

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

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Разработка математической модели каталитического крекинга вакуумного газойля
УДК 665.752:665.644.2:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д8Б	Межова Мария Юрьевна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Назарова Г.Ю.	К.Т.Н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Мойзес О.Е.	К.Т.Н.		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ
по образовательной программе «Химическая технология переработки нефти и газа»
(направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология»)

Код компетенции	Наименование компетенции
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач
УК(У)-2	способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений
УК(У)-3	способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде
УК(У)-4	способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном и иностранном(-ых) языке(-ах)
УК(У)-5	способен воспринимать межкультурное разнообразие общества в социально-историческом, этическом и философском контекстах
УК(У)-6	способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни
УК(У)-7	способен поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности
УК(У)-8	способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности
УК(У)-9	способен проявлять предприимчивость в практической деятельности, в т.ч. в рамках разработки коммерчески перспективного продукта на основе научно-технической идеи
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	способность и готовность использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности
ОПК(У)-2	готовностью использовать знания о современной физической картине мира, пространственно-временных закономерностях, строении вещества для понимания окружающего мира и явлений природы
ОПК(У)-3	готовность использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире
ОПК(У)-4	владение пониманием сущности и значения информации в развитии современного информационного общества, осознания опасности и угрозы, возникающих в этом процессе, способностью соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны
ОПК(У)-5	владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыками работы с компьютером как средством управления информацией
ОПК(У)-6	владение основными методами защиты производственного персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф, стихийных бедствий
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	способность и готовностью осуществлять технологический процесс в соответствии с регламентом и использовать технические средства для измерения основных параметров технологического процесса, свойств сырья и продукции
ПК(У)-2	готовность применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы

	профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования
ПК(У)-3	готовность использовать нормативные документы по качеству, стандартизации и сертификации продуктов и изделий, элементы экономического анализа в практической деятельности
ПК(У)-4	способность принимать конкретные технические решения при разработке технологических процессов, выбирать технические средства и технологии с учетом экологических последствий их применения
ПК(У)-5	способность использовать правила техники безопасности, производственной санитарии, пожарной безопасности и нормы охраны труда, измерять и оценивать параметры производственного микроклимата, уровня запыленности и загазованности, шума, и вибрации, освещенности рабочих мест
ПК(У)-6	способность налаживать, настраивать и осуществлять проверку оборудования и программных средств
ПК(У)-7	способность проверять техническое состояние, организовывать профилактические осмотры и текущий ремонт оборудования, готовить оборудование к ремонту и принимать оборудование из ремонта
ПК(У)-8	готовность к освоению и эксплуатации вновь вводимого оборудования
ПК(У)-9	способностью анализировать техническую документацию, подбирать оборудование, готовить заявки на приобретение и ремонт оборудования
ПК(У)-10	способность проводить анализ сырья, материалов и готовой продукции, осуществлять оценку результатов анализа
ПК(У)-11	способность выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса
Дополнительные профессиональные компетенции (профессиональные компетенции, установленные университетом)	
ДПК(У)-1	способность планировать и проводить химические эксперименты, проводить обработку результатов эксперимента, оценивать погрешности, применять методы математического моделирования и анализа при исследовании химико-технологических процессов
ДПК(У)-2	готовность изучать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования
ДПК(У)-3	готовность использовать знания фундаментальных физико-химических закономерностей для решения возникающих научно-исследовательских задач, самостоятельного приобретения физических знаний, для понимания принципов работы приборов и устройств, в том числе, химических реакторов
ДПК(У)-4	готовность использовать информационные технологии при разработке проектов
ДПК(У)-5	готовность изучать научно-техническую информацию отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования на английском языке

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

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

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП

(Подпись) _____ (Дата) Мойзес О.Е.
(Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

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

Студенту:

Группа	ФИО
2Д8Б	Межовой Марии Юрьевне

Тема работы:

Разработка математической модели каталитического крекинга вакуумного газойля	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	28-92/с от 28.01.2022 г.

Срок сдачи студентом выполненной работы:	31.05.2022 г.
--	----------------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе (наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).	Объект исследования — процесс каталитического крекинга вакуумного дистиллята. Данные об активности и избирательности псевдооживленных крекирующих катализаторов, составе бензина каталитического крекинга, содержании кокса на катализаторе после регенерации. Технологические параметры процесса на лабораторной установке и промышленной установке.
---	---

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	1) Введение. 2) Анализ современного состояния технологии каталитического крекинга нефтяного сырья. 3) Современные технологии каталитического крекинга нефтяного сырья. 4) Характеристика катализаторов крекинга. 5) Механизм каталитического крекинга. 6) Моделирование процесса каталитического крекинга. 7) Объект и методы исследования. 8) Разработка реакционной схемы превращений в процессе каталитического крекинга для прогнозирования состава газов. 9) Термодинамический анализ реакций процесса каталитического крекинга вакуумного газойля. 10) Формирование реакционной схемы процесса каталитического крекинга. 11) Разработка кинетических уравнений процесса каталитического крекинга. 12) Решение обратной кинетической задачи. 13) Исследование характеристик катализатора крекинга 14) Верификация математической модели. 15) Прогнозные расчеты с применением модели процесса каталитического крекинга. 16) Заключение.
--	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент ОСГН ШБИП, к.э.н., Рыжакина Т.Г.
Социальная ответственность	Старший преподаватель ООД ШБИП, Гуляев М.В.

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	22.02.2022 г.
--	---------------

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д8Б	Межова Мария Юрьевна		

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 18.03.01 Химическая технология
 Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии
 Период выполнения весенний семестр 2021/2022 учебного года

Форма представления работы:

Бакалаврская работа
(ВКР бакалавра/ ВКР специалиста/ ВКР магистра)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	31.05.2022 г.
--	---------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
22.03.2022	Обзор литературы	20
04.04.2022	Объект и методы исследования	10
25.04.2022	Разработка математической модели процесса каталитического крекинга	20
12.05.2022	Верификация и прогнозные расчеты по модели	20
20.05.2022	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
27.05.2022	Социальная ответственность	15

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Назарова Галина Юрьевна	К.Т.Н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Мойзес Ольга Ефимовна	К.Т.Н., доцент		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2Д8Б	Межовой Марии Юрьевне

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	18.03.01 Химическая технология «Технология подготовки и переработки нефти и газа»

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

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

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Определение структуры работы. Расчет трудоемкости выполнения работ. Подсчет бюджета исследования
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Рассчитать показатели финансовой эффективности, ресурсоэффективности и эффективности исполнения

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	03.02.2022
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Рыжакина Татьяна Гавриловна	к.э.н.		03.02.2022

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д8Б	Межова Мария Юрьевна		03.02.2022

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа		ФИО	
2Д8Б		Межовой Марии Юрьевне	
Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	18.03.01 Химическая технология

Тема ВКР:

<i>Разработка математической модели каталитического крекинга вакуумного газойля</i>	
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	Объектом исследования является математическое моделирование процесса каталитического крекинга Область применения: прогнозирование состава и выхода целевых продуктов процесса каталитического крекинга при переработке различного сырья. Рабочая зона: компьютерная аудитория 133 2-го корпуса ТПУ.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при разработке проектного решения/при эксплуатации: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	Рассмотреть специальные правовые нормы трудового законодательства; организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны (научно-исследовательская лаборатория 2 корпуса НИ ТПУ).
2. Производственная безопасность при разработке проектного решения/при эксплуатации: – Анализ потенциально вредных и опасных производственных факторов – Разработка мероприятий по снижению воздействия вредных и опасных факторов	Анализ вредных факторов: – Производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего; – Отсутствие или недостаток необходимого искусственного освещения; – Повышенный уровень шума; – Производственные факторы, связанные с наличием электростатического поля и электромагнитных полей радиочастотного диапазона; – Перенапряжение зрительного анализатора; – Умственное перенапряжение. Анализ опасных факторов: – Пожарная опасность; – Поражение электрическим током;
3. Экологическая безопасность при разработке проектного решения/при эксплуатации	Воздействие на литосферу оказывают влияние загрязнение почв исходными химическими веществами и продуктами реакции, а также отходы,

	образующиеся при выполнении работ: макулатура, пластик, отработанные люминесцентные лампы и т.д
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при разработке проектного решения:	К чрезвычайным ситуациям, которые могут произойти относятся: – пожар; – взрыв; – информационная безопасность.
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
20.02.2022	

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д8Б	Межова Мария Юрьевна		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа состоит из 103 страниц, 22 рисунков, 33 таблицы и 63 источника.

Ключевые слова: каталитический крекинг, катализатор, активность катализатора, математическое моделирование, реакционная схема, крекинг-газ, константа скорости.

Объектом исследования является процесс каталитического крекинга вакуумного газойля.

Цель работы – разработка математической модели процесса каталитического крекинга для прогнозирования показателей работы катализатора для перехода от лабораторной установки к промышленной, а также выхода и состава продуктов.

В процессе исследования выполнены расчёты термодинамических параметров реакций каталитического крекинга с использованием справочных данных и квантово-химических методов анализа. Предложена формализованная схема превращений процесса, ориентированная на прогнозирование индивидуального состава газов крекинга и базирующаяся на данных с лабораторной установки каталитического крекинга и термодинамическом анализе реакций. Разработана математическая модель процесса каталитического крекинга на языке программирования Python, учитывающая изменение активности катализатора и состава сырья, относительная погрешность расчета составила не более 5 % мас. Модель используется для определения кинетических параметров реакций каталитического крекинга при изменении состава и свойств катализатора за счет изменения режимов процесса и догрузки катализатора в систему.

Область применения: промышленные предприятия топливной и нефтехимической отрасли.

Результаты будут использованы при создании модуля непрерывного учета изменения свойств катализатора в модели промышленного процесса.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	14
1 СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И РАЗВИТИЕ ТЕХНОЛОГИИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА.....	17
1.1 Современные технологии каталитического крекинга нефтяного сырья...	17
1.2 Характеристика катализаторов крекинга	23
1.3 Механизм каталитического крекинга	28
1.4 Моделирование процесса каталитического крекинга	31
2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ	35
3 РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ.....	40
3.1 Разработка реакционной схемы превращений в процессе каталитического крекинга для прогнозирования состава газов	40
3.2 Термодинамический анализ реакций процесса каталитического крекинга вакуумного газойля	43
3.3 Формирование реакционной схемы процесса каталитического крекинга	48
3.4 Разработка кинетических уравнений процесса каталитического крекинга	49
3.5 Решение обратной кинетической задачи	52
3.6 Исследование характеристик катализатора крекинга	54
3.7 Верификация математической модели	58
3.8 Прогнозные расчеты с применением модели процесса каталитического крекинга.....	59
4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.....	63
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования	63
4.2 Анализ конкурентных технических решений	64
4.3 SWOT-анализ.....	66
4.4 Планирование работ по научно-техническому исследованию	70

4.4.1 Структура работ в рамках научного исследования	70
4.4.2 Определение трудоемкости выполнения работ	71
4.4.3 Разработка графика проведения научного исследования	72
4.5 Бюджет научно-технического исследования	75
4.5.1 Расчет материальных затрат НТИ	75
4.5.2 Расчёт затрат на специальное оборудование	76
4.5.3 Основная заработная плата исполнителей проекта	77
4.5.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	79
4.5.5 Накладные расходы	79
4.5.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	80
4.6 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	80
5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ	83
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	84
5.2 Производственная безопасность	86
5.2.1 Анализ вредных факторов	86
5.2.2 Разработка мероприятий по снижению воздействия вредных и опасных факторов	87
5.3 Экологическая безопасность	92
5.3.1 Воздействие на литосферу	92
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	93
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	95
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	97

ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на то, что область процесса каталитического крекинга достаточно развита, объем исследований по-прежнему высок из-за изменяющегося сырья и постоянных изменений в рыночных требованиях.

Нефтехимия является самым быстрорастущим источником повышения мирового спроса на сырую нефть. В 2018 году производство основных продуктов нефтехимии составляло 14,0 млн баррелей в сутки мирового спроса на сырую нефть и, по прогнозам, увеличится до 20,0 млн баррелей в сутки к 2050 году или около 50% ожидаемого роста спроса на нефть [1].

В настоящее время на российских предприятиях широко внедряются процессы глубокой переработки нефтяного сырья, в том числе каталитический крекинг, который является одним из основных крупнотоннажных процессов на современном НПЗ, работающих как по топливному, так и по нефтехимическому вариантам при переработке высокомолекулярного нефтяного сырья. Это диктует необходимость разработки ассортимента катализаторов крекинга различного назначения.

На протяжении последних десятилетий сформировалась прочная зависимость российских компаний как от импортных поставок катализаторов, так и систем моделирования, которые применяются в нефтеперерабатывающей отрасли, поэтому вопрос импортозамещения стоит достаточно остро. Например, по катализаторам гидроочистки и гидрокрекинга — ключевым процессам для производства дизельного топлива и глубокой переработки нефти — доля иностранных поставщиков составляет около 100%. Ситуация с каталитическим крекингом лучше — здесь зарубежных поставок порядка 50%.

Как при производстве, так и в процессе эксплуатации катализаторы тестируют в лабораторных условиях, при этом существует проблема прогнозирования показателей процесса при непрерывном изменении свойств катализатора на промышленных установках. Для этого необходимо выявить

взаимосвязи результатов лабораторных испытаний катализаторов с моделью промышленного процесса. Соответственно, актуальна разработка модели, которая будет учитывать изменение свойств катализатора на базе результатов лабораторных испытаний и прогнозировать их влияние на показатели процесса в промышленных условиях.

Кроме того, сегодня наблюдается растущая потребность в газах каталитического крекинга как в нефтехимическом сырье. Легкие олефины являются основными нефтехимическими продуктами, используемыми в производстве полимеров. В этом состоит актуальность прогнозирования состава газа крекинга, зависящего от параметров технологического режима и состава сырья. Особенно остро такая задача стоит для установок, интегрированных с нефтехимическими заводами. Вместе с тем, в литературе ограничены исследования по моделированию процесса каталитического крекинга на основе схемы превращений углеводородов, ориентированной на прогнозирование индивидуального состава газов крекинга.

Поэтому целью работы является разработка математической модели процесса каталитического крекинга для прогнозирования показателей работы катализатора для перехода от лабораторной установки к промышленной, а также выхода и состава продуктов

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- 1) выполнить численные исследования процесса каталитического крекинга, включающие мониторинг, обработку и анализ данных с промышленной и лабораторной установок каталитического крекинга;
- 2) разработать реакционную схему каталитического крекинга, чувствительную к составу сырья и обеспечивающую прогнозирование состава газов крекинга, бензина и количество кокса на основе термодинамического анализа реакций процесса;

- 3) определить кинетические параметры реакций процесса каталитического крекинга в лабораторных условиях, выявить их взаимосвязь с характеристиками катализатора;
- 4) разработать математическую модель процесса каталитического крекинга на основе полученной кинетической модели;
- 5) проверить модель на адекватность, соответствие лабораторным данным;
- 6) исследовать влияние состава сырья и технологических параметров ведения процесса на выход продуктов.

1 СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И РАЗВИТИЕ ТЕХНОЛОГИИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА

В настоящее время на мировых предприятиях широко используются процессы глубокой переработки нефтяного сырья, в том числе гидрокрекинг, термический крекинг, каталитический крекинг, которых является одним из основных крупнотоннажных процессов на современных НПЗ, работающих как по топливному, так и по нефтехимическому вариантам при переработке высокомолекулярного нефтяного сырья. Более того, в последние годы потребность в производстве продуктов нефтехимии (пластики, дезинфицирующие средства, поверхностно-активные вещества и др.) существенно возросла, что связано, в том числе с ростом их потребления, в связи с COVID-19 [2-4]. В этой связи процесс каталитического крекинга рассматривают как один из основных процессов производства сырья для нефтехимии, наряду с процессом пиролиза углеводородов.

1.1 Современные технологии каталитического крекинга нефтяного сырья

С момента своего появления в начале 1940-х годов технология FCC прошла несколько этапов развития. Процесс FCC обычно совершенствуется за счет объединения разработок в области катализатора, технологии процесса и оборудования (конструкции реактора и регенератора).

Традиционно в России технологию каталитического крекинга используют для получения высокооктанового бензина. Однако, высокий спрос на другие продукты каталитического крекинга, такие как пропилен и бутилены, важное сырье для нефтехимии, привел к изменению парадигмы в операционных стратегиях с огромным откликом на выбор сырья и катализатора, а также реконфигурацию реактора.

В зависимости от потребностей рынка целевым продуктом процесса может быть бензиновая фракция, легкие олефины, а также легкий газойль, использующийся в качестве сырья процесса компаундирования дизельного топлива, что более актуально для европейских стран с высокой долей автомобилей с дизельными двигателями.

В последние несколько десятилетий были предприняты большие усилия для получения легких олефинов каталитическими процессами для достижения рационального использования тяжелого сырья или побочных продуктов нефтехимии.

С этой целью соответствующие технологии FCC, такие как PetroFCC, MAXOFIN, DCC, MIP - CGP и TMP, принимаются нефтехимическими заводами по всему миру [5-7].

В работе [6] рассмотрена технология максимизации изо-парафинов (MIP), разработанная Научно-исследовательским институтом переработки нефти (RIPP), которая улучшила качество бензина для удовлетворения требований спецификации автомобильного бензина. Концепция, состоящая в том, что две разные реакционные зоны включают зону крекинга и зону конверсии, предлагается в качестве основы MIP в ходе исследований по химии реакций каталитического крекинга с псевдооживленным слоем (FCC). Процесс MIP характеризуется применением нового последовательного двухзонного лифтбокса в сочетании с запатентованным катализатором и инженерной техникой. Разработанный процесс MIP может не только повысить выход бензина или выход бензина и пропилена, но также производить бензин с более высоким содержанием изопарафинов и более низким содержанием серы. Минимальная потеря октанового числа достигается, когда бензин MIP обрабатывается последующей технологией десульфурации (RSDS/S Zorb). Комбинация процессов MIP и RSDS/S Zorb создает очень конкурентоспособный способ, который отличается от технического способа, используемого другими развитыми странами, для повышения качества автомобильного бензина с

наименьшими экономическими затратами в Китае. Всего за одно десятилетие производственные мощности установок MIP составили около 60 % всей внутренней производственной мощности установок FCC. Процесс MIP постепенно становится новым поколением технологии FCC.

Глубокий каталитический крекинг (DCC), разработанный Научно-исследовательским институтом переработки нефти (RIPP) Sinopet, представляет собой процесс псевдоожиженного каталитического крекинга, в котором используется запатентованный катализатор для селективного крекинга широкого спектра тяжелого сырья для получения легких олефинов [8]. Процесс, разработанный RIPP из Sinopet, был коммерчески доказан с десятью установками, построенными с 1990 года, семь в Китае и другие в Таиланде, Саудовской Аравии и Индии. Процесс DCC-I аналогичен обычному FCC с модифицированным реактором, состоящим из лифт-реактора и псевдоожиженного плотного слоя катализатора. Плотный слой приводит к более длительному времени пребывания при высоком соотношении катализатора к сырью, способствуя вторичному крекингу первичных промежуточных продуктов, что, как считается, увеличивает производство пропилена за счет выхода бензина. В системе DCC-II плотный слой удаляется, чтобы обеспечить гибкость выхода пропилена и бензина в соответствии с рыночным спросом.

Реактор обычного DCC представляет собой лифт-реактор с псевдоожиженным плотным слоем, который может увеличить производство пропилена, а также может вывести более высокий выход сухого газа и кокса из-за более низкой активности катализатора и чрезмерного градиента температуры в реакторе DCC. Чтобы улучшить селективность желаемых продуктов, RIPP разработала процесс DCC-plus, который может оптимизировать градиент температуры и активности катализатора вдоль реактора путем введения высокотемпературных и активных катализаторов в реактор с псевдоожиженным слоем через второй лифт-реактор. На опытной установке проведена серия экспериментов по технологии DCC-plus [9]. Экспериментальные результаты

показали, что по сравнению с технологией DCC выходы жидкого нефтяного газа (LPG), пропилена и бутиленов в процессе DCC-plus значительно увеличились, в то же время выходы сухого газа и кокса были снижены.

Процесс каталитического пиролиза (CPR), также разработанный Научно-исследовательским институтом переработки нефти (RIPP) из Синорес, является продолжением DCC, который дает повышенный выход этилена при сохранении производства пропилена с разумной скоростью. Основные особенности этого процесса заключаются в следующем [8, 10]:

- разработан новый каталитический материал, который снижает требуемую энергию активации, что позволяет проводить реакцию при значительно более низкой температуре по сравнению с температурой парового крекинга, а также способствует получению легких олефинов;
- катализатор обладает отличной гидротермической стабильностью и стойкостью к истиранию;
- условия эксплуатации CPR более жесткие, чем условия для каталитического крекинга остаточного сырья (RFCC), до такой степени, что это позволяет эксплуатировать его на существующих простаивающих установках RFCC без риска повреждения структуры установки;
- тепло, необходимое для реакции крекинга, может быть обеспечено сжиганием кокса в регенераторе, что делает реакцию полностью самоподдерживающейся;
- специально разработанный очиститель, расположенный между регенератором и реактором, удаляет дымовые газы, переносимые из регенератора.

PetroFCC [8, 11] процесс лицензирован UOP LLC и оснащен технологией RxCAT. Технология RxCAT предполагает рециркуляцию части закоксованного катализатора в обход регенератора в зону смешения сырья и регенерированного катализатора, что способствует повышению степени превращения и селективности процесса крекинга. Процесс дает высокие выходы пропилена,

легких олефинов и ароматических соединений для нефтехимических применений из сырья, которое может включать обычное сырье FCC (вакуумный газойль) и высококипящее или остаточное сырье. Сырье вступает в контакт со смешанным катализатором, в лифт-реакторе в очень тяжелых условиях обработки. Смешанный катализатор состоит из регенерированного и коксованного катализаторов.

В процессе PetroFCC используется реакционная зона с высокой конверсией и коротким временем контакта, которая работает при повышенных температурах на выходе из реактора и низких парциальных давлениях. Он также включает в себя относительно высокое количество селективной по форме добавки цеолитного катализатора с выбранным стандартным катализатором FCC в качестве баланса. Процесс PetroFCC включает в себя систему распределения сырья Optimix от UOP, систему вихревой сепарации (VSS), технология вихревой сепарации, усовершенствованная технология псевдооживленного (AF) отработанного катализатора и технология RxCat для повышения производства легких олефинов и/или ароматических соединений. RxCat является ключевой дифференцирующей технологией процесса PetroFCC по сравнению с альтернативной технологией.

Для повышения выхода и селективности по пропилену и снижения выхода сухого газа процесс PetroFCC предусматривает [8]:

- катализатор PetroFCC состоит из двух компонентов, первый компонент содержит крупнопористый цеолит, такой как цеолит Y-типа, второй компонент включает цеолиты со средними или мелкими порами, такие как ZSM-5 или ST-5, которые обладают высокой устойчивостью к коксованию;
- температура на входе в лифт-реактор снижается примерно до 620 °C за счет охлаждения регенерированного катализатора рециркулируемым закоксованным катализатором. Отношение катализатора к сырью может быть увеличено до такой степени, чтобы это не повлияло на тепловой баланс установки;

- для повышения производства легких олефинов используют низкое парциальное давление углеводородов ($70 \div 210$ кПа (абс.)) и повышенные температуры ($540 \div 620$ °C);
- второй лифт-реактор, который использует общий регенератор с первичным лифт-реактором, предназначен для повторного крекинга высших олефинов, содержащихся нефти.

Процесс SUPERFLEX [12-15] – это запатентованная технология компанией ARCO Chemical Technology, и предлагается исключительно по лицензии компанией Kellogg Brown and Root (KBR). Используют систему FCC с запатентованным катализатором для преобразования малоценного сырья с высоким содержанием олефинов в нефтехимические продукты, такие как пропилен и этилен. Исходным сырьем могут быть богатые олефинами легкие углеводороды с углеродным диапазоном $C_4 - C_8$, а идеальным исходным сырьем являются потоки C_4 и C_5 , образующиеся в установке парового крекинга. Диолефины и ацетилены в сырье могут быть частично гидрированы до олефинов, или диолефины могут быть извлечены для других нефтехимических применений. Другими возможными видами сырья являются рафинат МТБЭ-2, рафинат завода по производству ароматических углеводородов и потоки нефтеперерабатывающих заводов, богатые олефинами, такие как легкая нефть из FCCU, установки коксования или висбрекинга.

Потоки нефтепереработки не требуют предварительной обработки или гидрирования диенов – нет ограничений на содержание ароматических соединений или диенов в сырье.

Система SUPERFLEX FCC аналогична системе обычной установки FCC и состоит из реактора с восходящим потоком, корпуса регенератора и блоков для сжатия воздуха, обработки катализатора, обработки дымовых газов и рекуперации тепла исходного и выходящего потока.

Процесс SUPERFLEX работает примерно при температуре $500 \div 700$ °C и давлении $100 \div 200$ кПа, поэтому происходит превращение парафинов и

нафтеноев вместе с олефинами. Это позволяет работать в режиме полной рециркуляции и производить более высокие выходы пропилена и этилена. Отношение пропилен к этилену составляет примерно 2:1.

Таким образом, в качестве сырья процесса каталитического крекинга может быть использовано сырьё разного рода – от различных нефтяных фракций до спиртов и растительных масел. При этом преимущественно процессу подвергаются вакуумный газойль и тяжёлые нефтяные остатки. Также имеет место смешение различных веществ для получения сырья оптимального состава, то есть позволяющего получать необходимые продукты. Так, например, могут быть смешаны вакуумные газойли, полученные из разных нефтей (с разных месторождений), равным образом в процесс могут быть задействованы смеси вакуумного и атмосферного остатков. Стоит отметить, что выбор одной из вариаций существующих технологических процессов зависит от выбранных целевых продуктов и свойств и состава исходного сырья. Поэтому в связи с увеличением веса нефтяного сырья особый интерес вызывают исследования, направленные на изучение процессов глубокой конверсии с использованием сырья различной природы и состава.

Эффективность процесса каталитического крекинга в значительной степени определяется активностью, селективностью и стабильностью используемых микросферических цеолитсодержащих катализаторов, состав и характеристики которых изменяются в цикле «реакция–регенерация», и во многом определяют спектр получаемых продуктов, их соотношение и качество.

1.2 Характеристика катализаторов крекинга

В настоящее время общепризнано, что для крекинга углеводородов необходимо использовать кислотный катализатор, т.е. катализатор, способный образовывать на своей поверхности карбокатионы. Кислоты в растворе можно использовать, если сила их кислоты достаточно высока. Однако технические

проблемы, такие как коррозия, разделение фаз и извлечение катализатора, делают жидкий или гомогенный каталитический крекинг нецелесообразным. Гомогенные катализаторы, такие как галогениды металлов и, в частности, трихлорид алюминия, фактически были испытаны на коммерческой основе и от них отказались из-за эксплуатационных трудностей и больших потерь трихлорида алюминия в образующихся смолистых остатках [16].

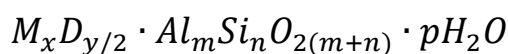
Альтернативой гомогенным катализаторам крекинга является гетерогенный катализатор крекинга. Первыми такими материалами, использованными в качестве катализаторов, были природные глины. К сожалению, несмотря на их активность, такие катализаторы очень быстро дезактивируются, и только после того, как был разработан процесс непрерывной регенерации, было достигнуто практическое техническое решение проблемы крекинга нефти.

Как только была достигнута регенерация катализатора путем выжигания углеродистых остатков, образующихся во время реакции крекинга, значительные усилия были направлены на улучшение доступных природных глиняных катализаторов. Первое улучшение было достигнуто кислотной обработкой доступных природных глин. Однако вскоре было обнаружено, что искусственные глины, такие как аморфные синтетические комбинации алюмосиликата, магнезимального кремнезема и диоксида циркония, также обладают интересными каталитическими свойствами. Хотя синтетический алюмосиликат является более дорогостоящим, чем природные глины, он обладает более высокой активностью и дает лучшее распределение продукта. В итоге из всех доступных силикатов наиболее интересным составом оказался алюмосиликат. Силикагель сам по себе не проявляет активности или кислотности; однако, как только в смесь вводятся небольшие количества оксида алюминия, кислотность начинает повышаться и активность материала как катализатора крекинга повышается.

Далее будет подробно рассмотрена структура цеолитных катализаторов каталитического крекинга.

Кристаллические катализаторы, называемые цеолитами, представляют собой серию твердых веществ со свойствами, весьма желательными для составов катализаторов. Они обладают высокой адсорбционной способностью, большой площадью поверхности и могут содержать кислотные центры различной силы. В кристаллических алюмосиликатах все атомы алюминия и кремния образуют тетраэдры, связанные общими атомами кислорода.

Общая формула состава такого цеолита может быть записана как [17]



Принуждение алюминия к тетраэдрическим конфигурациям приводит к появлению отрицательных зарядов на каждом таком атоме алюминия. М и D представляют собой одно- и двухвалентные катионы, которые уравнивают такие заряды на алюминии в кристаллической структуре [18, 19].

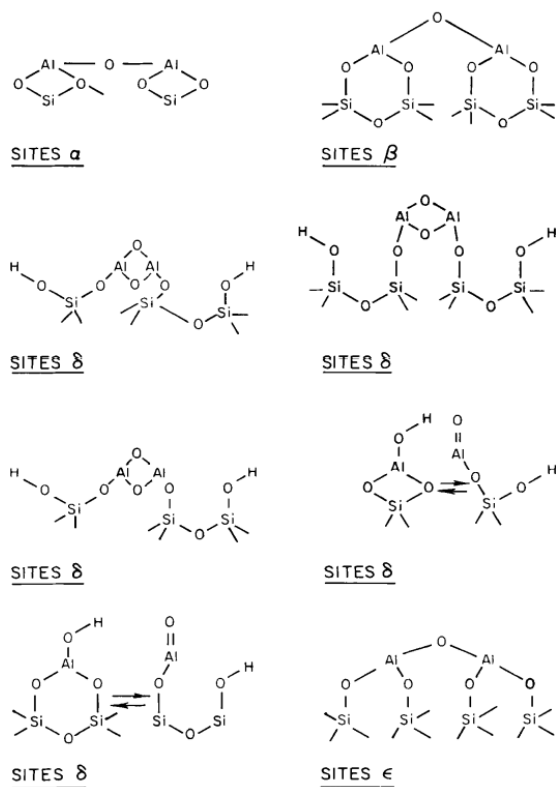


Рисунок 1.1 – Возможные структуры в аморфном кремнеземе оксида алюминия [17]

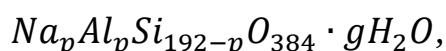
Эти подвижные катионы могут быть заменены путем контактирования твердого цеолита с растворами других подходящих катионов. Ионный обмен, в свою очередь, приводит к изменению кислотности активных центров на материале. На рисунке 1.1 показаны возможные структуры в аморфном кремнеземе оксида алюминия.

Известно около 40 природных цеолитов, только небольшая часть всех этих цеолитов в настоящее время представляет коммерческий интерес, как показано в таблице 1.1. Из коммерчески интересных материалов, перечисленных в таблице 1.1, в настоящее время в качестве коммерческих катализаторов крекинга используются цеолиты X и Y.

Таблица 1.1 – Использование основных видов цеолитов [17]

Природный цеолит	Использование	Синтетический цеолит	Использование
Морденит	Катализ и очистка воды	A	Адсорбция
Хабазит		X	Крекинг
Эрионит		Y	Крекинг
Клиноптило лит		L	Адсорбция
		Z	Конверсия метанола в бензин (MTG)

Цеолиты X и Y могут быть представлены формулой



где p колеблется от 96 до 74 для X и от 74 до 48 для Y, а g изменяется примерно от 270 до 250 по мере уменьшения содержания алюминия. В обоих цеолитах основными строительными блоками являются алюмосиликатные тетраэдры, расположенные в вершинах усеченного октаэдра. Усеченный октаэдр, известный как содалитовая ячейка, содержит 8 гексагональных граней, 6 квадратных граней, 24 вершины и 36 ребра. Таким образом, содалитовые ячейки являются вторичными строительными блоками цеолита. На следующем этапе строительства четыре содалитовые ячейки располагаются в

тетраэдрической конфигурации вокруг пятой содалитовой ячейки. Пять единиц соединены шестиугольными призмами, как показано [17] на рисунке 1.2, и составляют третичный и характерный строительный блок цеолита X и Y.

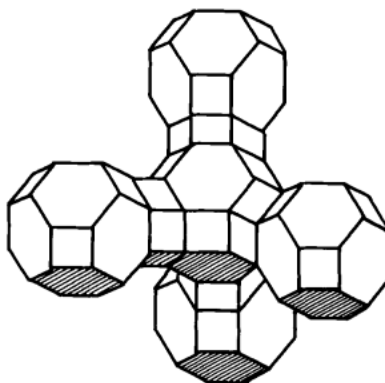


Рисунок 1.2 – Третичный структурный элемент цеолитов X и Y

Как упоминалось выше, отрицательные заряды на тетраэдрически координированном алюминии уравниваются одновалентными катионами, которые присутствуют вблизи каждого атома алюминия. Существование обменных катионов является ключом к получению цеолитов с достаточной кислотностью для использования в качестве катализаторов крекинга.

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

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

большей устойчивостью к термическим воздействиям, но меньшей каталитической активностью.

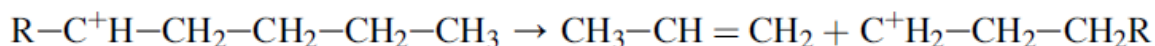
Резюмируя всё вышесказанное, можно сделать заключение, что развитие производства катализаторов для каталитического крекинга, а также изучение каталитической активности цеолитов являются наиболее передовыми областями в развитии процесса каталитического крекинга нефтяного сырья в мире. Это объясняется тем, что за счёт катализатора можно значительно интенсифицировать процесс крекирования путём повышения степени превращения сырья, уменьшением скорости коксообразования и повышением селективности процесса.

1.3 Механизм каталитического крекинга

Сложный состав тяжелого сырья означает, что на катализаторе может протекать большое количество реакций, как параллельно, так и последовательно. Это связано с наличием множества активных центров на гетерогенных катализаторах. Эти участки отличаются не только кислотной прочностью, но и природой. На этих кислотных участках могут происходить различные реакции карбокатионов, включая крекинг, изомеризацию, перенос водорода, перенос алкила и образование связи C-C, а также образование кокса. Однако преобладают реакции крекинга крупных молекул.

Реакция крекинга или бета-разрыв C-C-связи представляет собой разделение двух атомов углерода у положительного заряженного иона – карбониевого или карбениевого иона. Причиной высокой вероятности разрыва именно бета-связи молекулы является то, что по сравнению с альфа-разрывом, бета-разрыв требует меньше энергии, что является также причиной того, что углеводороды с короткой цепочкой обладают меньшей реактивностью, в сравнении с длинноцепочечными [20].

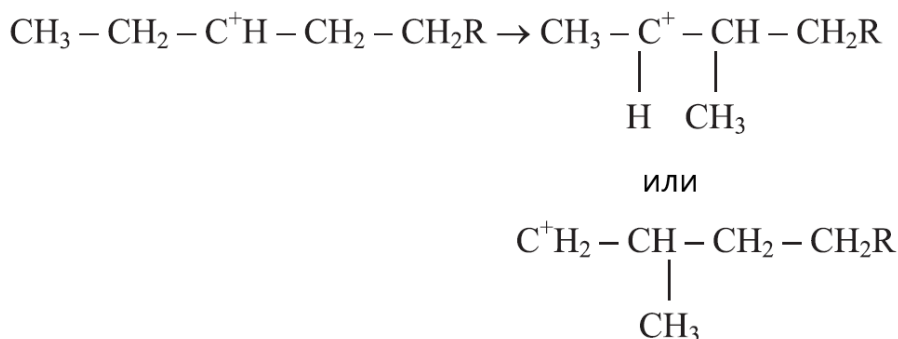
В результате бета-разрыва образуются олефин и новый карбениевый ион:



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

Реакция бета-разрыва является мономолекулярной и обладает положительным тепловым эффектом, то есть константа скорости реакции увеличивается с повышением температуры в реакционной среде.

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



Протекание реакций изомеризации в процессе каталитического крекинга нефтяного сырья обладает рядом преимуществ [20]:

- так как изопарафины обладают большим октановым числом, по сравнению с молекулами углеводородов, имеющих прямую цепь, то реакция изомеризации оказывает положительное влияние на получаемую бензиновую фракцию, повышая её октановое число, образовавшимися изопарафинами;

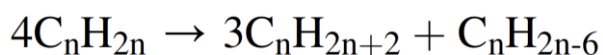
- образующиеся изопарафины понижают температуру помутнения в получаемой дизельной фракции;
- формирующиеся в результате реакции изомеризации изопарафины C_3/C_4 являются высокоценным сырьём в топливной промышленности и используются для получения МТБЭ (метил-трет-бутиловый эфир) и ТАМЭ (метил-трет-амиловый эфир – добавки в топливо, повышающие октановое число и уменьшающие выбросы).

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

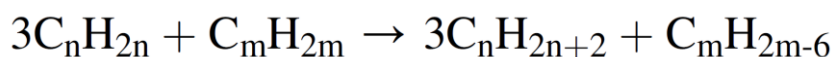
Реакция, в которой участвуют два олефина состоит из следующих стадий:

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

В общем виде данную реакцию можно записать следующим образом:



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



На катализаторах, в состав которых входят редкоземельные металлы, вероятность протекания реакции переноса водорода значительно повышается, за счёт образования так называемых «мостиков» между двумя или тремя кислотными центрами, на которых в последствии и будут адсорбироваться молекулы олефинов и нафтеннов.

Из-за образования молекул алканов можно сделать вывод, что протекание реакций переноса водорода повышает выход и стабильность бензиновой фракции.

1.4 Моделирование процесса каталитического крекинга

Сегодня, для решения взаимосвязанных и многофакторных задач прогнозирования состава и свойств продуктов и оптимизации промышленных процессов нефтепереработки широко применяются методы математического моделирования [21-24]. Поскольку процессы нефтепереработки являются многокомпонентными и на поверхности катализаторов протекает множество химических реакций, в основе разрабатываемых моделей положены формализованные схемы превращений реагентов.

Разработка формализованной схемы превращений углеводородов в процессах нефтепереработки является важнейшим этапом математического моделирования, определяющим прогнозирующую способность модели для решения требуемых производственных задач (прогнозирование состава и выхода бензиновой, дизельной фракции, газов крекинга и др.) и обеспечивающим высокую адекватность модели.

Существуют различные подходы к формализации химических превращений в процессе каталитического крекинга в зависимости от чувствительности лабораторных методов и требуемой предсказательной силы. В основном реализуют подход к моделированию каталитического крекинга путем

формирования псевдокомпонентов широкого фракционного состава и кокса [22, 23, 25]. Существуют 4-, 5-, 6-, 11-ти компонентные схемы по температурам кипения, потокам установки с отдельной стадией регенерации и др. [26–28], поскольку моделирование процессов глубокой переработки нефтяного сырья осложняется трудностью идентификации углеводородного состава тяжелых фракций ($350 \div 570+^{\circ}\text{C}$).

Такой подход позволяет определить весовую долю псевдокомпонентов широкого фракционного состава, но не учитывает реакционную способность углеводородов внутри выделенных групп и групповые характеристики перерабатываемого сырья, при этом углеводородный состав каждого псевдокомпонента разнообразен [29]. Хотя с увеличением температуры кипения сырья каталитического крекинга, содержание кокса на катализаторе возрастает, поскольку увеличивается содержание ароматических и смолистых соединений, такой подход не учитывает образование кокса как результат последовательных бимолекулярных реакций с участием углеводородов различных групп (конденсация, диеновый синтез, перенос водорода и др.). Углеводородный состав значительно влияет на выход кокса, дезактивацию катализаторов, вызывая потерю их эксплуатационных свойств, выход и состав продуктов, что необходимо учитывать при моделировании процесса.

Другой подход с использованием комбинированных моделей учитывает не только взаимодействия псевдокомпонентов, но и химические превращения основных групп углеводородов сырьевого потока установки каталитического крекинга (алканы, циклоалканы, арены, замещенные арены для легких и тяжелых фракций нефти, а также группы кокс+газ и бензин) [30–32]. Такой подход характеризуется информацией о механизме реакции с усредненной реакционной способностью групп углеводородов и позволяет прогнозировать конверсию сырья, групповой состав продуктов крекинга, выход светлых фракций газа и кокса, что позволяет оценить степень дезактивации катализатора от большого числа факторов процесса каталитического крекинга.

Комбинированные и поточные схемы превращений углеводородов в процессе каталитического крекинга совершенствуются путем деления компонентов системы на различные реакционные группы, введением в механизм учета отложений кокса на катализаторе и др. [33]. Так, например авторами [34,35] в схему было введено разделение сырья на смолы, асфальтены, насыщенные и ароматические углеводороды, а также разделение стадии образования кокса на две стадии образования газа. Подробное описание химических превращений углеводородов в процессе каталитического крекинга с учетом состава катализатора и прогнозирования содержания кокса на поверхности катализатора выполнено в работах [36, 37].

Другая направленность процесса, обусловленная растущей потребностью в газах крекинга как нефтехимическом сырье при расширении использования для производства алкилатов, эфиров, полимеризатов, высококачественных бензинов, обуславливает актуальность прогнозирования состава газов крекинга в зависимости от большого числа параметров технологического режима, состава сырья и дезактивации катализаторов и оптимизации сопряженных многоступенчатых процессов нефтепереработки и нефтехимии. Особенно остро эта проблема стоит для установок, интегрированных с нефтехимическими заводами.

Вместе с тем, в литературе ограничены исследования по моделированию процесса каталитического крекинга на основе схемы превращений углеводородов, ориентированной на прогнозирование индивидуального состава газов крекинга, группового состава бензиновой фракции и кокса. Так, в работе [38] в основе модели положена формализованная схема с участием псевдокомпонентов широкого фракционного состава (вакуумный газойль, бензин, кокс 1, кокс-2), а также легких олефинов — этилена и пропилена, при этом не учитывает углеводородный состав сырья и не позволяет прогнозировать содержание таких компонентов как изобутан и алкенов C_4 , содержание которых в бутан-бутиленовой фракции составляет ок.40 % мас. Работа [39] позволяет

рассчитать содержание 1,3-бутадиена и бутиленов, образующихся в процессе FCC, игнорируя превращение газойля в изобутан (содержание в ББФ ок.40 % мас), н-бутан, метан (содержание в сухом газе более 20 % мас.).

Наиболее детализированный подход к моделированию гетерогенных процессов объединен под названием «Single-event kinetic modeling approach», развитый почетным профессором химической инженерии Гентского университета, Бельгия, и профессор-исследователь Техасского университета A&M в начале 2000 г [40]. Сегодня этот подход широко применен авторами к процессам гидрокрекинга и олигомеризации с учетом групповой реакционной схемы и механизма превращений групп углеводородов. В 2003 году такой подход был применен к моделированию процесса каталитического крекинга путем учета стадии коксообразования и реакций через элементарные стадии с участием карбкатионов, с учетом теории переходных состояний и термодинамических ограничений с целью сокращения размерности модели [41]. Реакционная схема разработанной модели каталитического крекинга вакуумного газойля, включает н-парафины (отдельно до C₄₀), i-парафины; н-олефины; i-олефины; моно-, ди-, три- и четырехкольцевые нафтенy, ароматические соединения и ароматические олефины; и моно-, ди- и трехкольцевые нафтенoароматические соединения. В виду отсутствия детальных данных по составам сырья, авторы используют гаусовское распределение для расчета распределения псевдокомпонентов.

Таким образом, как учет кинетических параметров работы катализатора, так и создание математической модели пригодной для прогнозирования содержания углеводородов бензинового ряда и газов крекинга актуальны, как с точки зрения оптимизации процессов компаундирования бензинов, так и нефтехимической обработки сырья.

4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

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

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

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

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

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

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

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

В данном случае карта сегментирования будет выглядеть следующим образом (таблица 4.1).

Таблица 4.1 – Карта сегментирования рынка услуг по разработке компьютерных моделирующих систем

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

 – «Тюменьгипротранс»
  – «Самара НИПИ нефть»
  – «Институт проблем нефти и газа РАН»

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

4.2 Анализ конкурентных технических решений

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения. Подобный анализ необходимо проводить систематически, так как рынки находятся в постоянном движении и нужно постоянно подстраиваться под новые условия.

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

На данный момент лидирующими компаниями, предлагающими КМС являются «KBC Advanced Technologies» и «Aspen Tech». В таблице 4.2 представлена оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок).

Таблица 4.2 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

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

Условные обозначения: ϕ – предлагаемая разработка; k_1 – КМС компании «KBC Advanced Technologies»; k_2 – КМС компании «Aspen Tech».

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \times B_i$$

где K – конкурентоспособность вида;

B_i – вес критерия (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

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

4.3 SWOT-анализ

Далее для определения сильных и слабых сторон предлагаемой разработки, а также возможностей и угроз, которые могут появиться при выведении на рынок, проводится SWOT-анализ. SWOT представляет собой комплексный анализ научноисследовательского проекта для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Сильные стороны – это факторы, которые положительно сказываются на развитии проекта. Сюда обычно включают все, что превращает функционирование в успешную и конкурентную работу.

Слабые стороны – это недостаток, упущение или ограниченность научно-исследовательского проекта, которые препятствуют достижению его целей. Это то, что плохо получается в рамках проекта или где он располагает недостаточными возможностями или ресурсами по сравнению с конкурентами. Возможности включают в себя любую предпочтительную ситуацию в настоящем или будущем, возникающую в условиях окружающей среды проекта: тенденцию, изменение или предполагаемую потребность, которая поддерживает спрос на результаты проекта и позволяет руководству проекта улучшить свою конкурентную позицию.

Угроза представляет собой любую нежелательную ситуацию, тенденцию или изменение в условиях окружающей среды проекта, которые имеют разрушительный или угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем. В качестве угрозы может выступать барьер, ограничение или что-либо еще, что может повлечь за собой проблемы, разрушения, вред или ущерб, наносимый проекту.

Матрица SWOT-анализа представлена в таблице 4.3.

Таблица 4.3 – Матрица SWOT-анализа

Сильные стороны	Возможности во внешней среде
С1. Экономичность и энергоэффективность технологии. С2. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями. С3. Наличие бюджетного финансирования.	В1. Использование инновационной инфраструктуры НИ ТПУ. В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт. В3. Повышение стоимости конкурентных разработок.
Слабые стороны	Угрозы внешней среды
Сл1. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров. Сл2. Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца. Сл3. Отсутствие инжиниринговой услуги, способной обучить работать в рамках проекта.	У1. Появление более эффективных разработок у конкурентов. У2. Развитая конкуренция технологий производства. У3. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции.

Второй этап анализа состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений. В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Возможно использование этой матрицы в качестве одной из основ для оценки вариантов стратегического выбора. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон

возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-».

В соответствии с этим была построена интерактивная матрица проекта, представленная в таблицах 4.4, 4.5.

Таблица 4.4 – Интерактивная матрица сильных и слабых сторон и возможностей

	Сильные стороны				Слабые стороны		
Возможности проекта		C1	C2	C3	Сл1	Сл2	Сл3
	B1	+	+	+	-	-	+
	B2	+	+	0	-	-	-
	B3	+	+	+	-	-	-

Таблица 4.5 – Интерактивная матрица сильных сторон и слабых сторон и угроз

	Сильные стороны				Слабые стороны		
Угрозы проекта		С1	С2	С3	Сл1	Сл2	Сл3
	У1	+	+	0	0	+	-
	У2	+	+	0	-	-	-
	У3	0	+	0	-	-	-

В результате анализа интерактивной матрицы проекта, представленной в таблицах 4.4, 4.5, были определены следующие сильные коррелирующие стороны и возможности: B1C1C2C3; B2C1C2 и B3C1C2C4.

Корреляция сильных сторон и угроз: У1C1C2; У2C1C2 и У3C2.

Корреляция слабых сторон проекта и его возможностей: B1Сл3.

Корреляция слабых сторон и угроз: У1Сл2.

Третьим этапом анализа была составлена итоговая матрица SWOT-анализа, приведённая в таблице 4.6.

В результате проведения SWOT-анализа установили, что проектируемый продукт обладает рядом достоинств, среди которых основными являются повышенная эффективность, относительно разработок конкурентов, а также низкая цена. Таким образом, в ходе продвижения продукта на рынке необходимо постоянно совершенствовать предлагаемую разработку путём постоянных вложений в научные исследования, но при этом придерживаться ценовой

политики, позволяющей потребителям приобретать продукт по доступной цене. Сохранению относительно низкой цены способствует вовлечение в исследования бюджетных средств.

Таблица 6 – Итоговая матрица SWOT-анализа

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

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

4.4 Планирование работ по научно-техническому исследованию

4.4.1 Структура работ в рамках научного исследования

Планирование комплекса предполагаемых работ осуществляется в следующем порядке:

- определение структуры работ в рамках научного исследования;
- определение участников каждой работы;
- установление продолжительности работ;
- построение графика проведения научных исследований.

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой могут входить научные сотрудники и преподаватели, инженеры, техники и лаборанты, численность групп может варьироваться. По каждому виду запланированных работ устанавливается соответствующая должность исполнителей.

Примерный порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведён в таблице 4.7.

Таблица 4.7 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Исполнитель
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
	2	Выбор направления исследования	Руководитель, студент
	3	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, студент

Продолжение таблицы 4.7

Теоретические и экспериментальные исследования	4	Составление литобзора ВКР	Студент
	5	Составление формализованной схемы превращений	Руководитель, студент
	6	Разработка математической модели	Руководитель, студент
	7	Проведение расчётов с использованием разработанной математической модели	Студент
	8	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Студент
Обобщение и оценка результатов	9	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, студент
	10	Обсуждение результатов	Руководитель, студент
Разработка технической документации и проектирование	11	Оформление пояснительной записки ВКР	Студент
	12	Рецензирование	Руководитель
Защита ВКР	13	Презентация	Студент
	14	Защита ВКР	Студент

4.4.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаях образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

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

$$t_{oji} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5},$$

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

$t_{\min i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы, чел.-дн.;

$t_{\max i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы, чел.-дн.;

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

$$T_{pi} = \frac{t_{ожи}}{ч_i},$$

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

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

$ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

4.4.3 Разработка графика проведения научного исследования

Наиболее удобным и наглядным представлением проведения научных работ является построение ленточного графика в форме диаграммы Ганта.

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

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

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}},$$

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

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

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

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

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

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

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

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

Расчет коэффициента календарности:

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

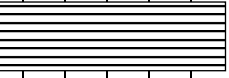
Временные показатели проведения научного исследования представлены в таблице 4.8.

Таблица 4.8 – Временные показатели проведения научного исследования

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

На основе таблицы временных показателей проведения научного исследования был построен календарный план-график проведения НИОКР по теме (таблица 4.9). Для удобства месяца в диаграмме были разбиты на декады (10 дней).

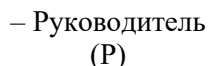
Таблица 4.9 – Календарный план-график проведения НИОКР

Наименование этапа	Исп.	T_{k_i} кал. дни	Продолжительность работ																							
			Ноябрь			Дек.			Янв.			Фев.			Март			Апрель			Май			Июнь		
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
Составление и утверждение технического задания	Р	4																								
Выбор направления исследования	Р	10																								
	С	10																								
Календарное планирование работ по теме	Р	5																								
Составление литературного обзора ВКР	С	13																								
Составление формализованной схемы превращений	Р	19																								
	С	27																								
Разработка математической модели	Р	56																								
	С	71																								
Проведение расчётов с использованием разработанной математической модели	С	30																								
Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	С	21																								
Оценка эффективности полученных результатов	Р	7																								
	С	5																								
Обсуждение результатов	Р	6																								
	С	6																								

Окончание таблицы 4.9

[illegible]

Условные обозначения:



4.5 Бюджет научно-технического исследования

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением. В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

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

4.5.1 Расчет материальных затрат НТИ

Данный подраздел включает стоимость всех материалов, используемых при разработке проекта.

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$З_{\text{м}} = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m \Pi_i \cdot N_{\text{расх}i}$$

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

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

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

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Величина коэффициента (k_T) принимается как 15 % от стоимости материала.

Материальные затраты, необходимые для данной разработки, представлены в таблице 4.10.

Таблица 4.10 – Материальные затраты проекта

Наименование	Единица измерения	Количество			Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (З _м), руб.		
		Исп.1	Исп.2	Исп.3		Исп.1	Исп.2	Исп.3
Блокнот	рубль	3	3	3	90	270	270	270
Ручка	рубль	10	10	10	25	250	250	250
Бумага	рубль	2	2	2	600	1200	1200	1200
Флеш-карта	рубль	1	1	1	670	670	670	670
Принтер(МФУ)	рубль	1	1	1	8000	8000	8000	8000
Картридж для принтера (ч/б)	рубль	1	1	1	2890	2890	2890	2890
Электроэнергия	кВт*ч	250	300	350	3,85	962,5	1155	1347,5
Итого						14242,5	14435	14627,5

4.5.2 Расчёт затрат на специальное оборудование

Затраты, связанные с приобретением специального оборудования, необходимого для проведения работ по теме исследования, приведены в таблице 4.11.

Таблица 11 – Расчёт бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Количество			Цена за единицу, руб.	Затраты на материалы, (Зм), руб.		
		Исп.1	Исп.2	Исп.3		Исп.1	Исп.2	Исп.3
1.	ПО Microsoft office	1	1	1	3400	3400	3400	3400
4.	ПО Python	1	-	-	Бесплатное	0	0	0
5.	ПО Pascal	-	1	-	Бесплатное	0	0	0
6.	ПО C++	-	-	1	32 263	0	0	32 263
7.	Персональный компьютер	1	1	1	70 000	70 000	70 000	70 000
Итого						73 400	73 400	105 663

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

$$З_a = \frac{H_a \cdot C}{365} \cdot T = \frac{0,33 \cdot 70\,000}{365} \cdot 248 = 15\,695,$$

где C – балансовая стоимость оборудования, руб.;

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

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

4.5.3 Основная заработная плата исполнителей проекта

В данном разделе приводится расчёт основной заработной платы исполнителей исследования (таблица 4.12).

Заработная плата $З_{зп}$ одного работника рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп},$$

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

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

Основная заработная плата ($З_{осн}$) работника рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot Т_p,$$

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_m \cdot M}{F_d},$$

где $З_m$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала раб. дней;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года.

При отпуске в 28 раб. дня – $M = 11,2$ месяца, 5-дневная рабочая неделя. При отпуске в 56 раб. дней – $M = 10,3$ месяца, 6-дневная рабочая неделя.

Должностной оклад работника за месяц рассчитывается по формуле:

$$З_m = З_{тс} \cdot (1 + k_{пр} + k_d) \cdot k_p,$$

где $З_{тс}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{пр}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3;

k_d – коэффициент доплат и надбавок составляет 0,2;

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

Таблица 4.12 – Расчёт основной заработной платы

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

Дополнительная заработная плата определяется по формуле:

$$З_{доп} = З_{осн} \cdot k_{доп},$$

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

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

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

4.5.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

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

Величина отчислений определяется по формуле:

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

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

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

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

4.5.5 Накладные расходы

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

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

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

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

Накладные расходы для исполнения 1 составили:

$$Z_{\text{накл}} = (14242,5 + 73\,400 + 412\,756 + 57\,786 + 141\,109) \cdot 0,16 = 111\,886,96 \text{ руб.}$$

Накладные расходы для исполнения 2 составили:

$$З_{\text{накл}} = (14435 + 73\,400 + 412\,756 + 57\,786 + 141\,109) \cdot 0,16 = 111\,917,76 \text{ руб.}$$

Накладные расходы для исполнения 3 составили:

$$\begin{aligned} З_{\text{накл}} &= (14627,5 + 105\,663 + 412\,756 + 57\,786 + 141\,109) \cdot 0,16 \\ &= 117\,110,64 \text{ руб.} \end{aligned}$$

4.5.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Итоговая таблица формирования бюджета исследовательского проекта представлена ниже (таблица 4.13):

Таблица 4.13 – Расчёт бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.			Примечание
	Исп.1	Исп.2	Исп.3	
1. Материальные затраты НТИ	14242,5	14435	14627,5	П. 4.5.1
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	73 400	73 400	105 663	П.4.5.2
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	412 756	412 756	412 756	П.4.5.3
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	57 786	57 786	57 786	П.4.5.3
5. Отчисления во внебюджетные фонды	141 109	141 109	141 109	П.4.5.4
6. Накладные расходы	111 886,96	111 917,76	117 110,64	П.4.5.5
7. Бюджет затрат НТИ	801 180,46	801 403,76	849 052,14	

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

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

Формула для расчёта интегрального показателя финансовой эффективности:

$$I_{\text{фин.р}}^{\text{исп}i} = \frac{\Phi_{\text{р}i}}{\Phi_{\text{max}}},$$

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

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

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения.

$$I_{\text{фин.р}}^{\text{исп}1} = \frac{801\,180,46}{849\,052,14} = 0,944;$$

$$I_{\text{фин.р}}^{\text{исп}2} = \frac{801\,403,76}{849\,052,14} = 0,944;$$

$$I_{\text{фин.р}}^{\text{исп}3} = \frac{849\,052,14}{849\,052,14} = 1$$

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

$$I_{\text{р}i} = \sum_{i=1}^n a_i \times b_i$$

где $I_{\text{р}i}$ – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

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

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя представлен в таблице 4.14.

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

$$I_{\text{исп}1} = \frac{I_{\text{р-исп}1}}{I_{\text{фин.р}}^{\text{исп}1}}$$

Таблица 4.14 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии \ Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,1	5	4	3
2. Удобство в проведении исследования на практике в силу его простоты, не требующей специального обучения	0,2	5	4	3
3. Экономичность	0,2	4	4	3
4. Низкая себестоимость в сравнении с более дорогими методами подбора	0,3	5	3	4
5. Надежность	0,2	5	4	4
Итого	1	4,8	3,8	3,4

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных.

Таблица 4.15 – Сравнительная эффективность разработки

№	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,944	0,944	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,8	3,8	3,4
3	Интегральный показатель эффективности	5,08	4,02	3,4
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,791	0,846

Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{\text{ср}}$):

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{исп2}}}{I_{\text{исп1}}}$$

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

5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

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

Рабочее место трудящегося должно соответствовать всем представленным в нормативных документах стандартам, то есть быть максимально безопасным для работника и сводить действия различных вредоносных факторов, оказывающих воздействие на здоровье человека, к минимуму.

Работа выполнялась в аудитории 133, аудитория расположена на первом этаже учебного корпуса 2 Томского политехнического университета. Экспериментальная часть работы осуществлялась на персональном компьютере при работе с различными программными обеспечениями. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, кондиционирования воздуха. Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного. В ходе её осуществления были использованы разного рода специализированные компьютерные программы, которыми обеспечено отделение химической инженерии. Объектом исследования в данном случае выступал процесс каталитического крекинга нефтяного сырья. Целью же данной работы являлось нахождение кинетических параметров, позволяющих осуществлять моделирование процесса каталитического крекинга нефтяного сырья.

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

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

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

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

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

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

Часто ухудшения состояния работника при работе с компьютером связаны с недостаточной, а то и вовсе отсутствующей, эргономикой рабочего пространства, то есть всего того, что связано с организацией рабочего места сотрудника. Данные показатели регламентируются СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 и ГОСТ 12.2.032–78, анализ выполнения которых при работе над данным проектом представлен в таблице 5.1.

Таблица 1 – Выполнение требований к организации рабочего места при работе с ПЭВМ

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

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

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

5.2 Производственная безопасность

5.2.1 Анализ вредных факторов

Потенциально опасными и вредными факторами в процессе получения данных и их обработки определяются в соответствии с ГОСТ 12.0.003-2015.

Факторы, которые могут воздействовать на исследователя в ходе работы, приведены в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Потенциально опасные и вредные факторы при исследовании математической модели процесса гидрокрекинга вакуумного газойля

Источник фактора, наименование вида работ	Факторы по ГОСТ 12.0.003-2015		Нормативные документы
	Вредные	Опасные	
Обработка экспериментальных данных; Программная реализации кинетической модели	– Производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего; – отсутствие или недостаток необходимого искусственного освещения; – повышенный уровень шума; – производственные факторы, связанные с наличием электростатического поля и электромагнитных полей радиочастотного диапазона; – перенапряжение зрительного анализатора; – умственное перенапряжение.	– Пожарная опасность; – поражение электрическим током.	– СанПиН 1.2.3685-21 [54]; – СП 52.13330.2016 [55]; – ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности [56]; – ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности [57]; – ГОСТ Р ИСО 9355-2-2009. Эргономические требования к проектированию дисплеев и механизмов управления. Часть 2. Дисплеи [58]; – СП 2.2.3670-20. Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда [59]; – Федеральный закон от 22.07.2013г. №123-ФЗ [60]; – ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов [61];

5.2.2 Разработка мероприятий по снижению воздействия вредных и опасных факторов

Производственные факторы, связанные с микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего.

Микроклимат производственных помещений – это климат внутренней среды этих помещений, который определяется действующими на организм человека сочетаниями температуры, влажности и скорости движения воздуха, а также температуры окружающих поверхностей.

Метеорологические условия рабочей среды (микроклимат) оказывают влияние на процесс теплообмена и характер работы. Микроклимат характеризуется температурой воздуха, его влажностью и скоростью движения, а также интенсивностью теплового излучения. Длительное воздействие на человека неблагоприятных метеорологических условий резко ухудшает его самочувствие, снижает производительность труда и приводит к заболеваниям.

В соответствии с [62] на рабочих местах пользователей ПК должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата в соответствии с нормативом СанПиН 2.2.4.548-96. Согласно этому документу, допустимые характеристики микроклимата представлены в таблице 5.2. Работу пользователя ПК относим к категории тяжести работ 1а (работы с интенсивностью энергозатрат до 120 ккал/ч (до 139 Вт), производимые сидя и сопровождающиеся незначительным физическим напряжением).

Таблица 5.2 – Допустимые параметры микроклимата [62]

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

Таблица 5.3 – Показатели микроклимата в холодный и теплый периоды времени

Сезон	Температура воздуха, t, °C	Относительная влажность, %
Холодный и переходный (среднесуточная температура меньше 10 °C)	22 ÷ 24	60 ÷ 40
Теплый (среднесуточная температура воздуха 10 °C и выше)	22 ÷ 23	60 ÷ 40

Параметры микроклимата согласно [66] в компьютерном классе, в котором выполнялось исследование, соответствуют допустимым нормам.

Отсутствие или недостаток необходимого искусственного освещения.

Отсутствие или недостаток необходимого искусственного освещения снижает производительность и качество труда работника, негативно влияет на органы зрения человека. Недостаточное освещение рабочего места затрудняет длительную работу, вызывает повышенное утомление и способствует развитию близорукости. Излишне яркий свет снижает зрительные функции, приводит к перевозбуждению нервной системы, снижает работоспособность.

В компьютерной аудитории имеется естественное (боковое одностороннее) и общее равномерное искусственное освещение. Компьютеры расположены вдоль стен аудитории. Восемь компьютеров расположены так, что естественный свет падает сбоку по отношению к мониторам, а три компьютера расположены вдоль окон. В качестве источников искусственного освещения используются газоразрядные лампы.

Оптимальная освещенность на поверхности стола при работе за компьютером должна составлять 300 ÷ 500 лк [67]. Коэффициент пульсации светового потока при работе за компьютером должен быть не более 5 %.

Таким образом для компьютерной аудитории рекомендуется замена газоразрядных ламп на светодиодные в системе общего освещения с целью снижения коэффициента пульсации светового потока.

Повышенный уровень шума.

Повышенный уровень шума приводит к появлению профессиональных заболеваний и может явиться причиной несчастного случая.

При работе в компьютерной аудитории второго корпуса ТПУ характер шума широкополосный с непрерывным спектром более 1 октавы.

Предельно допустимые уровни звукового давления, уровни звука и эквивалентные уровни звука для работы в компьютерной аудитории представлены в таблице 5.4.

Таблица 5.4 – Предельно допустимые уровни звукового давления, уровни звука и эквивалентные уровни звука для работы в лаборатории и компьютерной аудитории [63]

Назначение помещений или территорий	Уровни звукового давления (эквивалентные уровни звукового давления), дБ, в октавных полосах частот со среднегеометрическими частотами, Гц									Уровень звука (эквивалентный уровень звука), дБА
	31,5	63	125	250	500	1000	2000	4000	8000	
Классное помещение, учебные кабинеты, аудитории образовательных организаций, конференц-залы, читальные залы библиотек, зрительные залы клубов, залы судебных заседаний, культовые здания, зрительные залы клубов с обычным оборудованием	79	63	52	45	39	35	32	30	28	55 (80 по специальной оценке условий труда)

Согласно [63] уровень шума в компьютерной аудитории (ауд. 133) не превышает 80 дБА, что соответствует нормам.

Производственные факторы, связанные с наличием электростатического поля и электромагнитных полей радиочастотного диапазона.

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

Допустимые уровни ЭМП, создаваемых ЭВМ на рабочем месте представлены в таблице 5.5.

Таблица 5.5 – Допустимые уровни ЭМП, создаваемых ЭВМ [58]

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

Уровни ЭМП на рабочем месте в 133 аудитории ТПУ соответствуют допустимым уровням.

Умственное перенапряжение и перенапряжения зрительного анализатора.

Основной мерой предупреждения умственного перенапряжения и перенапряжения зрительного анализатора является организация временных перерыв в работе. Во время перерыва рекомендуется выполнять гимнастику для глаз.

Предложим следующий распорядок рабочего времени (без учета обеденного перерыва): 40 мин работа за компьютером (1) → 5 мин перерыв (2) → 40 мин работа за компьютером (3) → 15 мин перерыв (4) → (1) → ...

Пожарная опасность.

Риск пожара в компьютерной аудитории связан в первую очередь с потенциальными перегрузками в электрической сети, которые способны вызвать возгорание компьютерной техники, а также с дефектами самой компьютерной техники. Пожарная безопасность для людей и имущества в случае возгорания в компьютерной аудитории обеспечивается за счет:

0. Возможности эвакуации людей независимо от их возраста и физического состояния на прилегающую к зданию территорию;
1. Доступа личного состава пожарных подразделений и подачи средств пожаротушения к очагу пожара;
2. Нераспространения пожара на рядом расположенные здания;
3. Доступности огнетушителя углекислотного типа ОУ-5 для тушения всех видов горючих веществ, в том числе электрооборудования ≤ 10 кВ.

Поражение электрическим током.

Поражение электрическим током может быть вызвано дефектами оборудования, подключенного к электрической сети. Источниками электрической опасности являются оголенные части проводов или отсутствие изоляции.

В компьютерной аудитории эксплуатируется 11 компьютеров, подключенных к электрической сети 220 В и серверное оборудование, подключенное к сети 380 В.

Компьютерная аудитория второго корпуса ТПУ по опасности поражения электрическим током относится к первому классу – помещение без повышенной опасности, т.к. температура в помещении не превышает 30 °С, относительная влажность воздуха не превышает 70 %, токопроводящие полы отсутствуют (полы выполнены из керамической плитки).

Для защиты от поражения электрическим током в нормальном режиме эксплуатации электроустановок в компьютерной аудитории применены следующие меры защиты:

1. Защитное заземление и зануление;

2. Изолирующие электрозащитные средства;
3. Устройства автоматического отключения питания.

Необходимо также проводить мероприятия по закреплению работниками правил безопасной работы с электрическим оборудованием.

5.3 Экологическая безопасность

Источниками воздействия на окружающую среду при работе в компьютерной аудитории являются:

Бумажные, пластиковые, стеклянные отходы;
Ртутьсодержащие люминесцентные лампы.

Бумажный и стеклянный мусор не является серьезный источником загрязнения окружающей среды. Более опасными с для экологии являются пластиковые отходы. С экологической точки зрения, а также в целях повышения эффективности использования природных ресурсов целесообразным является организация сортировки мусора в помещениях и дальнейшая вторичная переработка бумаги, пластика и стекла.

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

5.3.1 Воздействие на литосферу

Люминесцентные лампы в целях избежания негативного воздействия ртути, содержащихся в них, подвергаются вывозу в герметичных контейнерах и дальнейшей утилизации на специализированных предприятиях, имеющих лицензию на данный вид деятельности.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

При работе с использованием ЭВМ потенциально опасной ЧС является пожар, который может возникнуть при перегрузках в электросети, износе электрических компонентов компьютеров, что может привести к изменению сопротивления компонентов и их перегреву.

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

Для тушения пожаров необходимо применять углекислотные и порошковые огнетушители, которые обладают высокой скоростью тушения, большим временем действия, возможностью тушения электроустановок, высокой эффективностью борьбы с огнем. Воду разрешено применять только во вспомогательных помещениях [63].

Предупреждение пожара обеспечивается следующими мероприятиями [58]:

Закреплением знаний работников в сфере пожаробезопасности, обучением сотрудников правилам безопасной работы в лаборатории; периодическим надзором, осуществляемым должностными лицами органов управления и подразделений Государственной противопожарной безопасности; обеспечением помещений оборудованием для пожаротушения (углекислотный огнетушитель ОУ-5 1 шт., порошковый огнетушитель ОП-5 1 шт., асбестовое одеяло, песок); наличием систем оповещения о возникновении пожара, которые согласно ФЗ-123. НПБ 104-03 должны быть установлены в каждом помещении. Данные системы должны обеспечивать подачу звуковых оповещающих сигналов в случае обнаружения признаков пожара (задымление, повышенная температура). Необходимо выполнять периодическую проверку работоспособности системы оповещения о пожаре.

При возникновении пожара необходимо отключить систему вентиляции и питание электрооборудования, принять меры, направленные на тушение пожара и обеспечить эвакуацию студентов и сотрудников согласно плану эвакуации.

Информационная безопасность заключается в обеспечении лицензированных программных пакетов для работы с математической моделью, а также своевременная установка антивирусной системы.

Компьютеры в 133 аудитории оснащены современной версией антивирусной системы Касперского, а также на каждой компьютере установлен пароль для предотвращения утечки информации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения данной работы выполнены численные и экспериментальные исследования процесса каталитического крекинга, включающие мониторинг, обработку и анализ данных с промышленной и лабораторной установок каталитического крекинга, а также проведение исследований по определению состава и свойств сырья и продуктов процесса. На основании которых, а также термодинамического анализа реакций процесса разработана реакционная схема каталитического крекинга, чувствительная к составу сырья и обеспечивающая прогнозирование индивидуального состава газов крекинга, бензина и количество кокса.

С применением модели определены кинетические параметры реакций процесса каталитического крекинга для трех существенно различающихся по микроактивности точек.

Выявлено, что константы скоростей реакций зависят от характеристик катализатора, поступающего на лабораторную установку. С увеличением содержания редкоземельных элементов и оксида алюминия с 0,703 до 0,766 % мас. и с 40,5 до 41,9 % мас., соответственно, в катализаторе возрастают скорости реакций переноса водорода и конденсации ($k_9=12 \div 14 \text{ лс}^{-1}\text{моль}^{-1}$, $k_{10}=54 \div 58 \text{ лс}^{-1}\text{моль}^{-1}$, $k_{12}=0,01 \div 0,08 \text{ лс}^{-1}\text{моль}^{-1}$, $k_{13}=10 \div 12 \text{ лс}^{-1}\text{моль}^{-1}$, $k_{14}=28 \div 73 \text{ лс}^{-1}\text{моль}^{-1}$), приводя к увеличению выхода кокса (на 2,7 % мас.) и снижая выход бензина на 2,18 % мас. Исследование характеристик катализатора показало, что с увеличением содержания кокса на регенерированном катализаторе из системы с 0,024 до 0,033 % мас., микроактивность снижается на 5 %, что влияет на выход бензина (проходит через максимум: $52,9 \div 54,2 \text{ % мас.}$) и газов крекинга (увеличивается с 22,2 до 27,3 % мас) на лабораторной установке.

В результате разработана математическая модель процесса каталитического крекинга на основе полученной кинетической модели. Данная математическая модель позволяет определять кинетические параметры процесса

с лабораторной установки и учитывает изменение активности катализатора в ходе эксплуатации. Была произведена верификация разработанной модели, результаты показали, что абсолютная погрешность по расчету продуктов процесса и состава газов не превышает 5 % мас.

С помощью разработанной математической модели процесса каталитического крекинга было исследовано влияние состава сырья, температуры и активности регенерированного катализатора на выход целевых продуктов. Исследование параметрической чувствительности показало, что изменение выхода продуктов и состава продуктов крекинга согласуются с теоретическими закономерностями процесса.

Таким образом разработанная модель учитывает параметры дезактивации катализатора и адекватно описывает влияние температуры процесса, состава сырья на выход целевых продуктов и пригодна для определения кинетических параметров и прогнозирования состава газов крекинга.

Результаты будут использованы при создании модуля непрерывного учета изменения свойств катализатора в модели промышленного процесса.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. IEA The Future of Petrochemicals International Energy Agency (IEA) and OECD, Paris. – 2018.
2. Sadrameli S. M. Thermal/catalytic cracking of liquid hydrocarbons for the production of olefins: A state-of-the-art review II: Catalytic cracking review //Fuel. – 2016. – Т. 173. – С. 285-297.
3. Yaisamlee R., Reubroycharoen P. Light olefin production from the catalytic cracking of fuel oil in a fixed bed reactor //Biomass and Bioenergy. – 2021. – Т. 153. – С. 106217.
4. Zou H. et al. Light olefin production by catalytic co-cracking of Fischer–Tropsch distillate with methanol and the reaction kinetics investigation //Chinese Journal of Chemical Engineering. – 2020. – Т. 28. – №. 1. – С. 143-151.
5. Jiasong Y. et al. Fluid catalytic cracking technology for maximum gasoline production //China Petroleum Processing & Petrochemical Technology. – 2021. – Т. 23. – №. 1. – С. 41.
6. Xu Y., Cui S. A novel fluid catalytic cracking process for maximizing iso-paraffins: from fundamentals to commercialization //Frontiers of Chemical Science and Engineering. – 2018. – Т. 12. – №. 1. – С. 9-23.
7. Gan J. et al. Numerical simulation of hydrodynamics and cracking reactions in the feed mixing zone of a multiregime gas–solid riser reactor //Industrial & engineering chemistry research. – 2011. – Т. 50. – №. 20. – С. 11511-11520.
8. Zhu G. et al. Catalytic processes for light olefin production //Springer Handbook of Petroleum Technology. – Springer, Cham, 2017. – С. 1063-1079.
9. Zhang Z. G., Xie C. G. Experimental study of DCC-plus technology //Petroleum Processing and Petrochemicals. – 2010. – Т. 41. – №. 6. – С. 39.
10. Wang G.Q., Shi W.Y., Xie C.G., Li Z.T. Catalytic pyrolysis process (CPP) – An upswing of RFCC for ethylene and propylene production//Proc. 5th Int. Conf. Refinery Processing. – 2002. – С. 241–249.

11. Greer D., Houdek M., Pittman R., Woodcock J. Proc. DGMK Conf. Creating Value from Light Olefins – Production and Conversion//Hamburg. – 2001. – C. 31–43.
12. Niccum P. K. et al. Consider improving refining and petrochemical integration as a revenue-generating option //Hydrocarbon Processing. – 2001. – T. 80. – №. 11. – C. 47-47.
13. ENG C. et al. Producing propylene //Hydrocarbon engineering. – 2004. – T. 9. – №. 7. – C. 69-72.
14. Tallman M. J., ENG C. N. Propylene on purpose //Hydrocarbon engineering. – 2010. – T. 15. – №. 12.
15. Eng C. et al. Economic routes to propylene //Hydrocarbon Asia, July/August. – 2004.
16. Mishra M., Jain S. K. Properties and applications of zeolites: A Review //Proceedings of the National Academy of Sciences India Section B-Biological Sciences. – 2011. – T. 81. – C. 250-259.
17. Corma A., Wojciechowski B. W. The chemistry of catalytic cracking //Catalysis reviews. – 1985. – T. 27. – №. 1. – C. 29-150.
18. Meier W. M., Olson D. H. Molecular Sieve Zeolite I //by EM Flanigen, LB Sand), Academic. – 1971.
19. Meier W. M., Mock H. J. Solid State Chern. – 1979. – T. 5. – C.349.
20. Corma A., Orchillés A. V. Current views on the mechanism of catalytic cracking //Microporous and mesoporous materials. – 2000. – T. 35. – C. 21-30.
21. Nazarova, G. Modeling of the catalytic cracking: Catalyst deactivation by coke and heavy metals / G Nazarova, E.Ivashkina, E.Ivanchina, A.Oreshina, I.Dolganova, M.Pasyukova // Fuel Processing Technology. – 2020. – 106318.
22. John, Y. M. Modelling and simulation of an industrial riser in fluid catalytic cracking process / Y. M. John, R. Patel, I. M. Mujtaba, // Computers and Chemical Engineering –2017. – Vol. 106. – P. 730–743.

23. Dagde, K.K. Six-lump kinetic modelling of adiabatic plug-flow riser reactor in an industrial FCC unit / K. K. Dagde, Y. T. Puyate // *International Journal of Engineering Research and Applications*. – 2012. – Vol. 2, № 6. – P. 557–568.
24. Ivanchina, E.D. Formation of the component composition of blended hydrocarbon fuels as the problem of the multi-objective optimization / E.D. Ivanchina, E.N. Ivashkina, V.A. Chuzlov, N.S. Belinskaya, A.Y. Dementyev // *Chemical Engineering Journal*. – 2020. – Vol. 383. – 121283.
25. Xiong, K. Kinetic study of catalytic cracking of heavy oil over an in-situ crystallized FCC catalyst / K. Xiong, Ch. Lu, Zh. Wang, X. Gao // *Fuel*. – 2015. – Vol. 142. – P.65–72.
26. Corella, J. Fluid Catalytic Cracking II / J. Corella, E. Francés // *American Chemical Society, ACS Symposium Series*. – 1991. – Vol. 452. – P. 165–182.
27. Qi, Y. CFD investigation of hydrodynamics, heat transfer and cracking reactions in a large-scale fluidized catalytic cracking riser / Y. Qi, A. S. Berrouk, Y. Du, H. Zhao, C. Yang, M. A. Rakib, A. Mohamed, A. Taher. // *Applied Mathematical Modelling*. – 2016. – Vol. 40, № 21–22. – P. 9378–9397.
28. Lee, L. Four-lump kinetic model for fluid catalytic cracking process / L. Lee, Y. Chen, T. Huang, W. Pan // *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. – 1989. – Vol. 67. – P. 615–619.
29. Stratiev, D. S. Impact of feed properties on gasoline olefin content in the fluid catalytic cracking / D. S. Stratiev, I. K. Shishkova, I. M. Nikolaychuk, E. Sharafutdinov, I. S. Chavdarov, R. Nikolova, M. Mitkova, D. Yordanov, N. Rudnev // *Petroleum Science and Technology*. – 2019. – Vol. 34. – P. 652–658.
30. Kang, X. An Introduction to the lump kinetics model and reaction mechanism of FCC gasoline / X. Kang, X. Guo, H. You // *Energy Sources*. – 2013. – Vol. 35, №20. –P. 1921–1928.
31. Radu, S. Modelling and Simulation of an Industrial Fluid Catalytic Cracking Unit / S. Radu, D. Ciuparu // *Revista de Chimie*. – 2014. – Vol.65, № 1. – P. 113-119.

32. Jacob, S. M. A lumping and reaction scheme for catalytic cracking / S. M. Jacob, B. Gross, S. E. Voltz, V. W. Jr. Weekman // *AIChE Journal*. – 1976. – Vol. 22. – P. 701-713.
33. Carella, J. On the modelling of the kinetics of the selective deactivation of catalysts. Application the fluid catalytic cracking process / J. Carella // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 2004. – Vol. 43, № 15. – P. 4080–4086.
34. Oliveira, L. Catalytic cracking kinetic models parameter estimation and model evaluation / L. Oliveira, E. C. Biscaia // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 1989. – Vol. 28. – P. 264–271.
35. Gao, J. Advanced model for turbulent gas-solid flow and reaction in FCC riser reactor / J. Gao, C. Xu, S. Lin, G. Yang, Y. Guo // *AIChE Journal*. – 1999. – Vol. 45. – P. 1095–1113.
36. Dewachtere, N.V. Advanced modeling of riser-type catalytic cracking reactors / N.V. Dewachtere, G.F. Froment, I. Vasalos, N. Markatos, N. Skandalis // *Applied thermal engineering*. – 1997. – Vol. 17, № 8–10. – P. 837-844.
37. Dewachtere N.V. Application of a single-event kinetic model in the simulation of an industrial riser reactor for the catalytic cracking of vacuum gas oil / N.V. Dewachtere, F. Santaella, G.F. Froment // *Chemical Engineering Science*. – 1999. – Vol. 54. – P. 3653–3660.
38. Исламов Г.И. Обзор и анализ математических моделей процесса каталитического крекинга / Г.И. Исламов, И.М. Губайдуллин // *Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2019*. – 2019. – С.175–180.
39. Fakhroleslam M. Thermal/catalytic cracking of hydrocarbons for the production of olefins; a state-of-the-art review III: Process modeling and simulation / M. Fakhroleslam, S. M. Sadrameli // *Fuel*. – 2019. – Vol.252. – P.553–566.
40. Froment G. Single event kinetic modeling of complex catalytic processes // *AIChE Annual Meeting, Conference Proceedings*. – 2005. – P.9576
Doi:10.1002/chin.200518293

41. Moustafa T.M., Froment G.F. Kinetic modeling of coke formation and deactivation in the catalytic cracking of vacuum gas oil // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. – 2003. – Vol. 42 (1). P. 14 – 25. DOI: 10.1021/ie0204538
42. Назарова Г.Ю. Повышение эффективности процесса каталитического крекинга вакуумного дистиллята в лифт-реакторе с применением метода математического моделирования: дис. канд. техн. наук: 02.00.13 / Назарова Галина Юрьевна. – Томск, 2019. – 187 с.
43. Сталл, Д. Химическая термодинамика органических соединений / Д. Сталл, Э. Вестрам, Г. Зинке. – М.: Мир, 1971. — 806 с.
44. Xian, X. Catalytic cracking of n-dodecane over HZSM-5 zeolite under supercritical conditions: Experiments and kinetics / X. Xian, G. Liu, X. Zhang, L. Wang, Z. Mi. // *Chemical Engineering Science*. – 2010. – Vol. 65, № 20. – P. 5588–5604.
45. Nakasaka Y. Crystal size of MFI-type zeolites for catalytic cracking of n-hexane under reaction-control conditions / Y. Nakasaka, T. Okamura, H. Konno, T. Tago, T. Masuda. // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2013, Vol. 182. – P. 244–249.
46. Hong, Y. Pentane conversion on dealuminated H-Y and HZSM-5 / Y. Hong, V. Gruver, J. J. Fripiat, // *Journal of Catalysis*. – 1996. – Vol. 161, № 2. – P. 766–775.
47. Li, Y. Theoretical study of 1-hexene activation over La/ZSM-5 zeolite // *Beijing Huagong Daxue Xuebao (Ziran Kexueban)* / Y. Li, J. Zhu, H. Liu, P. He, P. Wang, H. Tian // *Journal of Beijing University of Chemical Technology (Natural Science Edition)*. – 2011. – Vol. 38, № 3. – P. 6–11.
48. Fierro, V. A non-stationary kinetics approach for the determination of the kinetic parameters of the protolytic cracking of methylcyclohexane / V. Fierro, J. L. Duplan, J. Verstraete, Y. Schuurman, C. Mirodatos // *Studies in Surface Science and Catalysis*. 2001. – Vol. 133. – P. 341–348.

49. Konno, H. Kinetics of the catalytic cracking of naphtha over ZSM-5 zeolite: effect of reduced crystal size on the reaction of naphthenes / H. Konno, R. Ohnaka, J. Nishimura, T. Tago, Y. Nakasaka, T. Masuda. // Catal. Sci. Technol. – 2014. – Vol. 4. – P. 4265–4273.
50. Nagamatsu, S. Conversion of Light Naphtha to Aromatic Hydrocarbons (Part 4) Kinetic Study of Hexane Conversion Catalyzed by Platinum Supported on Zeolite L / S. Nagamatsu, M. Inomata, K. Imura, M. Kishida, K. Wakabayashi // Journal of The Japan Petroleum Institute. – 2001. – Vol. 44, № 6. – P. 351–359.
51. Cao, L. Reaction Mechanism of Ethylene Aromatization over HZSM-5 Zeolite: From C4 to C6 Intermediates / L. Cao, D. Zhou, S. Xing, X. Li // Chinese Journal of Catalysis. – 2010. – Vol. 31, № 6. – P. 645–650.
52. Konno, H. Kinetics of n-hexane cracking over ZSM-5 zeolites – Effect of crystal size on effectiveness factor and catalyst lifetime / H. Konno, T. Okamura, T. Kawahara, Y. Nakasaka, T. Tago, T. Masuda // Chemical Engineering Journal. – 2012. – Vol. 207–208, P. 490–496.
53. Войцеховский, Б.В. Каталитический крекинг, катализаторы, химия, кинетика / Б.В. Войцеховский, А. Корма: перевод с английского. – Под ред. Н.С. Печуро.– М.: Химия, 1990. – 152 с.
54. СанПиН 1.2.3685-21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания».
55. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение.
56. ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности;
57. ГОСТ 12.1.002-84 ССБТ. Электрические поля промышленной частоты. Допустимые уровни напряженности и требования к проведению контроля на рабочих местах.
58. ГОСТ Р ИСО 9355-2-2009. Эргономические требования к проектированию дисплеев и механизмов управления. Часть 2. Дисплеи.

59. СП 2.2.3670-20. Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда.

60. Федеральный закон от 22 июля 2013 г. № 123-ФЗ Технический регламент о требованиях пожарной безопасности [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. URL: <https://docs.cntd.ru/document/902111644>, свободный. – Дата обращения: 21.04.2021 г.

61. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.

62. ГОСТ 12.1.004. – 91. Пожарная безопасность. Общие требования.

63. СП 51.13330.2011 Защита от шума. Актуализированная редакция СНиП 23-03-2003 (с изменением № 1).