



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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

ООП Химическая технология топлива и газа

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРАНТА

Тема работы
<i>Разработка математической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа в жидкие углеводороды</i>

УДК 665.612.2-048.75

Обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ12	Гнеушева Виолетта Витальевна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ	Белинская Наталия Сергеевна	к.т.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООД	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП
«Химическая технология топлива и газа»
(направление подготовки 18.04.01 «Химическая технология»)

Код компетенции	Наименование компетенции
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий
УК(У)-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном (-ых) языке (-ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок
ОПК(У)-2	Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
ОПК(У)-3	Способен разрабатывать нормы выработки, технологические нормативы на расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии, контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку
ОПК(У)-4	Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способен к совершенствованию технологического процесса — разработке мероприятий по комплексному использованию сырья, по замене дефицитных материалов и изысканию способов утилизации отходов производства
ПК(У)-2	Способен оценивать эффективность новых технологий, модернизировать существующие технологии и внедрять технические решения в производство
ПК(У)-3	Способен осуществлять экспертный анализ технологий и управление технологическими процессами промышленной подготовки и переработки нефти и газа
ПК(У)-4	Способен проводить аналитический и метрологический контроль производства для обеспечения качества и безопасности выпускаемой продукции, хода технологического процесса, охраны окружающей среды
ПК(У)-5	Способен осуществлять выбор и эксплуатацию технологического оборудования для подготовки и переработки нефти и газа
ПК(У)-6	Способен использовать пакеты прикладных программ при мониторинге действующего процесса, выполнении проектных и/или исследовательских работ



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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки (ООП/ОПОП) 18.04.01 Химическая технология

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП

(Подпись) (Дата) (ФИО)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
2ДМ12	Гнеушева Виолетта Витальевна

Тема работы:

<i>Разработка математической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа в жидкие углеводороды</i>	
<i>Утверждена приказом директора (дата, номер)</i>	от 30.01.2023 №30-97/с

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	01.06.2023
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к функционированию (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.)</i></p>	<p>Объект исследования – процесс конверсии ПНГ в жидкие углеводороды. Исходные данные: технологические условия процесса, составы сырья и продукта.</p>
<p>Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке <i>(аналитический обзор литературных источников 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 Литературный обзор 1.1 Проблемы и возможности рационального использования попутного нефтяного газа 1.2 Основы процесса и технология газожидкостной конверсии 1.2.1 Преимущества использования GTL-технологий 1.2.2 GTL-процессы 1.2.3 Катализаторы процесса 1.3 Модели процессов переработки углеводородов на цеолитных катализаторах 1.4 Постановка цели и задач исследования 2 Объект и методы исследования</p>

	<p>2.1 Характеристика объекта исследования и исходных данных</p> <p>2.2 Методы исследования</p> <p>2.2.1 Метод математического моделирования</p> <p>2.2.2 Метод квантовой химии для расчета термодинамических свойств молекул</p> <p>3 Расчеты и аналитика</p> <p>3.1 Совершенствование формализованной схемы превращений процесса конверсии попутного нефтяного газа</p> <p>3.1.1 Превращения углеводородов на цеолитных катализаторах</p> <p>3.1.2 Термодинамический анализ реакций</p> <p>3.1.3 Компонентная формализованная схема превращений попутного нефтяного газа на цеолитном катализаторе</p> <p>3.2 Разработка кинетической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа</p> <p>3.3 Программная реализация кинетической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа</p> <p>4 Результаты проведенного исследования</p> <p>5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p> <p>6 Социальная ответственность</p>
--	---

Перечень графического материала

(с точным указанием обязательных чертежей)

—

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы *(с указанием разделов)*

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Криницына Зоя Васильевна, к.т.н., доцент ОСГН ШБИП
Социальная ответственность	Сечин Андрей Александрович, к.т.н., доцент ООД ШБИП
Иностранный язык	Уткина Анна Николаевна, к.ф.н., доцент ОИЯ ШБИП

Названия разделов, которые должны быть написаны на иностранном языке:

Литературный обзор

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	01.02.2023
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ	Белинская Наталия Сергеевна	к.т.н.		

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ12	Гнеушева Виолетта Витальевна		



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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки (ООП/ОПОП) 18.04.01 Химическая технология

Уровень образования Магистратура

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

Период выполнения Весенний семестр 2022/2023 учебного года

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
2ДМ12	Гнеушева Виолетта Витальевна

Тема работы:

<i>Разработка математической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа в жидкие углеводороды</i>

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	01.06.2023
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
07.02.2023	Введение	10
05.04.2023	Литературный обзор: проблемы и возможности рационального использования попутного нефтяного газа, основы процесса и технология газожидкостной конверсии, преимущества использования GTL-технологий, модели процессов переработки углеводородов на цеолитных катализаторах, постановка цели и задач исследования.	15
15.04.2023	Объект и методы исследования: составы исходного попутного нефтяного газа и продукты процесса конверсии; технологические параметры процесса конверсии; метод математического моделирования; метод квантовой химии для расчета термодинамических свойств молекул.	15
05.05.2023	Расчеты и аналитика: совершенствование формализованной схемы превращений процесса конверсии попутного нефтяного газа; превращения углеводородов на цеолитных катализаторах; термодинамический анализ реакций; компонентная формализованная схема превращений попутного нефтяного газа на цеолитном катализаторе; разработка кинетической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа; программная реализация кинетической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа.	20
10.05.2023	Результаты проведенного исследования.	20
15.05.2023	Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». Раздел «Социальная ответственность».	10

	Раздел «Иностранный язык»	
24.05.2023	Выводы	10

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ	Белинская Наталия Сергеевна	к.т.н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

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

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ12	Гнеушева Виолетта Витальевна		

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ12	Гнеушевой Виолетте Витальевне

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

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Бюджет проекта – не более 800 000 руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 300 000 руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Значение показателя интегральной ресурсоэффективности – не менее 4 баллов из 5
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Страховые взносы в размере 30 %. Районный коэффициент – 1,3.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	1.1 Потенциальные потребители результатов исследования 1.2 Анализ конкурентных технических решений 1.3 FAST-анализ 1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации 1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования
2. Разработка устава научно-технического проекта	2. Инициация проекта. Цели и результат проекта, организационная структура проекта, ограничения и допущения проекта
3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	3.1 Иерархическая структура работ проекта 3.2 Контрольные события проекта 3.3 План проекта 3.4 Бюджет научного исследования 3.5 Организационная структура проекта 3.6 Матрица ответственности 3.7 План управления коммуникациями проекта 3.8 Реестр рисков проекта
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	4.1 Оценка абсолютной эффективности исследования 4.2 Оценка сравнительной эффективности исследования

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.02.2023
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ12	Гнеушева Виолетта Витальевна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа		ФИО	
2ДМ12		Гнеушевой Виолетте Витальевне	
Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Тема ВКР:

Разработка математической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа в жидкие углеводороды

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

Введение

– Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения;
– Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации.

– Объект исследования – процесс конверсии попутного нефтяного газа в жидкие углеводороды.
– Область применения - в образовательных учреждениях и на газоперерабатывающих заводах.
– Рабочая зона – компьютерный класс, аудитория 133, корпус №2 Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при разработке проектного решения:

– Специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;
– Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.

– Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2020)
– Федеральный закон «О специальной оценке условий труда» от 28.12.2013 N 426-ФЗ
– ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.
– ТОИ Р-45-084-01. Типовая инструкция по охране труда при работе на персональном компьютере;
– ГОСТ Р ИСО 9241-4-2009. Эргономические требования к проведению офисных работ с использованием видео дисплейных терминалов (VDT). Часть 4. Требования к клавиатуре).

2. Производственная безопасность при разработке проектного решения:

– Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов;
– Расчет уровня опасного или вредного производственного фактора.

Вредные факторы:
– повышенная или пониженная температура воздуха (влажность) рабочей зоны;
– отсутствие или недостаток естественного света;
– нервно-психические перегрузки, связанные с напряженностью трудового процесса;
– повышенный уровень и другие неблагоприятные характеристики шума;
Опасные факторы:
– наличие электротехнических устройств высокого напряжения.
Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов:
– средства нормализации воздушной среды рабочего места (устройства для поддержания нормируемой величины барометрического давления, вентиляции и очистки воздуха, локализации вредных факторов и т. д.);

	<ul style="list-style-type: none"> – средства нормализации освещения производственных помещений и рабочих мест (источники света, осветительные приборы, световые проемы, светозащитные устройства, светофильтры); – средства защиты от поражения электрическим током (оградительные устройства, устройства автоматического контроля и сигнализации, изолирующие устройства и покрытия и т. д.); – средства защиты от повышенного уровня вибрации (виброизолирующие, вибропоглощающие средства). <p>Расчет искусственного освещения.</p>
3. Экологическая безопасность при разработке проектного решения	<ul style="list-style-type: none"> – Воздействие на селитебную зону: продукты разложения отходов (электролиты, тяжелые металлы). – Воздействие на литосферу: продукты разложения отходов (золото, серебро, алюминий, медь, железо, платина, полимеры). – Воздействие на гидросферу: продукты разложения отходов (электролиты – кислоты, щелочи). – Воздействие на атмосферу: продукты разложения отходов (продукты сжигания – углекислый газ, диоксины).
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при разработке проектного решения	<ul style="list-style-type: none"> – Возникновение чрезвычайных ситуаций, требующих обеспечения электро- и пожаро-взрывобезопасности на рабочем месте: обрушение здания, террористический акт, взрыв, пожар; – Возникновение чрезвычайных ситуаций, требующих обеспечения информационной безопасности на рабочем месте: утечка данных, потеря результатов; – Наиболее типичная ЧС: пожар.
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
	01.02.2023

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООД	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ12	Гнеушева Виолетта Витальевна		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 143 страницы, 27 рисунков, 44 таблицы, 57 источников, 2 приложения.

Ключевые слова: ПОПУТНЫЙ НЕФТЯНОЙ ГАЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, УГЛЕВОДОРОДЫ, ЦЕОЛИТНЫЙ КАТАЛИЗАТОР, КОНВЕРСИЯ, ЗАКОН ДЕЙСТВУЮЩИХ МАСС, GTL-ТЕХНОЛОГИИ.

Объектом исследования является процесс конверсии ПНГ в жидкие углеводороды на цеолитном катализаторе, позволяющий преобразовать компоненты смеси газообразных углеводородов в ценное нефтехимическое сырье.

Цель работы – установление закономерностей процесса и прогнозирование выхода жидких углеводородов в результате превращений компонентов ПНГ в процессе конверсии на цеолитном катализаторе, с использованием разработанной математической модели.

Метод исследования процесса конверсии ПНГ в ароматические углеводороды – математическое моделирование.

В ходе работы проводились расчет термодинамических и кинетических параметров протекающих реакций, разработка дифференциальных уравнений математической модели, программная реализация алгоритма решения уравнений математической модели, проводились расчеты с применением разработанной модели.

В результате термодинамических расчетов были выявлены основные закономерности протекания реакций на цеолитном катализаторе; расчеты на разработанной математической модели показали, что она может быть использована для прогнозирования состава продуктов процесса конверсии ПНГ в жидкие углеводороды.

Область применения: нефте- и газоперерабатывающие предприятия.

Экономическая значимость работы заключается в возможности снижения затрат на процесс конверсии ПНГ путем подбора оптимального технологического режима, без вмешательства в конструкцию установки.

В будущем планируется расширение областей применения данной модели путем введения в ее структуру учета гидродинамической составляющей процесса.

Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

В данной работе применены следующие термины с соответствующими определениями:

математическое моделирование химико-технологической системы: это количественный анализ процессов нефтехимии и нефтепереработки с помощью создания математических моделей.

Данная работа содержит следующие обозначения и сокращения:

ПНГ – попутный нефтяной газ

GTL – gas-to-liquid technology

ГПЗ – газоперерабатывающий завод

В данной работе использованы следующие нормативные ссылки:

ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.

СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

ГОСТ 12.1.003-2014. ССБТ. Шум. Общие требования безопасности.

ГОСТ Р 55710-2013. Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений.

ГОСТ Р 12.1.019-2009. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

ГОСТ 12.1.005-88. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.

ГОСТ 12.1.004-91. Пожарная безопасность. Общие требования.

ГОСТ Р 22.0.01-94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения.

Содержание

ВВЕДЕНИЕ	18
1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР	21
1.1 Проблемы и возможности рационального использования попутного нефтяного газа	21
1.2 Основы процесса и технология газожидкостной конверсии	24
1.2.1 Преимущества использования GTL-технологий	25
1.2.2 GTL-процессы	27
1.2.3 Катализаторы процесса	29
1.3 Модели процессов переработки углеводородов на цеолитных катализаторах	31
1.4 Постановка цели и задач исследования	32
2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ	34
2.1 Характеристика объекта исследования и исходных данных	34
2.2 Методы исследования	37
2.2.1 Метод математического моделирования.....	37
2.2.2 Метод квантовой химии для расчета термодинамических свойств молекул.....	39
3 РАСЧЕТЫ И АНАЛИТИКА.....	41
3.1 Совершенствование формализованной схемы превращений процесса конверсии попутного нефтяного газа.....	41
3.1.1 Превращения углеводородов на цеолитных катализаторах	41
3.1.2 Термодинамический анализ реакций.....	46
3.1.3 Компонентная формализованная схема превращений попутного нефтяного газа на цеолитном катализаторе.....	47

3.2 Разработка кинетической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа	49
3.3 Программная реализация кинетической модели процесса конверсии попутного нефтяного газа	50
3.4 Проверка модели на адекватность.....	58
4 РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕДЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ	63
5 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ	65
5.1 Предпроектный анализ	65
5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	66
5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	67
5.1.3 FAST-анализ	67
5.1.4 Диаграмма Исикавы.....	73
5.1.5 Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	73
5.1.6 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	75
5.2 Инициация проекта	77
5.2.1 Цели и результат проекта	77
5.2.2 Организационная структура проекта.....	77
5.2.3 Ограничения и допущения проекта	78
5.3 Планирование управления научно-техническим проектом.....	79
5.3.1 Иерархическая структура работ проекта.....	79
5.3.2 Контрольные события проекта	79
5.3.3 План проекта	80
5.3.4 Бюджет научного исследования	80

5.3.5	Организационная структура проекта.....	85
5.3.6	Матрица ответственности.....	86
5.3.7	План управления коммуникациями проекта.....	87
5.3.8	Реестр рисков проекта.....	87
5.4	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	88
5.4.1	Оценка абсолютной эффективности исследования.....	88
5.4.2	Оценка сравнительной эффективности исследования.....	93
6	СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....	97
6.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	98
6.2	Производственная безопасность.....	101
6.2.1	Анализ вредных факторов.....	101
6.2.1.1	Расчет искусственного освещения.....	103
6.2.2	Анализ опасных факторов.....	106
6.2.2.1	Электрический ток.....	106
6.2.2.2	Пожаробезопасность.....	107
6.2.3	Мероприятия по снижению уровней воздействия опасных и вредных факторов на исследователя.....	108
6.3	Экологическая безопасность.....	110
6.3.1	Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду.....	110
6.3.2	Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду.....	110
6.3.3	Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.....	110
6.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	111
6.4.1	Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований.....	111

6.4.2 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований	111
6.4.3 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС	113
ВЫВОДЫ	115
СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ	118
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	120
Приложение А Literature review.....	127
Приложение Б Диаграмма Исикавы	143

ВВЕДЕНИЕ

Процессы добычи и переработки нефти оказывают сильное воздействие на окружающую среду, в том числе из-за значительного объема ПНГ, выбрасываемого в атмосферу. Кроме того, газ имеет высокую концентрацию H_2S и других вредных веществ, которые также оказывают негативное воздействие на окружающую среду.

Сжигание газа является источником летучих органических соединений, CO , CO_2 , SO_2 , полиароматических углеводородов, NO_x (оксиды азота) и сажи, которые являются загрязнителями окружающей среды, влияющими на климатические процессы Земли прямо или косвенно. В этом контексте новые экологические нормы и тенденции в области рационального использования природных ресурсов в последнее время привлекли внимание исследователей во всем мире, а также вынудили нефтяную промышленность применять инновационные технологии для ликвидации негативного влияния на окружающую среду.

Процесс преобразования ПНГ в ароматические углеводороды с помощью цеолитных катализаторов может быть альтернативой другим процессам утилизации ПНГ. Основные преимущества цеолитных катализаторов: повышенная активность, стабильность, возможность регенерации, цеолиты являются природными материалами и не требуют использования специальных технологий переработки, относительно низкая стоимость, высокая устойчивость к условиям эксплуатации и селективность действия. Вместе с тем в случае цеолитных катализаторов следует отметить, что существует ряд факторов, ограничивающих их промышленное применение, таких, как высокая способность закоксовывания и короткий период между регенерациями. Эти проблемы могут быть решены путем выбора соответствующих технологических параметров, в том числе с помощью математической модели процесса.

Со временем состав ПНГ может значительно варьироваться с течением времени, в некоторых случаях даже в течение недели. В связи с этим для процессов переработки ПНГ встает задача прогнозирования и оптимизации

выхода продуктов реакции в зависимости от состава сырья, а также выбор оптимальных технологических параметров для достижения более высокого выхода продуктов без потери качества.

Приведенные выше аргументы обуславливают актуальность разработки математической модели, основанной на физико-химических закономерностях процесса.

Институт катализа имени Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук рассматривал вопрос о возможных путях использования ПНГ на нефтегазовых месторождениях. Была разработана и внедрена сравнительная модель нового цикла конверсии газа в жидкость (GTL) в качестве альтернативы сжиганию на нефтеперерабатывающем заводе (Горбани А. и др., Ширазский университет). Сегодня этот процесс также исследуется в лабораторных условиях: изучается влияние добавок на свойства цеолитных катализаторов, используемых в процессе преобразования ПНГ в жидкие углеводороды (Ерофеев В. И. и др., НИ ТПУ); исследуется возможность повышения эффективности катализатора в процессах ароматизации ПНГ (Лищинер И. И. и др., ОИВТ РАН); разработана модель переработки бензиновой фракции на цеолитных катализаторах (Ровенская С. А. и др., ОмГУ).

Учитывая вышесказанное, на данный момент не разработана математическая модель процесса переработки ПНГ в ароматические углеводороды, учитывающая физико-химические закономерности процесса.

Целью данной работы является установление закономерностей процесса и прогнозирование выхода жидких углеводородов в результате превращений компонентов ПНГ в процессе конверсии на цеолитном катализаторе, с использованием разработанной математической модели.

Объектом исследования является процесс конверсии ПНГ в жидкие углеводороды, в ходе которого компоненты смеси газообразных углеводородов преобразуются в ценное нефтехимическое сырье.

Предметом исследования являются физико-химические закономерности процесса конверсии попутного нефтяного газа в ароматические углеводороды.

Личный вклад заключается в исследовании химизма процесса, термодинамики и кинетики протекающих реакций, разработке уравнений математической модели, программной реализации алгоритма решения уравнений математической модели, проведении расчетов с применением разработанной модели.

С практической точки зрения, разработанная математическая модель может применяться для прогнозирования составов и выходов продуктов процесса конверсии ПНГ, оптимизации процесса в зависимости от состава сырья и активности катализатора.

Результаты исследований, проводимых в рамках подготовки выпускной квалификационной работы были представлены на XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке» имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 125-летию со дня основания Томского политехнического университета (17–20 мая 2021 года), доклад на тему: «Математическое моделирование процесса конверсии попутного нефтяного газа в ароматические углеводороды», а также на IV Международной научно-практической конференции «Современное программирование» (8 декабря 2021 года), доклад на тему: «Исследование конверсии попутного нефтяного газа на цеолитном катализаторе в ароматические углеводороды».

1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Проблемы и возможности рационального использования попутного нефтяного газа

ПНГ представляет собой комбинацию углеводородов C_1 - C_{7+} , в основном алканов. Типичный состав ПНГ включает CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 , n - C_4H_{10} , i - C_4H_{10} , n - C_5H_{12} , i - C_5H_{12} , C_6H_{14} , C_7H_{16} , H_2S , CO_2 и N_2 , где «n» и «i» – алканы с прямой и разветвленной цепью соответственно. Разделение газа и жидкости не является идеальным на проточных станциях, поэтому небольшое количество жидкости может присутствовать в потоке газа, что увеличивает количество алканов с более высокой молекулярной массой.

Сжигание газа — это процесс удаления газа путем сжигания в открытой атмосфере с использованием специально разработанного для этой цели наконечника горелки при добыче нефти и газа [1–3].

Сжигание газа на факелах осуществляется с целью преобразования углеводородов, в частности метана, в менее опасные продукты в непосредственной близости от места добычи [4]. Хотя целью факельной системы является обеспечение безопасности установки, то есть сжигание газов, теряемых через выпускные клапаны установки, и газа, сбрасываемого в систему продувки при нестабильных условиях эксплуатации, таких как остановка нефтеперерабатывающего завода, включая внезапное увеличение давления в газовых потоках и пожаре, при сгорании в этой башне образуются вредные для окружающей среды продукты, такие как углеводороды, CO , H_2 , NO , NO_2 , SO_2 и т.д. Таким образом, сжигание является одним из самых спорных вопросов, касающихся проблем современной энергетики и ее воздействия на окружающую среду [5–7].

Сжигание газа в нефтяной промышленности распространено в развивающихся странах и богатых нефтью регионах мира, где технологии и инфраструктура сбора, хранения и использования добываемого газа, которые позволили бы эффективно использовать весь углеводородный газ, недоступны или нерентабельны в повседневной деятельности. Несмотря на требования

международных организаций, таких как The World Bank-led Global Gas Flaring Reduction Partnership период с 2008 по 2016 год объем сжигаемого в факелах газа во всем мире составил около 130 миллиардов долларов.

Россия — крупнейшая по площади страна в мире, обладающая большими и разнообразными энергетическими ресурсами. Запасы нефти и природного газа оцениваются примерно в 80 млрд. баррель и 47,8 трлн. м³ соответственно [8, 9]. В мире запасы газа в России оцениваются как первые по величине [10].

Эти огромные запасы газа находятся либо в форме ПНГ, либо в виде природного газа, который представляет собой газ с небольшим содержанием нефти или без нее. Большой объем запасов газа в России составляют ПНГ [11].

По спутниковым данным [12], на четыре страны с самым высоким уровнем сжигания попутного газа (Россия, Ирак, США и Иран) по-прежнему приходится почти половина (45 %) мирового сжигания попутного газа в течение трех лет подряд (2017-2019 гг.).

Согласно модели GAINS (Взаимодействия и синергия парникового газа и загрязнения воздуха) на долю факельного газа приходится около 4 % общих антропогенных выбросов загрязняющих веществ, приходящихся в основном на ведущих производителей газа в России, Нигерии и на Ближнем Востоке [7]. Подсчитано, что Россия несет ответственность за 36,2 % выбросов загрязняющих веществ, которые представляют угрозу для окружающей среды и здоровья и являются причиной большей части годовых потерь доходов страны [11].

В связи с истощением запасов нефти в последние годы начаты исследования с целью получения ценных продуктов из альтернативного сырья (попутного газа и природного газа) для нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности [13–15].

Экономическая целесообразность использования ПНГ часто зависит от рассматриваемого географического положения, и у российских нефтяных компаний часто нет стимулов для инвестиций в инфраструктуру утилизации. Стоит отметить, что Россия ввела 5 % лимит на сжигание ПНГ в 2012 году, но в

2015 году сжигалось почти 12 % [16]; по данным Министерства природных ресурсов, в 2016 году этот показатель был близок к 11 %.

Достижение цели в 5 % технически осуществимо, как это уже продемонстрировали несколько частных нефтяных компаний [17]. Однако на сегодняшний день практически все нефтяные компании используют ПНГ в количестве, необходимом для обеспечения собственных нужд, а остальное сжигается [18-20].

Объемы сжигания ПНГ в России неуклонно снижаются, хотя фактический план еще не достигнут [16]. Однако достоверность этих данных вызывает сомнения, так как существуют значительные расхождения между российской статистикой сжигания ПНГ и данными спутников (National Oceanic and Atmospheric Administration (Национальное управление океанических и атмосферных исследований)) [21].

При этом проблема факельного сжигания ПНГ в России стоит особенно остро: по данным Минэнерго Российской Федерации, на объектах нефтедобычи сжигается 9,3 млрд. м³/год ПНГ [22]. Такие масштабы можно объяснить следующими факторами:

- Сжигание ПНГ происходит в основном на небольших месторождениях (мощностью менее 50 млн. м³/год газа), а проблема сжигания ПНГ на малых месторождениях пока не имеет экономически выгодного решения.
- Использование ПНГ без предварительной обработки в качестве топлива для двигателей внутреннего сгорания на местных электростанциях неизбежно приведет к перегреву и выходу двигателя из строя, поскольку конструкционные материалы и режим работы рассчитаны на работу с топливным газом, теплотворная способность которого не превышает 36 МДж/м³, тогда как минимальная теплотворная способность ПНГ находится в пределах от 42 до 60 МДж/м³, что является недопустимым превышением для стабильной работы двигателя.

Еще одна проблема использования ПНГ в двигателях внутреннего сгорания заключается в том, что ПНГ содержит тяжелые углеводороды, которые в зависимости от их концентрации и давления газа конденсируются ниже точки росы в питательной магистрали, образуя капли жидкости на входе в камеру сгорания. В результате сгорание топливной смеси происходит неравномерно, сопровождается образованием смолистых соединений, повышенным закоксовыванием и детонацией, что в конечном итоге приводит к преждевременному выходу двигателя из строя [23].

Конверсия ПНГ, несомненно, является наиболее привлекательным способом использования ПНГ, так как позволяет синтезировать продукты с высокой добавочной стоимостью, однако из-за логистических ограничений этот способ практически не практикуется в России. Однако положительным примером является Самарская область, где ПНГ полностью перерабатывается на Отрадном и Нефтегорском ГПЗ (350 и 450 млрд. н.м³/год соответственно).

Согласно отчету Нижневартковского научно-исследовательского и проектного института нефти [24], более 80 % нефтяных месторождений, на которых сжигается ПНГ, относятся к малым (менее 50 млн. н.м³/год) и при этом их количество продолжает расти, особенно в Западной и Восточной Сибири. Как и на месторождениях центральной России, организация сбора газа с таких нефтяных месторождений является весьма дорогостоящим процессом, сопровождающимся значительными эксплуатационными затратами. Согласно исследованию использования российского ПНГ, проведенному в 2007 г., объем сжигаемого ПНГ с учетом сжигания газа на газоконденсатных месторождениях в 3-4 раза превышает официальные данные и составляет почти 60 млрд. н.м³/год [25].

1.2 Основы процесса и технология газожидкостной конверсии

Углеводородный газ, вероятно, в будущем захватит большую долю мирового рынка, однако его применение затруднено рядом факторов.

Два основных метода утилизации углеводородного газа — это его сжижение и доведение до норм установленных ГОСТ Р 56021-2014 Газ горючий

природный сжиженный или утилизация посредством производства электроэнергии.

GTL-технологии позволяют преобразовывать углеводородный газ в жидкость и оксигенаты в результате химических реакций, что позволяем применять эти углеводороды как добавку к моторным топливам посредством компаундирования. Продукты GTL-технологий могут включать другие химические вещества, такие как аммиак, метанол или метил-трет-бутиловый эфир, которые также представляют определенную ценность для разных областей нефтехимической промышленности [26].

Несмотря на то, что интерес к GTL-технологиям был обусловлен политическими, а не экономическими факторами на протяжении десятилетий, недавние технические достижения сделали GTL-технологии более конкурентоспособными. В 2009 году существовало еще относительно немного объектов в коммерческой эксплуатации (например, Sasol в Южной Африке и Shell в Малайзии); на данный момент появляется все больше объектов коммерческого масштаба.

1.2.1 Преимущества использования GTL-технологий

Химическая конверсия углеводородного газа в жидкость позволяет предложить альтернативный источник жидких углеводородов для традиционных продуктов нефтепереработки из сырой нефти. Эта деятельность имеет очевидные преимущества, такие как энергетическая безопасность для стран, которые имеют ограниченный или затрудненный доступ к нефти, но большие запасы углеводородного газа. Кроме того, GTL-технологии облегчают транспортировку углеводородного газа от удаленных источников добычи к потребителю, поскольку альтернативные методы, такие как трубопроводный транспорт или сжижение газа могут быть недоступны. В данном случае GTL-технологии являются экономически и технически привлекательными для удаленных месторождений. Поскольку жидкое топливо легче, чем газообразное транспортировать морским, железнодорожным или автомобильным транспортом, а также хранить в пункте назначения преобразование

углеводородного газа в жидкость обеспечивает определенную гибкость в транспортировке по сравнению с трубопроводом и сжижением. Однако, GTL-технологии все же не являются альтернативой областям, где производство сжиженного газа имеет широкое распространение, поскольку капитальные вложения и эксплуатационные расходы на GTL установки не соответствовали бы объемам производства [26].

Следующий список иллюстрирует преимущества использования GTL-технологий:

- Извлечение экономической выгоды из углеводородного газа с крупных, но отдаленных месторождений. Несмотря на то, что мировые запасы природного газа велики и ожидается, что их хватит дольше, чем нефти, большая часть этих запасов (1/2 до 2/3 в странах бывшего Советского Союза и Ближнего Востока) не просто находятся в географически труднодоступных районах, но могут быть значительно удалены от ГПЗ, а также, как правило, находятся в неблагоприятных климатических условиях, таких как Арктика. В отсутствие трубопроводов, для эффективной транспортировки газа от источников к ГПЗ, GTL-технологии могут обеспечить технически и экономически выгодную альтернативу трубопроводному транспорту. Но при этом продукты GTL не всегда могут быть экономически конкурентоспособными по сравнению с обычными нефтепродуктами, однако для таких месторождений это может быть единственным вариантом получения экономической выгоды [27].

Ключевыми факторами, влияющими на конкурентоспособность GTL-технологий, являются стоимость оборудования, эксплуатационные расходы, масштаб предприятия и степень использования оборудования.

Таким образом, во многих случаях GTL-технологии могут решать проблему рационального использования природного газа.

- Исторически сложилось так, что попутный нефтяной газ, добываемый на морских или удаленных месторождениях, представлял собой проблему. Раньше попутный газ обычно сжигался или закачивался обратно в пласт при отсутствии средств для транспортировки газа на рынки. Сейчас

экологически неприемлемо и экономически расточительно следовать этой практике. GTL-технологии могут конвертировать попутный газ в «синтетическую» нефть, а затем использовать существующие жидкостные трубопроводы или жидкостные транспортные суда для транспортировки. Установки GTL для переработки попутного газа имеют небольшой экологический след, безопасны и хорошо интегрируются с производственными площадками, особенно на шельфе.

- Продление срока службы трубопроводов. Трубопроводы, построенные для транспортировки нефти, имеют небольшую ценность, если больше нет нефти, которую они могли бы транспортировать с месторождений, которые были истощены. Типичным случаем является Трансальяскинский трубопровод, построенный в 1977 году для транспортировки нефти из Прудхо-Бей — Вальдес. Подсчитано, что жидкости из GTL-технологий конверсии природного газа, могут транспортироваться по одному и тому же трубопроводу, что расширяет срок его полезного использования не менее чем на 20 лет.

1.2.2 GTL-процессы

Преобразование углеводородного газа (в основном метана) в жидкости представляет собой процесс полимеризации. Водород удаляется, а молекулы метана полимеризуются в углеводороды с более длинной цепью, которые являются аналогичными молекулам, обнаруженным во фракциях сырой нефти.

Существуют две основные технологии GTL: прямая конверсия углеводородного газа в жидкость и непрямая конверсия через синтез-газ. Прямое преобразование позволяет избежать производства синтез-газа, но прямую конверсию труднее контролировать, она имеет сравнительно низкую селективность (<20 %) и низкую конверсию (<40 %). Ряд процессов прямого преобразования были усовершенствованы, но пока ни один из них не получил широкого распространения [28].

Непрямое преобразование основано на трех основных шагах:

1. Риформинг (каталитическая конверсия) природного газа в синтез-газ (преимущественно смесь монооксида углерода и водорода в различных пропорциях).

2. Синтез Фишера-Тропша для каталитической конверсии синтез-газа в жидкие углеводороды или оксигенаты.

3. Преобразование продуктов с помощью ряда стандартных процессов нефтепереработки, таких как гидрокрекинг, изомеризация или каталитический риформинг. Схема представлена на рисунке 1.1.

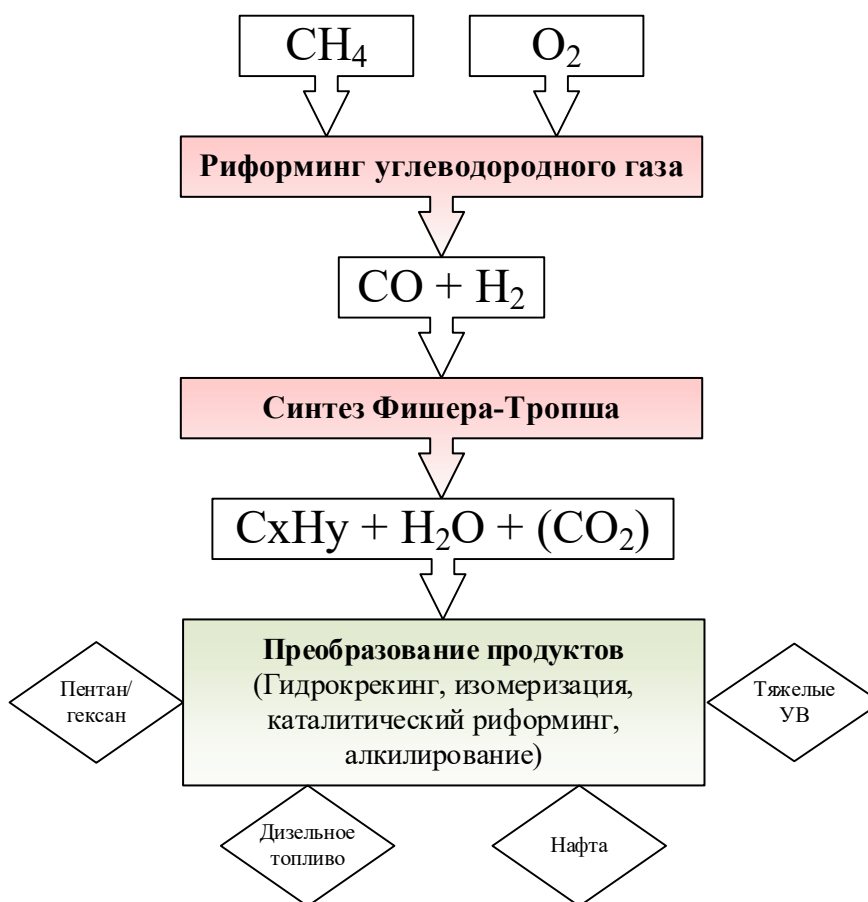
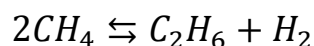


Рисунок 1.1 – Схема процесса непрямого процесса переработки углеводородных газов

Основная реакция прямой конверсии метана в высшие углеводороды:



В данной реакции водород отщепляется от двух молекул метана. Это самая непосредственная реакция, но, к сожалению, без участия катализаторов ее энергия Гиббса положительна. Возможность протекания реакции была достигнута за счет использования катализаторов и высоких температур, за счет

чего селективность (т.е. процент полезных продуктов) увеличилась до 20 %, а конверсия до 60 %.

Будущая разработка более селективных катализаторов может сделать прямое преобразование более привлекательно, учитывая его относительную простоту.

1.2.3 Катализаторы процесса

Катализ — вещества, изменяющие скорость химической реакции и не входящие в состав конечных продуктов. Степень, до которой реакция ускоряется, называется активностью катализатора и может достигать нескольких порядков. Поскольку катализатор может избирательно ускорить химическую реакцию из набора конкурирующих возможных реакций, он может направить систему реагентов на производство желаемых продуктов, тем самым улучшая селективность системы.

Конечно, катализаторы имеют первостепенное значение для GTL-технологий.

Промышленные катализаторы обычно представляют собой твердые вещества, влияющие на скорость реакции с участием газов или жидкостей, имеют форму гранул или порошка. Промышленный катализатор работает, обеспечивая каталитическую поверхность активных центров, на которых реагенты хемосорбируются и, таким образом, облегчается (за счет необходимости преодолевать более низкие энергетические барьеры) реакция с соседними молекулами, которые также адсорбируются на поверхности [29].

Избирательность реакций возможна из-за того, что поверхность катализатора управляет адсорбционными способностями реагентов.

Поскольку активные центры более доступны на поверхности катализатора, твердые катализаторы изготавливаются в виде небольших гранул, чтобы сделать как можно большую площадь поверхности доступной для реагентов.

Различные классы основных компонентов катализаторов функционируют по-разному: металлы и оксиды инициируют окислительно-восстановительные реакции, такие как гидрирование, окисление и гидрогенолиз. Металлы обладают

большей активностью, но оксиды проявляют лучшую селективность из-за их сложной структуры. Алумосиликаты инициируют реакции карбониевого типа, такие как крекинг, изомеризация и полимеризация. Промышленно важный класс алумосиликатных катализаторов – это цеолиты, представляющие собой молекулярные сита, позволяющие проводить селективные реакции, за счет того, что размер отверстий в цеолитных катализаторах ограничивает реакции молекул из-за их размера, то есть происходят стерические затруднения для побочных реакций.

Каталитическая активность или селективность могут снизиться в результате спекания или отравления катализатора. Спекание представляет собой укрупнение гранул катализатора со временем. Отравление происходит в результате хемосорбции примесей, таких как сера, на активные центры, которые затем становятся деактивированы.

Деактивация катализатора может также происходить в результате отложения углерода на активных поверхностях в результате реакций коксования (образование углерода от разложения углеводородов при высокой температуре). Закоксовывание может быть настолько сильным, что катализатору может потребоваться регенерация, как в случае псевдоожиженного каталитического крекинга.

Помимо подготовки основного компонента, каталитическая активность и стабильность могут быть оптимизированы за счет соответствующего выбора носителя для активных компонентов катализатора, а также промоторов нежелательных процессов. Важнейшая функция носителя заключается в обеспечении того, чтобы активный компонент был достаточно рассеян для обеспечения максимально возможного количества активных центров на поверхности катализатора.

Носитель изготавливается из материалов с высокой температурой плавления, таких как различные аллотропные модификации оксида алюминия, оксид марганца или цинка, чтобы избежать спекания. Вспомогательные

компоненты часто обладают кислотной активностью, что приводит к непреднамеренному отложению углерода.

Другая важная роль носителя катализатора заключается в придании желаемых свойств (например, размер, форма, твердость) каталитических гранул или порошков.

Промоторы добавляют в небольших количествах к катализатору (например, до 3 % масс. K_2O , добавленные к $\gamma-Al_2O_3$, нейтрализуют кислотные центры и предотвращают чрезмерное закоксовывание).

Работа катализатора во многом зависит от способа приготовления и предварительная обработка перед использованием.

Катализаторы активно используются в GTL-технологиях, поскольку правильно подобранный катализатор является фактором успеха предлагаемого процесса.

1.3 Модели процессов переработки углеводородов на цеолитных катализаторах

Приведенная в статье [30] общая технологическая схема превращений, уравнения материального баланса, полученные на лабораторной установке, позволили авторам разработать кинетическую модель процесса превращения сырья различного состава на цеолитах. В результате решения системы дифференциальных уравнений авторы определили значения констант скоростей реакции и энергию активации. Если говорить о применимости этой модели, то видно, что такая модель, основанная на группировке веществ по классам, может быть вполне применима на практике при проектировании промышленных установок, однако высокая сложность расчетов делает невозможным использовать эту модель на практике.

В статье [31] приведен результат моделирования процесса конверсии углеводородов в цеолиты, были выбраны оптимальные конструктивные и технологические параметры реактора конверсии. Кроме того, проведены расчеты термодинамических параметров некоторых реакций с использованием справочных данных и на основании расчетных, литературных и

экспериментальных данных предложена модельная схема превращений. Важно отметить, что предложенная авторами модель прошла проверку на адекватность, а разработанная модель позволяет прогнозировать выход и свойства получаемых веществ с высокой точностью.

Проведено моделирование процессов конверсии различных углеводородов на цеолитных катализаторах, но при этом не создана модель, которая имела бы возможность прогнозирования и оптимизации в зависимости от состава сырья. В то же время в работах И. И. Лишнера показана возможность эффективной переработки ПНГ в ценные продукты нефтехимии на цеолитном катализаторе. Это, в совокупности с необходимостью переработки ПНГ по экологическим нормам, подтверждает необходимость данного исследования.

1.4 Постановка цели и задач исследования

В результате обзора литературных источников выявлено, что сжигание ПНГ оказывает значительное негативное воздействие на окружающую среду. При этом в настоящее время предложено несколько способов эффективного использования ПНГ, включая его переработку в жидкие углеводороды на цеолитных катализаторах. Исследования в области переработки ПНГ направлены на разработку улучшенных модифицированных цеолитных катализаторов. Актуальной проблемой является разработка математической модели процесса конверсии ПНГ в жидкие углеводороды на цеолитных катализаторах, как инструмента для исследования процесса и его оптимизации.

Целью данной работы является установление закономерностей процесса и прогнозирование выхода жидких углеводородов в результате превращений компонентов ПНГ в процессе конверсии на цеолитном катализаторе, с использованием разработанной математической модели.

Для достижения обозначенной цели поставлены следующие задачи:

1. Исследование закономерностей химических превращений легких углеводородов, входящих в состав ПНГ, на цеолитных катализаторах;
2. Проведение термодинамического анализа реакций, протекающих в процессе;

3. Разработка формализованной схемы превращений в процессе;
4. Разработка уравнений кинетической модели процесса;
5. Разработка программного кода для решения уравнений кинетической модели и проведения расчетов;
6. Проведение прогнозных расчетов на модели по влиянию состава сырья и технологических параметров на процесс.

2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1 Характеристика объекта исследования и исходных данных

Объект исследования – процесс конверсии ПНГ в жидкие углеводороды, в ходе которого компоненты смеси газообразных углеводородов преобразуются в ценное нефтехимическое сырье.

Процесс предназначен для проведения синтеза ароматических углеводородов из веществ, входящих в состав ПНГ.

В качестве сырья в экспериментальных исследованиях использовались смеси, имитирующие состав ПНГ [32]. Состав сырья указан в таблице 2.1. При исследовании процесса использовались две смеси. Составы указанных смесей весьма схожи, однако в смесь 2 был добавлен этилен для увеличения выхода ароматических углеводородов [33]. Из таблицы 2.1 видно, что основным компонентом сырья является метан, на долю которого приходится 60 % масс. сырья, а соотношение пропана и бутана (~1,6) соответствует составу высокомолекулярной части ПНГ. Можно сделать вывод, что модельная смесь достаточно близка к реальному составу ПНГ.

Продуктами, получаемыми в процессе конверсии ПНГ, являются ароматические углеводороды и высококалорийные газы. Из данных, представленных в таблице 2.1, видно, что метан и этан не претерпевают существенных превращений в данных условиях, что также подтверждается термодинамическими расчетами реакций. С повышением температуры увеличивается количество отходящих газов и одновременно снижается выход ароматических углеводородов, так как интенсифицируются реакции крекинга.

Большую часть основного продукта процесса, ароматических углеводородов, составляет толуол, выход которого увеличивается с повышением температуры, в то время как выход длинноцепочечных алкилароматических углеводородов снижается с повышением температуры.

Таблица 2.1 – Показатели процесса конверсии ПНГ

Время отбора пробы, ч		5	40	50	70	80	20	50	75	100	20	50	75	100	
Состав сырья, % мас.	СН ₄	60	60	60	60	60	60	60	60	60	60	60	60	60	
	С ₂ Н ₆	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	
	С ₂ Н ₄	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	4	4	
	С ₃ Н ₈	16,2	16,2	16,2	16,2	16,2	16,2	16,2	16,2	16,2	16,2	14,0	14,0	14,0	14,0
	С ₄ Н ₁₀	9,8	9,8	9,8	9,8	9,8	9,8	9,8	9,8	9,8	9,8	8,5	8,5	8,5	8,5
	С ₅	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	3,5	3,5	3,5	3,5
Технологические параметры	T _{вх} , °С	490	500	505	515	520	490	500	510	520	490	500	510	520	
	P, МПа	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	
Состав продукта (отходящего газа), % мас.	СН ₄	72,3	72,7	73,4	74,4	74,8	69,9	70,3	70,7	71,3	68,7	69,9	70,2	71,4	
	С ₂ Н ₆	11,6	11,7	11,9	12,2	12,3	12,1	12,2	12,4	12,5	15,4	14,5	14,1	13,5	
	С ₂ Н ₄	0,1	0,1	0,1	0,0	0,0	0,3	0,2	0,2	0,1	0,1	0,1	0,2	0,2	
	С ₃ Н ₈	13,6	13,2	12,6	11,6	11,2	14,5	14,3	14,0	13,8	12,8	12,7	12,7	12,7	
	С ₃ Н ₆	0,2	0,2	0,1	0,1	0,1	0,3	0,3	0,2	0,1	0,2	0,2	0,2	0,1	
	С ₄ Н ₁₀	2,1	2,0	1,8	1,6	1,4	2,6	2,5	2,3	2,1	2,3	2,2	2,0	1,9	
	С ₄ Н ₈	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,3	0,2	0,2	0,1	0,5	0,4	0,4	0,2	
Состав продукта (ароматических углеводородов), % мас.	бензол	14,1	14,3	14,4	15,4	16,1	14,1	14,3	14,4	15,4	19,2	19,5	20,0	20,4	
	толуол	33,5	36,1	37,2	38,1	39,2	33,5	36,1	37,2	38,1	34,7	35,2	35,9	36,3	
	ксилолы+этилбензол	24,0	24,4	24,6	24,5	26,0	24,0	24,4	24,6	24,5	24,0	24,2	23,9	24,4	
	алкилароматические углеводороды С ₉₊	26,6	23,7	22,7	21,0	17,6	26,6	23,7	22,7	21,0	21,5	20,6	19,8	18,6	

Для проведения процесса конверсии ПНГ использовали модифицированный цеолитсодержащий катализатор ZSM-5 с мольным соотношением $\text{SiO}_2:\text{Al}_2\text{O}_3$, равным 35, массовой долей Na_2O 0,16 %, удельной поверхностью $420 \text{ м}^2/\text{г}$, насыпной массой $550 \text{ кг}/\text{м}^3$, размером кристаллов 1,5–1,7 мкм. Катализатор модифицировали путем пропитки его водным раствором гексагидрата нитрата цинка, выдерживая цеолит в этом растворе в течение 8 часов, с последующей сушкой при температуре $250 \text{ }^\circ\text{C}$ и дальнейшей термической обработкой в течение 4 ч при $550 \text{ }^\circ\text{C}$. Содержание оксида цинка в катализаторе составляет 2,2 % масс.

Процесс конверсии ПНГ проводился в изотермическом реакторе с периферийной тепловой трубой схема которого представлена на рисунке 2.1.

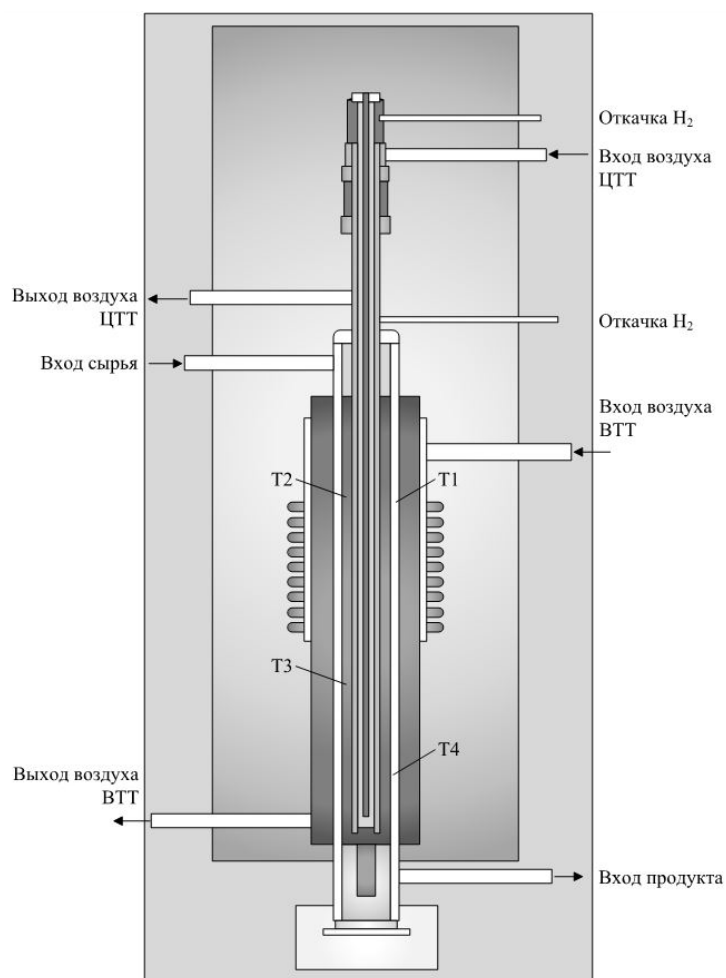


Рисунок 2.1 – Конструкция изотермического реактора с тепловой трубой: термопары: T1 – заданная температура нагрева тепловой трубы, T2 – верх, T3 – середина, T4 – из слоя катализатора; ЦТТ – центробежная тепловая труба, ВТТ – высокотемпературная тепловая труба.

Подача реакционной смеси осуществлялась сверху вниз. Температуру в реакторе (Т1) задавали нагревательным элементом тепловой трубы. Дополнительно было предусмотрено 3 термопары: Т2 (регистрирует температуру в верхней части слоя катализатора (на 1 см ниже границы)), Т3 (регистрирует температуру в средней части слоя катализатора), Т4 (регистрирует температуру в нижней части слоя катализатора (на 1 см выше границы)). Высота слоя катализатора составила 25 см, объем катализатора 100 см³.

Реакцию проводили в течение пяти 80–100-часовых циклов «реакция – регенерация» с последующей выгрузкой катализатора из реактора и его последующей регенерацией в муфельной печи при температуре 500 °С в течение 8 ч.

2.2 Методы исследования

2.2.1 Метод математического моделирования

Метод исследования процесса конверсии ПНГ в ароматические углеводороды – математическое моделирование.

Математическое моделирование химико-технологической системы – это количественный анализ процессов нефтехимии и нефтепереработки с помощью создания математических моделей.

Математическое моделирование проводится с целью упрощения и сокращения исследований, а также для повышения их эффективности [34].

Процесс конверсии ПНГ в ароматические углеводороды представляет собой каталитический процесс, это в свою очередь необходимо учитывать при разработке математической модели процесса для получения объективных данных. Так на рисунке 2.2 представлена последовательность шагов от идеи технологии до реального каталитического процесса [35].

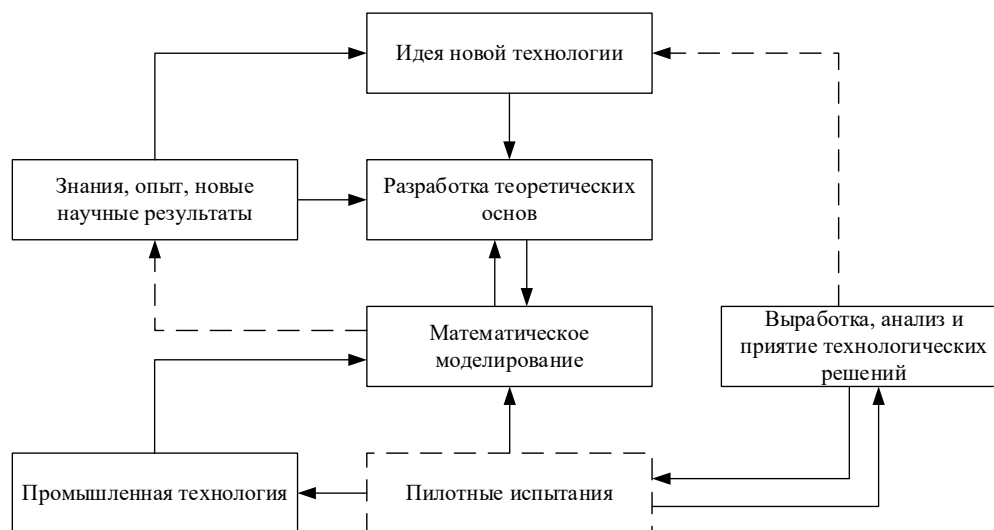


Рисунок 2.2 – Последовательность шагов для реализации промышленного процесса

При проведении различных исследований получают знания и опыт в результате которых рождается идея новой технологии, что в совокупности становится основой разработки теоретических основ новой технологии. На основании полученных данных разрабатываются математическую модель процесса, и проводят ее испытания на различных уровнях, от пилотных до промышленных. В ходе испытаний получают новую информацию, позволяющую проводить усовершенствование разработанной математической модели.

Как правило, химико-технологические процессы включают в себя большое количество компонентов и для упрощения расчетов используют различные методы объединения компонентов в группы по различным признакам. В свою очередь математические модели представляют собой систему алгебраических или дифференциальных уравнений, метод решения которых зависит от необходимой точности.

Когда решение системы уравнений найдено, необходимо количественно оценить адекватность модели. Оценка выполняется с помощью критерия Фишера. Заключительным этапом является определение среднеквадратичного отклонения рассчитанных значений от экспериментальных [36].

Моделирование химико-технологических систем также можно проводить с использованием специализированного программного обеспечения, например, Aspen HYSYS, UniSim Design, Petro-SIM, GIBBS и др. Данные программные

обеспечения позволяют решать задачи стационарного моделирования технологических процессов подготовки и переработки углеводородного сырья.

2.2.2 Метод квантовой химии для расчета термодинамических свойств молекул

Значения термодинамических свойств молекул при стандартных или нормальных условиях приведены в качестве справочных данных [37, 38]. Однако процессы переработки углеводородного сырья протекают в условиях, отличных от стандартных или нормальных. В связи с этим необходимо применять квантово-химические методы для расчета термодинамических свойств молекул и термодинамический анализ процессов при технологических условиях его реализации в промышленности.

Для изучения молекулярных систем и химических реакций существует множество программных продуктов, наиболее известным из которых является Gaussian – пакет программ, использующий современные теории об электронной структуре молекул.

Компьютерная химия моделирует химические структуры и реакции на основе фундаментальных физических законов. Поэтому широкий спектр химических явлений может быть изучен с помощью компьютерных расчетов без необходимости проведения экспериментов. Более того, некоторые существующие методы могут моделировать не только стабильные молекулы, но и нестабильные промежуточные продукты [39]. Таким образом, вычислительная химия является важным приложением к экспериментальным исследованиям.

При использовании методов электронной структуры в основном применяются законы квантовой механики, а не классической физики. Квантовая механика описывает различные свойства молекул путем решения уравнения Шредингера [39]:

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

где H – оператор энергии;
 Ψ – волновая функция частицы;
 E – полная энергия частицы.

Однако точного компьютерного решения уравнения Шредингера не существует ни для одной системы. Разнообразие электронных структурных методов определяется различными математическими приближениями при решении уравнения Шредингера.

В этой работе мы используем метод, основанный на теории функционала плотности. Применяемый метод Density Functional Theory очень похож на методы *ab initio*. Методы *ab initio*, также известные как неэмпирические методы, используют для расчетов только законы квантовой механики, что приводит к чрезвычайно высоким требованиям к ресурсам компьютера. В то время как компьютеры, требующие меньше вычислительных ресурсов, в настоящее время привлекают больше внимания.

Метод вычисления теории функционала плотности требует того же количества компьютерных ресурсов, что и вычисления по методу Хартри-Фока.

Основное преимущество этого метода состоит в том, что он учитывает эффект электронной корреляции, то есть отталкивания электронов друг от друга в результате взаимодействия [39].

Расчеты по методу Хартри-Фока также в некоторой степени учитывают влияние электронной корреляции, но в этом случае не рассчитывается мгновенное взаимодействие электронных пар с противоположными спиновыми числами.

Таким образом, это приближение приводит к тому, что расчеты по методу Хартри-Фока менее точны. Выбранный метод Density Functional Theory имеет явное преимущество перед более дорогими методами *ab initio*.

5 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

В данном разделе подробно разобран коммерческий потенциал данного исследования и его перспективы на рынке. Проведена оценка ресурсоэффективности проделанной работы, описан и составлен план необходимого комплекса работ.

Данное исследование имеет высокий коммерческий потенциал, короткий срок реализации в связи с большой потребностью в конечных продуктах исследуемого процесса переработки ПНГ и является ресурсосберегающей технологией, поскольку полученные результаты позволяют за короткий промежуток времени рассчитать показатели процесса и сэкономить на дорогостоящих материалах, необходимых для процесса.

В конечном итоге это позволит снизить себестоимость конечного продукта процесса переработки ПНГ.

5.1 Предпроектный анализ

Нефтяная промышленность является важнейшей отраслью, которая формирует экономику страны.

Целевой рынок – это нефтехимические предприятия, на которых в будущем будет использоваться данная разработка. В свою очередь, сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками.

Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга) [48].

Данный проект направлен на разработку и составление математической модели в виде программного продукта для исследования и оптимизации процесса конверсии ПНГ в ароматические углеводороды.

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

Целью данного раздела в выпускной квалификационной работе является определение перспективности и успешности научно-исследовательского проекта, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации. Достижение цели обеспечивается решением следующих задач:

- разработка общей экономической идеи проекта, формирование концепции проекта;
- организация работ по научно-исследовательскому проекту;
- планирование научно-исследовательских работ;
- оценки коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения;
- определение ресурсосберегающей, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективностей исследования [48].

5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Для анализа потенциальных потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование. На рисунке 5.1 представлена карта сегментирования рынка применения математической модели процесса конверсии ПНГ в жидкие углеводороды.

Потребитель	Вид услуги		
	Продажа программного продукта	Оказание услуг по оптимизации процесса	Продажа тренировочной версии
Крупные ГПЗ			
Средние ГПЗ			
Мелкие ГПЗ			
Образовательные учреждения			
Проектные организации			




-  – Schneider, Франция, г. Рюэй-Мальмезон
-  – Schlumberger, Россия, г. Москва
-  – Aspen Technology, США, г. Бедфорд

Рисунок 5.1 – Карта сегментирования

Рисунок 5.1 демонстрирует ниши на рынке услуг, которые могут быть заинтересованы математической моделью, которые не заняты конкурентами.

Компания Schneider является мировым экспертом в управлении энергией и автоматизации. Она является производителем оборудования для энергетических подкомплексов промышленных предприятий, объектов гражданского и жилищного строительства, центров обработки данных.

Компания Schlumberger – крупнейшая нефтесервисная компания. Она является ведущим мировым поставщиком технологий для комплексной оценки пласта, строительства скважин, управления добычей и переработки углеводородов.

Компания Aspen Technology является поставщиком программного обеспечения и услуг для обрабатывающей промышленности. Это ведущий поставщик систем программного обеспечения и услуг в сфере информационных технологий для компаний нефтеперерабатывающей отрасли.

5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Результатом проведенных исследований станет математическая модель процесса конверсии ПНГ в ароматические углеводороды. Данная работа имеет практическое значение для прогнозирования составов и выходов продуктов процесса конверсии ПНГ, оптимизации процесса в зависимости от состава сырья и активности катализатора.

Анализ конкурентных разработок на данный момент провести невозможно, поскольку на рынке отсутствуют аналоги технологии, разрабатываемой в данной работе.

5.1.3 FAST-анализ

Объектом FAST-анализа является процесс создания математической модели конверсии ПНГ в жидкие углеводороды.

В таблице 5.1 приведено описание главной, основных и вспомогательных функций, выполняемых объектом.

Таблица 5.1 – Классификация функций, выполняемых объектом исследования

Наименование объекта	Кол-во	Выполняемая функция	Ранг функции		
			Главная	Основная	Вспомогательная
Программа	1	Расчет основных технологических параметров изучаемого процесса	X		
Магистрант	1	Написание программного кода		X	
Руководитель	1	Разработка плана научно-исследовательской работы, проверка результатов		X	
Среда программирования	1	Предоставление возможности для разработки программного кода		X	
Лицензия на программный пакет Gaussian	1	Расчет термодинамических показателей процесса			X
Программное обеспечение Microsoft Office 365 Small Bus Base	1	Оформление пояснительной записки проекта			X
Персональный компьютер	2	Предоставление возможности для функционирования среды программирования		X	

Определим значимость выполняемых функций при помощи метода расстановки приоритетов. Для этого была построена матрица смежности функций, приведенная в таблице 5.2.

Преобразуем матрицу смежности в матрицу количественных соотношений функций. Результат представлен в таблицу 5.3.

Определим значимость функции путем деления балла, полученного по каждой функции, на общую сумму баллов по всем функциям. Результат представлен в таблице 5.4.

Таблица 5.2 – Матрица смежности

	Расчет основных технологических параметров изучаемого процесса	Написание программного кода	Разработка плана научно-исследовательской работы, проверка результатов	Предоставление возможности для разработки программного кода	Расчет термодинамических показателей процесса	Оформление пояснительной записки проекта	Предоставление возможности для функционирования среды программирования
Расчет основных технологических параметров изучаемого процесса	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Более значимая	Одинаковые функции по значимости
Написание программного кода	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Менее значимая	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Более значимая	Одинаковые функции по значимости
Разработка плана научно-исследовательской работы, проверка результатов	Одинаковые функции по значимости	Более значимая	Одинаковые функции по значимости	Менее значимая	Более значимая	Более значимая	Одинаковые функции по значимости
Предоставление возможности для разработки программного кода	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Более значимая	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Более значимая	Одинаковые функции по значимости
Расчет термодинамических показателей процесса	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Менее значимая	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Более значимая	Одинаковые функции по значимости
Оформление пояснительной записки проекта	Менее значимая	Менее значимая	Менее значимая	Менее значимая	Менее значимая	Одинаковые функции по значимости	Менее значимая
Предоставление возможности для функционирования среды программирования	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Одинаковые функции по значимости	Более значимая	Одинаковые функции по значимости

Таблица 5.3 – Матрица количественных соотношений

	Расчет основных технологических параметров изучаемого процесса	Написание программного кода	Разработка плана научно-исследовательской работы, проверка результатов	Предоставление возможности для разработки программного кода	Расчет термодинамических показателей процесса	Оформление пояснительной записки проекта	Предоставление возможности для функционирования среды программирования	ИТОГ
Расчет основных технологических параметров изучаемого процесса	1	1	1	1	1	1,5	1	7,5
Написание программного кода	1	1	0,5	1	1	1,5	1	7
Разработка плана научно-исследовательской работы, проверка результатов	1	1,5	1	0,5	1,5	1,5	1	8
Предоставление возможности для разработки программного кода	1	1	1,5	1	1	1,5	1	8
Расчет термодинамических показателей процесса	1	1	0,5	1	1	1,5	1	7
Оформление пояснительной записки проекта	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	1	0,5	4
Предоставление возможности для функционирования среды программирования	1	1	1	1	1	1,5	1	7,5
								$\Sigma = 49$

Таблица 5.4 – Определение значимость функций

Функция	Балл
Расчет основных технологических параметров изучаемого процесса	0,15
Написание программного кода	0,14
Разработка плана научно-исследовательской работы, проверка промежуточных и конечного результатов	0,16
Предоставление возможности для разработки программного кода	0,16
Расчет термодинамических показателей процесса	0,14
Оформление пояснительной записки проекта	0,08
Предоставление возможности для функционирования среды программирования	0,15

Оценим уровень затрат на выполнение каждой функции. Расчет стоимости функций приведен в таблице 5.5.

На основании полученных данных построим функционально-стоимостную диаграмму объекта. Результат приведен на рисунке 5.2.

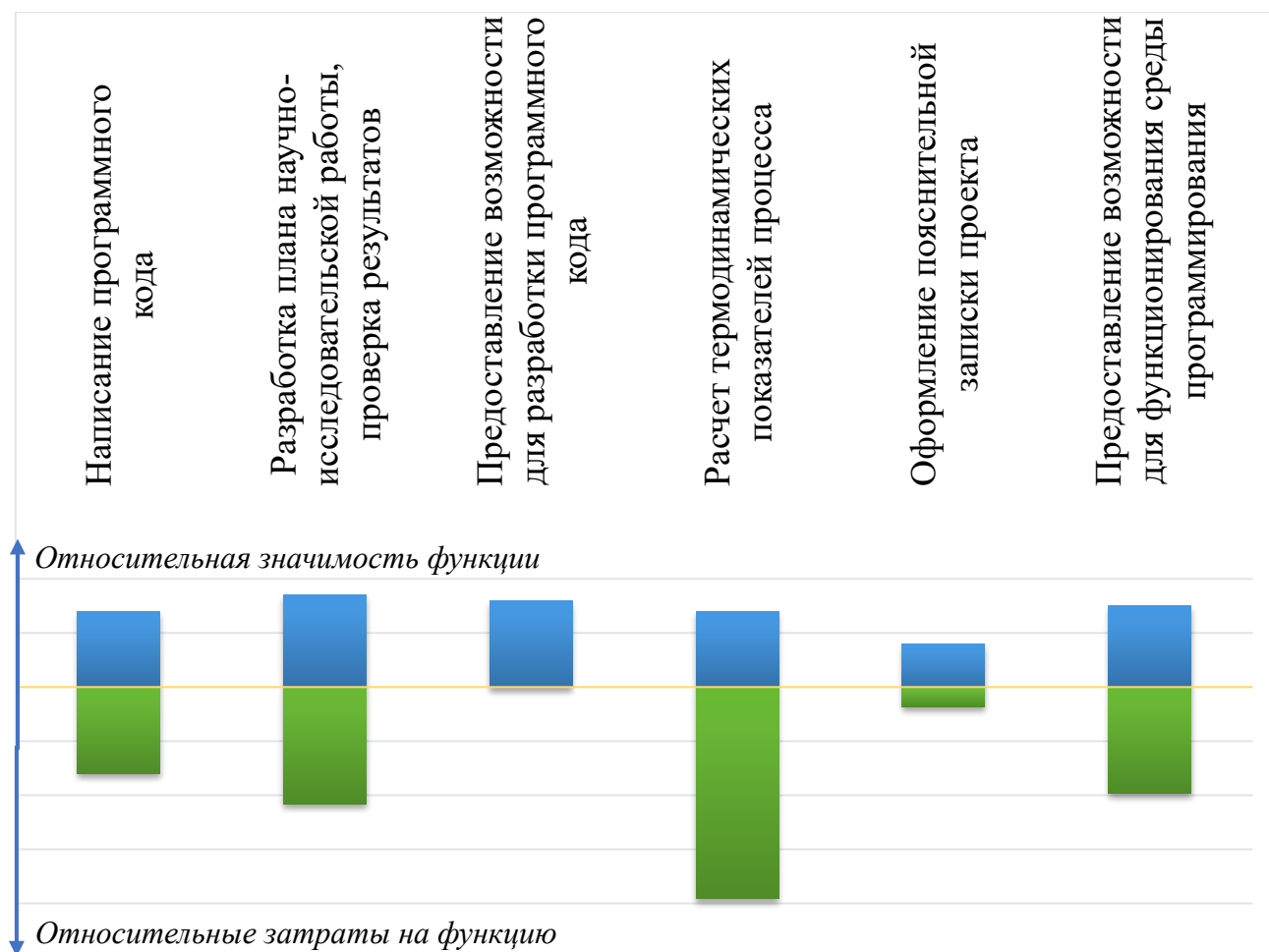


Рисунок 5.2 – Функционально-стоимостная диаграмма

Таблица 5.5 – Определение относительных затрат на функции, выполняемые объектом исследования

Наименование объекта	Кол-во	Выполняемая функция	Норма трудозатрат, человеко-час	Стоимость, руб.	Заработная плата, руб.	Итого, руб.	Балл
Программа	1	Расчет основных технологических параметров изучаемого процесса	-	-	-	-	-
Магистрант	1	Написание программного кода	550	-	-	16 361	0,16
Руководитель	1	Разработка плана научно-исследовательской работы, проверка результатов	400	-	-	22 064	0,21
Среда программирования	1	Предоставление возможности для разработки программного кода	-	0	-	0	0
Лицензия на программный пакет Gaussian	1	Расчет термодинамических показателей процесса	-	40 000	-	40 000	0,39
Программное обеспечение Microsoft Office 365 Small Bus Base	1	Оформление пояснительной записки проекта	-	3 750	-	3 750	0,04
Персональный компьютер	2	Предоставление возможности для функционирования среды программирования	-	20 000	-	20 000	0,20
						$\Sigma = 102\,175$	

Анализ приведенной выше функционально-стоимостной диаграммы показал явное рассогласование по функции расчета термодинамических показателей. Для снижения стоимости затрат принимаем возможность приобретения лицензии на меньший срок, что соответственно снизит затраты на приобретение программного обеспечения, при этом позволит нам провести нужные расчёты в полной мере.

5.1.4 Диаграмма Исикавы

Диаграмма причины-следствия Исикавы (Cause-and-Effect-Diagram) – это графический метод анализа и формирования причинно-следственных связей, инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления.

Область применения диаграммы:

- выявление причин возникновения проблемы;
- анализ и структурирование процессов на предприятии;
- оценка причинно-следственных связей.

Построение диаграммы начинают с формулировки проблемной темы. Затем выявляются группы факторов, влияющие на объект анализа. Часто, для выявления таких факторов используется прием 6М:

- персонал (Manpower);
- оборудование (Machine);
- сырье, материалы, комплектующие (Material);
- технология проведения работ (Method);
- средства измерения и методы контроля (Measurement);
- производственная среда (Media).

Данная диаграмма приведена в Приложении Б.

5.1.5 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На какой бы стадии жизненного цикла не находилась научная разработка полезно оценить степень ее готовности к коммерциализации и выяснить уровень собственных знаний для ее проведения (или завершения). Для этого необходимо заполнить специальную форму, содержащую показатели о степени

проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта. Перечень вопросов приведен ниже в таблице 5.6.

Таблица 5.6 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
Определен имеющийся научно-технический задел	5	5
Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	5	5
Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	5
Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	5
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	5
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	3	3
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	4
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	4
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	4	4
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	4
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	3	3
Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	2	2
Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	4
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	5
Проработан механизм реализации проекта	4	4
ИТОГО БАЛЛОВ	61	62

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

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i \quad (5.1)$$

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

B_i – балл по i -му показателю.

Значение $B_{\text{сум}}$ позволяет говорить о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации. В данном случае $B_{\text{сум}}$ составляет 61 и 62, т.е. в диапазон от 60 до 75 входят оба направления. Такая научная разработка считается перспективной, а знания разработчика достаточными для коммерциализации. Успешное развитие моделирования процесса конверсии ПНГ в ароматические углеводороды составит хорошую конкуренцию зарубежным разработкам. Для этого необходимо вкладывать большие ресурсы в разработку, а также необходимо финансирование, в том числе и от государства.

5.1.6 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

При коммерциализации научно-технических разработок продавец (а это, как правило, владелец соответствующих объектов интеллектуальной собственности), преследует вполне определенную цель, которая во многом зависит от того, куда в последующем он намерен направить (использовать, вложить) полученный коммерческий эффект.

Выделяют следующие методы коммерциализации научных разработок:

1. Торговля патентными лицензиями, т.е. передача третьим лицам права использования объектов интеллектуальной собственности на лицензионной основе. При этом в патентном законодательстве выделяющие виды лицензий: исключительные (простые), исключительные, полные лицензии, сублицензии, опционы.

2. Передача ноу-хау, т.е. предоставление владельцем ноу-хау возможности его использовать другим лицом, осуществляемое путем раскрытия ноу-хау.

3. Инжиниринг как самостоятельный вид коммерческих операций предполагает предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной, именуемой консультантом, другой стороне, именуемой заказчиком, комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг, связанных с проектированием, строительством и вводом объекта в эксплуатацию, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика,

усовершенствованием имеющихся производственных процессов вплоть до внедрения изделия в производство и даже сбыта продукции.

4. Франчайзинг, т.е. передача или переуступка (на коммерческих условиях) разрешения продавать чьи-либо товары или оказывать услуги в некоторых областях.

5. Организация собственного предприятия.

6. Передача интеллектуальной собственности в уставной капитал предприятия.

7. Организация совместного предприятия, т.е. объединение двух и более лиц для организации предприятия.

8. Организация совместных предприятий, работающих по схеме «российское производство – зарубежное распространение».

Проанализировав перечисленные методы коммерциализации, наиболее эффективным для данной разработки является инжиниринг.

На данной стадии уже имеется предприятие, на котором реализован процесс гидрокрекинга вакуумного газойля. Таким предприятием является один из российских газоперерабатывающих заводов. Данное предприятие заинтересовано в разработке новых технологий, а также в усовершенствовании технологического процесса.

Проводилась работа по исследованию процесса конверсии ПНГ в ароматические углеводороды. Такой выбор связан с тем, что исследования проводятся на основе экспериментальных данных, взятых с конкретной установки. Данная разработка является актуальной лишь для одной определенной установки, что связано с различными условиями проведения процесса. В будущем владелец установки и работники, выполняющие исследования, будут заранее договариваться о предоставлении услуг по повышению эффективности процесса, а производитель в свою очередь будет предоставлять данные для научно-технических исследований. Такой метод коммерциализации является единственным подходящим в данном случае.

5.2 Инициация проекта

5.2.1 Цели и результат проекта

Целью данного проекта является прогнозирование показателей, установление термодинамических и кинетических закономерностей процесса конверсии ПНГ в ароматические углеводороды на цеолитных катализаторах. Информация по заинтересованным сторонам проекта представлена в таблице 5.7.

Таблица 5.7 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Газоперерабатывающие заводы	Оптимизация технологического режима процессе конверсии ПНГ в ароматические углеводороды
Национальный исследовательский Томский политехнический университет	Сотрудничество, развитие партнёрских отношений для достижения общих экономических и стратегических целей

Цели и результаты проекта представлены в таблице 5.8.

Таблица 5.8 – Цели и результаты проекта

Цель проекта	Разработка математической модели процесса конверсии ПНГ в ароматические углеводороды
Ожидаемые результаты проекта	Освещение потенциала переработки ПНГ в ароматические углеводороды
Критерии приёмки результата проекта	Адекватность поученной математической модели (минимальное расхождение между расчетными и экспериментальными значениями) должна составлять не менее 90 %
Требования к результату проекта	Возможность внедрения модели на производство в виде технологической моделирующей системы

5.2.2 Организационная структура проекта

Необходимо определить группу данного проекта и роль каждого участника, их функции и трудозатраты. Результаты представлены в таблице 5.9.

Таблица 5.9 – Рабочая группа проекта

ФИО, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, ч
Белинская Наталия Сергеевна, к.т.н., доцент	Руководитель проекта	Отвечает за реализацию проекта в пределах заданных ограничений по ресурсам, координирует деятельность участников	400
Креницына Зоя Васильевна, к.т.н., доцент	Эксперт проекта	Координирует деятельность магистранта при выполнении раздела финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	25
Сечин Андрей Александрович, к.т.н., доцент	Эксперт проекта	Координирует деятельность магистранта при выполнении раздела социальная ответственность	25
Гнеушева Виолетта Витальевна, магистрант	Исполнитель проекта	Выполнение работ по проекту	550
ИТОГО			1000

5.2.3 Ограничения и допущения проекта

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» – параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта. Ограничения данного проекта представлены в таблице 5.10.

Таблица 5.10 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/допущения
Бюджет проекта	300 000 руб.
Источник финансирования	НИ ТПУ
Сроки проекта	февраль 2022 – май 2023
Дата утверждения плана проекта	01.03.2022
Дата завершения проекта	май 2023

5.3 Планирование управления научно-техническим проектом

5.3.1 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ – детализация укрупненной структуры работ. На рисунке 5.3 представлена иерархическая структура работ по проекту.



Рисунок 5.3 – Иерархическая структура работ по проекту

5.3.2 Контрольные события проекта

Список контрольных событий – это список важных моментов или событий проекта. Контрольные события данного проекта отражены в таблице 5.11.

Таблица 5.11 – Контрольные события проекта

Контрольное событие	Дата	Результат
Получение задания и составление плана работ	15.02.2023 – 22.02.2023	Отчет о плане работ
Ознакомление с экспериментальными данными	22.02.2023 – 01.03.2023	Отчет
Изучение теоретических материалов	01.03.2023 – 15.03.2023	Отчет
Работа с литературой	15.03.2023 – 29.03.2023	Литературный обзор
Разработка моделирующей программы	29.03.2023 – 19.04.2023	Отчет
Разработка презентации	19.04.2023 – 26.04.2023	Презентация
Обработка результатов	26.04.2023 – 10.05.2023	Отчет
Оформление таблиц данных, графиков	10.05.2023 – 17.05.2023	Презентация
Обсуждение результатов	17.05.2023 – 24.05.2023	Отчет о результатах
Оформление пояснительной записки	24.05.2023 – 31.05.2023	Пояснительная записка

5.3.3 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный график проекта. Календарный план проекта приведен в таблице 5.12.

Таблица 5.12 – Календарный план проекта

Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Получение задания и составление плана работ	7	15.02.2023	22.02.2023	Белинская Н. С., Гнеушева В. В.
Ознакомление с данными	7	22.02.2023	01.03.2023	Гнеушева В. В.
Изучение теоретических материалов	14	01.03.2023	15.03.2023	Гнеушева В. В.
Работа с литературой	7	15.03.2023	29.03.2023	Гнеушева В. В.
Разработка моделирующей программы	21	29.03.2023	19.04.2023	Белинская Н. С., Гнеушева В. В.
Разработка презентации	7	19.04.2023	26.04.2023	Гнеушева В. В.
Обработка результатов	14	26.04.2023	10.05.2023	Гнеушева В. В.
Оформление таблиц данных, графиков	7	10.05.2023	17.05.2023	Гнеушева В. В.
Обсуждение результатов	7	17.05.2023	24.05.2023	Белинская Н. С., Гнеушева В. В.
Оформление пояснительной записки	7	24.05.2023	31.05.2023	Гнеушева В. В.
ИТОГО	98			

На основе таблицы 5.12 был построен календарный план-график, представленный в таблице 5.14.

5.3.4 Бюджет научного исследования

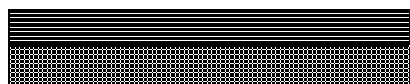
Расчёт стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. В стоимость материальных затрат включают транспортно-заготовительные расходы (3-5 % от цены). Результаты по данной статье занесём в таблицу 5.13.

Таблица 5.13 – Сырье, материалы и комплектующие изделия

Наименование	Ед. изм.	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Бумага	пачка	2	290	580
Картридж для принтера	шт.	1	1 100	1 100
Транспортно-заготовительные расходы				90
ИТОГО				1 770

Таблица 5.14 – Календарный план-график

№	Вид работ	Исп.	T_{ki} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ												
				февр		март			апрель			май			июнь	
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
1	Составление и утверждение технического задания	Р	2	■												
2	Подбор и изучение материалов по теме	С	50		■	■	■	■	■							
3	Выбор направления исследований	С	2						■							
4	Календарное планирование работ	Р, С	2						■							
5	Изучение литературы, составление формализованной схемы превращений	Р, С	40							■	■					
6	Разработка кинетической модели	С	5									■				
7	Проверка модели на адекватность	С	5										■			
8	Расчет результатов на разработанной модели	С	5										■			
9	Оценка результатов	Р	5											■		
10	Определение целесообразности проведения ОКР	С	8											■		
11	Оценка эффективности полученных результатов	Р	5											■		
12	Составление пояснительной записки	С	10												■	
13	Подготовка к защите работы	С	6													■
14	Защита дипломной работы	С	2													■



– Студент
– Руководитель

- Специальное оборудование для научных работ

Для выполнения данного проекта необходимо приобретение: персонального компьютера для двух участников проекта, программное обеспечение Microsoft Office, лицензионного программного обеспечения Gaussian для расчета термодинамических параметров реакций в ходе процесса конверсии ПНГ в ароматические углеводороды.

Также необходимо иметь экспериментальные данные, которые могут быть получены двумя способами: 1) получить данные из научной статьи; 2) провести необходимые исследования в лаборатории кафедры. Затраты на оборудование приведены в таблице 5.15.

Таблица 5.15 – Затраты на оборудование

Наименование	Кол-во	Цена, тыс. руб.	Общая стоимость, тыс. руб.
Персональный компьютер	2	30	60
Принтер	1	5	5
Программное обеспечение Microsoft Office 365 Small Bus Base	2	3,750	7,5
Лицензия на программный пакет Gaussian	1	40	40
ИТОГО			112,5

- Основная заработанная плата

Статья включает основную заработанную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработанную плату.

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп} \quad (5.2)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработанная плата, руб.;

$Z_{доп}$ – дополнительная заработанная плата, руб.

Основная заработная плата ($Z_{осн}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия рассчитывается по формуле, представленной ниже [48].

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб} \quad (5.3)$$

где $Z_{дн}$ – среднедневная заработанная плата работника, руб.;

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

Среднедневная заработанная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}} \quad (5.4)$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

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

Таблица 5.16 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Кол-во нерабочих дней		
выходные дни:	44	48
праздничные дни:	14	14
Потери рабочего времени		
отпуск:	56	28
невыходы по болезни:	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	275

Таким образом, среднедневная заработанная плата составит:

$$Z_{\text{дн (рук.)}} = \frac{36\,920 \cdot 10,4}{251} = 1\,529,8 \text{ руб.}$$

$$Z_{\text{дн (инж.)}} = \frac{32\,240 \cdot 11,2}{275} = 1\,313,0 \text{ руб.} \quad (5.5)$$

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} \quad (5.6)$$

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

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

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок (за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: определяется Положением об оплате труда);

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

Расчет основной заработной платы представлен в таблице 5.17.

Таблица 5.17 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	З _б , руб.	k _{пр}	k _д	k _р	З _м , руб.	З _{дн} , руб.	T _{раб} , раб. дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель	28 400	-	-	1,3	36 920	1 529,8	56	85 666,2
Инженер	24 800	-	-	1,3	32 240	1 313,0	133	174 635,3
ИТОГО								260 301,5

- Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

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

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

где Z_{осн} – основная заработанная плата, руб.;

k_{доп} – коэффициент дополнительной зарплаты.

Результаты расчета заработной платы исполнителей научно-технических исследований приведены в таблице 5.18.

Таблица 5.18 – Заработанная плата исполнителей проекта

Заработанная плата	Руководитель	Инженер
Основанная зарплата, руб.	85 666,2	174 635,3
Дополнительная зарплата, руб.	12 849,9	26 195,3
ИТОГО	98 516,1	200 830,6

- Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$Z_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) \quad (5.8)$$

где Z_{осн} – основная заработанная плата, руб.;

Z_{доп} – дополнительная заработанная плата, руб.;

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

Результат расчетов отчислений на социальные нужды приведен в таблице 5.19.

Таблица 5.19 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Руководитель	Инженер
Заработанная плата, руб.	98 516,1	200 830,6
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	30 %	
Отчисления, руб.	29 554,8	60 249,2

- Накладные расходы

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

Расчёт накладных расходов ведётся по следующей формуле:

$$Z_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) \quad (5.9)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработанная плата, руб.;

$Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработанная плата, руб.;

$k_{\text{внеб}}$ – коэффициент накладных расходов.

$$Z_{\text{накл}} = 0,8 \cdot 285\,140,5 = 228\,112,4 \text{ руб.} \quad (5.10)$$

Сгруппируем расходы по статьям. Результат представлен в таблице 5.20.

Таблица 5.20 – Группировка расходов по статьям

Вид работ	Расходы, руб.
Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	1 770
Специальное оборудование для научных работ	112 500
Основная заработная плата	260 301,5
Дополнительная заработная плата	39 045,2
Отчисления на социальные нужды	89 804,0
Накладные расходы	239 477,3
Итого плановая себестоимость	742 898,0

5.3.5 Организационная структура проекта

Для проводимого исследования характерна проектная организационная структура, представленная на рисунке 5.4.



Рисунок 5.4 – Организационная структура проекта

5.3.6 Матрица ответственности

Для распределения ответственности между участниками проекта была сформирована матрица ответственности, представленная в таблице 5.21.

Таблица 5.21 – Матрица ответственности

Этапы проекта	Магистрант	Руководитель
Получение задания и составление плана работ	Исполнитель	Ответственный
Ознакомление с данными	Исполнитель	Утверждающее лицо
Изучение теоретических материалов	Исполнитель	Утверждающее лицо
Работа с литературой	Исполнитель	Утверждающее лицо
Разработка моделирующей программы	Исполнитель	Утверждающее лицо
Разработка презентации	Исполнитель	Утверждающее лицо
Обработка результатов	Исполнитель	Утверждающее лицо
Оформление таблиц данных, графиков	Исполнитель	Утверждающее лицо
Обсуждение результатов	Исполнитель	Утверждающее лицо, согласующее лицо
Оформление пояснительной записки	Исполнитель	Утверждающее лицо, согласующее лицо

5.3.7 План управления коммуникациями проекта

В плане управления коммуникациями проекта, представленном в таблице 5.22, отображены требования к коммуникациям со стороны участников проекта.

Таблица 5.22 – План управления коммуникациями

Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
Статус проекта	Магистрант	Руководитель	Еженедельно на консультации
Информация о каждой части проекта	Магистрант	Руководитель	Не позже сроков графиков
Программный код	Магистрант	Руководитель	Не позже сроков графиков
Пояснительная записка проекта	Магистрант	Руководитель	Не позже сроков графиков
Обратная связь по переданным данным	Руководитель	Магистрант	Еженедельно на консультации

5.3.8 Реестр рисков проекта

Информация о возможных неопределенных событиях, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты приведена в таблице 5.23.

Таблица 5.23 – Реестр рисков

Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления	Влияние риска	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
Развитие конкурентных технологий	Невостребованность данной разработки	1	5	Низкий	Привлечение предприятий, публикация результатов метода	Развитие конкурентных процессов
Ограниченность финансового обеспечения научного исследования	Невозможность продолжать дальнейшие исследования	1	5	Низкий	Пересчёт расхода на анализ, сокращение статей расходов	Сомнения в результатах анализа
Повышение стоимости программного оборудования	Невозможность продолжать дальнейшие исследования	2	5	Низкий	Использование аналогичного оборудования, более дешёвого	Инфляция

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

Эффективность научного ресурсосберегающего проекта включает в себя социальную эффективность, экономическую и бюджетную эффективность.

Показатели общественной эффективности учитывают социально-экономические последствия реализации инвестиционного проекта для общества.

5.4.1 Оценка абсолютной эффективности исследования

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

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

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

Расчёт NPV осуществляется по следующей формуле:

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{опт}^t}{(1+i)^t} - I_0 \quad (5.11)$$

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

I_0 – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году;

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

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

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

Расчет чистой текущей стоимости представлен в таблице 5.24. При расчете рентабельность проекта составляла 20 % от бюджета, амортизационные отчисления 10 % от стоимости оборудования. Операционные затраты составили 40 % от бюджета.

Коэффициент дисконтирования рассчитан по формуле:

$$КД = \frac{1}{(1+i)^t}, \quad (5.12)$$

где i – ставка дисконтирования, 20 %;

t – шаг расчета.

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 1 058 251 рублей, что позволяет судить об его эффективности.

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

$$PI = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_t}{(1+i)^t} / I_0, \quad (5.13)$$

где ЧДД – чистый денежный поток, руб.;

I_0 – начальный инвестиционный капитал, руб.

Таким образом PI для данного проекта составляет:

$$PI = \frac{417887,7248}{244852,20} = 1,71.$$

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

Таблица 5.24 – Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб.	0	293 822,64	293 822,64	293 822,64	293 822,64
2	Итого приток, руб.	0	293 822,64	293 822,64	293 822,64	293 822,64
3	Инвестиционные издержки, руб.	-244 852,20	0	0	0	0
4	Операционные затраты, руб.	0	97 940,88	97 940,88	97 940,88	97 940,88
5	Налогооблагаемая прибыль	0	195 881,76	195 881,76	195 881,76	195 881,76
6	Налоги 20 %, руб.	0	39 176,352	39 176,352	39 176,352	39 176,352
7	Итого отток, руб.(4+6)	-244 852,20	137 117,232	137 117,232	137 117,232	137 117,232
8	Чистая прибыль, руб.(5-6)	0	156 705,408	156 705,408	156 705,408	156 705,408
9	Чистый денежный поток (ЧДП), руб.	-244 852,20	161 533,7166	161 533,7166	161 533,7166	161 533,7166
10	Коэффициент дисконтирования (КД)	1	0,833	0,694	0,578	0,482
11	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб.	-244 852,2	134 557,5859	112 104,3993	93 366,48818	77 859,25139
12	Σ ЧДД			417 887,7248		
13	Итого NPV, руб.			173 035,5248		

Внутренняя ставка доходности (IRR). Значение ставки, при которой обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или IRR. Формальное определение «внутренней ставки доходности» заключается в том, что это та ставка дисконтирования, при которой суммы дисконтированных притоков денежных средств равны сумме дисконтированных оттоков или =0. По разности между IRR и ставкой дисконтирования i можно судить о запасе экономической прочности инвестиционного проекта. Чем ближе IRR к ставке дисконтирования i , тем больше риск от инвестирования в данный проект.

Между чистой текущей стоимостью (NPV) и ставкой дисконтирования (i) существует обратная зависимость. Эта зависимость представлена в таблице 5.25 и на рисунке 5.5.

Таблица 5.25 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№	Наим. показ.	0	1	2	3	4	NPV, руб.
1		-244852,2	161533,72	161533,72	161533,72	161533,72	
2	Коэффициент дисконтирования						
	0,1	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	0,2	1	0,833	0,694	0,579	0,482	
	0,3	1	0,769	0,592	0,455	0,350	
	0,4	1	0,714	0,510	0,364	0,260	
	0,5	1	0,667	0,444	0,296	0,198	
	0,6	1	0,625	0,391	0,244	0,153	
	0,7	1	0,588	0,346	0,204	0,120	
	0,8	1	0,556	0,309	0,171	0,095	
	0,9	1	0,526	0,277	0,146	0,077	
	1,0	1	0,500	0,250	0,125	0,063	
3	Дисконтированный денежный поток, руб.						
	0,1	-244852,20	146834,15	133426,85	121311,82	110327,53	267048,15
	0,2	-244852,20	134557,59	112104,40	93528,02	77859,25	173197,06
	0,3	-244852,20	124219,43	95627,96	73497,84	56536,80	105029,83
	0,4	-244852,20	115335,07	82382,20	58798,27	41998,77	53662,11
	0,5	-244852,20	107742,99	71720,97	47813,98	31983,68	14409,42
	0,6	-244852,20	100958,57	63159,68	39414,23	24714,66	-16605,06
	0,7	-244852,20	94981,83	55890,67	32952,88	19384,05	-41642,78
	0,8	-244852,20	89812,75	49913,92	27622,27	15345,70	-62157,57
	0,9	-244852,20	84966,73	44744,84	23583,92	12438,10	-79118,61
	1,0	-244852,20	80766,86	40383,43	20191,71	10176,62	-93333,57

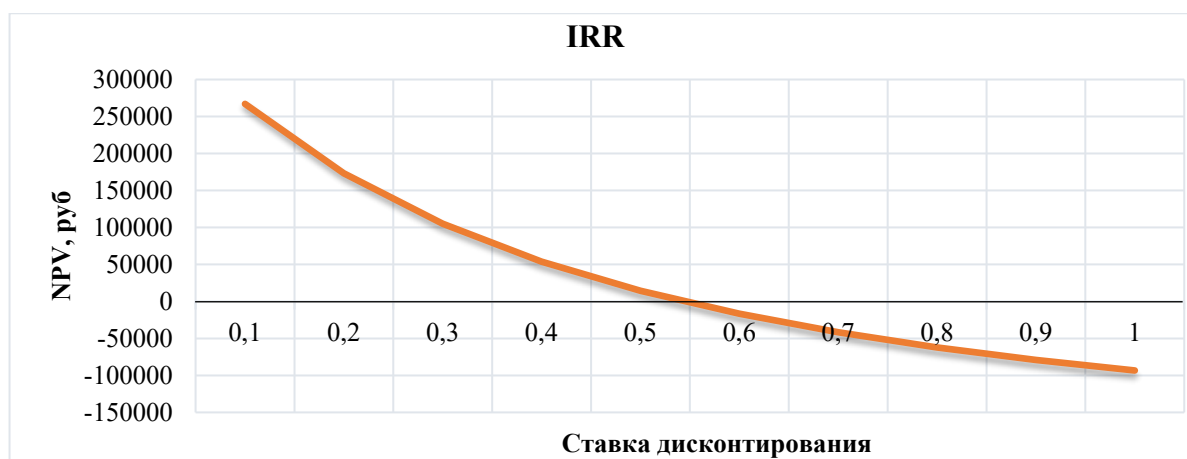


Рисунок 5.5 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Из таблицы и графика следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Значение ставки, при которой NPV обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или «внутренней нормы прибыли». Из графика получено, что IRR составляет 0,55.

Запас экономической прочности проекта: $55\% - 20\% = 35\%$

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

Этот недостаток устраняется путем определения дисконтированного срока окупаемости.

Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (таблица 5.26).

Таблица 5.26 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток ($i=0,20$), руб.	-244852,20	134557,59	112104,40	93528,02	77859,25
2	То же нарастающим итогом, руб.	-244852,20	-110294,61	1809,79	95337,81	173197,06
3	Дисконтированный срок окупаемости	$PP_{диск} = 1 + (110294,61 / 112104,40) = 1,98$ года				

Социальная эффективность научного проекта учитывает социально-экономические последствия осуществления научного проекта для общества в целом или отдельных категорий населения или групп лиц, в том числе как непосредственные результаты проекта, так и «внешние» результаты в смежных секторах экономики: социальные, экологические и иные внеэкономические эффекты (таблица 5.27).

Таблица 5.27 – Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Отсутствие математической модели превращения углеводородов, входящих в состав стабильного газового конденсата на цеолитном катализаторе	Разработана модель и новая технология получения высокооктановых компонентов за счет превращения углеводородов, входящих в состав стабильного газового конденсата на цеолитном катализаторе. С возможностью контролировать и оптимизировать существующие технологии
Нехватка данных об превращениях углеводородов, входящих в состав стабильного газового конденсата на цеолитном катализаторе	Определены условия процесса, расчетные коэффициенты и формализованная модель процесса

5.4.2 Оценка сравнительной эффективности исследования

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

Сгруппируем затраты по статьям, включая аналоги. Результаты представлены в таблицах 5.28, 5.29 и 5.30.

Таблица 5.28 – Сырье, материалы и комплектующие изделия

Наименование	Ед. изм.	Кол-во	Цена за единицу, руб.		
			Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Бумага	пачка	2	360	420	555
Картридж для принтера	шт.	1	1 100	2 900	2 900
Транспортно-заготовительные расходы			90	112	120
Сумма, руб.			1 900	3 832	4 105

Таблица 5.29 – Затраты на оборудование

Наименование	Кол-во	Цена, тыс. руб. за ед.		
		Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Персональный компьютер	2	30	40	45
Принтер	1	5	5,5	6
Программное обеспечение Microsoft Office 365 Small Bus Base	2	3,750	3,750	3,750
Лицензия на программный пакет Gaussian	1	40	40	40
Общая стоимость, тыс. руб.		112,5	123	128,5

Таблица 5.30 – Группировка расходов по статьям

Вид работ	Расходы, руб.		
	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	1 900	3 832	4 105
Специальное оборудование для научных работ	112 500	123 000	128 500
Основная заработная плата	54 017,48	54 017,48	54 017,48
Дополнительная заработная плата	8 102,62	8 102,62	8 102,62
Отчисления на социальные нужды	13 666,42	13 666,42	13 666,42
Накладные расходы	49 696,08	49 696,08	49 696,08
Итого плановая себестоимость	239 882,6	252 314,6	258 087,6

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} \quad (5.14)$$

где Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения, руб.;

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

$$I_{\Phi_{\text{Аналог 1}}}^p = \frac{239\,882,6}{258\,087,6} = 0,929 \quad (5.15)$$

$$I_{\Phi_{\text{Аналог 2}}}^p = \frac{252\,314,6}{258\,087,6} = 0,978 \quad (5.16)$$

$$I_{\Phi_{\text{Аналог 3}}}^p = \frac{258\,087,6}{258\,087,6} = 1 \quad (5.17)$$

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное удешевление стоимости разработки.

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

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a \quad (5.18)$$

$$I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p \quad (5.19)$$

где a_i – весовой коэффициент i -го параметра;

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

n – число параметров сравнения.

Расчёт интегрального показателя ресурсоэффективности представлен в таблице 5.31.

Таблица 5.31 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	I_m^p	Исп. 2	I_m^{a2}	Исп. 3	I_m^{a3}
Адекватность разработки	0,5	5	2,5	4	2	4	2
Унифицированность	0,15	4	0,6	4	0,6	4	0,6
Простота применения	0,25	5	1,25	4	1	3	0,75
Универсальность	0,10	3	0,3	3	0,3	3	0,3
ИТОГО	1	17	4,65	15	3,9	14	3,65

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{фин}^p$) и аналога ($I_{фин}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{фин}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p} = \frac{4,65}{0,929} = 5,01 \quad (5.20)$$

$$I_{\text{фин}}^p = \frac{I_m^{a2}}{I_{\phi}^p} = \frac{3,9}{0,978} = 3,99 \quad (5.21)$$

$$I_{\text{фин}}^p = \frac{I_m^{a3}}{I_{\phi}^p} = \frac{3,65}{1} = 3,65 \quad (5.22)$$

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

Сравнительная эффективность проекта определяется по формуле:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{фин}}^p}{I_{\text{фин}}^{a_i}} \quad (5.23)$$

где $I_{\text{фин}}^p$ – интегральный показатель эффективности разработки;

$I_{\text{фин}}^{a_i}$ – интегральный технико-экономический показатель i -го аналога.

Сравнительная эффективность разработки представлена в таблице 5.32.

Таблица 5.32 – Сравнительная эффективность разработки

Показатель	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Интегральный финансовый показатель разработки	0,929	0,978	1
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,65	3,9	3,65
Интегральный показатель эффективности	5,01	3,99	3,65
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,80	0,73

Сравнение значений интегральных показателей эффективности вариантов исполнения разработки показало, что более эффективным вариантом решения технической задачи, поставленной в работе с позиции финансовой и ресурсной эффективности, является данная разработка.

Выводы по разделу: в ходе выполнения раздела финансового менеджмента определена чистая текущая стоимость, NPV = 173 036 руб.; индекс доходности PI = 1,71, внутренняя ставка доходности IRR = 55 %, срок окупаемости PPдск = 1,98 года. Таким образом, разработанная математическая модель конверсии ПНГ в жидкие углеводороды является более ресурсоэффективной, экономичной и конкурентоспособной, чем аналоги.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ

№ п/п	Название	Издательство, журнал (название, номер, год)	Кол-во стр.	Фамилии соавторов
Публикации в изданиях, входящих в базы Scopus или Web of Science - 3 шт.				
1	Studying the Regularities of Atmospheric Oil Distillates Catalytic Dewaxing Process Using the Method of Mathematical Modelling	Petroleum and Coal. – 2021. – Vol. 62. – No 3. – P. 951-956.	6 стр.	Белинская Н.С. Афанасьева Д.А Маужигунова Е.Н.
2	Development of a Mathematical Model of the Vacuum Oil Distillates Hydrocracking Process Taking into Account Catalyst Deactivation by Coke	Petroleum and Coal. – 2021 – Vol. 63(3). - p. 853–858	6 стр.	Белинская Н.С. Афанасьева Д.А Костень М.С.
3	Development of a Mathematical Model of the Diesel Fractions Isodewaxing Process	Petroleum and Coal. – 2021 – Vol. 63(4). - p. 988–993	6 стр.	Белинская Н.С. Афанасьева Д.А Костень М.С.
Публикации в ведущих научных изданиях ВАК / РИНЦ - 2 шт.				
4	Разработка математической модели процесса изодепарафинизации дизельных фракций нефти	Вестник Технологического университета. – 2021. – Т. 24. – № 4. – С. 29-33.	4 стр.	Белинская Н.С. Афанасьева Д.А Костень М.С.
5	Исследование закономерностей и разработка модели процесса гидрокрекинга вакуумного газойля	Технологии нефти и газа. – 2021. – № 4(135). – С. 10-15. – DOI 10.32935/1815-2600-2021-135-4-10-15.	5 стр.	Белинская Н.С. Афанасьева Д.А Костень М.С.
Публикации в журналах и сборниках конференций - 8 шт.				
6	Research of the associated petroleum gas conversion into aromatic hydrocarbons on a zeolite catalyst	Химия и химическая технология в XXI веке : Материалы XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 110-летию со дня рождения профессора А.Г. Стромберга, Томск, 21–24 сентября 2020 года. – Томск: Томский политехнический университет, 2020. – P. 522-523.	1 стр.	–
7	Исследование конверсии попутного нефтяного газа на цеолитном катализаторе в ароматические углеводороды	Химия и химическая технология в XXI веке : Материалы XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 110-летию со дня рождения профессора А.Г. Стромберга, Томск, 21–24 сентября 2020 года. – Томск: Томский	1 стр.	–

		политехнический университет, 2020. – С. 360.		
8	Математическое моделирование процесса конверсии попутного нефтяного газа в ароматические углеводороды	Ломоносов - 2020. Секция "Химия": материалы XXVII Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных, Москва, 10-27 Ноября 2020. - Москва: Перо, 2020 - С. 1322.	1 стр.	Белинская Н.С.
9	Математическое моделирование процесса конверсии попутного нефтяного газа в жидкие углеводороды	Инновационные технологии: теория, инструменты, практика: материалы XII Международной интернет-конференция молодых ученых, аспирантов и студентов, Пермь, 16 ноября – 15 декабря 2020 года. – Пермь: Изд-во Пермского национального исследовательского политехнического университета, 2020. – С. 493-494.	1 стр.	Белинская Н.С.
10	Математическое моделирование процесса конверсии попутного нефтяного газа в ароматические углеводороды	Химия и химическая технология в XXI веке : материалы XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л. П. Кулёва и Н. М. Кижнера, посвященной 125-летию со дня основания Томского политехнического университета, Томск, 17-20 мая 2021 г. : в 2 т. — Томск : Изд-во ТПУ, 2021. — Т. 2. — С. 42-44.	1 стр.	Белинская Н.С.
11	Research of the associated petroleum gas conversion into aromatic hydrocarbons on a zeolite catalyst	Химия и химическая технология в XXI веке материалы XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л. П. Кулёва и Н. М. Кижнера, посвященной 125-летию со дня основания Томского политехнического университета, Томск, 17-20 мая 2021 г.: в 2 т.: / Томский политехнический университет (ТПУ). — 2021 . — Т. 2 . — С. 192-193.	1 стр.	Белинская Н.С.
12	Исследование конверсии попутного нефтяного газа на цеолитном катализаторе в ароматические углеводороды	Наука. Технологии. Инновации : Сборник научных трудов. В 9-ти частях, Новосибирск, 30 ноября 2020 года / Под редакцией А.В. Гадюкиной. – Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет, 2020. – С. 16-17.	1 стр.	Белинская Н.С.
13	Исследование конверсии попутного нефтяного газа на цеолитном катализаторе в ароматические углеводороды	Проблемы геологии и освоения недр : труды XXV Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых ученых, посвященного 120-летию горно-геологического образования в Сибири, 125-летию со дня основания Томского политехнического университета, Томск, 05–9 апреля 2021 года. – Томск: Томский политехнический университет, 2021. – С. 257-259.	2 стр.	Белинская Н.С.

Приложение А

(обязательное)

Part 1

Development of a mathematical model for the conversion of associated petroleum gas into liquid hydrocarbons

(Literature review)

Обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ12	Гнеушева Виолетта Витальевна		

Руководитель ВКР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ	Белинская Наталия Сергеевна	к.т.н.		

Консультант – лингвист отделения (НОЦ) школы ШБИП:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОИЯ	Уткина Анна Николаевна	к.филос.н.		

1 LITERATURE REVIEW

1.1 Problems and opportunities for the rational use of associated petroleum gas

APG is a combination of C_1 - C_{7+} hydrocarbons, mainly alkanes. A typical APG composition includes CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 , $n-C_4H_{10}$, $i-C_4H_{10}$, $n-C_5H_{12}$, $i-C_5H_{12}$, C_6H_{14} , C_7H_{16} , H_2S , CO_2 and N_2 , where "n" and "i" are straight and branched chain alkanes, respectively. Separation of gas and liquid is not ideal in flow stations, so a small amount of liquid may be present in the gas stream, which increases the amount of higher molecular weight alkanes.

Gas flaring is the process of removing gas by burning in an open atmosphere using a burner tip specially designed for this purpose in oil and gas production [1–3].

Flaring of gas is carried out in order to convert hydrocarbons, in particular methane, into less hazardous products in the immediate vicinity of the production site [4]. Although the purpose of the flare system is to ensure the safety of the plant, i.e., the combustion of gases lost through the plant vent valves and gas vented to the blowdown system during unstable operating conditions, such as a refinery shutdown, including a sudden increase in pressure in gas streams and a fire, during combustion environmentally harmful products such as hydrocarbons, CO , H_2 , NO , NO_2 , SO_2 , etc. are generated in this tower. Thus, combustion is one of the most controversial issues concerning the problems of modern energy and its impact on the environment [5–7].

Gas flaring in the oil industry is common in developing countries and oil-rich regions of the world, where technologies and infrastructure for collecting, storing and using produced gas that would allow efficient use of all hydrocarbon gas are not available or unprofitable in daily operations. Despite the demands of international organizations such as The World Bank-led Global Gas Flaring Reduction Partnership, from 2008 to 2016, the volume of gas flared worldwide amounted to about 130 billion dollars.

Russia is the largest country in the world in terms of area, with large and diverse energy resources. Oil and natural gas reserves are estimated at about 80 billion barrels and 47.8 trillion. m³, respectively [8, 9]. In the world, gas reserves in Russia are estimated as the first in size [10].

These vast gas reserves are either in the form of APG or natural gas, which is a gas with little or no oil content. Most of the gas reserves in Russia are APG [11].

According to satellite data [12], the four countries with the highest levels of associated gas flaring (Russia, Iraq, the United States and Iran) still account for almost half (45 %) of the world's associated gas flaring for three consecutive years (2017-2019)).

According to the GAINS (Greenhouse Gas and Air Pollution Interactions and Synergies) model, flare gas accounts for about 4 % of total anthropogenic pollutant emissions, mainly from leading gas producers in Russia, Nigeria and the Middle East [7]. It is estimated that Russia is responsible for 36.2 % of pollutant emissions that pose a threat to the environment and health and are the cause of most of the country's annual loss of income [11].

In connection with the depletion of oil reserves in recent years, research has begun to obtain valuable products from alternative raw materials (associated gas and natural gas) for the oil refining and petrochemical industries [13–15].

The economic feasibility of using APG often depends on the geographic location under consideration, and Russian oil companies often lack incentives to invest in utilization infrastructure. It should be noted that Russia introduced a 5 % limit on APG flaring in 2012, but in 2015 almost 12 % was flared [16]; according to the Ministry of Natural Resources, in 2016 this figure was close to 11 %.

Achieving the 5 % target is technically feasible, as several private oil companies have already demonstrated [17]. However, today almost all oil companies use APG in the amount necessary to meet their own needs, and the rest is flared [18-20].

APG flaring volumes in Russia are steadily declining, although the actual plan has not yet been reached [16]. However, the reliability of these data is doubtful, since

there are significant discrepancies between Russian APG flaring statistics and satellite data (National Oceanic and Atmospheric Administration) [21].

At the same time, the problem of APG flaring in Russia is particularly acute: according to the Ministry of Energy of the Russian Federation, 9.3 billion m³/year of APG is flared at oil production facilities [22]. This scale can be explained by the following factors:

- APG flaring occurs mainly at small fields (with a capacity of less than 50 million m³/year of gas), and the problem of APG flaring at small fields does not yet have an economically viable solution.

- The use of APG without pre-treatment as a fuel for internal combustion engines at local power plants will inevitably lead to overheating and engine failure, since the construction materials and operating mode are designed to work with fuel gas, the calorific value of which does not exceed 36 MJ/m³, then as the minimum calorific value of APG is in the range from 42 to 60 MJ/m³, which is an unacceptable excess for stable engine operation.

Another problem of using APG in internal combustion engines is that APG contains heavy hydrocarbons, which, depending on their concentration and gas pressure, condense below the dew point in the feed line, forming liquid droplets at the combustion chamber inlet. As a result, the combustion of the fuel mixture occurs unevenly, accompanied by the formation of resinous compounds, increased coking and detonation, which ultimately leads to premature engine failure [23].

APG conversion is undoubtedly the most attractive way to use APG, as it allows the synthesis of products with high added value, however, due to logistical constraints, this method is practically not practiced in Russia. However, a positive example is the Samara region, where APG is fully processed at the Otradnoye and Neftegorsk gas processing plants.

According to the report of the Nizhnevartovsk Oil Research and Design Institute [24], more than 80 % of the oil fields where APG is flared are small (less than 50 million m³/year) and their number continues to grow, especially in the Western and Eastern Siberia. As in the fields of central Russia, organizing the

collection of gas from such oil fields is a very expensive process, accompanied by significant operating costs. According to a study on the use of Russian APG, conducted in 2007, the volume of APG flared, taking into account gas flaring at gas condensate fields, is 3–4 times higher than official data and amounts to almost 60 billion m³/year [25].

1.2 Process fundamentals and gas-liquid conversion technology

Hydrocarbon gas is likely to capture a large share of the world market in the future, but its use is hampered by a number of factors.

The two main methods of utilization of hydrocarbon gas are its liquefaction and bringing to the standards established by GOST R 56021-2014 Combustible natural gas liquefied or utilization through the production of electricity.

GTL technologies make it possible to convert hydrocarbon gas into liquid and oxygenates as a result of chemical reactions, which allows us to use these hydrocarbons as an additive to motor fuels through compounding. GTL technology products may include other chemicals such as ammonia, methanol, or methyl tert-butyl ether, which are also of some value to various areas of the petrochemical industry [26].

While interest in GTL technologies has been driven by political rather than economic factors for decades, recent technological advances have made GTL technologies more competitive. In 2009, there were still relatively few sites in commercial operation (eg Sasol in South Africa and Shell in Malaysia); at the moment, there are more and more objects of commercial scale.

1.2.1 Benefits of using GTL technologies

The chemical conversion of hydrocarbon gas to liquid allows us to offer an alternative source of liquid hydrocarbons for traditional crude oil refinery products. This activity has obvious benefits such as energy security for countries that have limited or difficult access to oil but large reserves of hydrocarbon gas. In addition, GTL technologies facilitate the transportation of hydrocarbon gas from remote sources of production to the consumer, since alternative methods, such as pipeline transport or gas liquefaction, may not be available. In this case GTL technologies

are economically and technically attractive for remote fields. Because liquid fuels are easier to transport than gaseous fuels by sea, rail, or road, and store at the destination, the conversion of hydrocarbon gas to liquid provides some flexibility in transportation compared to pipeline and liquefaction. However, GTL technologies are still not an alternative to areas where the production of liquefied gas is widespread, since capital investments and operating costs for GTL plants would not correspond to production volumes [26].

The following list illustrates the benefits of using GTL technologies:

- Deriving economic benefits from hydrocarbon gas from large but remote fields. Although the world's natural gas reserves are large and expected to last longer than oil, most of these reserves (1/2 to 2/3 in the countries of the former Soviet Union and the Middle East) are not just located in geographically remote areas, but can be significantly removed from the GTF, and also, as a rule, are located in adverse climatic conditions, such as the Arctic. In the absence of pipelines to efficiently transport gas from sources to gas processing plants, GTL technologies can provide a technically and economically viable alternative to pipeline transport. But at the same time, GTL products may not always be economically competitive compared to conventional petroleum products, however, for such deposits, this may be the only option for obtaining economic benefits [27].

Key factors affecting competitiveness GTL-technologies are the cost of equipment, operating costs, the scale of the enterprise and the degree of equipment utilization. Thus, in many cases, GTL technologies can solve the problem of rational use of natural gas.

- Historically, associated petroleum gas from offshore or offshore fields has been a problem. In the past, associated gas was usually flared or injected back into the reservoir without the means to transport the gas to markets. It is now environmentally unacceptable and economically wasteful to follow this practice. GTL technologies can convert associated gas into “synthetic” oil and then use existing liquid pipelines or liquid transport vessels for transportation.

GTL's associated gas processing units have a low environmental footprint, are safe and integrate well with production sites, especially offshore.

- Extending the service life of pipelines. Pipelines built to transport oil are of little value if there is no more oil to transport from fields that have been depleted. A typical case is the Trans-Alaska Pipeline, built in 1977 to transport oil from Prudhoe Bay - Valdes. It is estimated that liquids from GTL natural gas shift technologies can be transported through the same pipeline, which extends its useful life by at least 20 years.

1.2.2 GTL processes

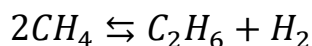
The conversion of a hydrocarbon gas (mainly methane) into a liquid is a polymerization process. The hydrogen is removed and the methane molecules polymerize into longer chain hydrocarbons that are similar to those found in crude oil fractions.

There are two main GTL technologies: direct conversion of hydrocarbon gas to liquid and indirect conversion via synthesis gas. Direct conversion avoids the production of synthesis gas, but direct conversion is more difficult to control and has relatively low selectivity (< 20 %) and low conversion (< 40 %). A number of direct conversion processes have been improved, but so far none of them has become widespread [28].

Indirect conversion is based on three main steps:

1. Reforming (catalytic conversion) of natural gas into synthesis gas (mainly a mixture of carbon monoxide and hydrogen in various proportions).
2. Fischer-Tropsch synthesis for the catalytic conversion of synthesis gas into liquid hydrocarbons or oxygenates.
3. Transform products using a range of standard refinery processes such as hydrocracking, isomerization or catalytic reforming.

The main reaction of direct conversion of methane to higher hydrocarbons:



In this reaction, hydrogen is split off from two methane molecules. This is the most direct reaction, but, unfortunately, without the participation of catalysts, its

Gibbs energy is positive. The possibility of the reaction was achieved through the use of catalysts and high temperatures, due to which the selectivity (i.e. the percentage of useful products) increased to 20%, and the conversion to 60%.

Future development of more selective catalysts may make direct conversion more attractive given its relative simplicity.

1.2.3 Process catalysts

Catalysis – substances that change the rate of a chemical reaction and are not part of the final products. The degree to which the reaction is accelerated is called the activity of the catalyst and can reach several orders of magnitude. Because a catalyst can selectively accelerate a chemical reaction from a set of competing possible reactions, it can direct a reactant system to produce desired products, thereby improving the selectivity of the system. Of course, catalysts are of paramount importance for GTL technologies.

Industrial catalysts are usually solids that affect the rate of reactions involving gases or liquids, in the form of granules or powder. An industrial catalyst works by providing a catalytic surface for active sites on which reactants are chemisorbed and thus facilitates (due to the need to overcome lower energy barriers) the reaction with neighboring molecules, which are also adsorbed on the surface [29].

The selectivity of reactions is possible due to the fact that the surface of the catalyst controls the adsorption abilities of the reagents.

Since the active species are more accessible on the surface of the catalyst, solid catalysts are made in small pellets to make as much surface area as possible available to the reactants.

Different classes of major catalyst components function differently: metals and oxides initiate redox reactions such as hydrogenation, oxidation, and hydrogenolysis. Metals are more reactive, but oxides show better selectivity due to their complex structure. Aluminosilicates initiate carbonium type reactions such as cracking, isomerization and polymerization. An industrially important class of aluminosilicate catalysts are zeolites, which are molecular sieves that allow selective reactions, due to the fact that the size of the holes in the zeolite catalysts limits the

reactions of the molecules due to their size, that is, there are steric hindrances for side reactions.

Catalytic activity or selectivity may decrease as a result of sintering or poisoning of the catalyst. Sintering is the coarsening of catalyst granules over time. Poisoning occurs as a result of chemisorption of impurities, such as sulfur, on active sites, which then become deactivated.

Catalyst deactivation can also occur as a result of carbon deposition on the active surfaces as a result of coking reactions (formation of carbon from the decomposition of hydrocarbons at high temperature). The coking may be so severe that the catalyst may need to be regenerated, as is the case in fluid catalytic cracking.

In addition to the preparation of the main component, catalytic activity and stability can be optimized by the appropriate choice of support for the active components of the catalyst, as well as promoters of undesired processes. The most important function of the support is to ensure that the active component is sufficiently dispersed to provide the maximum possible number of active sites on the surface of the catalyst.

The support is made from materials with a high melting point, such as various allotropes of alumina, manganese oxide, or zinc oxide, to avoid sintering. Auxiliary components often have acidic activity, which leads to unintentional carbon deposition.

Another important role of the catalyst carrier is to impart the desired properties (eg size, shape, hardness) to the catalyst granules or powders.

The performance of the catalyst is largely dependent on the method of preparation and pre-treatment prior to use.

Catalysts are actively used in GTL technologies, since a properly selected catalyst is a success factor for the proposed process.

1.3 Models of hydrocarbon processing processes on zeolite catalysts

The general technological scheme of transformations given in the article [30], the material balance equations obtained on a laboratory setup, allowed the authors to develop a kinetic model of the process of transformation of raw materials of

various compositions on zeolites. As a result of solving the system of differential equations, the authors determined the values of the reaction rate constants and the activation energy. If we talk about the applicability of this model, it is clear that such a model based on the grouping of substances by classes can be quite applicable in practice in the design of industrial installations, however, the high complexity of the calculations makes it impossible to use this model in practice.

The article [31] presents the result of modeling the process of conversion of hydrocarbons into zeolites, the optimal design and technological parameters of the conversion reactor were chosen. In addition, the thermodynamic parameters of some reactions were calculated using reference data, and a model scheme of transformations was proposed based on the calculated, published, and experimental data. It is important to note that the model proposed by the authors was tested for adequacy, and the developed model makes it possible to predict the yield and properties of the obtained substances with high accuracy.

The modeling of the processes of conversion of various hydrocarbons on zeolite catalysts has been carried out, but a model has not been created that would be able to predict and optimize depending on the composition of the feedstock. At the same time, the works of I. I. Lishner show the possibility of effective APG processing into valuable petrochemical products on a zeolite catalyst. This, together with the need to process APG in accordance with environmental standards, confirms the need for this study.

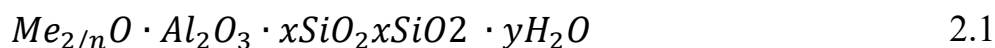
1.4 Transformation of hydrocarbons on zeolite catalysts

1.4.1 Zeolite catalysts

Zeolites or zeolite catalysts are microporous crystalline composites of aluminosilicates formed due to the common tips of aluminum and silicon oxides. A method for producing synthetic zeolites is hydrothermal synthesis using different sources of Al, Si, and different structure-forming agents. Alkaline or alkaline earth metals, as well as amines or other organozinc compounds, are used as structure-forming agents that determine the final configuration of the zeolite structure and are distributed in its pores [40].

These particles serve as a charge stabilizer of the framework that is bound to Al and fills in the void. Zeolites have the following features: uniform size of pores, a large ion exchange capacity, and the ability to reversibly desorb the adsorbed phase that was dispersed in the crystal pores, without affecting the crystal structure.

To describe the chemical composition of zeolite, a formula is used for simulating the composition of a single unit cell. The formula can be presented as follows (Formula 2.1):



n -valence of the metal cation Me;

x -molar ratio of silicon and aluminum oxides;

y -the number of moles of water.

A number of factors determine the chemical properties of zeolites. To understand how different effects and active centers are formed, it is worth turning to the basics of organic inorganic chemistry. In the presence of water the end oxide atoms bind to hydroxyl groups and determine their properties.

To determine the properties of hydroxyl groups, one may investigate sulfuric acid, where OH groups are proton donors, and in the base they act as hydroxyl ions [41]. Based on the summary of these facts, it is found out that on the surface of silica gel, OH groups do not manifest basic and acidic properties.

On the surface of Al_2O_3 , hydroxyl groups sometimes form a center of weak acidity and when interacting with strong bases, they can give up a proton. In turn, on the surface of an aluminosilicate, hydroxyl groups tend to be proton donors.

The analysis of studies on hydrocarbon transformations in aluminosilicates showed that hydroxyl groups are capable of giving up a proton to hydrocarbons. Acid properties characterize the formation of acid centers per unit of surface area and the ability to interact with organic bases.

Bronsted acid sites in acid zeolites refer to mobile protons-counterions of tetrahedra $[AlO_4]^-$, which contribute to manifestation of the acidic properties of zeolites [42]. Silanol hydroxyl groups formed on structural defects of zeolites are Bronsted acid sites; although they are not very chemically reactive, they can be

present at completely different acidity levels. The structure of these sites is shown in Figure 2.1.

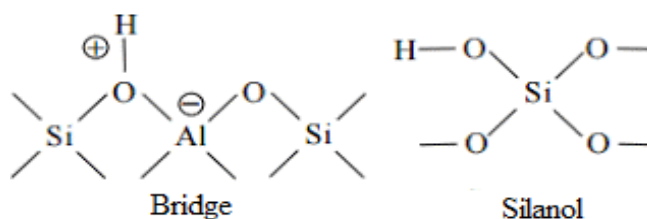


Figure 2.1- Structure of acid centers on zeolite catalysts [43]

The shift of negative charges of tetrahedra, which occur due to the energy distribution to oxygen atoms that are conjugated with bridged cations, form the main Lewis centers. Their strength depends on the electronegativity, - the lower it is, the greater the conjugation of oxygen [44].

1.4.2 Chemistry of transformations on zeolite catalysts

The transformation of hydrocarbons on a zeolite catalyst involves different types of transformations and different mechanisms. All these depend on a number of factors, which include the structure of the zeolite itself, possible modifications, and ways to modernize it. In the paper it is proposed to consider possible mechanisms of reactions on a zeolite catalyst based on various literature data and conducted studies.

- Cracking

If we consider in more detail the cracking of paraffin on acidic centers of a zeolite catalyst, three main stages, shown in Figure 2.2, can be distinguished [45].

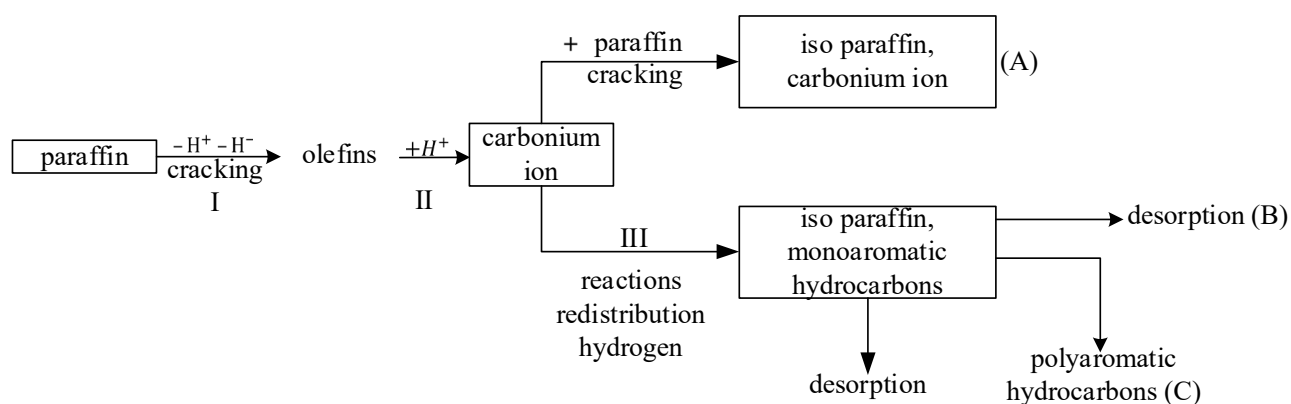


Figure 2.2 - Cracking of paraffins on zeolites

Stage I – paraffin molecules interact with the active sites of the catalyst and dehydrogenate the products of this stage are olefins;

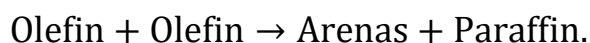
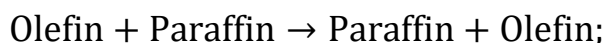
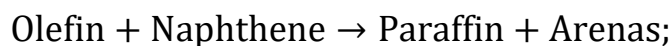
Stage II – during the formation of olefins on the surface of the catalyst, a carbonium ion is formed as a highly active center and allows further reactions to occur; paraffin splitting occurs due to interaction with the carbonium ion;

Stage III – alkylation of olefins, and decomposition of strongly branched isomers that were formed as a result of this transformation, as well as possible reactions of hydrogen redistribution in olefins with the formation of isomers of normal paraffin's and aromatic compounds occur at this stage.

It is also worth considering how this mechanism is described in terms of chain development reactions involving the following most characteristic reactions of carbenium ions: C-C bond decay, hydride ion transfer (H-transfer), isomerization, cyclization, decyclization, dealkylation, alkylation, polymerization, polycondensation, and others [46].

The chain of carbenium ion transformation is broken by the return of protons to the catalyst surface or the removal of an electron from the Lewis site. The decomposition of the C-C bond of the carbene ion is one of the most important target reactions leading to the formation of low-molecular-weight fuel fractions and C₃-C₄ hydrocarbons in gases.

The transfer of the hydride ion, namely H-transfer, leads to an increase in the yield of fuel fractions and the chemical stability of the resulting gasoline. The following reactions are carried out through H-transfer [46]:



- Isomerization

The isomerization reaction of carbenium ion is also an important target reaction along with cracking, which improves commercial properties of the resulting products. In most cases, isomerization reactions proceed more quickly than cracking reactions. This causes an increased content of iso-structured hydrocarbons in the products.

The transformation of hydrocarbons involves the formation of carbocations as reaction intermediates. According to the classical reaction scheme, alkenes are protonated to the alkylcarbenium ion. These cations undergo isomerization and a separation reaction, then they are desorbed from the acidic sites in the form of alkenes. During the reaction, the carbenium ion can be broken down to produce an alkene and a smaller carbenium ion, or isomerized to a more stable ion. After isomerization, the carbenium ion can again undergo rupture or desorption as a branched alkene when reduced by a proton on a catalyst [43]. An example of the formation of an alkylcarbenium ion is shown in Figure 2.3.

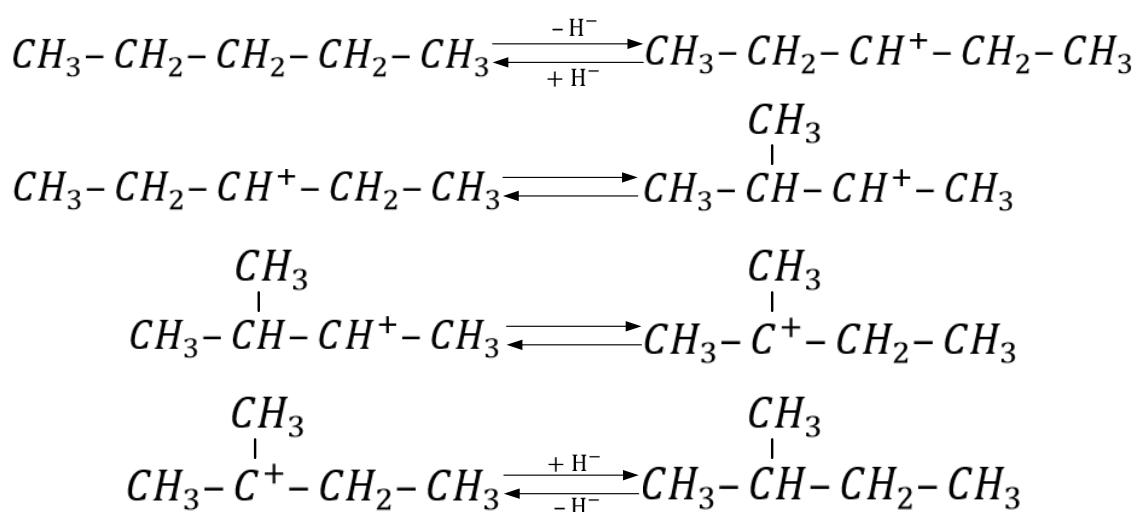


Figure 2.3-Mechanism of paraffin isomerization reaction on zeolites

Isomerization can occur either through proton transfer (hydride shift) or methyl group skeletal isomerization along the hydrocarbon chain [42]. The flow pattern of these paths is shown in Figure 2.4.

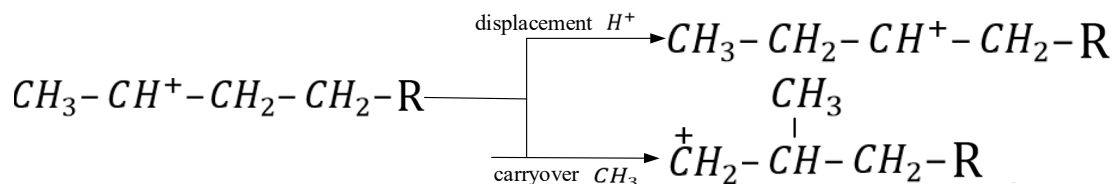


Figure 2.4-Variation of isomerization on zeolites

For isomerization reactions, a mechanism has been proposed according to which the process is carried out through the formation of intermediate cyclic structures, for example, cyclopropane, cyclobutane, and etc. An example of this mechanism is shown in Figure 2.5.

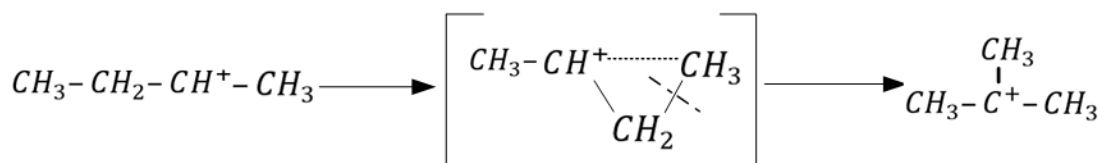


Figure 2.5-Isomerization through the formation of cyclic structures

The transfer process of a methyl group within a molecule during isomerization of dimethylbenzenes and polymethylbenzenes is also considered. During this transfer, the position of the broom groups changes while xylenes undergo transformation [41]. An example of xylene isomerization is shown in Figure 2.6.

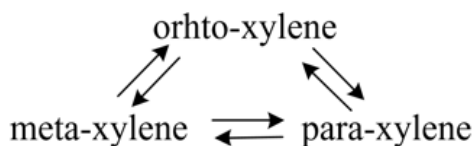


Figure 2.6 - Isomerization of xylenes

Cyclopentanes are more stable than cyclohexanes. Under these conditions, cyclohexanes can be dehydrogenated into arenes through H-transfer [43].

In the presence of long side chains in the cycloalkane carbenium ion, side chain isomerization and dealkylation are possible.

- Aromatization

At low temperatures, zeolites undergo double bond transfer and skeletal isomerization of olefins. Oligomerization and polymerization reactions also occur at higher temperatures.

Light paraffin isomers C₅-C₈ are high-octane components of liquid fuels. At the acidic centers of zeolites that do not contain transition metals, paraffin isomerization is carried out according to the following scheme: separation of the hydride ion from the paraffin molecule, and the isomerization of the resulting hydride ion with the release of iso-paraffin. The flow pattern of this mechanism is shown in Figure 2.9 [40].

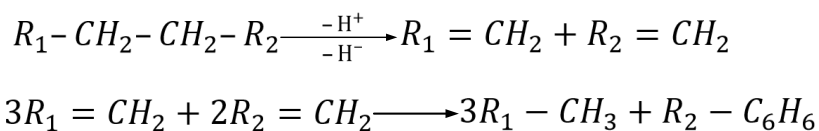


Figure 2.9 -Scheme of hydrocarbon aromatization [40]

As a result of hydrogen transfer reactions, up to 60 % of the products of primary cracking reactions are converted to saturated paraffins and only about 40 % to aromatic compounds.

- Alkylation

Alkylation reactions take place on zeolite catalysts. Acidic zeolites accelerate the alkylation reactions of aromatic compounds with olefins.

In general, the transformation of olefins on zeolite catalysts can be represented as follows [44]:

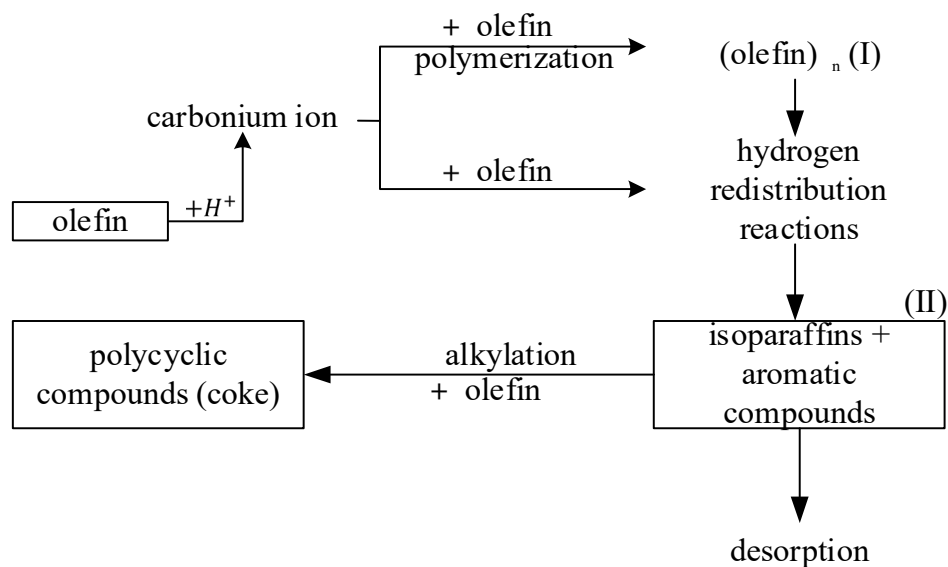


Figure 2.10-Transformation of olefins on zeolite catalysts

Приложение Б Диаграмма Исикавы

