

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

Институт природных ресурсов
Направление подготовки «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов»
Кафедра ХТТ и ХК

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы	
Исследование производства дизельных топлив методом математического моделирования	

УДК 665.75.097:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д2В	Белозерцева Наталья Евгеньевна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры ХТТ и ХК	Белинская Наталья Сергеевна			
Доцент кафедры ХТТ и ХК	Францина Евгения Владимировна	к.т.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ахмеджанов Рафик Равильевич	д.б.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ХТТ и ХК	Юрьев Егор Михайлович	к.т.н.		

Томск – 2016 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП «Химическая технология»

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС ВПО, критериев и/или заинтересованных сторон
Профессиональные компетенции		
P1	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности	Требования ФГОС (ПК-1,2,3,19,20), Критерий 5 АИОР (п.1.1), CDIO(п. 1.1, 4.1, 4.3, 4.8)
P2	Применять знания в области современных химических технологий для решения производственных задач	Требования ФГОС (ПК-7,11,17,18,ОК-8), Критерий 5 АИОР (пп.1.1,1.2), CDIO (п. 1.1, 3.2, 4.2, 4.3, 4.5, 4.6)
P3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии	Требования ФГОС (ПК-1,5,8,9, ОК-2,3), Критерий 5 АИОР (пп.1.2), CDIO (1.2, 2.1, 4.5)
P4	Разрабатывать новые технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии, проектировать объекты химической технологии в контексте предприятия, общества и окружающей среды	Требования ФГОС (ПК-11,26,27,28), Критерий 5 АИОР (п.1.3) CDIO (п.1.3, 4.4, 4.7)
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий	Требования ФГОС (ПК-4,21,22,23,24,25, ОК-4,6), Критерий 5 АИОР (п.1.4), CDIO (п. 2.2)
P6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, выводить на рынок новые материалы , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.	Требования ФГОС (ПК-6,10,12,13,14,15, ОК-6,13,15), Критерий 5 АИОР (п.1.5) CDIO (п. 4.1, 4.7, 4.8, 3.1, 4.6)
Общекультурные компетенции		
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-5,9,10,11), Критерий 5 АИОР (пп.2.4,2.5), CDIO (п. 2.5)
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1,2,7,8,12), Критерий 5 АИОР (2.6), CDIO (п. 2.4)

P9	<i>Активно</i> владеть <i>иностранным языком</i> на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-14) , Критерий 5 АИОР (п.2.2), CDIO (п. 3.2, 3.3)
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, <i>демонстрировать лидерство в инженерной деятельности и инженерном предпринимательстве</i> , ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.	Требования ФГОС (ОК-3,4) , Критерий 5 АИОР (пп.1.6, 2.3) CDIO (п. 4.7, 4.8, 3.1)

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

Институт природных ресурсов
Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология»
Профиль (специализация) «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов»
Кафедра химической технологии топлива и химической кибернетики

УТВЕРЖДАЮ:
Зав. кафедрой

_____ Юрьев Е.М.

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

Студенту:

Группа	ФИО
2Д2В	Белозерцевой Наталье Евгеньевне

Тема работы:

Исследование производства дизельных топлив методом математического моделирования	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	1749/с от 11.03.2016

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01.06.2016
--	------------

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	Объект исследования: Установка производства дизельных топлив Л-24-10/2000 ООО «ПО «Киришинефтеоргсинтез». Исходными данными являются технологическая схема установки, технологические режимы работы реактора каталитической депарафинизации, составы сырья и продукта. Экспериментальные значения физико-химических и эксплуатационных свойств дизельных топлив, получаемых на установке. Режим работы реактора депарафинизации – непрерывный.
--	---

анализ и т. д.).	
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. Обзор литературы 1.1. Дизельное топливо, области применения дизельного топлива 1.2. Физико-химические и эксплуатационные свойства дизельного топлива 1.3. Методы экспериментального определения низкотемпературных свойств и цетанового числа дизельного топлива 1.4. Современные требования к дизельным топливам для холодных климатических зон 1.5. Способы получения низкозастывающих дизельных топлив 1.6. Постановка цели и задач исследования 2. Объект и методы исследования 2.1. Описание технологического процесса и технологической схемы установки каталитической депарафинизации 2.2. Квантово-химические методы расчета свойств молекул 2.3. Метод математического моделирования в решении задач повышения эффективности нефтеперерабатывающих производств 3. Экспериментальная часть 3.1. Термодинамический анализ реакций процесса дерпарафинизации и разработка схемы превращений углеводородов 3.2. Расчет дипольного момента молекул углеводородов, входящих в состав дизельных фракций 3.3. Расчет энергии связи молекул углеводородов, входящих в состав дизельных фракций 3.4. Выявление зависимостей между дипольным моментом углеводородов и их низкотемпературными свойствами 3.5. Выявление зависимостей между энергией связи углеводородов и их цетановым числом 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 4.1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения 4.2. Планирование научно-исследовательских работ 4.3. Бюджет научно-технического исследования 4.4. Определение ресурсной (ресурсосберегающей),

	финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования 5. Социальная ответственность 5.1 Анализ вредных и опасных факторов на рабочем месте 5.2 Анализ факторов, характеризующих возникновение чрезвычайных ситуаций
Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)	
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Рыжакина Татьяна Гавриловна, к.э.н., доцент
Социальная ответственность	Ахмеджанов Рафик Равильевич, д.б.н., профессор
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	05.03.2015
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры ХТТ и ХК	Белинская Н.С.			
Доцент кафедры ХТТ и ХК	Францина Е.В. (консультант)	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д2В	Белозерцева Н.Е.		

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

Студенту:

Группа	ФИО
2Д2В	Белозерцева Наталья Евгеньевна

Институт	Природных ресурсов	Кафедра	ХТТ и ХК
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	ХТПЭ и УМ

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

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

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта.
2. Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.
3. Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски.	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИИ
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности.	Проведение оценки экономической эффективности исследования.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	к.ЭК.Н		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д2В	Белозерцева Наталья Евгеньевна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2Д2В	Белозерцева Наталья Евгеньевна

Институт	ИПР	Кафедра	ХТТ и ХК
Уровень образования	бакалавр	Направление/специальность	«Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов»

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<i>Объект исследования – процесс каталитической депарафинизации с получением дизельных топлив с оптимальными низкотемпературными характеристиками</i> <i>Рабочая зона – компьютерный класс</i> <i>Область применения - нефтехимия</i>
--	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Производственная безопасность 1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности: - физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; - действие фактора на организм человека; - приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); - предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем индивидуальные защитные средства). 1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности: - механические опасности (источники, средства защиты); - термические опасности (источники, средства защиты); - электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); - пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).	1.1. <i>Выявление вредных факторов в компьютерном классе при разработке научного исследования:</i> - вредные вещества; - освещение; - производственный шум и вибрация; - вредные вещества. 1.2. <i>Выявление опасных факторов при разработке и эксплуатации научного исследования:</i> - микроклиматические условия - электробезопасность (токоведущие части электрооборудования); - вентиляция (способы вентиляции в рабочей зоне);
2. Безопасность в чрезвычайных ситуациях: – перечень возможных ЧС при разработке и	- <i>Перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации научного</i>

эксплуатации проектируемого решения; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.	исследования: пожар, взрыв, разрушения зданий в результате разрядов электричества, ураган, землетрясения; - Разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий: использование огнетушителя, песка, асбестового одеяла; в случае стихийных бедствий отключение воды и электричества; организационная эвакуация работников.
3. Анализ вредных факторов при адаптации математической модели на производстве	- Выявление вероятности аварийных ситуаций, формирования поражающих факторов и ожидаемых последствий на предприятии при адаптации созданного программного модуля процесса гидродепарафинизации
4. Экологическая безопасность: – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы);	- Выявление вредных веществ, которые выделяются или используются в процессе каталитической депарафинизации при производстве дизельных топлив с улучшенными низкотемпературными характеристиками

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор кафедры ЭБЖ ИНК	Ахмеджанов Рафик Равильевич	д.б.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д2В	Белозерцева Наталья Евгеньевна		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 111 страниц, 20 рисунков, 27 таблиц, 53 источника, 2 приложения.

Ключевые слова: дизельное топливо, каталитическая гидродепарафинизация, температура застывания, температура помутнения, предельная температура фильтруемости, математическое моделирование, низкотемпературные характеристики.

Объектом исследования является установка каталитической гидродепарафинизации дизельного топлива.

Цель работы – исследование процесса каталитической депарафинизации для производства дизельных топлив.

В исследовании использовались квантово-химические методы расчета свойств молекул углеводородов, реализованные в программном продукте Gaussian, а так же метод математического моделирования для исследования закономерностей процесса каталитической гидродепарафинизации.

В результате исследования впервые получены зависимости между дипольным моментом углеводородов, входящих в состав дизельных фракций, зависимости между энергией связи углеводородов и их цетановым числом.

Результаты исследования могут применяться для прогнозирования физико-химических и эксплуатационных свойств дизельных топлив.

Область применения: нефтеперерабатывающие предприятия, где реализован процесс каталитической гидродепарафинизации дизельного топлива.

Экономическая значимость работы заключается в возможности применения математической модели для оптимизации процесса путем подбора оптимального технологического режима, без вмешательства в работу установки, что позволяет получать максимальный выход продукта с требуемыми характеристиками качества с минимальными затратами.

Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

Нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. ГОСТ 305 – 2013 Топливо дизельное. Технические условия.
2. ГОСТ Р 52368 – 2005 (EN 590:2009) Топливо дизельное ЕВРО. Технические условия.
3. ГОСТ Р 55475 – 2013 Топливо дизельное зимнее и арктическое депарафинированное. Технические условия.
4. ГОСТ 32511-2013 (EN 590:2009) «Топливо дизельное ЕВРО. Технические условия»
5. ГОСТ 32508-2013. Топлива дизельные. Определение цетанового числа.
6. ГОСТ 32393-2013. Нефтепродукты. Определение температуры застывания методом вращения.
7. ГОСТ 54269-2010. Топлива. Метод определения предельной температуры фильтруемости на холодном фильтре.
8. ГОСТ 5066-91. Топлива моторные. Методы определения температуры помутнения, начала кристаллизации и кристаллизации.
9. ГОСТ 12.1.002–84. Электрические поля промышленной частоты. Допустимые уровни и требования к проведению контроля на рабочем месте.
10. ГОСТ Р 22.0.01-94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения.

Определения

В данной работе применены следующие термины с соответствующими определениями:

температура помутнения: Максимальная температура, при которой в топливе появляется фазовая неоднородность.

температура застывания: Температура, при которой топливо полностью теряет подвижность (ниже температуры помутнения на 5–10 °С).

предельная температура фильтруемости: Наиболее высокая температура, при которой данный объем топлива не проходит через стандартный фильтр в установленное время при стандартизованных условиях охлаждения.

цетановое число: Характеристика воспламеняемости дизельного топлива, определяющая промежуток времени от впрыска топлива в цилиндр до начала его горения.

Оглавление

Введение.....	15
1 Обзор литературы.....	18
1.1 Дизельное топливо, области применения дизельного топлива.....	18
1.2 Физико-химические и эксплуатационные свойства дизельного топлива.....	18
1.3 Методы экспериментального определения низкотемпературных свойств и цетанового числа дизельного топлива.....	21
1.4 Современные требования к дизельным топливам для холодных климатических зон.....	23
1.5 Способы получения низкозастывающих дизельных топлив.....	25
1.6 Постановка цели и задач исследования.....	28
2 Объект и методы исследования.....	30
2.1 Описание технологического процесса и технологической схемы установки каталитической депарафинизации.....	30
2.2 Квантово-химические методы расчета молекул.....	34
2.3 Метода математического моделирования в решении задач повышения эффективности нефтеперерабатывающих производств.....	36
3 Экспериментальная часть.....	39
3.1 Термодинамический анализ реакций процесса депарафинизации и разработка схемы превращений углеводородов.....	39
3.2 Расчет дипольного момента молекул углеводородов, входящих в состав дизельных фракций.....	42
3.3 Расчет энергии связи молекул углеводородов, входящих в состав дизельных фракций.....	48
3.4 Выявление зависимостей между дипольным моментом углеводородов и их низкотемпературными свойствами.....	53
3.5 Выявление зависимостей между энергией связи углеводородов и их цетановым числом.....	60
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение....	64

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	65
4.1.1 Анализ конкурентных технических решений.....	66
4.1.2 SWOT-анализ	67
4.2 Планирование научно-исследовательских работ.....	69
4.2.1 Определение трудоемкости выполнения работ.....	70
4.2.2 Разработка графика проведения научного исследования.....	71
4.3 Бюджет научно-технического исследования	71
4.3.1 Расчет материальных затрат научно-технического исследования.....	72
4.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ.....	73
4.3.3 Расчет заработной платы	73
4.3.4 Расчет дополнительной заработной платы.....	75
4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	75
4.3.6 Накладные расходы.....	76
4.3.7 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта.....	76
4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	77
5 Социальная ответственность.....	80
5.1 Анализ вредных и опасных факторов на рабочем месте	81
5.2 Анализ факторов, характеризующих возникновение чрезвычайных ситуаций.....	86
5.3 Анализ вредных факторов при адаптации математической модели на производстве.....	89
Заключение.....	93
Список публикаций.....	95
Список использованных источников.....	97

Введение

Особенности фракционного и химического состава дизельных топлив определяют зависимость их свойств от температурных условий применения, в связи, с чем различают дизельные топлива для умеренного, холодного и арктического климатов. В России наблюдается дефицит производства низкозастывающих дизельных топлив, обусловленный климатом значительной части регионов страны, а также освоением северных регионов и Арктики [1]. Существующая потребность в данном виде топлива покрывается менее чем наполовину. Данная статистика определяет важность и востребованность производства дизельных топлив с улучшенными низкотемпературными характеристиками.

В связи с повышением потребности в дизельных топливах возрастает и значимость процессов их производства. Одним из наиболее современных процессов производства данного вида топлива является процесс каталитической депарафинизации.

Процесс является достаточно новым для российской нефтеперерабатывающей отрасли (первая установка каталитической депарафинизации введена в эксплуатацию в 2003 на нефтеперерабатывающем заводе в г. Ухта). Это обуславливает недостаточную изученность закономерностей данного процесса, а также свойств низкозастывающих дизельных топлив, получаемых в данном процессе.

Исследования процесса каталитической депарафинизации ведутся научными коллективами ОАО «ВНИПИнефть» (В.М. Капустин, И.Е. Кузора и др.); ОАО «ВНИИ НП» (В.А. Хавкин, Л.А. Гуляева и др.); ООО «РН-ЦИР» (Д.Н. Герасимов, В.В. Фадеев и др.); УГНТУ, (Салихов А.И., и др.); СибГТУ, (О.А. Дружинин и др.); ОАО «Ангарский завод катализаторов и органического синтеза» (Т.П. Киселёва, Р.Р. Алиев и др.).

Основная тенденция в совершенствовании процесса депарафинизации направлена на разработку отечественных катализаторов. Также проводятся

исследования влияния различных конструкций аппаратов на выход и состав продукта в промышленных и лабораторных условиях.

Недостаточно изученными являются термодинамические закономерности процесса каталитической депарафинизации, а также закономерности влияния свойств молекул индивидуальных углеводородов на их низкотемпературные свойства и цетановое число. Их исследование позволяет осуществить моделирование данного процесса с целью его совершенствования.

Целью выпускной квалификационной работы является исследование процесса каталитической депарафинизации, предназначенного для производства дизельного топлива.

Моделирование процесса каталитической депарафинизации очень актуально, так как оптимизация данного процесса позволит получать требуемый вид топлива в соответствии с международными стандартами, при этом снизив экономические и производственные потери к минимуму.

Объектом исследования является установка каталитической гидродепарафинизации дизельных топлив.

Предметом исследования являются закономерности влияния свойств молекул индивидуальных углеводородов, содержащихся в дизельных фракциях, на их низкотемпературные свойства и цетановое число.

Личный вклад заключается в проведении квантово-химических расчетов дипольных моментов и энергий разрыва связей молекул углеводородов дизельных фракций, выявление и анализ зависимостей низкотемпературных характеристик и цетанового числа от свойств индивидуальных углеводородов.

Результаты проведенного исследования могут быть использованы для разработки математической модели и расчета низкотемпературных характеристик и цетанового числа дизельных топлив для оптимизации процесса каталитической депарафинизации дизельных топлив по низкотемпературным свойствам, цетановому числу и выходу продукта на промышленной установке депарафинизации с применением математической модели процесса.

1 Обзор литературы

1.1 Дизельное топливо, области применения дизельного топлива

Дизельное топливо – это смесь углеводородов, которую получают из керасиново–газойлевых фракций путем прямой перегонки нефти. Данный вид жидкого нефтяного топлива в основном применяют в дизельных двигателях внутреннего сгорания.

В источнике [2] двигатели с самовоспламенением (дизели) подразделяют по частоте вращения коленчатого вала на быстроходные и тихоходные. В значительной мере требования к качеству топлива определяется именно видом двигателя, а именно, степенью его быстроходности. Основная масса грузовых автомобилей и сельскохозяйственной техники на данный момент работает на быстроходных двигателях, а суда речного и морского флотов оснащены тихоходными двигателями внутреннего сгорания.

Автор [2] выделяет ряд преимуществ дизельных двигателей в сравнении с бензиновыми:

- дизельные двигатели более устойчивы к перегрузкам;
- выхлопные газы менее токсичны;
- за счет малого времени контакта топлива с воздухом уменьшается опасность возникновения детонационного возгорания и другие.

Но, не смотря на все преимущества, существуют и недостатки дизельных двигателей. Самым ощутимым для пользователей дизельных двигателей является, то, что в зимнее время года эксплуатация значительно затруднена.

1.2 Физико-химические и эксплуатационные свойства дизельного топлива

Общеизвестно, что дизельное топливо имеет ряд основных важнейших параметров, по которым определяется его марка и условия эксплуатации.

Рассмотрим некоторые из этих параметров более подробно.

Цетановое число. Под цетановым числом понимают воспламеняемость дизельного топлива, определяющуюся длиной задержки воспламенения топлива, который выражается периодом времени между впрыском топлива в цилиндр двигателя и началом его горения. То есть чем выше значение цетанового числа, тем меньше задержка и, как следствие, топливная смесь горит более спокойно. Для оптимальной работы современных дизельных двигателей цетановое число должно быть от 45 до 55, в зависимости от марки топлива (летнее, зимнее или арктическое дизельное топливо).

Температура застывания. Температура, при которой топливо полностью теряет подвижность. При снижении температуры парафины нормального строения срачиваются, образуя мелкие кристаллы, которые впоследствии, образуют сетчатые каркасные структуры, за счет которых топливо замерзает при дальнейшем охлаждении [3].

Предельная температура фильтруемости. Минимальная температура, при которой заданный объем топлива перекачивается через стандартный фильтр за определенный промежуток времени [3].

Температура помутнения. Температура, при которой топливо теряет свою фазовую однородность, т.е. при охлаждении нормальные парафины начинают образовывать агрегаты, которые мешают прокачке топлива через фильтры [4].

Фракционный состав оказывает существенное влияние на основные характеристики дизельного топлива такие как: полнота сгорания, дымность выхлопа, степень нагарообразования и другие. При высоком содержании легких фракций повышается давление сгорания, что «заставляет» двигатель работать в жестких условиях, снижая его долговечность. В то же время при высоком содержании тяжелых фракций увеличивается дымность выхлопа и снижается экономичность двигателя. Исходя из этого, можно сказать, что оптимальный фракционный состав дизельного топлива диктуется конструктивными особенностями дизельного двигателя и условиями его

эксплуатации.

Также не маловажными параметрами являются плотность и вязкость дизельного топлива, которые обеспечивают хорошую подачу топлива, его эффективность распыления в камере сгорания и работоспособность всего двигателя в целом.

Основные характеристики дизельных топлив разных марок можно видеть в таблице 1 [5].

Таблица 1 – Основные физико-химические показатели дизельных топлив разных марок [5]

Наименование показателя	Норма для марки		
	Л	З	А
1. Цетановое число, не менее	45	45	45
2. Фракционный состав:			
50 % перегоняется при температуре, °С	280	280	255
96 % перегоняется при температуре (конец перегонки), °С	360	340	330
3. Кинематическая вязкость при 20 °С, мм ² /с	3,0 – 6,0	1,8 – 5,0	1,5 – 4,0
4. Температура застывания, °С, не выше, для климатической зоны:			
умеренной	минус 10	минус 35	-
холодной	-	минус 45	минус 55
5. Температура помутнения, °С, не выше, для климатической зоны:			
умеренной	минус 5	минус 25	-
холодной	–	минус 35	-
6. Плотность при 20 °С, кг/м ³ , не более	860	840	830
7. Предельная температура фильтруемости, °С,	минус 5	-	-

Параметры, представленные в (таблице 1), показывают основные требования по низкотемпературным характеристикам дизельных топлив. Кроме представленных параметров нормируется также содержание серы, меркаптановой серы, воды, механических примесей, сероводорода и другие параметры.

В ходе выполнения выпускной квалификационной работы особое внимание уделялось низкотемпературным характеристикам дизельного топлива и значению цетанового числа, поэтому в следующем пункте будут рассматриваться методы определения именно этих показателей.

1.3 Методы экспериментального определения низкотемпературных свойств и цетанового числа дизельного топлива

В источнике [6] определение цетанового числа проводят с использованием стандартного одноцилиндрового четырехтактного форкамерного дизельного двигателя с переменной степенью сжатия. Опытным образцом такого двигателя являются двигатели модели ИДТ-90 (рисунок 1). Конечный результат получают в единицах условной шкалы цетановых чисел с диапазоном значений от 0 до 100.



Рисунок 1 – Внешний вид установки ИДТ-90

Сущность метода заключается в сравнении характеристик сгорания в двигателе исследуемого образца топлива с характеристиками сгорания эталонных образцов (первичных и вторичных) в том же двигателе с известными значениями цетановых чисел при испытании в нормальных рабочих условиях.

Метод определения температуры застывания

В источнике [7] определение температуры застывания проводят методом вращения, с использованием автоматического прибора, непрерывно вращающего и охлаждающего пробу. Данный метод определяет отсутствие течения нефтепродуктов (кроме сырой нефти) при кристаллизации образца и/или при увеличении его вязкости.

Сущность метода заключается в помещении пробы в автоматический аппарат определения температуры застывания, далее образец нагревают, затем охлаждают за счет поддержания постоянной разности температур между блоком охлаждения и пробой. Постоянно проверяют характеристики течения пробы, вращая сосуд с пробой со скоростью приблизительно 0,1 об./мин вокруг стационарного, уравновешенного шарообразного маятника. Температуру пробы, при которой кристаллическая структура и/или увеличение вязкости пробы вызывает смещение маятника, регистрируют с точностью до 0,1 °С. Затем проба нагревается до первоначальной температуры.

Метод определения предельной температуры фильтруемости

В источнике [8] определение предельной температуры фильтруемости проводят на холодном фильтре, с фиксированием самого высокого значения температуры, при котором фиксированный объем топлива не может пройти через стандартизированное фильтрационное устройство за определенный промежуток времени при постепенном охлаждении пробы.

Сущность метода заключается в охлаждении пробы при определенных условиях с постепенным снижением температуры на 1 °С, и втягивании в пипетку под вакуумом через специальный сетчатый фильтр изготовленный из проволоки. Понижение температуры продолжают до тех пор пока:

- выпадающие из раствора кристаллы парафинов не затрудняют прохождение топлива через фильтр ;
- выпадающие из раствора кристаллы парафинов не замедляют поток топлива так, что время заполнения пипетки превысит 60 секунд;
- топливо не прекратит полностью стекать в сосуд перед охлаждением еще на 1 °С.

Метод определения температуры помутнения

В источнике [9] определение температуры помутнения проводят при помощи двух специальных пробирок с двойными стенками и ручными мешалками. В первую пробирку помещают пробу топлива, а во вторую – прозрачный эталон, которую помещают на рабочем месте так, чтобы через нее

хорошо проходил свет.

Метод заключается в охлаждении образца при постоянном его перемешивании. За несколько градусов до предполагаемой температуры помутнения пробирка вынимается из смеси, в которой проходит охлаждение, и сравнивается с образцом эталона. Если вид топлива не отличается от прозрачного эталона, то пробирку снова возвращают на охлаждение и повторную проверку проводят при понижении температуры образца еще на один градус.

Данную процедуру проводят до тех пор, пока топливо не станет значительно отличаться от прозрачного эталона, т.е. до момента появления в образце мути. Температурой помутнения принимают температуру, при которой образец топлива стал отличаться от эталонного образца.

1.4 Современные требования к дизельным топливам для холодных климатических зон

Одним из важнейших критериев эксплуатационной эффективности дизельных топлив, применяемых в условиях холодных климатических зон, являются хорошие низкотемпературные свойства, значениями которых определяется функционирование дизельных двигателей при отрицательных температурах окружающей среды и в условиях хранения топлива. Низкотемпературные свойства в основном определяются содержанием нормальных парафинов в дизельных топливах и характеризуются тремя показателями: температурой помутнения, температурой застывания и предельной температурой фильтруемости (ПТФ).

В настоящее время в России экологические и эксплуатационные характеристики дизельных топлив регулируются Техническими условиями, а также Техническим регламентом Таможенного Союза ТР ТС 013/2011 «О требованиях к автомобильному и авиационному бензину, дизельному и судовому топливу, топливу для реактивных двигателей и мазуту» [10].

Технические условия устанавливаются следующими основными Государственными стандартами:

- ГОСТ Р 52368-2005 (ЕН 590:2009) «Топливо дизельное ЕВРО. Технические условия (с Изменением №1)» [11],
- ГОСТ Р 55475-2013 «Топливо дизельное зимнее и арктическое депарафинированное. Технические условия» [12],
- ГОСТ 32511-2013 (ЕН 590:2009) «Топливо дизельное ЕВРО. Технические условия» [13] – вступил в силу 01.01.2015 г.

Технический регламент Таможенного Союза в большей степени регулирует экологические характеристики топлив, а также устанавливает сроки обязательного перехода на выпуск топлива того или иного класса.

Характеристики зимнего и арктического дизельных топлив, полученных в процессе депарафинизации, а также технология их производства регламентируются в соответствии с источником [12]. Основные показатели качества зимнего и арктического дизельных топлив приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Требования к дизельному топливу [12]

№	Наименование показателя	Значение				
		3-32	3-38	A-44	A-48	A-52
1	Цетановое число, не менее	48	47			
2	Температура вспышки в закрытом тигле, °С, не ниже	40	30			
3	Кинематическая вязкость при 40°С, мм	1,5- 4,5	1,4- 4,5	1,2-4,0		
4	Фракционный состав					
	перегоняется до температуры 180 °С, % об., не более	10				

Продолжение таблицы 2

	95% об. перегоняется при температуре, °С, не выше	360				
5	Температура помутнения, °С, не выше	минус 22	минус 28	минус 34	минус 38	минус 42
6	Предельная температура фильтруемости, °С, не выше	минус 32	минус 38	минус 44	минус 48	минус 52

Обозначения в таблице 2: З – зимнее дизельное топливо; А – арктическое дизельное топливо; цифры стоящие после букв З и А показывают значение предельной температуры фильтруемости. По источнику [12] значение температуры застывания не регламентируется.

1.5 Способы получения низкозастывающих дизельных топлив

Разработки технологий получения низкозастывающих дизельных топлив являются на данный момент очень актуальными в России, так как потребление зимнего и арктического видов данного топлива постоянно растет. Реализация проектов в данной области требует комплексного подхода, позволяющего обеспечить значительное повышение качества топлива и доведение его до международных стандартов.

Данное условие является определяющим для получения российскими нефтеперерабатывающими предприятиями дизельного топлива современного уровня качества и выведения отечественных технологий на высокий технический уровень. Для достижения данной цели требуется внедрение современных гидрогенизационных процессов производства дизельных топлив и создание новейших эффективных катализаторов, позволяющих осуществить промышленную реализацию технологий.

Наиболее часто применяемые в российской практике технологии

получения низкозастывающих дизельных топлив методы сокращения температурных интервалов кипения, разбавления дизтоплива керосиновой фракцией и применения депрессорных присадок [14]. Но, к сожалению, существующие методы не являются технологически и экономически обоснованным. При снижении температуры конца кипения дизельного топлива и смешении с керосином улучшению низкотемпературных свойств топлива сопутствует общее ухудшение его качества, а именно, снижение цетанового числа, вязкости, температуры вспышки, повышение степени износа двигателя, а также сложность подбора оптимального состава дизельного топлива, удовлетворяющего требованиям стандартов [15].

К уже перечисленным недостаткам также можно добавить, что использование данных технологий приводит к снижению выхода суммы светлых нефтепродуктов и уменьшению объема выпуска реактивного топлива, что является неприемлемым, учитывая факт повышения в настоящее время спроса на данный вид топлива.

Производство зимних и арктических ДТ введением депрессорных присадок не приводит к ухудшению качества целевого продукта, однако высокая стоимость присадок, проблема подбора оптимальной присадки и оптимального дозирования в зависимости от конкретного состава топлива, также создает проблемы как для производителей, так и для потребителей (так как значительно увеличивается стоимость производства и цена конечного продукта).

Как отмечено в пункте 1.4, низкотемпературные свойства дизельных топлив напрямую зависят от содержания в них парафинов нормального строения, обладающих улучшенными низкотемпературными характеристиками (что отрицательно сказывается на качестве дизельного топлива в целом), поэтому наиболее эффективны процессы, направленные на уменьшение концентрации в дизельных фракциях данной группы углеводородов. Но, в то же время, снижение содержания нормальных парафинов приведет к уменьшению значения цетанового числа, поэтому производители должны

находить технологии получения дизельных топлив с оптимальными значениями всех определяющих параметров.

На сегодняшний день основными промышленными процессами, применение которых позволяет снизить содержание нормальных парафинов в дизельных топливах, являются технологии каталитической гидродепарафинизации и изодепарафинизации (изомеризационной депарафинизации). Различия между данными технологиями заключается в применяемых катализаторах, а соответственно и в механизме протекания химических превращений [1].

В ходе выполнения выпускной квалификационной работы внимание уделяется именно процессу гидродепарафинизации, поэтому данный процесс рассмотрим подробнее.

В процессе гидродепарафинизации снижение концентрации н-парафинов в дизельной фракции происходит за счет их разрушения в результате крекинга, что приводит к небольшому снижению выхода целевого продукта и его обогащению нафтеновыми и ароматическими углеводородами, вследствие чего цетановое число снижается по сравнению с показателем в исходной фракции. Выход целевого продукта в процессе гидродепарафинизации составляет 88-90 % мас. Данный процесс, также как и процесс изодепарафинизации, проводят на бифункциональных катализаторах, содержащих гидрирующие металлы, а в качестве кислотного компонента – цеолиты или цеолитоподобные структуры.

Установлено, что реакции изомеризации и распада углеводородов идут на одних и тех же центрах катализатора (кислотных), при этом крекинг парафиновых углеводородов изо-строения, имеющих тот же молекулярный вес, что и нормальные парафины, протекает значительно легче.

1.6 Постановка цели и задач исследования

Обзор литературы в области производства дизельных топлив показал, что потребность в дизельных топливах с улучшенными низкотемпературными свойствами удовлетворена только на половину и имеется тенденция роста спроса на такие дизельные топлива. Поэтому в российскую промышленность внедряются новые технологии процесса каталитической депарафинизации [16], позволяющие выпускать не только летнее, но и зимнее и арктическое дизельное топливо.

Кроме того, выявлено, что понижение низкотемпературных свойств дизельных топлив (температуры помутнения, предельной температуры фильтруемости, температуры застывания) в процессе депарафинизации сопровождается также снижением выхода целевого продукта – дизельного топлива, а также ухудшению цетанового числа за счет снижения содержания н-парафинов в его составе. Поэтому, с одной стороны, необходимо производить дизельное топливо с требуемыми низкотемпературными свойствами, а с другой, стремиться к достижению максимально возможного выхода целевого продукта при соблюдении требований стандартов по цетановому числу.

Для решения таких сложных многофакторных задач нефтеперерабатывающей промышленности эффективно применяется метод математического моделирования [17, 18]. Математические модели, разработанные на основе физико-химических закономерностей протекания процессов, позволяют проводить мониторинг, прогнозировать и оптимизировать процессы нефтепереработки.

Целью данной работы является исследование процесса каталитической депарафинизации, предназначенного для производства дизельных топлив.

Задачи работы включают:

1. Проведение термодинамического анализ реакций процесса каталитической депарафинизации;

2. Разработку схемы превращений углеводородов в процессе;
3. Исследование закономерности влияния свойств молекул индивидуальных углеводородов на их низкотемпературные характеристики и цетановое число.

2 Объект и методы исследования

2.1 Описание технологического процесса и технологической схемы установки каталитической депарафинизации

Процесс каталитической депарафинизации заключается в гидрокрекировании длинно цепочных парафинов входящих в состав сырья. Для того чтобы гидрокрекирование проходило избирательно, используют бифункциональные цеолитные катализаторы на основе неблагородных металлов.

Первая стадия процесса каталитической депарафинизации включает гидроочистку, так как серо-, азот- и кислород-содержащие соединения являются ядами для катализаторов применяемых на последующих стадиях, т.е. они значительно снижают активность и продолжительность использования катализатора, снижение их содержания значительно улучшает показатели гидрокрекинга. Предварительная обработка сырья может не потребоваться, если сырье содержит сравнительно мало органической серы и азота, но на территории России очень мало месторождений с сырьем, удовлетворяющим требованиям. Кроме того, сырье нефтеперерабатывающего завода, в состав которого входит установка депарафинизации, характеризуется высоким содержанием серы.

В процессе применяется два типа катализаторов. Первый – высокоактивный катализатор десульфуризации и деазотирования, способствующий достижению оптимального баланса между целями и себестоимостью переработки. Катализатор второго типа – патентованный катализатор депарафинизации – избирательно крекирует n-парафины.

Размеры пор цеолитовой подложки катализатора депарафинизации таковы, что в них могут свободно проникать молекулы нормальных (и близких к нормальным) парафинов, в отличие от молекул разветвленных парафинов. В результате первые крекируются значительно быстрее последних.

Таким образом, достигаемое избирательное сокращение содержания длинноцепочных парафинов улучшает показатели текучести углеводородного сырья при низких температурах. Гибкая система с катализаторами предварительной обработки и депарафинизации позволяет перерабатывать сырье с самыми разными свойствами и содержанием примесей, не ухудшая качество продукта и не сокращая длительность цикла.

Тип катализатора, применяемого на конкретной установке, определяется целями переработки. Катализаторы депарафинизации сохраняют работоспособность в течение 6-8 лет, в течение которых их по мере необходимости регенерируют. Типичная длительность цикла между регенерациями составляет от 2-4 года.

Технологическая схема установки каталитической депарафинизации (рисунок 2) включает в себя три основных блока и 5-7 вспомогательных узлов. Количество вспомогательных узлов варьируется в зависимости от того как на предприятии комбинируются установки и есть ли между ними какие то связи.

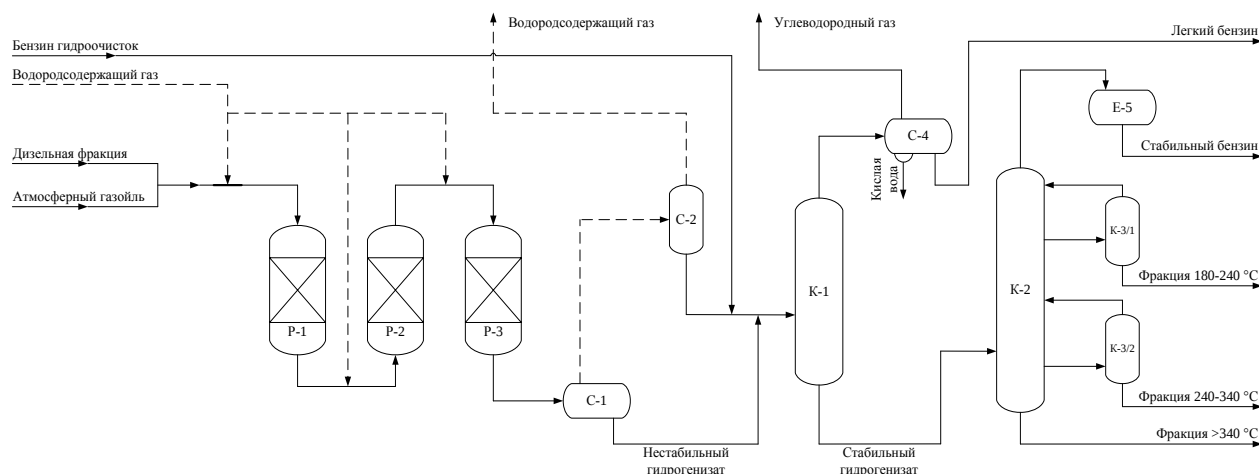


Рисунок 2 – Схема установки каталитической депарафинизации [19]

P-1 и P-2 – реакторы гидроочистки; P-3 – реактор депарафинизации; C-1 – сепаратор высокого давления; C-2 – сепаратор низкого давления; K-1 – стабилизационная колонна; K-2 – ректификационная колонна; K-3/1, 3/2 – отпарные колонны (стрипинги); C-4, E-5 – рефлюксные ёмкости

Основными блоками процесса каталитической депарафинизации являются:

- Реакторный блок, предназначенный для гидроочистки и гидродепарафинизации сырья.
- Блок стабилизации, предназначенный для стабилизации продукта процесса гидродепарафинизации (гидрогенизата).
- Блок ректификации, предназначенный для разделения стабильного гидрогенизата на отдельные фракции (бензиновую, дизельную и остаток)

Каталитической депарафинизации является сложным и многостадийным процессом, включающим вышеприведённые блоки.

Сырьевая смесь поступает в реакторный блок на «тройник смешения», где смешивается с циркуляционным водородсодержащим газом. После «тройника смешения» газосырьевая смесь нагревается в теплообменнике и подается в печь, после чего поступает в реакторы гидроочистки P-1 и P-2. После реактора P-2 газопродуктовая смесь поступает на нагрев в печь и далее в реактор депарафинизации P-3. Реактора P-1, P-2, P-3 работают последовательно. В реакторах P-1 и P-2 происходит гидрирование соединений, содержащих серу, азот и кислород с образованием сероводорода, аммиака и воды, водородсодержащий газ подается между реакторами P-1 и P-2.

Регулирование температуры на входе в реактор депарафинизации P-3 может осуществляться двумя вариантами: охлаждение газопродуктовой смеси подачей водородсодержащего газа между реакторами P-2 и P-3, если температура входа в P-3 выше необходимой, и нагрев в печи, если температура на входе в P-3 ниже необходимой для процесса гидродепарафинизации.

Газопродуктовая смесь из реактора P-3 поступает в сепаратор C-1, где происходит ее разделение на парогазовую смесь и нестабильный гидрогенизат. Парогазовая смесь из сепаратора C-1 поступает в теплообменник, где отдает тепло на нагрев нестабильного гидрогенизата из C-2, затем охлаждается в воздушном холодильнике и поступает в сепаратор C-2, где разделяется на циркуляционный газ и нестабильный гидрогенизат. На выходе из сепаратора C-2 в поток нестабильного гидрогенизата подается бензин-отгон гидроочисток. Нестабильный гидрогенизат из сепаратора C-2 нагревается теплом парогазовой

смеси из С-1, и после смешения с нестабильным гидрогенизатом сепаратора С-1, направляется на стабилизацию в колонну К-1. Для поддержания необходимой концентрации водорода в циркуляционном газе часть газа отдувается с установки, а взамен в поток циркуляционного газа подается свежий водородсодержащий газ.

В блоке стабилизации смесь нестабильного гидрогенизата из сепараторов С-1 и С-2 с отгоном с установок гидроочистки нагревается в теплообменнике и поступает в колонну стабилизации К-1, где из нее выделяются растворенные легкие углеводороды, сероводород и вода. Для более эффективного удаления сероводорода из нестабильного гидрогенизата предусмотрена линия подачи стабильного бензина (верх К-2) в печь перед колонной К-1.

Легкие продукты из верхней части колонны К-1 конденсируются и охлаждаются в воздушном и водяном конденсаторах-холодильниках и поступают в сепаратор С-4, где происходит их разделение на углеводородный газ и легкий бензин и отстаивание легкого бензина от воды. Для снижения степени коррозии оборудования и трубопроводов перед воздушным конденсатором-холодильником в поток подается ингибитор коррозии. Легкий бензин из сепаратора С-4 подается на 20 тарелку колонны К-1 в качестве орошения, а балансовое количество выводится на установки первичной переработки нефти.

После блока стабилизации стабильный гидрогенизат из нижней части колонны К-1 поступает в блок ректификации через печь в колонну К-2. В сложной колонне ректификации К-2 с двумя стриппингами К-3/1 и К-3/2 происходит разделение стабильного гидрогенизата на следующие фракции: стабильный бензин (верх К-2), 180-240 °С, 240-340 °С и остаток – фракцию > 340 °С. Пары стабильного бензина из верхней части колонны К-2 после конденсации и охлаждения в воздушном конденсаторе-холодильнике поступают в рефлюксную емкость Е-5, откуда часть бензина возвращается в колонну К-2 в качестве орошения, а балансовое количество после охлаждения в

воздушном и водяном холодильниках выводится с установки. Фракция 180-240 °С выводится на верхнюю тарелку колонны стриппинга К-3/1, где из нее выделяются более легкие фракции. Выделенная легкая часть фракции 180-240 °С возвращается в колонну К-2, а стабильная фракция 180-240 °С из кубовой части колонны К-3/1 и после охлаждения в воздушном и водяном холодильниках выводится с установки. Фракция 240-340 °С выводится на верхнюю тарелку в колонну стриппинга К-3/2, где из нее выделяются более легкие фракции. Выделенная легкая часть фракции 240-340 °С возвращается в колонну К-2, а стабильная фракция 240-340 °С из нижней части колонны К-3/2 отдает свое тепло в ребойлере на поддержание температурного режима в колонне К-3/1 и в трубном пространстве теплообменника на нагрев сырья, охлаждается в воздушном холодильнике и выводится с установки. Фракция > 340 °С из кубовой части колонны К-2 частично возвращается в колонну через печь в качестве «горячей струи», а балансовое количество отдает тепло в ребойлере на поддержание температурного режима колонны К-3/2 и в теплообменнике на нагрев сырья колонны К-1, после чего охлаждается в воздушном холодильнике и выводится с установки в качестве компонента приготовления котельного топлива [19].

2.2 Квантово-химические методы расчета свойств молекул

Существует множество различных методов по проведению анализа термодинамики реакций протекающих в определенном процессе. Проведение данного анализа включает в себя определение таких параметров как энтальпия, энтропия и энергия Гиббса, также в ходе данного анализа определяется вероятность протекания той или иной реакции при заданных условиях процесса (определенной температуре и давлении).

Справочники [20] с термодинамическими параметрами веществ позволяют проводить такие расчеты, но количество описанных в них компонентов ограничено и отсутствует возможность исследования влияния

давления на протекание реакций. Другими способами определения термодинамики является, например, энтропийно-информационный метод моделирования и метод термодинамического подобия [21]. Использование данных методов многократно увеличивает объем расчетов и время их проведения.

В настоящее время созданы такие программные модули как Gaussian, HyperChem, Природа, которые значительно упрощают квантово-химических расчеты и сокращают затраты времени на данный вид работы.

Данные методы на основе расчетов электронной структуры молекул, путем решения уравнения Шредингера, позволяют предсказать различные молекулярные свойства химических систем, такие как энергия, структура, спектральные характеристики, термохимические параметры, параметры ядерного магнитного резонанса и т.д. Они не имеют жесткой привязки к узким классам органических соединений и способны учесть множество эффектов, таких как колебательные и вращательные движения атомов, конфигурацию электронных орбиталей, эффекты сопряжения двойных связей [22].

Программный пакет Gaussian является наиболее распространенным средством выполнения неэмпирических квантово-химических расчетов. Программный комплекс предлагает целый ряд методов расчета электронной структуры.

Разные методы характеризуются разными наборами параметров. Неэмпирические методы, в отличие от полуэмпирических и методов молекулярной механики, при расчетах не используют параметров, полученных экспериментально. Расчеты по неэмпирическим методам основываются только на законах квантовой механики и на небольшом наборе физических констант, таких как скорость света, масса и заряд электрона и ядра, постоянная Планка [23].

Полуэмпирические и неэмпирические методы различаются точностью результатов. Полуэмпирические методы обеспечивают достаточно качественные описания молекулярных систем и довольно точное

количественное предсказание энергии и структуры систем, для которых существуют наборы параметров. Неэмпирические вычисления дают высокоточные расчеты целого ряда систем без каких-либо ограничений, недостатком такого метода является длительность расчета [24].

Для расчета термодинамических характеристик индивидуальных углеводородов, входящих в состав дизельных фракций и участвующих в реакциях процесса каталитической депарафинизации, был использован программный продукт Gaussian, реализующий квантово-химические методы расчета реакций в ходе процесса депарафинизации. Модели веществ, участвующих в реакциях, были построены в программе GaussView.

В данной работе в качестве метода расчета выбран метод теории функционала плотности DFT. Преимуществом данного метода перед другими методами является то, что модели DFT учитывают эффект электронной корреляции, т.е. тот факт, что электроны в молекуле отталкиваются в результате взаимодействия. Метод теории функционала плотности обладает достаточной точностью для расчета углеводородов дизельной фракции. Теоретическим приближением являлась модель B3LYP (теория функционала плотности Беке (B3), использующая электронную корреляцию Ли Янга и Пара (LYP)), базис 3-21G [23].

2.3 Метод математического моделирования в решении задач повышения эффективности нефтеперерабатывающих производств

В настоящее время с развитием науки, техники и производства технологические объекты нефтепереработки, как и другие производственные объекты, непрерывно усложняются, и уже сейчас говорят об этих объектах как о некоторой сложной системе, которая состоит из различных компонентов, взаимосвязанных друг с другом и характеризующаяся множеством критериев экономического, экологического характера.

При применении методов математического моделирования технологических систем нефтепереработки необходимо, прежде всего, четко определить цель моделирования, так как невозможно полностью смоделировать реально функционирующую систему – исследуемую технологическую установку нефтепереработки.

Любой процесс нефтеперерабатывающей промышленности очень сложен и включает в себя массу различных реакций с огромным числом реакционных компонентов, поэтому применение математического моделирования в данной области не заменимо.

Математическое моделирование обладает достаточной точностью описания и очень мощными прогностическими свойствами, позволяющими осуществлять эффективное масштабирование и оптимизацию различных процессов в широком диапазоне параметров их осуществления.

На данный момент существуют общие модели основных реакторов, установок и аппаратов участвующих в нефтепереработке, что значительно упрощает как моделирование уже известных технологий, так и создание моделей обновленных или новейших процессов. Основная сложность моделирования заключается в описании химизма процесса, так как именно на нем «строится» математическое моделирование.

Из-за сложности химизма процессов и большого количества индивидуальных компонентов реакций кинетические модели получаются очень громоздкими, а определение параметров на основании экспериментальных данных становится практически невыполнимой задачей. Для решения данной проблемы в таких моделях стали использовать различные упрощения, основанные на группировке индивидуальных реагентов и индивидуальных реакций в групповые псевдореагенты и групповые реакции, соответственно.

Это позволяет существенно упростить кинетические модели и уменьшить число определяемых параметров в них, но при этом происходит естественное снижение точности модели и ее прогностической мощности. В

целом эффективность применяемых моделей определяется именно успешностью компромисса между простотой и точностью.

Математические модели эффективно используются для решения таких задач нефтепереработки как:

- оптимизации промышленных процессов, что позволяет повысить стабильность работы промышленных аппаратов, выход целевых продуктов при минимизации затрат [25–27];
- исследования и улучшения работы промышленных сопряженных реакционных и ректификационных процессов и аппаратов [28–31];
- исследования факторов, влияющих на дезактивацию катализаторов процессов нефтепереработки и продление срока их службы [32];
- оптимизации производства товарных бензинов [33].

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Разрабатываемый проект направлен на разработку и составление математической модели в виде программного продукта для исследования и оптимизации процесса каталитической гидродепарафинизации дизельного топлива.

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

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

- разработка общей экономической идеи проекта, формирование концепции проекта;
- организация работ по научно-исследовательскому проекту;
- планирование научно-исследовательских работ;
- оценки коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения;
- определение ресурсосберегающей, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективностей исследования [36].

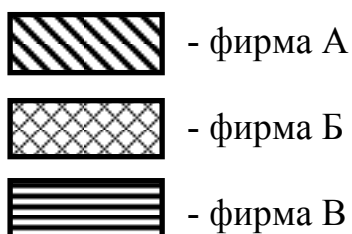
4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Потенциальные потребители результатов исследования

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование. На рисунке 20 представлена карта сегментирования рынка по виду оказываемой услуги с применением математической модели процесса гидродепарафинизации дизельного топлива.

Потребитель	Вид услуги		
	Продажа программного продукта	Оказание услуг по исследованию и оптимизации	Продажа тренировочной версии
Крупные НПЗ			
Средние НПЗ			
Мелкие НПЗ			
Образовательные учреждения			
Проектные организации			

Рисунок 20 – Карта сегментирования



На рисунке 20 показано, какие ниши на рынке услуг по применению математической модели не заняты конкурентами или где уровень конкуренции низок.

4.1.1 Анализ конкурентных технических решений

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешнее противостоять своим соперникам. Важно реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

В таблице 16 представлен сравнительный анализ математической модели (М), которую планируется создать на основании полученных зависимостей, и двух конкурентных моделей (К1) [22] и (К2) [37], выполненных в 2013 и 2014 годах соответственно.

Таблица 16 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _М	Б _{К1}	Б _{К2}	К _М	К _{К1}	К _{К2}
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
Повышение производительности труда пользователя	0,09	5	2	2	0,45	0,18	0,18
Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,07	5	3	3	0,35	0,21	0,21
Энергоэкономичность	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
Надежность	0,07	5	4	4	0,35	0,28	0,28
Безопасность	0,04	5	5	5	0,2	0,2	0,2
Экономические критерии оценки эффективности							
Конкурентоспособность продукта	0,2	5	3	2	1	0,6	0,4
Уровень проникновения на рынок	0,07	4	5	4	0,28	0,35	0,28
Цена	0,08	5	3	4	0,4	0,24	0,32
Предполагаемый срок эксплуатации	0,08	5	5	5	0,4	0,4	0,4
Послепродажное обслуживание	0,07	5	5	2	0,35	0,35	0,14
Финансирование научной разработки	0,03	4	4	4	0,12	0,12	0,12
Срок выхода на рынок	0,05	5	3	3	0,25	0,15	0,15
Наличие сертификации разработки	0,05	5	5	5	0,25	0,25	0,25
Итого	1	63	51	46	4,9	3,73	3,23

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле [36]:

(1)

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

$В_i$ – вес показателя (в долях единицы);

$Б_i$ – балл i -го показателя.

Разрабатываемая математическая модель является конкурентоспособной на рынке, главным преимуществом которой, является чувствительность к составу перерабатываемого сырья.

4.1.2 SWOT-анализ

Для комплексной оценки научно-исследовательского проекта применяют SWOT-анализ, результатом которого является описание сильных и слабых сторон проекта, выявление возможностей и угроз для его реализации, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Итоговая матрица SWOT-анализа представлена в таблице 17.

Таблица 17 – SWOT-анализ

	Сильные стороны проекта: 1. Возможность оптимизации важного процесса переработки нефтяного сырья – гидродепарафинизации. 2. Эффективное использование топливно-энергетических ресурсов. 3. Возможность проведения необходимых исследований без вмешательства в работу 4. Отсутствие аналогичных математических моделей по процессу 5. Чувствительность к изменению состава сырья.	Слабые стороны проекта: 1. Ограниченность экспериментальных данных с промышленной установки. 2. Отсутствие учета в модели реакции коксообразования на катализаторе депарафинизации. 3. Отсутствие экспериментальных образцов для проведения анализа.
Угрозы:	1. Продвижение новой технологии	1. Разработка научного

1.Создание подобной модели на рынке в более быстрые сроки 2.Внедрение других моделей на предприятиях отечественных НПЗ	оптимизации процесса с применением математической модели. 2. Развитие конкурентной среды. 3. Введение в модель чувствительности к составу сырья	исследования 2.Повышение квалификации кадров у потребителя 3.Приобретение необходимых экспериментальных данные по составу сырья и продукта с
---	---	--

Продолжение таблицы 17

3. Отсутствие спроса не заинтересованность предприятий по внедрению инновационного проекта		промышленной установки.
Возможности: 1. Внедрение разработанной модели на предприятия нефтепереработки для оптимизации процесса производства дизельных топлив. 2. Внедрение разработанной модели на производство для отработки действий персонала. 3. Внедрение системы в образовательную сферу в качестве компьютерного тренажера для обучения студентов. 4.Использование инновационной инфраструктуры ТПУ 5. Внедрение на Российский НПЗ процесса гидродепарафинизации и соответственно повышение спроса на разрабатываемый продукт.	1.Разработка математической модели процесса каталитической гидродепарафинизации на основании физико-химической основы процесса с учетом реакционной способности углеводородов, участвующих в реакциях	1.Ограниченность экспериментальных данных с промышленной установки. 2.Отсутствие данных о содержании кокса на катализаторе. 3.Повышение эффективности использования сырья на предприятии 4.Повышение квалификации персонала на производстве 5.Создание тренировочной версии для обучения студентов основам процесса гидродепарафинизации, закономерностям процесса. 6.Отсутствие экспериментальных образцов для проведения анализа.

В данном разделе был проведен SWOT-анализ, представленный в таблице 17. По его результатам были выявлены сильные и слабые стороны проекта, а так же угрозы и возможности. Так же было выявлено то, как можно компенсировать слабые стороны проекта за счет его возможностей и нейтрализовать угрозы с помощью сильных сторон проекта. Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта.

4.2 Планирование научно-исследовательских работ

В Таблице 18 составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, проведено распределение исполнителей по видам работ.

Таблица 18 - Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследований	Руководитель, бакалавр
	3	Подбор и изучение материала	Бакалавр
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель
	5	Изучение литературы, термодинамический анализ реакций, составление формализованной схемы превращений	Бакалавр
	6	Разработка кинетической модели	Бакалавр, руководитель
	7	Проверка модели на адекватность	Руководитель
	8	Расчет на разработанной математической модели	Бакалавр
	9	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель
	10	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель
Обобщение и оценка результатов	11	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель
	12	Составление пояснительной записки	Бакалавр
<i>Проведение ОКР</i>			
Оформление отчета по НИР (комплекта документации по ОКР)	13	Подготовка к защите дипломной работы	Бакалавр
	14	Защита дипломной работы	Бакалавр

4.2.1 Определение трудоемкости выполнения работ

Ожидаемая трудоемкость выполнения [36]:

$$t_{\text{ож}i} = \frac{3t_{\text{min}i} + 2t_{\text{max}i}}{5} \quad (2)$$

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

$t_{\text{min}i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\text{max}i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Ожидаемая трудоемкость для этапов работы, приведенных в таблице 18, рассчитывается по формуле (2):

$$t_{\text{ож}1} = \frac{3 \cdot 1 + 2 \cdot 2}{5} = 1,4, \text{ чел.-дн.}$$

Для этапов 2 – 14 расчет аналогичен. Результаты в Приложении А.

Продолжительность каждой работы в рабочих днях [36]:

$$T_{pi} = \frac{t_{\text{ож}i}}{Ч_i} \quad (3)$$

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

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

Продолжительность каждого этапа работы приведенных в таблице 18 рассчитывается по формуле (3) [36]:

$$T_{p1} = \frac{1,4}{1} = 1,4$$

Для этапов 2 – 14 расчет аналогичен. Результаты в Приложении А.

4.2.2 Разработка графика проведения научного исследования

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни.

Для этого необходимо воспользоваться следующей формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}} \quad (4)$$

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

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

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

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} \quad (5)$$

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.

$$k_{\text{кал}} = \frac{366}{366 - 119} = 1,48$$

Продолжительность выполнения каждого этапа работы, приведенного в Таблице 18 рассчитывается по формуле (4).

$$T_{k1} = 1,4 \cdot 1,48 = 2,08 = 2$$

Все рассчитанные значения представлены в Приложении А.

На основе Приложения А строится календарный план-график Приложение Б.

4.3 Бюджет научно-технического исследования

При планировании бюджета должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех расходов, связанных с его выполнением [36].

4.3.1 Расчет материальных затрат научно-технического исследования

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле [36]:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m \Pi_i \cdot N_{расхi} \quad (6)$$

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

$N_{расхi}$ – 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 (принимается в пределах 15-25% от стоимости материалов).

Материальные затраты на требующиеся аппараты и приспособления представлены в таблице 19.

Таблица 19 – Материальные затраты

Наименование	Ед. измерения	Количество			Цена за ед. с НДС, руб.			Затраты на материалы, (З _м), руб.		
		Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
Хроматограф кристалл 5000	шт.	1	1	1	825300	825300	825300	825300		
Образцы дизельного топлива	литр	2	4	6	37	37	37	74	148	222
ПГС водород 40%	балон	1	2	3	2430	2430	2430	2430	4860	7290
Автоматическая установка ПТФ	шт	1	1	1	212400	212400	212400	212400		
Итого	Исполнение 1				Исполнение 2			Исполнение 3		
	1040204 руб.				1042708 руб.			1045212 руб.		

4.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

Расчет затрат на приобретение программного обеспечения (ПО) в таблице 20.

Таблица 20 – расчеты затрат на приобретение ПО

Наименование ПО			Стоимость ПО с НДС, руб.		
Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
Microsoft office	Microsoft office	Microsoft office	2900	2900	2900
-	Delphi	Delphi		43800	43800
Gaussian	Gaussian	Gaussian	35700	35700	35700
Итого:			38600	82400	82400

4.3.3 Расчет заработной платы

Расчет основной заработной платы представлен в таблице 21.

Таблица 21 – Расчёт основной заработной платы

№	Наименование этапов	Исполнители по категориям	Трудо-емкость, чел.-дн.	Заработная плата, на один чел.-дн., тыс.руб.	Всего заработная плата по окладам без кр, тыс. руб.
1	Разработка технического задания, выбор направления исследований, оценка результатов	Руководитель	22	1,08	23,76
2	Теоретические и экспериментальные исследования, расчет на разработанной модели, оформление отчетов по НИР	Бакалавр	44	0,411	18,08
Итого:					41,84

$$C_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}, [3] \quad (7)$$

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

$Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле [36]:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}, \quad (8)$$

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

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле [36]:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (9)$$

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

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

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 22).

Таблица 22 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Бакалавр
Календарное число дней	366	366
Количество нерабочих дней – выходные дни – праздничные дни	119	119
Потери рабочего времени – отпуск – невыходы по болезни	92	92
Действительный годовой фонд рабочего времени	155	155

Месячный должностной оклад работника [36]:

$$, \quad (10)$$

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

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3.

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 23.

Таблица 23 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	З _б , руб.	k _р	З _м , руб.	З _{дн} , руб.	T _р , раб. дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель	23760	1,3	30888	2231,9	155	345944,5
Бакалавр	18080	1,3	23504	1698,4	155	263252

4.3.4 Расчет дополнительной заработной платы

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 12-15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнение темы [36]:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}} \quad (11)$$

где $З_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.;

$k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты (15 % от $З_{\text{осн}}$);

$З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

Результаты расчета в таблице 24.

4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников. Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы [36]:

$$З_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (12)$$

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

На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2015 году водится пониженная ставка – 30%.

Результаты расчета в таблице 24.

4.3.6 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов и т.д. Их величина определяется по следующей формуле [36]:

(13)

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

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

Результаты расчета в таблице 24.

4.3.7 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно- технической продукции [36].

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 24.

Таблица 24 – Расчет бюджета затрат на научно-исследовательский проект

Наименование статьи	Сумма, руб.		
	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Материальные затраты	1040204	1042708	1045212
2. Затраты на специальное оборудование	38600	82400	82400
3. Затраты по основной ЗП исполнителей	54392	54392	54392
4. Затраты по дополнительной ЗП исполнителей	8158,8	8158,8	8158,8
5. Отчисления во внебюджетные фонды	18765	18765	18765
6. Накладные расходы	185619,2	193027,8	193428,5
7. Бюджет затрат НТИ	1345739	1399451,6	1402356,3

Как видно из таблицы 24 основные затраты НТИ приходятся на материальные затраты, включающие покупку дорогостоящего оборудования и приспособления для его работы.

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

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по формуле [36]:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.i}} = \frac{\Phi_{\text{pi}}}{\Phi_{\text{max}}} \quad (14),$$

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

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

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

$$I_{\text{ф}}^{\text{исп 1}} = 1345739/1402356,3 = 0,95$$

$$I_{\text{ф}}^{\text{исп 2}} = 1399451,6/1402356,3 = 0,99$$

$$I_{\text{ф}}^{\text{исп 3}} = 1402356,3 / 1402356,3 = 1$$

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в размах (значение меньше единицы, но больше нуля). Результаты расчета интегрального показателя ресурсоэффективности приведены в таблице 25.

Таблица 25 - Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии \ Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Способствует росту производительности труда	0,1	4	4	5
2. Удобство в эксплуатации	0,15	2	4	5
3. Энергосбережение	0,15	4	5	5
4. Надежность	0,20	3	4	4
5. Воспроизводимость	0,25	5	3	5
6. Материалоемкость	0,15	4	4	3
ИТОГО	1			

$$I_{\text{р-исп1}} = 0,1 * 4 + 0,15 * 2 + 0,15 * 4 + 0,20 * 3 + 0,25 * 5 + 0,15 * 4 = 3,8$$

$$I_{\text{р-исп2}} = 0,1 * 4 + 0,15 * 4 + 0,15 * 5 + 0,2 * 4 + 0,25 * 3 + 0,15 * 4 = 3,9$$

$$I_{\text{р-исп3}} = 0,1 * 5 + 0,15 * 5 + 0,15 * 5 + 0,20 * 4 + 0,25 * 5 + 0,15 * 3 = 4,5$$

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

$$I_{исп.i} = \frac{I_{p-исп.i}}{I_{финр}} \quad (15)$$

$$I_{исп.1} = 3,8 / 0,95 = 4,00$$

$$I_{исп.2} = 3,9 / 0,99 = 3,94$$

$$I_{исп.3} = 4,5 / 1,00 = 4,50$$

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

Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{cp}$) [36]:

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

Таблица 26 - Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
Интегральный финансовый показатель разработки	0,95	0,99	1,00
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3,80	3,90	4,50
Интегральный показатель эффективности	4,00	3,94	4,50
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	0,89	0,87	1

Из таблицы 26 можно видеть, что лучшим исполнением научно-технического исследования является исполнение 3, так как в данном исполнении лучшее обеспечение материалами и оборудованием, следовательно, достигается наибольшая эффективность проделанной работы. В результате проведенной работы была спроектирована и создана конкурентоспособная разработка, отвечающая современным требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

Список публикаций

1. Белинская Н.С., Назарова (Силко) Г.Ю., Проневич А.Ю., Белозерцева Н.Е. Исследование факторов, оказывающих влияние на процесс каталитической гидродепарафинизации дистиллятов // Проблемы геологии и освоения недр: труды XIX Международного симпозиума имени академика М. А. Усова студентов и молодых ученых, посвященного 70-летию юбилею Победы советского народа над фашистской Германией, Томск, 6-10 Апреля 2015. – Томск: Изд-во ТПУ, 2015 – Т. 2 – С. 211–212.
2. Белозерцева Н.Е., Белинская Н.С., Францина Е.В. Зависимость эксплуатационных и физико-химических свойств дизельных топлив от свойств индивидуальных углеводородов // Химия и химическая технология в XXI веке : материалы XVII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, имени профессора Л.П. Кулёва, посвященной 120-летию Томского политехнического университета (г. Томск, 17–20 мая 2016 г.) / Томский политехнический университет. — Томск : Изд-во Томского политехнического университета. – 2016 – с. 327-328
3. Белинская Н.С., Францина Е.В., Белозерцева Н.Е. Мониторинг работы промышленной установки гидродепарафинизации по цетановому числу и низкотемпературным характеристикам дизельного топлива // Проблемы геологии и освоения недр: труды XX Международного научного симпозиума имени академика М.А. Усова «Проблемы геологии и освоения недр», Томск, 4-8 апреля 2016 (принята к публикации)
4. Belinskaya N.S., Frantsina E.V., Belozertseva N.E. Monitoring of industrial hydrodewaxing plant in the context of cetane number and low temperature characteristics of diesel fuel // Проблемы геологии и освоения недр: труды XX Международного научного симпозиума

имени академика М.А. Усова «Проблемы геологии и освоения недр»,
Томск, 4-8 апреля 2016 (принята к публикации)