588–5604. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.08.004>.

41 C. Chen, B. Yang, J. Yuan, Z. Wang, L. Wang, Establishment and solution of eight-lump kinetic model for FCC gasoline secondary reaction using particle swarm optimization, *Fuel*. 86(15) (2007) 2325–2332. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.01.007>.

42 V. Fierro, J. L. Duplan, J. Verstraete, Y. Schuurman, C. Mirodatos, A non-stationary kinetics approach for the determination of the kinetic parameters of the

protolytic cracking of methylcyclohexane, *Studies in Surface Science and Catalysis*, (2001) 341–348. [https://doi.org/10.1016/s0167-2991\(01\)81981-9](https://doi.org/10.1016/s0167-2991(01)81981-9).

43 S. Nagamatsu, M. Inomata, K. Imura, M. Kishida, K. Wakabayashi, Conversion of Light Naphtha to Aromatic Hydrocarbons. Part 4. Kinetic Study of Hexane Conversion Catalyzed by Platinum Supported on Zeolite L. *Journal of The Japan Petroleum Institute*, 44(6) (2001) 351–359. <https://doi.org/10.1627/jpi1958.44.351>.

44 J.L. Fernandes, J.J. Verstraete, C.I.C. Pinheiro, N.M.C. Oliveira, F. Ramoa Ribeiro, Dynamic modelling of an industrial R2R FCC unit, *Chem. Eng. Science*, 62(4) (2007) 1184–1198. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.11.003>.

45 K. Xiong, C. Lu, Z. Wang, X. Gao, Quantitative correlations of cracking performance with physiochemical properties of FCC catalysts by a novel lump kinetic modelling method, *Fuel*, 161 (2015) 113–119. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2015.07.081>.

46 Y. Behjat, S. Shahhosseini, M.A. Marvast, CFD analysis of hydrodynamic, heat transfer and reaction of three phase riser reactor, *Chem. Eng. Res. Des.* 89(7) (2011) 978–989. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2010.10.018>.

47 G. Liu, S. Guo, Z. Liu, Kinetic Study of Catalytic Cracking of n-Heptane on a ZSM-5 Based Mesoporous Catalyst with Small Crystal Size, *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, 54(1) (2018) 72–85. <https://doi.org/10.1007/s10553-018-0900-4>.

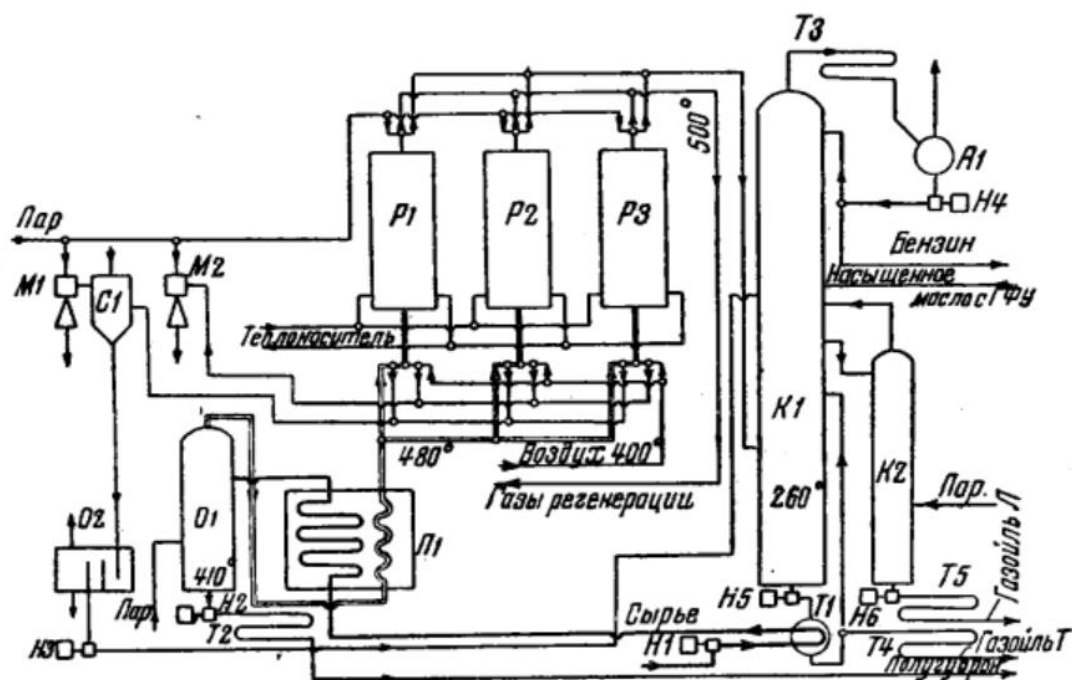
48 K. Chu, B. Wang, D.L. Xu, Y.X. Chen, A. Yu, CFD–DEM simulation of the gas–solid flow in a cyclone separator, *Chem. Eng. Science*, 66(5) (2011) 834–847.

49 B W Wojciechowski, A. Corma, *Catalytic cracking: Catalysts, chemistry, and kinetics*, United States, 1986.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение А

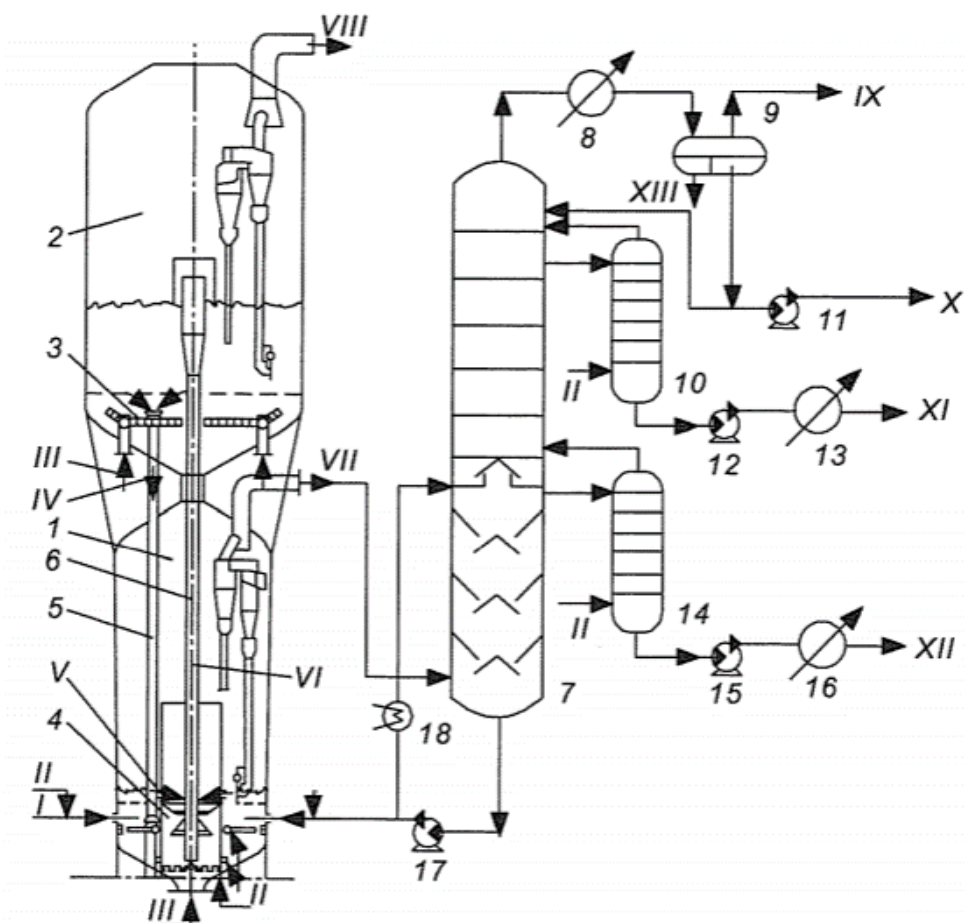
Установка каталитического крекинга со стационарным слоем катализатора (установка Гудри) [3]:



П1 - трубчатая печь; P1, P2, P3 - реакторы; C1 - конденсатор смешения; M1 и M2 - эжекторы; O1 - гудроноотделитель; O2 - отстойник (газо-водоотделитель); K1 - ректификационная колонна; K2 - отпарная колонна; A1 - газоотделитель; T1-T5 - теплообменники, конденсаторы, холодильники; N1-N6 - насосы

Приложение Б

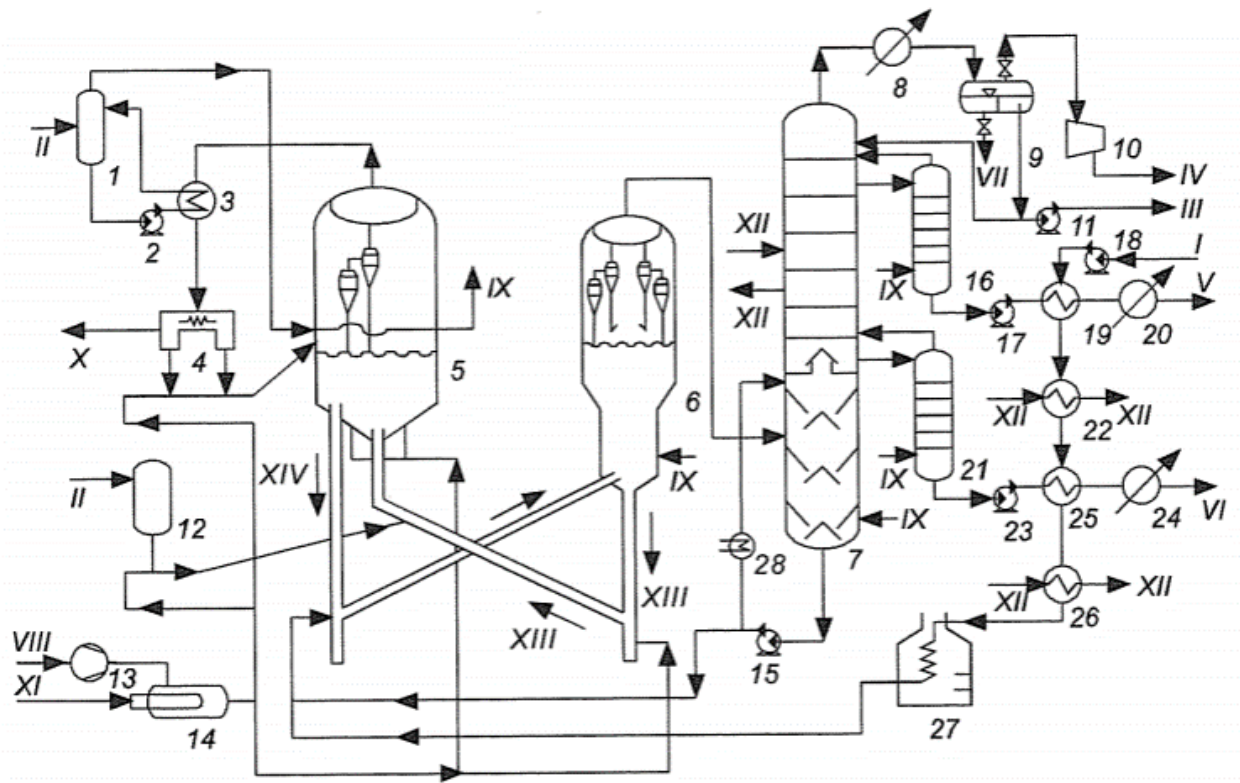
Принципиальная схема технологии "Orthoflow" процесса каталитического крекинга с кипящим слоем микросферического аморфного алюмосиликатного катализатора [3]:



1 - реактор; 2 - регенератор; 3 - воздухораспределитель; 4 - десорбер; 5 - напорный стояк; 6 - пневмодъёмник; 7 - ректификационная колонна; 8, 13, 16 - холодильники; 9 - сепаратор; 10, 14 - отпарные колонны; 11, 12, 15, 17 - насосы; 18 - парогенератор; I - сырьё; II - водяной пар; III - воздух; IV - регенированный катализатор; V - закоксованный катализатор на отпарку; VI - отпаренный катализатор; VII - продукты крекинга; VIII - дымовые газы; IX - газ; X - бензин; XI - лёгкий газойль; XII - тяжёлый газойль; XIII - вода

Приложение В

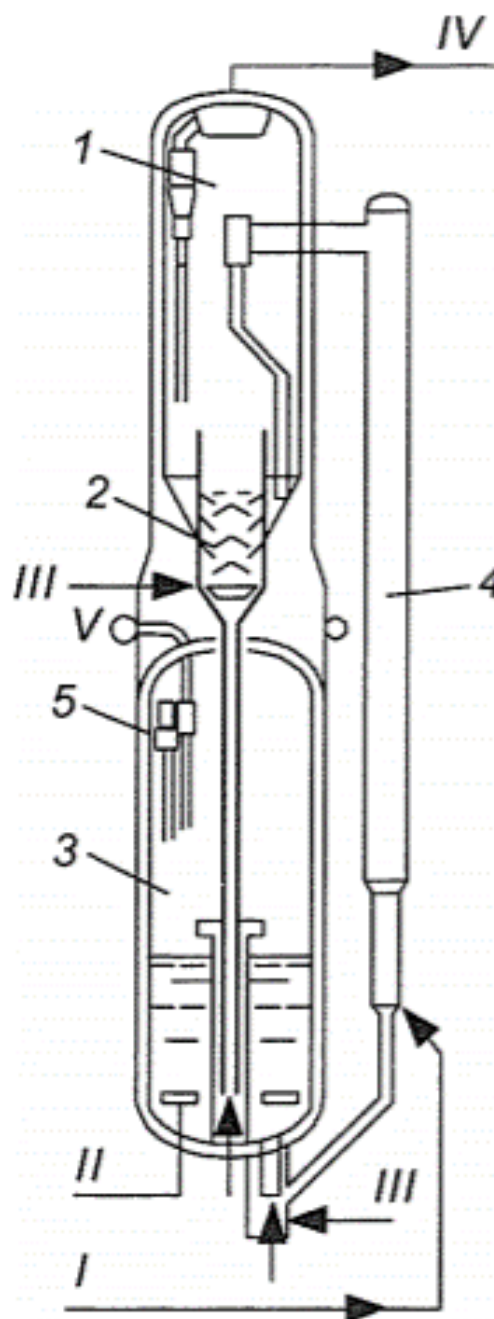
Принципиальная схема установки каталитического крекинга с "кипящим" слоем микросферического, аморфного, алюмосиликатного катализатора [3]:



1 - сепаратор; 2, 11, 15, 17, 18, 23 - насосы; 3 - котёл-утилизатор; 4 - элеткрофильтр; 5 - регенератор; 6 - реактор; 7, 16, 21 - колонны; 8, 20, 24 - холодильник; 9 - ёмкость; 10 - компрессор; 12 - бункер катализатора; 13 - воздуходувка; 14 - подогреватель воздуха; 19, 22, 25, 26 - теплообменники; 27 - печь; 29 - парогенератор; I - сырьё; II - свежий катализатор; III - бензин; IV - газ; V - фракция 195-350 °С; VI - фракция выше 350 °С; VII - вода; VIII - воздух; IX - водяной пар; X - дымовые газы; XI - топливный газ; XII - циркуляционное орошение колонны 7; XIII - закоксованный катализатор; XIV - регенерированный катализатор

Приложение Г

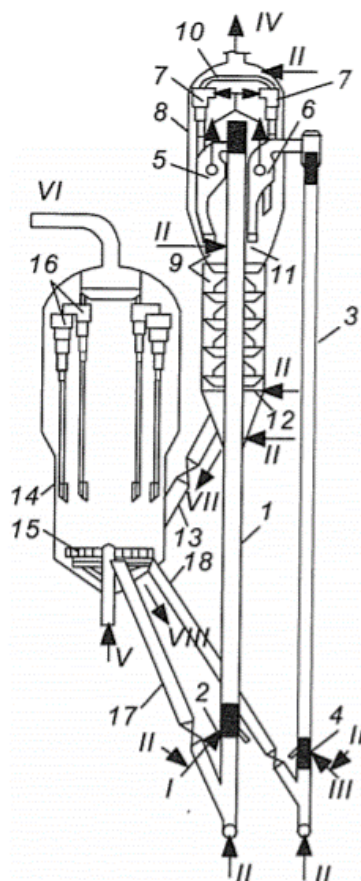
Принципиальная схема реакторно-регенераторного блока технологии "Orthoflow" с лифт-реактором [3]:



1 - реактор-сепаратор катализатора; 2 - отпарная секция; 3 - регенератор; 4 - лифт-реактор; 5 - циклоны; I - сырьё; II - воздух; III - водяной пар; IV - продукты реакции; V - дымовые газы

Приложение Д

Схема реакторно-регенераторного блока процесса каталитического крекинга с двумя лифт-реакторами на микросферическом цеолитсодержащем катализаторе [3]

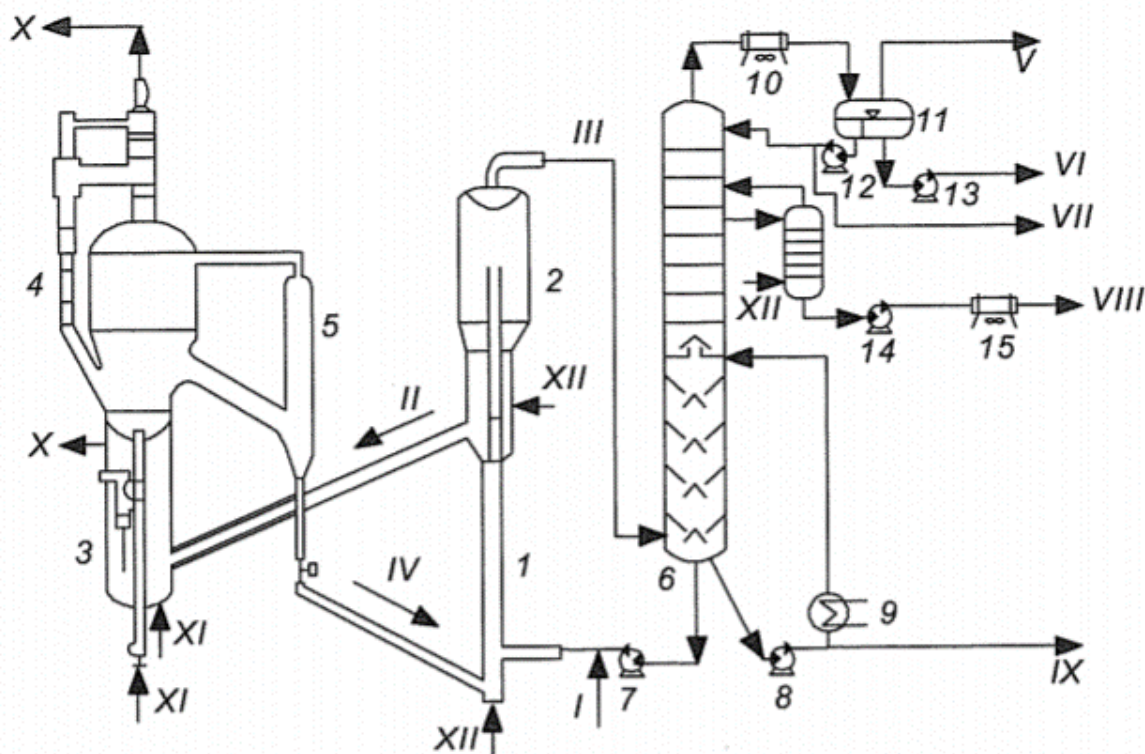


1 - основной лифт-реактор; 2 - узел ввода сырья; 3 - дополнительный лифт-реактор; 4 - узел ввода бензина; 5, 6 - центробежно-инерционный сепаратор; 7 - одноступенчатые циклоны; 8 - сепарационная секция реактора; 9 - отпарная секция реактора; 10 - парораспределитель сепарационной секции; 11 - парораспределитель предварительной отпарки; 12 - основной парораспределитель отпарной секции; 13, 17, 18 - наклонные катализаторопроводы; 14 - регенератор; 15 - трубчатый воздухораспределитель; 16 - двухступенчатые циклоны; I - сырьё; II - водяной пар; III - лёгкий бензин;

IV - продукты крекинга; V - воздух; VI - дымовые газы; VII - закоксованный катализатор; VIII - регенерированный катализатор

Приложение Е

Принципиальная схема установки R2R процесса каталитического крекинга с двумя регенераторами [9]



1 - лифт-реактор; 2 - реактор-сепаратор; 3 - первый регенератор; 4 - второй регенератор; 5 - холодильник катализатора; 6 - ректификационная колонна; 7, 8, 12-14 - насосы; 9 - пароподогреватель; 10, 15 - аппараты воздушного охлаждения; 11 - ёмкость; I - сырьё; II - закоксованный катализатор; III - продукты реакции; IV - регенерированный катализатор; V - газ; VI - кислая вода; VII - бензин; VIII - лёгкий газойль; IX - тяжёлый газойль; X - дымовые газы; XI - воздух; XII - пар

Приложение Ж

Влияние соединений серы и азота и кокса на катализатор [14]

Примесное вещество	Эффект, который вещество оказывает на катализатор
Азот	Отравляет активные центры, уменьшает активность, повышает скорость образования кокса на поверхности, закупоривает поры катализатора, уменьшает степень превращения сырья, уменьшает константу скорости реакции
Сера	Уменьшает степень превращения исходного сырья, уменьшает активность, повышает скорость образования кокса, уничтожает кислотные центры
Кокс	Перекрывает кислотные центры, закупоривает поры катализатора, уменьшает площадь активной поверхности и объём пор

Влияние различных металлов на различные аспекты каталитического процесса

[14]

Металл	Состояние металла и локация в структуре катализатора	Основные эффекты присутствия примесного металла	Дополнительный эффект	Влияние на процесс каталитического крекинга
V	V ⁴⁺ , V ⁵⁺ Цеолит	Сокращение активной поверхности; уничтожение кислотных центров; dealюминирование	Уменьшение размера элементарной ячейки кристаллической решётки; увеличение диаметра пор цеолита	Существенное снижение активности катализатора
Ni	Ni ⁰ , Ni ²⁺ Матрица	Катализация дегидрогенизации; ускоряет образование кокса	Отравление кислотных центров матрицы; неселективный крекинг	Повышение вероятности протекания реакций дегидрогенизации; увеличение скорости образования кокса
Na	Na ⁺ Цеолит	Депротонирование активных центров; ингибирование процесса dealюминации цеолита	Наличие вызывает гидротермическую нестабильность; нейтрализация кислотных центров; увеличение кристаллической решётки цеолита; закупоривание микропор цеолита; спекание частиц катализатора	Потеря активности
Fe	Fe ²⁺ , Fe ³⁺ Матрица	Закупоривание пор матрицы; разрушение поверхности катализатора	Отравление кислотных центров	Понижение активности катализатора; уменьшение степени превращения сырья в лифт-реактора; повышение скорости формирования кокса
Ca	Ca ²⁺ Матрица	Депротонирование активных центров	Нейтрализация кислотных центров матрицы; уменьшение гидротермической	Повышение скорости формирования кокса

			стабильности; разрушение структуры пор матрицы	
--	--	--	--	--

Влияние смесей примесных металлов на процесс каталитического крекинга [14]

Сочетание металлов	Суммарный эффект	Оказываемое влияние на процесс
V + Na	Неблагоприятный	Ускоряет процесс деалюминизации цеолита; уничтожает цеолитную структуру
V + Ni	Благоприятный/неблагоприятный	Понижает образование кокса на поверхности; стабилизирует цеолитную структуру; повышает активность катализатора
Ni + Fe	Неблагоприятный	Понижает скорость реакции дегидрогенизации
Fe + Ca	Неблагоприятный	Повышает температуру регенерации; увеличивает гидротермическую нестабильность
V + Ni + Fe	Неблагоприятный	Уменьшает скорость реакции дегидрогенизации; понижает гидротермическую стабильность

Приложение 3

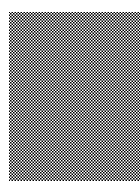
Кинетические параметры 12-компонентной схемы превращений [26]

Реакция	k_0 , м ³ /кг/с	E_a , кДж/моль	Реакция	k_0 , м ³ /кг/с	E_a , кДж/моль
HS→DIESEL	6,1587	2,70	DIESEL→GS	0,7519	21,22
HS→GS	5,4843	2,67	DIESEL→GO	11,9102	18,77
HS→GO	6,5231	4,30	DIESEL→GA	21129,70	70,13
HS→GA	27,1603	15,40	DIESEL→DGAS	4,68E+10	178,79
HS→DGAS	464,3800	46,93	DIESEL→LO3	223,27	43,59
HS→LO3	25,4203	23,11	DIESEL→LO4	230,3797	43,32
HS→LO4	26,7701	23,10	DIESEL→LPGD	56,1793	39,91
HS→LPGD	12,7840	19,13	DIESEL→COKE	15,3636	26,91
HS→COKE	3,1651	8,20	GS→GO	17,1273	19,12
HA→DIESEL	6,8411	3,89	GS→GA	7980,623	22,31
HA→GS	6,1421	3,99	GS→DGAS	1,41E+35	559,13
HA→GO	8,5312	6,70	GS→LO3	974,511	52,37
HA→GA	58,6668	21,32	GS→LO4	1053,82	52,7
HA→DGAS	1,55E+09	152,33	GS→LPGD	321,4317	48,19
HA→LO3	33,8441	24,09	GS→COKE	101,1580	38
HA→LO4	28,2481	21,94	GO→GS	64,5203	27,42
HA→LPGD	73,6142	36,70	GO→GA	66,823	29,73
HA→COKE	13,7661	20,39	GO→DGAS	2,07E+09	170,2
HR→DIESEL	7,1451	18,26	GO→LO3	76,61	35,1
HR→GS	7,1931	19,04	GO→LO4	85,2496	35,53
HR→GO	13,4641	23,92	GO→LPGD	7,1751	22,01
HR→GA	1802,0500	57,92	GO→COKE	348,4111	45,75
HR→DGAS	36,6922	37,30	GA→DGAS	25479,867	81,16
HR→LO3	5,6481	14,20	GA→LO3	47,4302	29,7
HR→LO4	6,0219	14,65	GA→LO4	92,4413	33,97
HR→LPGD	3,1525	10,33	GA→LPGD	21,6051	26,43
HR→COKE	12,3701	21,87	GA→COKE	54,7128	31,04

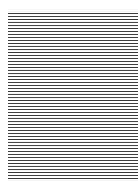
Приложение К

Карта сегментирования рынка услуг по разработке компьютерных моделирующих систем

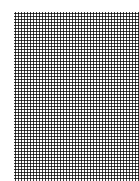
Размер компании	Вид продукции		
	КМС для промысловой подготовки нефти	КМС для НПЗ	КМС для нефтехимических производств
Крупные			
Средние			
Мелкие			



—
«Тюменьгипротранс»



— «Самара
НИПИ нефть»



— «Институт
проблем
нефти и газа
РАН»

Приложение Л

Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии эффективности							
Повышение производительности труда пользователя	0,10	5	4	3	0,50	0,4	0,3
Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,18	5	3	3	0,90	0,54	0,54
Надёжность	0,05	5	4	3	0,25	0,20	0,15
Простота эксплуатации	0,10	5	3	3	0,50	0,30	0,30
Качество интеллектуального интерфейса	0,09	5	3	3	0,45	0,27	0,27
Экономические критерии оценки эффективности							
Конкурентоспособность продукта	0,07	5	4	3	0,35	0,28	0,21
Уровень проникновения на рынок	0,07	4	5	5	0,28	0,35	0,35
Цена	0,07	5	4	4	0,35	0,28	0,28
Предполагаемый срок эксплуатации	0,08	5	5	5	0,40	0,40	0,40
Послепродажное обслуживание	0,06	5	3	2	0,30	0,18	0,12
Финансирование научной разработки	0,03	4	5	4	0,12	0,15	0,12
Срок выхода на рынок	0,04	5	4	4	0,20	1,16	0,16
Наличие сертификации разработки	0,06	4	5	4	0,24	0,30	0,24
Итого:	1	62	52	46	4,84	3,81	3,44

Условные обозначения: ф – предлагаемая разработка; к₁ – КМС компании «КВС Advanced Technologies»; к₂ – КМС компании «Aspen Tech».

Приложение М

Итоговая матрица SWOT-анализа

	Сильные стороны НИР С1. Экономичность и энергоэффективность технологии. С2. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями. С3. Наличие бюджетного финансирования.	Слабые стороны НИР Сл1. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров. Сл2. Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца. Сл3. Отсутствие инженеринговой услуги, способной обучить работать в рамках проекта.
Возможности В1. Использование инновационной инфраструктуры НИ ТПУ. В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт. В3. Повышение стоимости конкурентных разработок.	1. Повышение эффективности использования разрабатываемого продукта путём постоянных исследований. 2. Выбор грамотной рыночной стратегии по продвижению проектируемого продукта. 3. Сохранение доступной для потребителя цены на проектируемый продукт.	Создание инженеринговой услуги, способной обучить работать в рамках проекта с использованием всей доступной инфраструктуры.
Угрозы У1. Появление более эффективных разработок у конкурентов. У2. Развитая конкуренция технологий производства. У3. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции.	1. Следование тенденции к снижению стоимости продукта. 2. Наиболее эффективное использование инфраструктуры и оборудования, доступных для разработки продукта. 3. Анализ цен на продукты конкурентов, результирующий в формирование цены разрабатываемого продукта.	Приобретение наиболее эффективного оборудования для анализа испытываемого образца.

Приложение Н

Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Исполнитель
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
	2	Выбор направления исследования	Руководитель, студент
Теоретические и экспериментальные исследования	3	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, студент
	4	Составление литобзора ВКР	Студент
	5	Составление формализованной схемы превращений	Руководитель, студент
	6	Разработка математической модели	Руководитель, студент
	7	Проведение расчётов с использованием разработанной математической модели	Студент
Обобщение и оценка результатов	8	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Студент
	9	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, студент
Разработка технической документации и проектирование	10	Обсуждение результатов	Руководитель, студент
	11	Оформление пояснительной записки ВКР	Студент
Защита ВКР	12	Рецензирование	Руководитель
	13	Презентация	Студент
	14	Защита ВКР	Студент

Приложение О

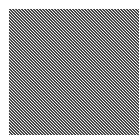
Временные показатели проведения научного исследования

Наименование этапа	Исполнитель	Трудоёмкость работ, человеко-дни			T_{p_i} , дни	T_{k_i} дни
		t_{min_i}	t_{max_i}	$t_{ожид_i}$		
Составление и утверждение технического задания	Руководитель	1	5	2,6	2,6	4
Выбор направления исследования	Руководитель	3	5	3,8	3,8	10
	Студент	3	5	3,8	3,8	10
Календарное планирование работ по теме	Руководитель	1	7	3,4	3,4	5
Составление литературного обзора ВКР	Студент	5	15	9	9	13
Составление формализованной схемы превращений	Руководитель	7	21	12,6	12,6	19
	Студент	10	30	18	18	27
Разработка математической модели	Руководитель	30	50	38	38	56
	Студент	40	60	48	48	71
Проведение расчётов с использованием разработанной математической модели	Студент	14	30	20,4	20,4	30
Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Студент	10	20	14	14	21
Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель	3	7	4,6	4,6	7
	Студент	2	5	3,2	3,2	5
Обсуждение результатов	Руководитель	3	5	3,8	3,8	6
	Студент	3	5	3,8	3,8	6
Оформление пояснительной записки ВКР	Студент	10	18	13,2	13,2	20
Рецензирование	Руководитель	6	8	6,8	6,8	10
Презентация	Студент	4	7	5,2	5,2	8
Защита ВКР	Студент	1	1	1	1	1
Итого:	Руководитель				96	117
	Студент				140	212

Условные обозначения:



—
Руководитель
(P)



— Студент
(C)

Приложение Р

Выполнение требований к организации рабочего места при работе с ПЭВМ

Требование	Требуемое значение	Значение параметров в рабочем помещении
Высота рабочей поверхности	725 мм, если высота нерегулируемая	Требование выполняется
Высота сидения	430 мм	Аудитория оснащена компьютерными подъёмно-поворотными креслами с регулирующейся высотой, поэтому требование выполняется
Подставка для ног	Регулируемая высота	Подставка для ног отсутствует. Требование не выполняется
Расположение средств зрительной информации (видеомонитор)	Под углом $\pm 15^\circ$ от нормальной линии взгляда и на расстоянии 600–700 мм	Требования соблюдены
Расстояние между рабочими столами с видеомониторами	Не менее 2,0 м	Не соблюдается
Расположение клавиатуры	100–300 мм от края, обращённого к пользователю	Соблюдается

Приложение С

Возможные опасные и вредные факторы

Факторы по ГОСТ 12.0.003-2015	Этапы работы			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
1. Недостаточное освещение	+	+	+	– СП 52.13330.2016 «Естественное и искусственное освещение». Актуализированная редакция СНиП 23-05-95 – СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы»
2. Напряжённость труда	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы»
3. Неудовлетворительный микроклимат	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений
4. Поражение электрическим током	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов
5. Статические физические перегрузки	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы»