

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

Институт Институт природных ресурсов
Направление подготовки (специальность) Химическая технология
Кафедра Химической технологии топлива и химической кибернетики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Математическое моделирование процесса компаундирования товарных бензинов

УДК 665.73.013:519.6

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д2В	Кныш Ольга Сергеевна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Киргина Мария Владимировна	к.т.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент кафедры менеджмента	Рыжакина Татьяна Гавриловна	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
профессор кафедры ЭБЖ	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 направлению подготовки бакалавров

18.04.01 «Химическая технология»

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС ВПО, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Профессиональные компетенции</i>		
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 (пп.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 (пп.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 (п.1.2), CDIO (пп.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 (пп.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 (пп.4.1, 4.7, 4.8, 3.1, 4.6)
<i>Общекультурные компетенции</i>		
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-5,9,10,11), Критерий 5 АИОР (пп.2.4,2.5), CDIO (п.2.5)
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1,2,7,8,12), Критерий 5 АИОР (п.2.6), CDIO (п.2.4)

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

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

Институт Институт природных ресурсов
Направление подготовки (специальность) Химическая технология
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	Кныш Ольга Сергеевна

Тема работы:

Расчетные способы определения низкотемпературных свойств дизельных топлив	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	11.03.2016, № 1749/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:

01.06.2016

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Данные хроматографического анализа сырьевых потоков, вовлекаемых в производство товарных бензинов.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	1 Обзор литературы 1.1 Требования, предъявляемые к качеству автомобильных бензинов 1.2 Физико-химические и эксплуатационные свойства товарных бензинов 1.3 Марки бензинов и экологические требования, предъявляемые к товарной продукции 1.4 Компоненты товарных бензинов 1.5 Установка компаундирования автомобильных бензинов 1.6 Методы расчета октанового числа товарных бензинов 2 Объект и методы исследования 2.1 Обработка данных хроматографического анализа

	3 Расчеты и аналитика 3.1 Расчет дипольных моментов ключевых компонентов 3.2 Расчет интенсивности межмолекулярных взаимодействий ключевых компонентов 3.3 Проверка модели на адекватность 4 Результаты проведенного исследования 4.1 Расчет октановых чисел и физико-химических свойств компонентов товарных бензинов 4.2 Разработка рецептур компаундирования товарных бензинов различных марок 5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 6 Социальная ответственность
Перечень графического материала	нет
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Рыжакина Т.Г.
Социальная ответственность	Ахмеджанов Р.Р.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
нет	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	01.03.2016
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ассистент	Киргина М.В.	к. т. н.		01.03.2016

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д2В	Кныш Ольга Сергеевна		01.03.2016

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

Студенту:

Группа	ФИО
2Д2В	Кныш Ольге Сергеевне

Институт	ИПР	Кафедра	ХТТиХК
Уровень образования	Бакалавриат	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	По результатам расчетов, общая себестоимость НИ составляет 162 250 рублей.
2. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Принимаются отчисления во внебюджетные фонды в размере 30%.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	На основе анализа конкурентных решений выявлена сильная позиция на рынке, коэффициент конкурентоспособности больше единицы.
2. Оценка готовности проекта к коммерциализации	Высокая степень проработанности проекта и компетенций разработчика делает разработку перспективной, а ее коммерциализацию – успешной.
3. Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски проекта	Выбрана проектная структура проекта, построен календарный план проекта, составлен бюджет исследования, определены основные риски.
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	На основе сравнения интегральных показателей эффективности с конкурентными решениями проект определен эффективным.
5. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НИИ	Выявлен положительный коммерческий и инновационный потенциал исследования.

Перечень графического материала:

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет НИИ
4. FAST-анализ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ
6. Сравнительная эффективность разработки

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	Кандидат экономических наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д2В	Кныш Ольга Сергеевна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2Д2В	Кныш Ольге Сергеевне

Институт	Институт природных ресурсов	Кафедра	Химической технологии топлива и химической кибернетики
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	ХТПЭ и УМ

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения

*Объект исследования – автоматическая станция процесса смешения бензинов
Рабочее место – компьютерный класс
Область применения – нефтехимия*

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).

Выявление вредных факторов:

- вредные вещества (бензол, толуол, МТБЭ, метанол), согласно ГОСТ 12.1.005-88.;
- производственные шумы и вибрации (СН 2.2.4/2.1.8.566-96);
- недостаточная освещенность по СанПиН 2.2.5.1313-03.

Выявление опасных факторов:

- механические опасности (механизмы оборудования, режущие и колющие предметы, рабочее место на высоте);
- искровые разряды, по ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ.;
- возгорание, согласно Федеральному закону от 22 июля 2008 г. N123-ФЗ;
- взрыв.

2. Экологическая безопасность: – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.	• вредные вещества, которые выделяются или используются вовремя производства через вентиляционную систему (углеводороды C_1-C_5); • разработаны решения по обеспечению экологической безопасности.
3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях: – перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.	• перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения- • пожар, взрыв, разрушения зданий в результате разлива бензина, разрядов атмосферного электричества, ураган, землетрясения; • разработка действий в результате возникновения наиболее типичной ЧС – пожара, мер по ликвидации её последствий согласно ГОСТ Р 22.0.01-94., Федерального закона от 22 июля 2008 г. N123-ФЗ и ГОСТ 12.1.010-76. и плана эвакуации.
4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	• - Технический регламен от 24 декабря 2009 г. • - Приказ Министерства здравоохранения и социального развития Российской Федерации от 17 декабря 2010 г. • - ГОСТ 12.0.004-90 • - "Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 31.12.2014) • -организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны: технический перерыв, проветривание, полная изоляция от производственных источников шума и вибрации.

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д2В	Кныш Ольга Сергеевна		

Реферат

Выпускная квалификационная работа 104 с., 12 рис., 24 табл., 41 источник, 1 прил.

Ключевые слова: компаундирование, бензин, октановое число, детонационная стойкость, дипольный момент, рецептура, моделирующая система.

Объект исследования – процесс компаундирования товарных бензинов. Предметом исследования являются рецептуры компаундирования товарных бензинов.

Цель работы – разработать рецептуры компаундирования товарных бензинов с учетом неаддитивности октановых чисел и влияния состава вовлекаемого в смешение сырья.

- Рассчитаны значения дипольных моментов для набора из 110 ключевых компонентов.
- Рассчитаны коэффициенты, характеризующие интенсивность межмолекулярных взаимодействий ключевых компонентов
- Осуществлен расчет октановых чисел и физико-химических свойств потоков, вовлекаемых в процесс компаундирования товарных бензинов.
- Разработаны рецептуры компаундирования бензинов марок Регуляр-92, Премиум-95 и Супер-98.

В результате исследования была получена новая база коэффициентов, характеризующих интенсивность межмолекулярных взаимодействий ключевых компонентов, позволяющая осуществлять точный расчет октановых чисел бензинов и бензиновых компонентов с учетом неаддитивности.

Экономическая эффективность/значимость работы: разработанная математическая модель для расчета октановых чисел с учетом неаддитивности может быть использована для прогнозирования октановых чисел компонентов бензина, а также для уточнения рецептур компаундирования товарных бензинов в зависимости от состава и расхода, вовлекаемых в смешение потоков, во избежание перерасхода высококачественных и дорогостоящих компонентов.

Оглавление

Введение.....	14
1 Обзор литературы	17
1.1 Требования, предъявляемые к качеству автомобильных бензинов.....	17
1.2 Физико-химические и эксплуатационные свойства товарных бензинов	19
1.2.1 Испаряемость.....	19
1.2.2 Детонационная стойкость	20
1.2.3 Теплота сгорания.....	22
1.2.4 Химическая стабильность	22
1.2.5 Содержание веществ.....	23
1.3 Марки бензинов и экологические требования, предъявляемые к товарной продукции.....	25
1.4 Компоненты товарных бензинов	26
1.5 Установка компаундирования автомобильных бензинов.....	28
1.6 Методы расчета октанового числа товарных бензинов	31
2 Объект и методы исследования	38
2.1 Обработка данных хроматографического анализа	41
3 Расчеты и аналитика	Ошибка! Закладка не определена.
3.1 Расчет дипольных моментов ключевых компонентов	Ошибка! Закладка не определена.
3.2 Расчет интенсивности межмолекулярных взаимодействий ключевых компонентов.....	Ошибка! Закладка не определена.
3.3 Проверка модели на адекватность...	Ошибка! Закладка не определена.
4 Результаты проведенного исследования	Ошибка! Закладка не определена.

4.1 Расчет октановых чисел и физико-химических свойств компонентов товарных бензинов	Ошибка! Закладка не определена.
4.2 Разработка рецептур компаундирования товарных бензинов различных марок.....	Ошибка! Закладка не определена.
5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	44
5.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	44
5.2 FAST-анализ	47
5.3 SWOT-анализ.....	49
5.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	51
5.5. План проекта.....	53
5.6. Бюджет научного исследования	56
5.7. Реестр рисков проекта	59
5.8 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования .	61
5.8.1 Оценка сравнительной эффективности исследования	61
6 Социальная ответственность	Ошибка! Закладка не определена.
6.1 Описание рабочего места (автоматической станции смешения бензинов).....	Ошибка! Закладка не определена.
6.2 Анализ выявленных вредных факторов производственной среды	Ошибка! Закладка не определена.
6.2.1 Вредные вещества	Ошибка! Закладка не определена.
6.2.2 Производственные шумы и вибрации	Ошибка! Закладка не определена.
6.2.3 Освещенность	Ошибка! Закладка не определена.

6.3 Анализ опасных факторов производственной среды	Ошибка! Закладка не определена.
6.3.1 Механические опасности	Ошибка! Закладка не определена.
6.3.2 Электробезопасность	Ошибка! Закладка не определена.
6.3.3 Пожаровзрывобезопасность.....	Ошибка! Закладка не определена.
6.4 Охрана окружающей среды	Ошибка! Закладка не определена.
6.4.1 Воздействие АССБ на атмосферу	Ошибка! Закладка не определена.
6.4.2 Воздействие АССБ на гидросферу.....	Ошибка! Закладка не определена.
6.4.3 Воздействие АССБ на литосферу.....	Ошибка! Закладка не определена.
6.5 Защита в чрезвычайных ситуациях .	Ошибка! Закладка не определена.
6.6 Правовое обеспечение	Ошибка! Закладка не определена.
Выводы	Ошибка! Закладка не определена.
Список использованных источников	Ошибка! Закладка не определена.
Приложение	Ошибка! Закладка не определена.

Введение

Истощение нефтяных месторождений, повышение стоимости на бензин, загрязнение окружающей среды – крупные и актуальные проблемы человечества. Решение этих проблем многие видят в использовании альтернативного топлива, но, сколько времени потребуется для повсеместного перехода? Насколько это экономически выгодно и какова вероятность отсутствия новых масштабных проблем? На сегодняшний день эти вопросы остаются открытыми и, в какой-то степени, неизведанными. Тем временем практика применения бензина насчитывает десятки лет. И с каждым годом его потребление только растет. Так, по данным исследований аналитического агентства «АВТОСТАТ», в России за 2014 год автомобильным транспортом было использовано 65,5 млн. тонн топлива – 84 млрд. литров, что в денежном эквиваленте соответствует 2,7 трлн. рублей. Доля бензина в общем объеме топлива составила 60,6%. Но, с ростом объемов производства и потребления бензинов, растут и требования к качеству нефтепродуктов на рынке, и экологические требования. Именно по этой причине, как отметил на одном из совещаний председатель Правительства России Дмитрий Медведев, необходима модернизация производств нефтяного топлива [1].

Четырехсторонние соглашения, подписанные в 2011 году нефтяными компаниями, Федеральной антимонопольной службой, Ростехнадзором и Росстандартом, обязали НПЗ к модернизации. В итоге, в период с 2011 по 2014 год нефтяные компании инвестировали в модернизацию НПЗ 823 млрд. рублей [2]. Но, учитывая экономическую ситуацию в стране, дальнейшие инвестиции пришлось сократить, поэтому производители находятся в постоянном поиске оптимальных методик получения бензина, близкого к экологически чистому продукту на экономически выгодных условиях. Создание таких методик – один из наиболее важных и актуальных вопросов современной нефтепереработки.

Наиболее ответственным процессом для формирования качественных и количественных показателей бензина является компаундирование. Компаундирование – процесс смешения различных компонентов бензина, таких как: прямогонные бензины, продукты процессов каталитического риформинга, изомеризации, крекинга, алкилирования, антидетонационные присадки и добавки-оксигенаты. Ввиду важности компаундирования в производстве бензина, одной из основных задач, стоящих на сегодняшний день перед большинством нефтеперерабатывающих заводов является оптимизация процесса смешения, что возможно только с использованием метода математического моделирования.

Целью данной работы является разработка рецептур компаундирования товарных бензинов с учетом неаддитивности октановых чисел и влияния состава вовлекаемого в смешение сырья. Для достижения данной цели были поставлены следующие задачи:

1. Рассчитать значения дипольных моментов для набора из 110 ключевых компонентов, согласно которому происходит автоматическая обработка хроматограмм бензинов и бензиновых компонентов.
2. Рассчитать коэффициенты, характеризующие интенсивность межмолекулярных взаимодействий ключевых компонентов, входящих в состав бензинов и бензиновых компонентов.
3. Осуществить расчет октановых чисел и физико-химических свойств потоков, вовлекаемых в процесс компаундирования товарных бензинов.
4. Разработать рецептуры компаундирования бензинов марок Регуляр-92, Премиум-95 и Супер-98 с учетом неаддитивности октановых чисел и влияния состава вовлекаемого в смешение сырья.

Объектом исследования в данной работе является процесс компаундирования товарных бензинов. Предмет исследования – рецептуры компаундирования товарных бензинов.

Научная и практическая новизна работы: в ходе работы получена новая база коэффициентов, характеризующих интенсивность межмолекулярных взаимодействий ключевых компонентов, позволяющая осуществлять точный расчет октановых чисел бензинов и бензиновых компонентов с учетом неаддитивности.

Практическая значимость работы: разработанная математическая модель для расчета октановых чисел, дополненная базой коэффициентов, характеризующих интенсивность межмолекулярных взаимодействий ключевых компонентов, может быть использована для прогнозирования октановых чисел компонентов бензина, а также для уточнения рецептур компаундирования товарных бензинов в зависимости от состава и расхода, вовлекаемых в смешение потоков, во избежание перерасхода высококачественных и дорогостоящих компонентов.

Реализация и апробация работы: работа была представлена на XIX Международном научном симпозиуме имени академика М. А. Усова «Проблемы геологии и освоения недр».

1 Обзор литературы

Бензин – горючая смесь легких углеводородов с температурой кипения от 33 до 205 °С. Бензин используется в качестве топлива для карбюраторных и инжекторных двигателей или как высокоимпульсное ракетное топливо. Из бензина производят парафин, применяют как растворитель или просто горючий материал. Топливные материалы подразделяются на автомобильные и авиационные бензины. Авиационные бензины отличаются тем, что содержат больше легких фракций. В данной выпускной квалификационной работе рассматривается только автомобильный бензин.

Основное количество производимых автомобильных бензинов представляют собой продукты переработки нефти и газового конденсата. По факту, это смесь компонентов, получаемых различными технологическими процессами и по-своему влияющих на свойства товарного бензина. Компоненты делятся на две основные группы: базовые (преобладают по объему, являются основой бензина) и высокооктановые (низкокипящие углеводороды и их смеси, корректирующие свойства бензина в соответствии с определенными требованиями) [3].

1.1 Требования, предъявляемые к качеству автомобильных бензинов

Успешное применение бензинов в качестве источника энергии для движения автомобиля возможно, если бензины имеют определенный углеводородный состав и обладают строго регламентируемыми физико-химическими и эксплуатационными свойствами. Современные требования к автомобильным бензинам представляют собой совокупность требований эксплуатации, крупномасштабного производства и необходимости минимизации отрицательного воздействия на окружающую среду.

Требования, предъявляемые производителями двигателей с искровым зажиганием к качеству применяемых бензинов:

1. В любых климатических условиях на всех режимах работы двигателя сжигание смеси бензина и воздуха в камере сгорания должно происходить с нормальной скоростью без возникновения детонации.

2. Бензин должен иметь высокую теплоту сгорания, но минимальную склонность к образованию отложений и нагара в топливной и пусковых системах.

3. Приготовление горючей смеси должно быть возможным при любых температурах эксплуатации двигателей, что обеспечивает определенное значение испаряемости.

Таким образом, данные требования регламентируют детонационную стойкость, фракционный состав, давление насыщенных паров и содержание ряда веществ в бензинах [4].

Требования к качеству вырабатываемых бензинов, обусловленные техническими возможностями отечественной нефтепереработки, ограничивают показатели фракционного и углеводородного состава, содержание серы и антидетонаторов.

Для того чтобы увеличить выход бензина из нефтяного сырья нефтеперерабатывающие компании заинтересованы в повышении температуры конца кипения, но эффективное использование бензина в двигателе возможно при ограниченном содержании высококипящих фракций. Требования производителей автомобилей идут вразрез с требованиями НПЗ, поэтому необходим компромисс в виде экономически целесообразного уровня этих требований.

Требования, связанные с транспортированием и хранением бензинов, обусловлены необходимостью сохранения их в течение нескольких лет.

Транспортирование, хранение и применение бензина непосредственно на автомобилях осуществляется в различных климатических условиях при температуре воздуха от -50 до +45 °С, при этом необходимо обеспечить нормальную работу двигателя.

Требования по эксплуатации бензина регламентируют физическую и химическую стабильность, склонность к потерям от испарения и образованию паровых пробок, содержание коррозионно-агрессивных соединений.

Воздействие бензинов на окружающую среду при их применении связано с токсичностью соединений, попадающих в атмосферный воздух, воду, почву непосредственно из топлива или с продуктами его сгорания.

Экологические свойства бензинов обеспечиваются ограничениями по содержанию отдельных токсичных веществ, по групповому углеводородному составу, по содержанию низкокипящих углеводородов, а также серы и бензола.

Физико-химические свойства автомобильных бензинов и регулировочные параметры двигателей должны быть тщательно увязаны друг с другом. К основным характеристикам автомобильных бензинов относят: детонационную стойкость, испаряемость (фракционный состав и давление насыщенных паров), плотность, углеводородный состав [4].

1.2 Физико-химические и эксплуатационные свойства товарных бензинов

1.2.1 Испаряемость

Фракционный состав и давление насыщенных паров зависят от состава бензина, поэтому данные показатели у разных бензинов могут существенно различаться. Пусковые свойства бензинов, склонность к образованию паровых пробок, физическая стабильность – это свойства, которые определяются давлением насыщенных паров (ДНП) и фракционным составом. ДНП зависит от температуры, а также от соотношения паровой и жидкой фаз. С уменьшением температуры или увеличением отношения пар-жидкость давление насыщенных паров уменьшается. От содержания в бензине легкокипящих фракций зависит его физическая стабильность (склонность к потерям от испарения), скорость прогрева двигателя, износ цилиндро-поршневой группы, приемистость двигателя.

Содержание легких фракций при этом определяется по объему легких фракций, выкипающих при температуре до 70 °С или по давлению насыщенных паров и температуре перегонки 10%. Чем ниже температура окружающего воздуха, тем больше легких фракций требуется для запуска двигателя.

В общем, требования к фракционному составу и давлению насыщенных паров бензинов определяются конструкцией автомобильного двигателя и климатическими условиями его эксплуатации. Ведь одновременно необходимо и обеспечить запуск двигателя при низких температурах, и предотвратить образование паровых пробок при высоких температурах, которые приводят к нарушениям в работе двигателя.

Кроме того, для нормальной работы двигателя необходимо контролировать полноту испарения топлива. Это величина, которая может быть охарактеризована температурой перегонки 90% бензина и температурой конца кипения. Если бензин испаряется не полностью, небольшая его часть в жидком виде может проникнуть в камеру сгорания, смывая при этом масло со стенок цилиндров. Жидкая пленка через зазоры поршневых колец может проникать в картер, при этом происходит разжижение масла. В результате повышается износ двигателя, ухудшается мощность и экономичность его работы. Снижение температуры конца кипения бензинов повышает их эксплуатационные свойства, но снижает ресурс бензинов [5].

1.2.2 Детонационная стойкость

Данный показатель характеризует способность автомобильных бензинов противостоять самовоспламенению при сжатии. Нормальное сгорание на всех режимах эксплуатации двигателя обеспечивается высокой детонационной стойкостью бензинов. Процесс горения топлива в двигателе носит радикальный характер. При сжатии смеси бензина и воздуха температура и давление повышаются, углеводороды окисляются (окисление интенсифицируется после воспламенения смеси). При недостаточной стойкости несгоревшей части углеводородов к окислению, происходит

интенсивное накапливание пероксидов, а затем их взрывной распад. При высокой концентрации перекисных соединений происходит тепловой взрыв, приводящий к самовоспламенению топлива, которое, в свою очередь, приводит к взрывному горению оставшейся части топлива – детонационному сгоранию. Детонация вызывает перегрев, повышенный износ или даже местные разрушения двигателя и сопровождается резким характерным звуком, падением мощности, увеличением дымности выхлопа.

Показатель детонационной стойкости автомобильных бензинов – октановое число – равно содержанию (в процентах по объёму) изооктана (2,2,4-триметилпентана) в его смеси с н-гептаном, при котором эта смесь эквивалентна по детонационной стойкости исследуемому топливу в стандартных условиях испытаний.

Для определения октанового числа бензина используют два метода: моторный и исследовательский. Октановое число, определенное моторным методом (ОЧМ) ниже октанового числа, определенного исследовательским методом (ОЧИ), ввиду того, что моторный метод осуществляется при более напряженном режиме работы одноцилиндровой установки, чем исследовательский. ОЧМ в большей степени характеризует детонационную стойкость топлива при эксплуатации автомобиля в условиях повышенного теплового форсированного режима, когда как ОЧИ характеризует бензин при работе на частичных нагрузках в условиях городской езды.

Детонационная стойкость бензинов зависит от их углеводородного состава. Наибольшей детонационной стойкостью обладают ароматические углеводороды. Самая низкая детонационная стойкость у парафиновых углеводородов нормального строения, которая при этом уменьшается с увеличением молекулярной массы. Изопарафины и олефиновые углеводороды обладают более высокими антидетонационными свойствами по сравнению с нормальными парафинами, но разветвление и снижение молекулярной массы повышает детонационную стойкость парафинов.

Нафтенy, в свою очередь, по детонационной стойкости превосходят парафиновые углеводороды, но уступают ароматическим углеводородам.

Таким образом, антидетонационные свойства бензинов, получаемых различными технологическими процессами, определяются входящими в их состав углеводородами. Известно, что самая низкая детонационная стойкость принадлежит бензинам прямой перегонки, состоящих, в основном, из парафиновых углеводородов нормального строения [6].

1.2.3 Теплота сгорания

Мощностные и экономические показатели работы двигателя определяются теплотой сгорания, чем она выше, тем меньше удельный расход топлива. Этот показатель зависит от углеводородного состава бензинов, а для различных углеводородов определяется соотношением углерод/водород. Чем выше это соотношение, тем ниже теплота сгорания. Парафиновые углеводороды, бензины прямой перегонки и алкилбензин обладают наибольшей теплотой сгорания, наименьшей – ароматические углеводороды и бензины каталитического риформинга [5].

1.2.4 Химическая стабильность

Способность бензинов сохранять свой состав и свойства при хранении, транспортировании или при нагревании впускной системой двигателя может быть охарактеризована таким показателем, как химическая стабильность. Химические изменения бензина во время его эксплуатации связаны с окислением входящих в его состав углеводородов. Значит, химическую стабильность бензинов можно определить по скорости реакций окисления. Скорость, в свою очередь, зависит от строения входящих в бензин углеводородов и условий процесса.

Во время окисления в бензинах накапливаются смолистые вещества, образующиеся в результате полимеризации и конденсации продуктов окисления. Сначала количество смолистых веществ в бензине невелико, и они полностью растворимы в нем, но по мере углубления процесса окисления содержание смолистых веществ увеличивается. Как уже было

указано ранее, наличие в бензине продуктов окисления отрицательно влияет на его эксплуатационные свойства. Смолянистые вещества, выпадая из топлива, образуют отложения в резервуарах, трубопроводах и др. Окисление нестабильных бензинов при нагревании во впускной системе двигателя приводит к образованию отложений на ее элементах, а также увеличивает склонность к нагарообразованию на клапанах, в камере сгорания и на свечах зажигания.

Кроме того, на химическую стабильность бензинов влияют содержащиеся в них неуглеводородные компоненты. Наиболее склонны к окислению бензины термического крекинга, коксования, пиролиза, каталитического крекинга (в значительных количествах содержат олефиновые и диолефиновые углеводороды). Химически стабильными являются бензины каталитического риформинга, прямогонные бензины, алкилбензин [7].

1.2.5 Содержание веществ

Одним из жестко нормируемых параметров качества бензина является содержание в нем определенных веществ: серы, ароматических углеводородов и бензола, смолистых и смолообразующих соединений, металлов и т.д.

В бензине всегда присутствуют смолистые и смолообразующие соединения. Смолы – это темно-коричневые жидкие или полужидкие вещества с плотностью около 1000 кг/м^3 , обладающие сильной красящей способностью, легко растворимые во всех нефтепродуктах. Их содержание в бензине зависит от способов получения и очистки бензинов, а также длительности и условий его хранения. Входящие в состав смол тяжелые молекулы углеводородов не испаряются из бензина, а только накапливаются на горячих стенках трубопроводов, забивают жиклеры, что может привести к уменьшению проходных сечений различных участков топливоподающей аппаратуры, всасывающего коллектора. Как итог: снижение мощности и ухудшение экономичности двигателя. Кроме того, повышается износ,

ухудшается процесс сгорания и увеличивается расход топлива за счет образования нагара в двигателе. Нагар – это уплотненные смолистые отложения в зонах высокой температуры, хрупкие и твердые, состоящие, в основном, из углерода [6].

Содержание серы в бензинах также строго регламентируется. При сгорании кислородные соединения серы вызывают коррозию и способствуют процессам образования отложений и износу двигателей. Общее содержание серы в бензинах – это суммарное количество всех сернистых соединений в топливе. Количество серы в бензинах не должно превышать 0,05 %. Экспериментальным методом установлено, что при увеличении серы с 0,05 до 0,10% износ деталей двигателя возрастает в 1,5-2 раза, а при повышении количества серы до 0,20% – еще вдвое.

Ограничивается и содержание бензола в автомобильном топливе, несмотря на то, что чистый бензол обладает высоким октановым числом (более 100 единиц). Ряд причин, по которым бензол используется в ограниченном количестве: высокая температура замерзания (кристаллизации), плохая летучесть при низких температурах, высокая гигроскопичность, пониженная теплотворность [7].

Содержание ценнейших ввиду своей высокой детонационной стойкости составляющих автомобильных бензинов – ароматических углеводородов – также нормируются вследствие повышения нагарообразования в двигателе и образования в отработавших газах канцерогенного бензола. Кроме того, снижение доли ароматических углеводородов в бензине позволяет уменьшить содержание токсичных продуктов в отработавших газах. Строение ароматических углеводородов оказывает существенное влияние на нагарообразование в камерах сгорания и на клапанах двигателей, что снижает КПД и мощность, отрицательно сказывается на экономических и экологических характеристиках. Более того, при воздействии высоких температур ароматические углеводороды окисляются и откладываются в двигателе в виде нагара [6].

1.3 Марки бензинов и экологические требования, предъявляемые к товарной продукции

Основную массу автомобильных бензинов в России вырабатывают по ГОСТ 2084-77, ГОСТ Р 51105-97, ТУ 38.001165-97 и ГОСТ Р 51866-2002. В зависимости от октанового числа ГОСТ 2084-77 «Бензины автомобильные» предусматривает пять марок автомобильных бензинов: А-72, А-76, АИ-91, АИ-93 и АИ-95.

Однако, параметры автомобильных бензинов, вырабатываемых по ГОСТ 2084-77, существенно отличаются от принятых международных норм, особенно в части экологических требований [8].

В целях повышения конкурентоспособности российских бензинов и доведения их качества до уровня европейских стандартов был разработан ГОСТ Р 51105-97 «Топлива для двигателей внутреннего сгорания. Неэтилированный бензин. Технические условия». Согласно данному нормативному документу предполагается выпуск четырех марок бензинов: «Нормаль-80», «Регуляр-92», «Премиум-95», «Супер-98». Требования, предъявляемые к этим маркам бензинов согласно ГОСТ Р 51866-2002 «Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия», указаны в таблице 1.1.

Таблица 1.1 – Требования, предъявляемые к товарным бензинам согласно
ГОСТ Р 51866-2002 «Топлива моторные. Бензин неэтилированный.
Технические условия»

Характеристика	Норма-80	Регуляр-92	Премиум-95	Супер-98
ОЧИ, не менее	80	92	95	98
ОЧМ, не менее	76	83	85	88
Плотность при 15°C, кг/м ³	720-775			

Бензин «Нормаль-80» предназначен для использования на грузовых автомобилях. Неэтилированный бензин «Регуляр-92» предназначен для эксплуатации автомобилей взамен этилированного А-93. Автомобильные бензины «Премиум-95» и «Супер-98» полностью отвечают европейским требованиям согласно Техническому регламенту Таможенного союза

ТР ТС 013/2011 «О требованиях к автомобильному и авиационному бензину, дизельному и судовому топливу, топливу для реактивных двигателей и топочному мазуту» представленным в таблице 1.2 [9].

Таблица 1.2 – Требования, предъявляемые к товарным бензинам согласно Техническому регламенту Таможенного союза

Характеристика	Евро-2	Евро-3	Евро-4	Евро-5
Содержание серы, мг/кг	500	150	50	10
ДНП, КПа				
летний период	45-80			
зимний период	50-100			
Содержание компонентов, не более % мас.				
ароматические углеводороды	не определяется	42	35	
бензол	5	1		
олефины	18			
МТБЭ	15			
ММА	1,3			

Кроме того, в настоящее время множество мелких производителей бензинов выпускают свою продукцию по собственным техническим условиям. Чтобы при этом уровень требований к бензинам не занижался, введен ГОСТ Р 51313-99 Бензины автомобильные. Общие технические требования, который носит ограничительный характер и устанавливает ряд обязательных показателей, которые следует включать в любую нормативно-техническую документацию на бензины [10].

Автомобильные бензины, производимые по ТУ 38.001165-97, предназначены в основном для поставки на экспорт, а существующий нормативный документ ГОСТ Р 51866-2002, является аутентичным переводом европейского стандарта EN-228 [11].

1.4 Компоненты товарных бензинов

Автомобильные бензины представляет собой смеси компонентов – продуктов переработки нефтяного сырья (прямой перегонки нефти, каталитического риформинга, каталитического крекинга и гидрокрекинга вакуумного газойля, изомеризации прямогонных фракций, алкилирования, ароматизации, термического крекинга, висбрекинга, замедленного коксования). Набор компонентов бензина зависит, в основном, от его марки и

определяется наличием тех или иных технологических установок на нефтеперерабатывающем заводе [10].

Как правило, базовый компонент для выработки автомобильного топлива – бензины каталитического риформинга, каталитического крекинга или продукты изомеризации. Бензины каталитического риформинга высокостабильны при хранении за счет малого содержания серы и практически полного отсутствия олефинов. Однако есть и ряд недостатков: повышенное содержание ароматических углеводородов и неравномерность распределения детонационной стойкости по фракциям. Однако, доля компонента каталитического риформинга в составе бензинового фонда России составляет около 50%. Характеристика бензинов каталитического крекинга: низкое содержание серы, высокие значения октановых чисел по исследовательскому методу – 90-93 единицы. Содержание в них ароматических углеводородов составляет 30-40%, олефиновых – 5-35%. За счет отсутствия диеновых углеводородов в составе бензинов каталитического крекинга, последние считаются химически очень стабильными. По сравнению с бензинами каталитического риформинга, в бензинах крекинга распределение детонационной стойкости по фракциям является равномерным.

Продукты процесса каталитической изомеризации характеризуются высокими октановыми числами (ОЧМ около 88-92, ОЧИ – 93-97 единиц). В основном, после изомеризации на компаундирование отправляется изопентановая фракция. Смешение изомеризата с другими компонентами товарных бензинов дает возможность понижать содержание в них вредных веществ.

Ввиду всех перечисленных причин, в качестве базы для производства автомобильных бензинов целесообразно использовать смесь компонентов каталитического риформинга, каталитического крекинга и продуктов процесса каталитической изомеризации.

Бензины таких термических процессов, как замедленное коксование имеют низкую детонационную стойкость и химическую стабильность, но при этом высокое содержание серы. Поэтому они используются в ограниченных количествах и только для получения низкооктановых бензинов. При производстве же высокооктановых бензинов используются алкилбензин, изооктан, изопентан и толуол. Чаще всего при получении бензинов марок «Премиум95» и «Супер-98» используют кислородсодержащие компоненты: метилтретбутиловый эфир (МТБЭ) или его смесь с третбутанолом – фэтерол. При введении МТБЭ в бензин повышается полнота его сгорания и равномерность распределения детонационной стойкости по фракциям. Однако, максимально допустимая концентрация МТБЭ в бензинах составляет 15% из-за его относительно низкой теплоты сгорания и высокой агрессивности по отношению к резинам [7].

1.5 Установка компаундирования автомобильных бензинов

Установка компаундирования бензинов по своей конструкции является модульной, в которой технологическое оборудование и пункт управления размещаются в одном модуле блок-боксе рамной конструкции.

Установка компаундирования бензинов позволяет обеспечить заданное соотношение нескольких исходных компонентов бензина при приготовлении автобензина требуемой марки, а также вовлечь в него расчётное количество октаноповышающей добавки. Внешний вид установки компаундирования бензинов схематично приведён на рисунке 1.1 [12].

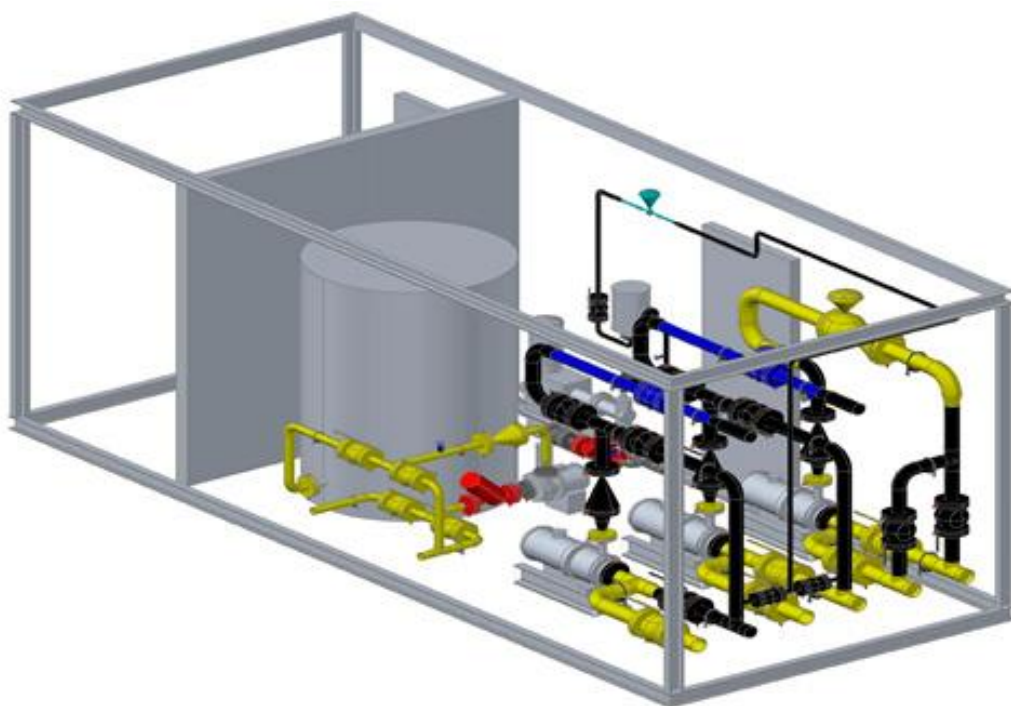


Рисунок 1.1 – Установка компаундирования товарных бензинов

Установка компаундирования автомобильных бензинов представляет собой рамный модуль заводского изготовления с установленным внутри него технологическим оборудованием, обязанным технологическими внутримодульными трубопроводами со средствами КИПиА. Часть модуля занимает пункт управления установкой компаундирования автомобильных бензинов, на который выводятся показания уровнемеров резервуаров, объёмных счётчиков бензиновых потоков. В пункте расположены лампы рабочей и аварийной сигнализации, частотные вариаторы и кнопки управления насосами установки. Пункт управления – изолированное от окружающей среды помещение, снабжённое системой приточной подпорной вентиляции. Кроме того, в состав установки входит внешнее оборудование в виде статического смесителя и системы приточной вентиляции пункта управления (воздухозаборная труба, центробежный вентилятор и проточный электрокалорифер) [12].

Применяемые на установке компаундирования бензинов средства автоматизации и приборы КИП обеспечивают необходимый и достаточный уровень контроля основных параметров технологического режима, что в

свою очередь, позволяет гибко регулировать и поддерживать показатели качества получаемой продукции.

Технологическая схема компаундирования бензинов, совмещенная со схемой автоматизации, представлена на рисунке 1.2 [12].

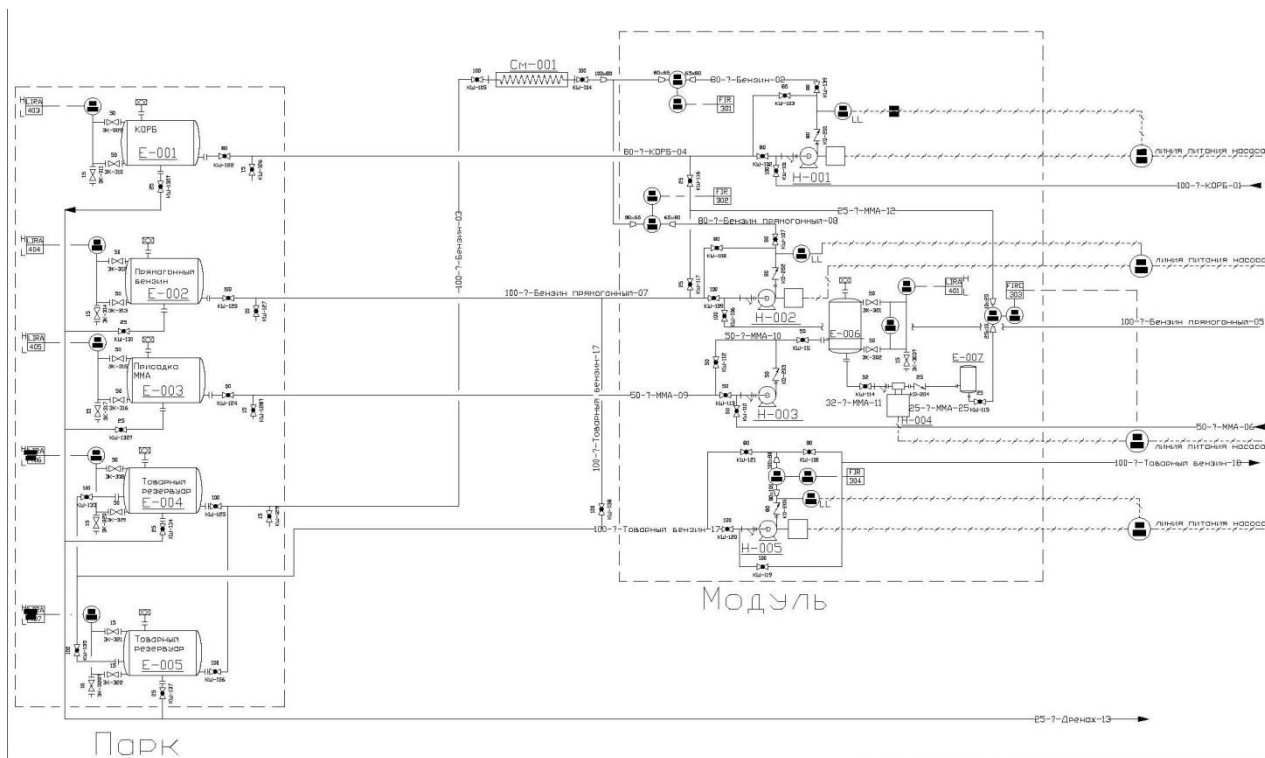


Рисунок 1.2 – Технологическая схема смешения товарных бензинов

Перед пуском установки компаундирования бензинов в работу производится загрузка резервуаров исходными бензиновыми компонентами, в качестве которых на практике обычно применяется прямогонный бензин, низкооктановый автомобильный бензин марки А-80, КОРБ (кубовые остатки ректификации бензола), абсорбент осветлённый стабилизированный, отходы производства ароматических углеводородов.

Заполнение резервуаров исходными бензиновыми компонентами может производиться бензиновыми насосами Н-001, Н-002 из автомобильных цистерн. Аналогичным образом производится загрузка резервуара ММА (или другой октаноповышающей добавки) из автоцистерны или транспортного контейнера при помощи центробежного химического насоса Н-003 [12].

Пуск установки заключается в практически одновременном включении в работу насосов подачи бензиновых компонентов и дозирующего насоса подачи ММА (или другой октаноповышающей добавки) через смеситель СМ-100 с направлением общего смесового потока в резервуар приготавливаемого автобензина заданной марки. При этом оператором установки задаётся требуемая расчётная производительность каждого насоса с контролем расходов по показаниям объёмных счётчиков потоков, имеющих также функции расходомеров. По мере отработки резервуаров бензиновых компонентов и (или) заполнения резервуара приготавливаемого автобензина производится остановка насосов. При необходимости автобензин из резервуара готового продукта может быть повторно взят в производство и повторно смешан с каким-либо из имеющихся бензиновых компонентов. Например, для корректировки достигнутого октанового числа, если оно по результатам лабораторного анализа окажется меньше, чем требуется по техническим условиям для данной марки автобензина. Или, напротив, будет иметь существенное избыточное значение [12].

1.6 Методы расчета октанового числа товарных бензинов

Проблема оптимизации процесса приготовления высокооктановых бензинов сводится к отсутствию надежных методик, позволяющих с высокой точностью проводить оценку детонационной стойкости смесового бензина и определять оптимальную рецептуру смешения компонентов для получения продукта требуемой марки. Проведенный аналитический обзор показал, что хотя проблемам оптимизации процесса компаундирования посвящено немало работ, рассмотренные в них математические модели не учитывают неаддитивность октановых чисел смешения и не обладают прогнозирующей способностью. В настоящее время общепризнанным считается использование методов, основанных на учете механизма взаимодействия углеводородов, присадок и добавок. В различных методах учитываются разные свойства, такие как состав, структура, плотность, спектр поглощения, диэлектрическая проницаемость, степень сжатия, степень преломления и др.

Известен способ определения октанового числа автомобильных бензинов [13], состоящий в сравнении детонационной стойкости испытуемого и эталонного топлива на специальном стандартизированном двигателе внутреннего сгорания. При определении находят экспериментальную зависимость степени сжатия рабочей смеси в двигателе от содержания изооктана в эталонном топливе, а затем по этой зависимости после испытания анализируемого бензина находят значение его октанового числа.

Методика состоит в том, что на разогретом и отрегулированном двигателе при степени сжатия, соответствующей стандартной интенсивности детонации, проводится сравнение испытуемого топлива с близкими к нему по октановым числам смесями первичных или вторичных эталонов. Предварительно для испытуемого топлива и эталонных смесей подбирают регулировкой карбюратора такой состав рабочей смеси, при котором на измерителе детонации фиксируются наибольшие показатели (максимум детонации). Сравнение испытуемого и эталонного топлив заключается в том, что на стандартном режиме проводят не менее трех раз отсчеты по указателю детонации при работе двигателя попеременно на испытуемом топливе и на смесях эталонных топлив. Эталонные топлива при этом подбираются таким образом, чтобы одна смесь обладала большей, а другая меньшей детонационной стойкостью, чем испытуемое топливо. При этом смеси эталонных топлив должны отличаться друг от друга не более чем на две октановые единицы.

Если определение ведется с первичными эталонами, то октановое число рассчитывают по формуле:

$$A = A_1 + (A_2 - A_1) \cdot \frac{a_1 - a}{a_1 - a_2} \quad (1.1)$$

Где A_1 – содержание изооктана в смеси с нормальным гептаном, детонирующий сильнее испытуемого топлива, об. %; A_2 – то же для смеси, детонирующей слабее испытуемого топлива, об. %; a – среднее

арифметическое из отсчетов по указателю детонации для испытуемого топлива; a_1 и a_2 – то же соответственно для смесей первичных эталонов.

При работе с вторичными эталонами по аналогичной формуле подсчитывают процентное содержание высокооктанового вторичного эталонного топлива в смеси вторичных этанолов, эквивалентной по детонационной стойкости испытуемому топливу, а затем по шкале вторичных эталонов отсчитывают октановое число.

Недостатком данного способа определения октанового числа является большая длительность определения, составляющая 120 мин, высокая стоимость и громоздкость экспериментальной установки, сложность ее обслуживания и дороговизна компонентов, из которых составляются эталонные топлива.

Представление о детонации как о взрывном распаде пероксидных соединений позволяет объяснить влияние многих конструктивных параметров двигателя на его требования к детонационной стойкости применяемых топлив. Все факторы, способствующие повышению температуры в камере сгорания и увеличению времени пребывания последних в камере сгорания, вызывают накопление пероксидных соединений, облегчают возникновение детонации, т.е. требования двигателя к детонационной стойкости применяемого топлива ужесточаются. Наибольшее влияние оказывает степень сжатия и диаметр цилиндра. С повышением степени сжатия резко возрастает температура, при которой протекают предпламенные реакции, а с увеличением диаметра цилиндра длительность пребывания последних порций топлива в камере сгорания становится больше. Найдена эмпирическая зависимость [6] между октановым числом топлива, необходимым для бездетонационной работы двигателя, степенью сжатия и диаметром цилиндра (формула Аронова Д.М.):

$$ОЧ = 125,4 - \frac{413}{\varepsilon} + 0,183 \cdot D \quad (1.2)$$

где $ОЧ$ – октановое число; ε – степень сжатия; D – диаметр цилиндра.

Для прямогонных бензинов Башкирским научно-исследовательским институтом по переработке нефти (БашНИИ НП) [14] была предложена формула:

$$ОЧ_{\text{м}} = 250,9 - 281\rho_4^{20} \quad (1.3)$$

где ρ_4^{20} – относительная плотность бензина.

Октановое число прямогонных бензинов с концом кипения до 200 °С [14] может быть рассчитано следующим образом:

$$ОЧ_{\text{м}} = 100А + 70Н + 50ИП - 12 НП \quad (1.4)$$

где А, Н, ИП, НП – массовые доли ароматических, нафтеновых, изопарафиновых и н-парафиновых углеводородов в бензине.

Кроме того, октановое число бензинов может быть рассчитано по следующей формуле [15]. Эта эмпирическая формула расчета позволяет определить ОЧ, соответствующее октановому числу, определенному при испытаниях бензина по исследовательскому методу:

$$ОЧ = 120 - 2 \cdot \frac{t_{\text{ср}} - 58}{5 \cdot \rho_{20}} \quad (1.5)$$

$$t_{\text{ср}} = \frac{t_{\text{нк}} + t_{\text{кк}}}{2}$$

где $t_{\text{ср}}$ – средняя температура разгонки топлива; $t_{\text{нк}}$ – температура начала кипения топлива; $t_{\text{кк}}$ – температура конца кипения топлива; ρ_{20} – плотность топлива при 20 °С, г/см³.

Для бензинов с октановыми числами выше 62 рекомендуется [5] следующая эмпирическая формула:

$$ОЧ = 1020,7 - 64,86 \cdot \left[4 \lg \left(\frac{1415}{15} - 131,5 \right) + 21 \lg \left(\frac{9}{5} t_{10\%} + 32 \right) + 1,31 \lg \left(\frac{9}{5} t_{90\%} + 32 \right) \right] \quad (1.6)$$

где $t_{10\%}$, $t_{90\%}$ – температуры перегонки 10%-ных и 90%-ных фракций бензина.

Существует также расчетный метод ВНИИ НП, основанный на хроматографическом анализе бензина [16].

Авторы статьи [17] предложили метод вычисления октанового числа по спектрам поглощения. Основа метода: установление взаимосвязи между

октановым числом бензина и его спектральными характеристиками, минуя стадию химического состава. В простейшем виде такая взаимосвязь может быть представлена в виде линейной комбинации коэффициентов поглощения бензина на различных длинах волн излучения. Физическая основа данной взаимосвязи обусловлена тем фактом, что спектр поглощения бензина однозначно определяется его химическим составом, который в свою очередь, определяется детонационными свойствами нефтепродукта. Следовательно, коэффициенту поглощения бензина на какой-либо определенной волне излучения соответствует численный коэффициент, совокупно отражающий влияние химических компонентов бензина на уменьшение или увеличение октанового числа топлива. В основе линейного регрессионного анализа спектральных данных лежит предположение о том, что октановое число образца бензина может быть с определенной точностью представлено в виде:

$$y_i = a_0 + \sum_{j=1}^k a_j x_{ij} \quad (1.7)$$

где индекс i – номер образца бензина; y_i – вычисленное (предсказанное) значение октанового числа i -образца бензина; a_j – коэффициенты линейной регрессии; x_{ij} – коэффициенты поглощения i -образца бензина на всех длинах волн излучения. Недостатками данного метода являются возникновения погрешностей при измерении коэффициентов поглощения бензина и отсутствие чувствительности к присадкам.

Следующий способ определения октанового числа был запатентован в 2002 году сотрудниками Рязанской государственной сельскохозяйственной академии им. проф. Костычева [18]. Суть метода заключается в определении ОЧ по значениям скоростей распространения ультразвуковой волны в бензинах при двух различных фиксированных температурах.

Октановое число определяют из данной зависимости:

$$\text{ОЧ(АИ)} = 40 \cdot \left[\frac{V_1 - V_2}{100} + \frac{2000}{V_2} \right] \quad (1.8)$$

где ОЧ (АИ) – октановое число бензина, соответствующее октановому числу бензина, определенного исследовательским методом; V_1 – скорость распространения ультразвуковой волны в бензине при температуре $t_1 = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$, м/с; V_2 – скорость распространения ультразвуковой волны в бензине при температуре $t_2 = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$, м/с.

К недостаткам данного способа следует отнести использование в качестве основной характеристики ОЧ бензина только диэлектрическую проницаемость ε , что снижает точность определения ОЧ при исследовании бензинов с различными химическими примесями.

Авторы патента [19] предлагают способ определения октанового числа автомобильных бензинов, основанный на определении ОЧ различных эталонных бензинов по моторному и исследовательскому методу, построении калибровочной зависимости информационного параметра от ОЧ и последующей идентификацией ОЧ анализируемой пробы по этой кривой. В процессе измерения диэлектрической проницаемости анализируемой пробы дополнительно замеряют текущее значение температуры и плотности пробы, а октановое число анализируемой пробы определяют по формуле:

$$\text{ОЧ} = a_1\varepsilon_2 - a_2\varepsilon_3 + a_3\varepsilon + bP + cT \quad (1.9)$$

где a_1 , a_2 , a_3 , b , c – постоянные коэффициенты, определяемые при калибровке; ε – измеренное значение диэлектрической проницаемости; P – измеренное значение плотности, г/см³; T – измеренное значение температуры, $^{\circ}\text{C}$.

К недостаткам данного способа следует отнести использование в качестве основной характеристики октанового числа бензина только диэлектрической проницаемости, что снижает точность определения детонационной стойкости при исследовании бензинов с различными химическими примесями.

Авторами работы [20] предложен метод определения октанового числа бензинов, реализованного без контакта электрических устройств с анализируемым бензином и обеспечивающего инвариантность результатов

измерений к содержанию воды в анализируемом бензине. Сущность способа заключается в определении значений информативного параметра для различных эталонных бензинов, построении калибровочной зависимости информативного параметра от октанового числа этих бензинов, определении значения информативного параметра пробы анализируемого бензина и определении по калибровочной зависимости октанового числа анализируемого бензина, а также измерении плотности и температуры пробы анализируемого бензина. Дополнительно измеряют коэффициент преломления анализируемого бензина, а в качестве информативного параметра используют поверхностное натяжение анализируемого бензина, при этом октановое число определяют в интервале температур 10-40 °С по расчетной формуле:

$$X = \left\{ A_1 + \frac{A_2[1 - \beta(t - 20)]}{n - 1} \right\} \cdot \frac{\sigma}{[1 - \varphi(t - 20)]} + A_0 \quad (1.10)$$

где X – октановое число бензина; A_0 , A_1 , A_2 – постоянные коэффициенты, определяемые при калибровке; t – измеренное значение температуры бензина, °С; n – измеренное значение коэффициента преломления бензина при температуре t ; σ – измеренное значение поверхностного натяжения при температуре t , Н/м; β – объемный коэффициент теплового расширения бензинов, 1/°С; φ – коэффициент, учитывающий изменение поверхностного натяжения от температуры, 1/°С.

Как можно видеть, существующие методы расчета октановых чисел бензинов, рассматривают октановое число как аддитивную величину, основываются в большинстве своем на физико-химических свойствах бензина, при расчете слабо реагируют на изменение углеводородного состава бензина.

2 Объект и методы исследования

Проблема оптимизации процесса приготовления высокооктановых бензинов сводится к отсутствию надежных методик, позволяющих с высокой точностью проводить оценку детонационной стойкости смесевых бензинов и определять оптимальную рецептуру смешения компонентов для получения продукта требуемой марки. Проведенный аналитический обзор показал, что хотя проблемам оптимизации процесса компаундирования посвящено немало работ, рассмотренные в них математические модели не учитывают неаддитивность октановых чисел смешения и не обладают прогнозирующей способностью.

На кафедре Химической технологии топлива и химической кибернетики Томского политехнического университета было установлено, что причиной отклонений октановых чисел бензинов от правила аддитивности является наличие взаимодействий между углеводородами, входящими в состав бензинов. Вместе с тем, силы межмолекулярного взаимодействия определяющим образом зависят от полярности молекул компонентов бензиновой смеси. Считается, что молекулы углеводородов являются неполярными, однако известен тот факт, что молекулы ароматических углеводородов легко поляризуются и тем самым приобретают наведенный дипольный момент [10].

Таким образом, были установлены количественные закономерности между величиной полярности компонентов бензиновой смеси (дипольным моментом) и неаддитивностью октановых чисел смешения, согласно которым октановое число смешения можно представить в виде суммы двух составляющих: аддитивной и неаддитивной [11]:

$$ОЧ_{см} = \sum_{i=1}^n (ОЧ_i \cdot C_i) + B \quad (2.1)$$

где $ОЧ_{см}$ – октановое число смешения бензинов; B – суммарное отклонение октановых чисел от аддитивности; C_i – концентрация i -го компонента, отн. ед.

$$B = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=2}^n B_i B_j C_i C_j \quad (2.2)$$

B_i, B_j – величины, характеризующие склонность i -й молекулы к межмолекулярному взаимодействию с j -й молекулой, которую можно выразить через дипольные моменты молекул:

$$B_i = \alpha \left(\frac{D_i}{D_{\max}} \right)^n \quad (2.3)$$

где α и n – кинетические параметры, определяющие интенсивность межмолекулярных взаимодействий в зависимости от дипольного момента D ; $D_{\max}$ – максимальный дипольный момент молекул ароматических углеводородов C_{9+} [9].

Полярность молекул компонентов, направляемых на узел компаундирования бензинов, оказывает влияние на отклонения октановых чисел смешения от правила аддитивности. Поэтому учет взаимодействий между молекулами в модели смешения позволяет прогнозировать октановые числа бензинов значительно более точно, чем аддитивные модели.

Однако неаддитивность при смешении проявляют не только углеводороды бензиновой фракции, но и добавки и присадки, вовлекаемые в процесс компаундирования, в силу их полярности. На основе механизма действия присадок, который заключается в разрушении пероксидов, была разработана математическая модель процесса компаундирования, учитывающая влияние антидетонационных присадок на прирост октанового числа базового бензина:

$$ОЧ_i = ОЧ_0 + П \cdot \Delta ОЧ_{\max} \cdot (1 - e^{-K_{эфф} \cdot C_{np}}); \quad C_{np} = C_i / C_{\max} \quad (2.4)$$

где $П$ – величина, характеризующая приемистость разного типа топлива к присадке; $K_{эфф}$ – коэффициент эффективности присадки; C_{np} – приведенная концентрация присадки, равная отношению концентрации присадки C_i к максимально допустимой концентрации присадки в бензине $C_{\max}$.

Другой важной характеристикой товарного бензина, регламентируемой всеми стандартами, является давление насыщенных паров (ДНП). ДНП индивидуальных углеводородов с высокой точностью можно рассчитать по уравнению Антуана:

$$\ln P = A_{\text{ANT}} - B_{\text{ANT}} / (T + C_{\text{ANT}}) \quad (2.5)$$

где T – внешняя температура, К; A_{ANT} , B_{ANT} , C_{ANT} – константы, зависящие от природы углеводорода и температуры.

Расчет плотности товарного бензина осуществляется по формуле Менделеева:

$$\rho_4^t = \rho_4^{20} - \Delta t \cdot (t - 20) \quad (2.6)$$

где ρ_4^t – плотность при температуре t , кг/м³; ρ_4^{20} – плотность при температуре 20°C, кг/м³; Δt – температурная поправка к плотности на 1°C.

На основе разработанных математических моделей была создана компьютерная моделирующая система сопровождения процесса компаундирования высокооктановых бензинов «Compounding» [10].

Диалоговое окно моделирующей системы «Compounding» представлено на рисунке 2.1.

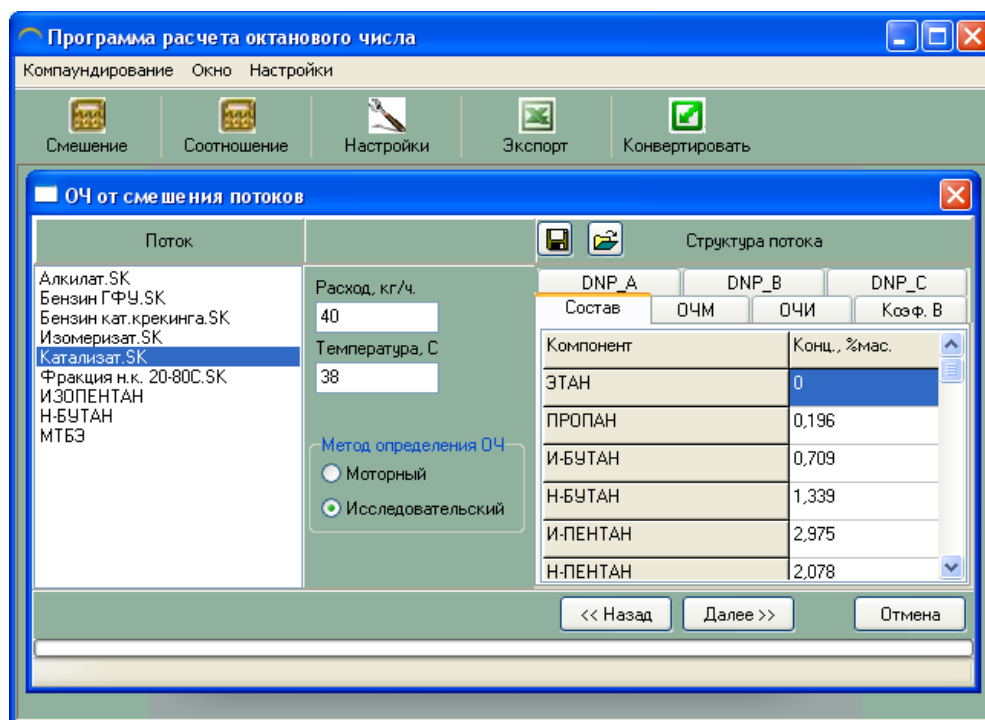


Рисунок 2.1 – Главное диалоговое окно моделирующей системы «Compounding»

При разработке моделирующей системы была использована технология создания многооконных приложений – это позволяет производить расчеты одновременно для нескольких марок бензина, а также является удобным при сравнении расчетов с различными параметрами процесса.

Компьютерная моделирующая система позволяет осуществлять расчет детонационной стойкости, давления насыщенных паров и плотности, как отдельных потоков, так и их смеси с присадками и добавками, кроме того система позволяет фиксировать суммарное содержание бензола, ароматических и олефиновых углеводородов в потоках. Также разработанный программный продукт позволяет рассчитывать оптимальную рецептуру смешения компонентов для получения товарного бензина требуемой марки, отвечающего всем экологическим стандартам.

2.1 Обработка данных хроматографического анализа

Исходными данными для проведения расчетов в моделирующей системе «Compounding» являются данные об углеводородном составе направляемых на компаундирование потоков, т.е. данные хроматографического анализа. В связи с отсутствием единой формы представления данных хроматографического анализа, а также тем фактом, что хроматограммы различных углеводородных потоков отличаются по набору и количеству компонентов, в моделирующей системе «Compounding» присутствует блок автоматизированной обработки данных хроматографического анализа «UniChrom».

В процессе обработки любая хроматограмма сводится к набору ключевых компонентов, формирующих конечное октановое число получаемого бензина. Данный набор является минимальным для обеспечения высокой точности расчета октанового числа смесевых бензинов. Ключевые компоненты представлены как индивидуальными углеводородами, так и псевдокомпонентами.

Агрегирование индивидуальных углеводородов в псевдокомпоненты осуществлялось на основе четырех критериев:

1. Групповая принадлежность углеводородов;
2. Близость концентраций;
3. Близость углеводородной структуры молекул;
4. Близость октановых чисел компонентов.

На начальных этапах разработки моделирующей системы «Compounding» набор ключевых компонентов включал в себя 69 компонентов (н-парафины, изопарафины, нафтены, ароматические углеводороды). Однако в дальнейшем, в связи с расширением углеводородного состава, вовлекаемых в смешение бензина потоков, набор ключевых компонентов был расширен до 110 компонентов: 10 н-парафинов, 39 изопарафинов, 15 нафтенных, 14 ароматических и 32 олефиновых углеводородов (таблица 2.1).

Таблица 2.1 – Ключевые компоненты блока обработки данных хроматографического анализа

№	Вещество	№	Вещество	№	Вещество
н-парафины		38	2,2,4-trimethylpentane(I8)	75	A9
1	ethane (P2)	39	2,3,3-trimethylpentane(I8)	76	tetramethylbenzenes(A10)
2	propane(P3)	40	2,3,4-trimethylpentane(I8)	77	A10
3	n-butane(P4)	41	I8	78	A11+
4	n-pentane(P5)	42	methyloctanes(I9)	олефины	
5	n-hexane(P6)	43	dimethylheptanes(I9)	79	butene-1(O4)
6	n-heptane(P7)	44	trimethylhexanes(I9)	80	butene-2(O4)
7	n-octane(P8)	45	I9	81	isobutylene(O4)
8	n-nonane(P9)	46	methylnonanes(I10)	82	O4
9	n-decane(P10)	47	dimethyloctanes(I10)	83	pentene-2(O5)
10	P11+	48	I10	84	pentene-1(O5)
изопарафины		49	I11+	85	cyclopentene(O5)
11	i-butane(I4)	нафтены		86	methylbutenes-1(O5)
12	i-pentane(I5)	50	cyclopentane(N5)	87	2-methylbutene-2(O5)
13	2,2-dimethylpropane(I5)	51	methylcyclopentane(N6)	88	O5
14	2-methylpentane(I6)	52	ethylcyclopentane(N7)	89	hexene-1(O6)
15	3-methylpentane(I6)	53	dimethylcyclopentanes(N7)	90	hexene-2(O6)
16	2,2-dimethylbutane(I6)	54	n-propylcyclopentane(N8)	91	hexene-3(O6)
17	2,3-dimethylbutane(I6)	55	i-propylcyclopentane(N8)	92	cyclohexene(O6)
18	2-methylhexane(I7)	56	ethylmethylcyclopentanes(N8)	93	methylcyclopentenes(O6)
19	3-methylhexane(I7)	57	trimethylcyclopentanes(N8)	94	methylpentenes-1(O6)
20	3-ethylpentane(I7)	58	cyclohexane(N6)	95	methylpentenes-2(O6)
21	2,2-dimethylpentane(I7)	59	methylcyclohexane(N7)	96	O6
22	2,3-dimethylpentane(I7)	60	1,2-dimethylcyclohexanes(N8)	97	heptene-1(O7)
23	2,4-dimethylpentane(I7)	61	1,3-dimethylcyclohexanes(N8)	98	heptene-2(O7)
24	3,3-dimethylpentane(I7)	62	N8	99	heptene-3(O7)
25	2,2,3-trimethylbutane(I7)	63	N9	100	methylhexenes(O7)

26	2-methylheptane(I8)	64	N10+	101	dimethylpentenes-1(O7)
27	3-methylheptane(I8)		ароматические	102	dimethylpentenes-2(O7)
28	4-methylheptane(I8)	65	benzene(A6)	103	trimethylbutenes(O7)
29	3-ethylhexane(I8)	66	toluene(A7)	104	O7
30	2,2-dimethylhexane(I8)	67	ethylbenzene(A8)	105	octene-1(O8)
31	2,3-dimethylhexane(I8)	68	dimethylbenzene(A8) = xylols	106	octene-2(O8)
32	2,4-dimethylhexane(I8)	69	i-propylbenzene(A9)	107	octene-3(O8)
33	2,5-dimethylhexane(I8)	70	n-propylbenzene(A9)	108	octene-4(O8)
34	3,3-dimethylhexane(I8)	71	methylethylbenzenes(A9)	109	O8
35	3,4-dimethylhexane(I8)	72	1,3,5-trimethylbenzene(A9)	110	O9+
36	methylethylpentanes(I8)	73	1,2,4-trimethylbenzene(A9)		
37	2,2,3-trimethylpentane(I8)	74	1,2,3-trimethylbenzene(A9)		– псевдокомпоненты

В связи с расширением списка ключевых компонентов, на основании данных о содержании которых, происходит расчет октановых чисел потоков по моделям (2.1) – (2.3), встала задача расчета величин дипольных моментов и интенсивности межмолекулярных взаимодействий для нового набора ключевых компонентов.

5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Предлагаемая разработка исследование имеет достаточно высокий коммерческий потенциал и является ресурсосберегающей технологией. Основными функциями являются: краткосрочный полуавтоматический расчет состава и свойств поступающих на смешение потоков, детонационных характеристик получаемых товарных бензинов, и разработка оптимальных рецептур смешения, отталкиваясь от имеющихся запасов сырья.

Практические преимущества разработки заключаются в точности производимых расчетов и реагировании изменения в составе сырья, что позволяет сэкономить дорогостоящие компоненты, снизить нежелательный запас по качеству и минимизировать объем некондиционных партий бензина, что в конечном итоге отражается на ценовой характеристике бензина, увеличивая его конкурентоспособность.

В данном разделе проведен анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения с целью оценки сравнительной эффективности научной разработки, и определения направления для ее будущего повышения. В оценочной карте (Таблица 5.1), сведены данные о трех конкурентных решениях и разработках, существующих на рынке: AspenPIMS, BOSS, OpenBPC.

Таблица 5.1 –Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы				Конкурентоспособность			
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	Б _{к3}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}	К _{к3}
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Технические критерии оценки ресурсоэффективности									
Повышение производительности	0,075	5	5	5	5	0,375	0,375	0,375	0,375

труда пользователя									
Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,05	5	5	5	5	0,25	0,25	0,25	0,25
Помехоустойчивость	0,005	5	5	4	4	0,025	0,025	0,02	0,02
Энергоэкономичность	0,005	5	5	4	4	0,025	0,025	0,02	0,02
Надежность	0,03	4	5	4	4	0,12	0,15	0,12	0,12
Уровень шума	0,0005	5	5	5	5	0,0025	0,0025	0,0025	0,0025
Безопасность	0,0005	5	5	4	4	0,0025	0,0025	0,002	0,002
Потребность в ресурсах памяти	0,035	5	4	4	4	0,175	0,14	0,14	0,14
Функциональная мощность (предоставляемые возможности)	0,125	4	5	5	4	0,5	0,625	0,625	0,5
Простота эксплуатации	0,06	5	4	4	4	0,3	0,24	0,24	0,24
Качество интеллектуального интерфейса	0,05	4	5	5	5	0,2	0,25	0,25	0,25
Возможность подключения в сеть ЭВМ	0,075	5	5	5	5	0,375	0,375	0,375	0,375
Экономические критерии оценки эффективности									
Конкурентоспособность продукта	0,08	4	5	5	5	0,32	0,4	0,4	0,4
Уровень проникновения на рынок	0,005	4	5	4	4	0,02	0,025	0,02	0,02
Цена	0,2	5	2	2	2	1	0,4	0,4	0,4
Предполагаемый срок эксплуатации	0,05	5	5	5	5	0,25	0,25	0,25	0,25
Послепродажное обслуживание	0,1	5	4	4	4	0,5	0,4	0,4	0,4
Финансирование научной разработки	0,002	3	5	5	5	0,006	0,01	0,01	0,01
Срок выхода на рынок	0,002	3	5	5	5	0,006	0,01	0,01	0,01
Наличие сертификации разработки	0,05	5	5	5	5	0,25	0,25	0,25	0,25
Итого	1	-	-	-	-	4,702	4,205	4,1595	4,034

где: B_{ϕ} – баллы предлагаемой разработки (комплексной системы для повышения ресурсоэффективности процесса производства бензинов); $B_{\kappa 1}$ – баллы первого конкурента (AspenPIMS); $B_{\kappa 2}$ – баллы второго конкурента (BOSS); $B_{\kappa 3}$ – баллы третьего конкурента (Honeywell's OpenBlendPropertyControl (OpenBPC)).

Анализ конкурентных технических решений определялся по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i = 4,702, \quad (5.1)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента; B_i – вес показателя (в долях единицы); B_i – балл i -го показателя.

Коэффициент конкурентоспособности:

$$КС = \frac{K}{K_{\text{max}}} = \frac{4,702}{4,205} = 1,118, \quad (5.2)$$

где $КС$ – коэффициент конкурентоспособности разработки, K_{max} – максимальная конкурентоспособность конкурента.

Основываясь на знаниях о конкурентных решениях, можно заключить, что уязвимость позиции конкурентов обусловлена в основном высокой ценой их разработок, а также необходимостью предприятиям дополнительно выплачивать значительные суммы денег за диагностику неполадок, улучшение и обновление их продукции. Также, имеют место технические недостатки разработок, такие как отсутствие учета физико-химической природы процесса производства бензинов, что в свою очередь, реализовано в данном проекте. За счет этого станет возможным занять нишу на рынке программного обеспечения, и сотрудничать со средними и крупными нефтеперерабатывающими предприятиями, предлагая им свою разработку в качестве альтернативы или дополнения к существующим на предприятии системам.

Многочисленные апробации разработки на реальных промышленных данных подтвердила точность производимых вычислений, что и являлось объектом интереса потенциальных партнеров. Дальнейшая работа будет направлена на улучшение интерфейса, расширение функционала и стабильности разработки, что поможет создаваемому продукту быть более гибким в условиях производства и завоевывать доверие большего числа покупателей.

5.2 FAST-анализ

Проведем FAST-анализа проекта, предполагающий шесть основных стадий:

Стадия 1. Выбор объекта FAST-анализа

В качестве объекта FAST-анализа выступает объект исследования – разработанная компьютерная моделирующая система для производства автомобильных бензинов.

Стадия 2. Описание главной, основных и вспомогательных функций, выполняемых объектом

Таблица 5.2 – Классификация функций, выполняемых объектом исследования

Наименование детали (узла, процесса)	Выполняемая функция	Ранг функции		
		Главная	Основная	Вспомогательная
Блок обработки данных хроматографического анализа («Unichrom»)	Формирование входной информации для расчетов; формализация многообразия компонентов бензинового пула при помощи логического фильтра			X
Блок расчета характеристик бензина («Compounding»)	Расчет детонационных характеристик вовлекаемых потоков и товарных бензинов на основе математических моделей		X	
Блок разработки оптимальных рецептур смешения бензинов	Разработка наиболее ресурсоэффективных рецептур смешения бензинов	X		

Стадия 3. Определение значимости выполняемых функций объектом.

Для оценки значимости функций будем использовать метод расстановки приоритетов, предложенный Блумбергом В.А. и Глуценко В.Ф. В основу данного метода положено расчетно-экспертное определение значимости каждой функции (Таблицы 5.1, 5.2).

Таблица 5.3 – Матрица смежности

	Функция 1 (Главная)	Функция 2 (Основная)	Функция 3 (Вспомогательная)
Функция 1 (Главная)	=	>	>
Функция 2 (Основная)	<	=	>
Функция 3 (Вспомогательная)	<	<	=

Таблица 5.4 – Матрица количественных соотношений функций

	Функция 1 (Главная)	Функция 2 (Основная)	Функция 3 (Вспомогательная)	ИТОГО
Функция 1 (Главная)	1	1,5	1,5	4
Функция 2(Основная)	0,5	1	1,5	3
Функция 3 (Вспомогательная)	0,5	0,5	1	2
				$\Sigma=9$

Значимость функции 1(Главной): $4/9=0,444$

Значимость функции 2 (Основной): $3/9=0,333$

Значимость функции 3(Вспомогательной): $2/9=0,222$

Стадия 4. Анализ стоимости функций, выполняемых объектом исследования.

Задача данной стадии заключается в том, что с помощью специальных методов оценить уровень затрат на выполнение каждой функции. Сделать это возможно с помощью применения нормативного метода. Расчет стоимости функций приведен в Таблице 5.5.

Таблица 5.5 – Определение стоимости функций, выполняемых объектом исследования

Наименование детали (узла, процесса)	Выполняемая функция	Трудоемк ость детали, нормо-ч.	Стоимость материала, т. руб.	Заработ ная плата, т. руб.	Себесто имость, т. руб.
Блок обработки данных хроматографического анализа («Unichrom»)	Смотри Таблицу 2	0,2	11,45	11,252	21,982
Блок расчета характеристик бензина	Смотри Таблицу 2	0,3	17,175	16,878	32,973

(«Compounding»)					
Блок разработки оптимальных рецептур смешения бензинов	Смотри Таблицу 2	0,5	28,625	28,13	56,93

Стадия 5. Функционально-стоимостная диаграмма(ФСД) разработки представлена на Рисунке 5.1.

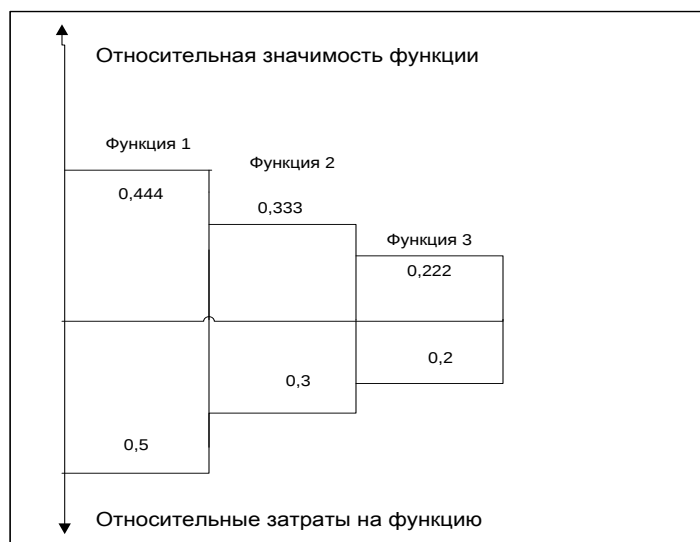


Рисунок 5.1 – Функционально-стоимостная диаграмма

Анализ приведенной выше ФСД показывает соответствие значимостей и затрат по всем имеющимся функциям, оптимизация функций, выполняемых объектом, не требуется.

5.3 SWOT-анализ

Комплексный анализ научно-исследовательского проекта SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) представлен в Таблице 10.

Таблица 5.6 – SWOT-анализ проекта

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	С1. Программа способна выполнять точный расчет углеводородного состава компонентов бензинов и товарного продукта	Сл1. Относительно большой срок внедрения на производство
	С2. Программа способна выполнять точный	Сл2. Необходимость наличия данных хроматографического

	одновременный расчет основных детонационных характеристик компонентов бензинов и товарного продукта	анализа
	С3. С помощью программы возможно осуществлять прогнозы детонационных характеристик	Сл3. Необходимость доработки программы в связи с возможными изменениями технологии смешения и/или числа используемых компонентов
	С4. Имеется возможность расчета оптимальных с точки зрения производства рецептур смешения и их корректировка в зависимости от изменений состава сырья	Сл4. Отсутствие необходимого оборудования для проведения лабораторных исследований
	С5. Применение системы дает экономию дорогостоящих присадок и добавок	Сл5. Сравнительно узкий функционал, по сравнению с комплексными моделирующими системами
	С6. Применение системы дает уменьшение нежелательного запаса по качеству товарных продуктов	Сл6. Использование относительно неэффективного алгоритма поиска оптимальных рецептур
	С7. Применение системы дает уменьшение риска выпуска некондиционных партий бензина	Сл7. Реализация не в самом «гибком» языке программирования
	С8. Программа проста в использовании	
Возможности:	Стратегия «Сильные стороны и Возможности»: разработанный программный продукт в силу своей простоты, наглядности, удобства и широкого функционала может быть легко внедрен как на российские, так и на зарубежные НПЗ разной мощности, дополняя в имеющиеся производственные системы, наращивая при этом точность и	Стратегия «Слабые стороны и Возможности»: реализация продукта должна осуществляться таким образом, чтобы избежать трудностей внедрения на производство, а именно: необходимо заранее убедиться в наличии необходимого сопутствующего оборудования, иметь широкие временные сроки внедрения, а также постоянно работать над улучшением модели поиска оптимальных рецептур смешения, модернизировать
В1. Повсеместное внедрение на малые, средние и крупные НПЗ		
В2. Постепенное увеличение точности расчетов программы путем накопления базы данных		
В3. Интеграция в комплексную систему моделирования производства моторных топлив с учетом влияния процессов вторичной нефтепереработки на качество конечного		

продукта	масштабность работы.	продукт и делать его более гибким в широком диапазоне изменения условий производства.
В4. Увеличение спроса на программу, как в России, так и за рубежом, путем активной рекламы «отечественной» разработки В5. Высокая стоимость конкурентных разработок	Низкая цена разработки сделает внедрение достаточно легким процессом.	
Угрозы:	Стратегия «Сильные стороны и Угрозы»:	Стратегия «Слабые стороны и Угрозы»:
У1. Разработка аналогов программы у конкурентов и их совершенствование с точки зрения физико-химических основ процесса смешения	поскольку главным отличием разработки от имеющихся на рынке аналогов является описание нелинейностей смешения с физико-химической точки зрения, необходимо и далее совершенствовать эту модель, не допуская ее утечки на рынок (в виде исходного кода программы). Необходимо использовать гибкость программы для внедрения ее на НПЗ, по возможности иметь несколько копий программы в разных языках программирования	принимая во внимание масштабы проблемы и силу конкурентов, а также недоработки программы в плане модели поиска рецептур и самого языка программирования, необходимо заранее оговаривать это при контактах с потенциальными партнерами, во избежание недопонимания. Основным преимуществом здесь будет возможность постепенной модернизации программы в условиях производства, постоянный контакт с партнерами, качественное обслуживание и сервис, что увеличит шансы на распространение разработанного продукта.
У2. Несовместимость с имеющимся на НПЗ программным обеспечением, необходимость смены языка программирования		
У3. Отказ от внедрения в связи с удовлетворением нынешнего потребления продукции/отсутствия значительных проблем, связанных с производством топлив.		

5.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

В Таблице 5.7 приведены показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта.

Таблица 5.7 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
-------	--------------	--	---

1.	Определен имеющийся научно-технический задел	5	4
2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	5	4
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	4
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	4
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	5
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	4	5
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	3	4
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	3
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	3
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	3
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	3
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	2	2
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	1	2
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	2	4
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	2	4
	ИТОГО БАЛЛОВ	48	54

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

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i = 48 + 54 = 102, \quad (5.3)$$

где $B_{\text{сум}}$ – суммарное количество баллов по каждому направлению; B_i – балл по i -му показателю.

Значение $B_{\text{сум}}=102$ позволяет говорить о том, что разработка считается перспективной, а знания разработчика достаточны для успешной ее коммерциализации.

По результатам оценки можно сделать вывод о необходимости увеличения объемов инвестирования в текущую разработку, улучшения уровня компетенций в вопросах продвижения проекта на международный

рынок, использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот и финансирования коммерциализации научной разработки.

5.5. План проекта

В рамках планирования научного проекта был построен календарный графики проекта в виде Таблицы 5.8 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени выполнения научного проекта.

Таблица 5.8 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№ работ	Вид работ	Исполнители	T_{ki} , кал.дн.	Продолжительность выполнения работ												
				февр.		март			апрель			май			июнь	
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель	4													
2	Выбор направления исследований	Руководитель Студент	4													
3	Обзор современной периодической литературы по выбранному направлению	Руководитель Студент	3													
4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Студент	1 1													
5	Разработка схемы функционирования продукта	Руководитель, Студент	13 14													
6	Теоретическое обоснование и выбор экспериментальных методов исследований	Руководитель Студент	15													

7	Построение моделей и проведение экспериментов	Руководитель Студент	5													
8	Сопоставление расчетных данных с фактическими	Студент	2													
9	Калибровка модели и её улучшение	Руководитель Студент	5													
10	Оценка эффективности применения разработки	Руководитель Студент	4													
11	Составление пояснительной записки	Руководитель, Студент	21													
12	Сдача работы на рецензию	Студент	3													
13	Предзащита	Руководитель, Студент	1 1													
14	Подготовка к защите дипломной работы	Студент	16													
15	Защита дипломной работы	Студент	1 1													

 – руководитель,  – студент.

5.6. Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения.

1. Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты (за вычетом отходов) и прочие материальные затраты, необходимые для данной разработки, сведены в Таблице 5.9.

Таблица 5.9 – Затраты на сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты

Наименование	Ед-ца измерения	Количество		Цена за ед. с НДС, руб.		Затраты на материалы, (З _м), руб.	
		Руководитель (Р)	Студент (С)	Р	М	Р	М
Бумага для принтера	листов	200	500	1	1	240	600
Тетрадь для записей	шт	2	4	30	30	72	144
Ручка	шт.	2	4	20	20	48	96
Краска для принтера	мл.	100	300	5	5	600	1800
Итого, руб.						3600	

2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ. Все расчеты по приобретению спецоборудования, включая 15% на затраты по доставке и монтажу, отображены в Таблице 5.10.

Таблица 5.10 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудов ания	Цена единицы оборудовани я, тыс. руб.	Мощность электроприбо ра, кВт·ч	Затраты на электроэнергию, тыс. руб
1	Компьютер	2	20	0,75	1,7854
2	Лазерный принтер	1	5	0,05	0,119
Итого, т.руб.					53,65

Расчет стоимости электроэнергии (Таблица 14):

$$E_1 = C \cdot N_1 \cdot H \cdot D = 4,36 \cdot 0,75 \cdot 6 \cdot 91 = 1785,4 \text{ руб} \quad (5.4)$$

$$E_2 = C \cdot N_2 \cdot H \cdot D = 4,36 \cdot 0,05 \cdot 6 \cdot 91 = 119 \text{ руб},$$

где: E_1 – общее потребление электроприбором №1 энергии на весь срок научного исследования; N – мощность электроприбора, кВт·ч; C – стоимость электроэнергии для юридических лиц по Томской области (4,36 руб/кВт·ч); H – норма рабочих часов в день (6 часов в день); D – общий срок научного исследования (91 день).

3. Расчет основной заработной платы сводится в Таблицу 5.11:

Таблица 5.11 – Расчет основной заработной платы

№ п/п	Наименование этапов	Исполнители по категориям	Трудоемкость, чел.-дн.	Заработная плата, приходящаяся на один чел.- дн., тыс.руб.	Всего заработная плата по тарифу (окладам), тыс. руб.
1	Подготовительный	Руководитель, студент	19	0,618	11,74
2	Основной	Руководитель, студент	43	0,618	26,58
3	Завершающий	Руководитель, студент	29	0,618	17,93
Итого, т.р.					56,26

Для расчетов принято, что заработная плата руководителя – ассистента кафедры ХТТиХК, согласно [1], составляет 13824 рубля в месяц, заработная плата студента равна повышенной стипендии и составляет 2500 рублей в месяц. Районный коэффициент для Томской области – 130%.

Дополнительная заработная плата составляет 10% от основной, отчисления во внебюджетные фонды – 30%.

Для руководителя:

$$\begin{aligned} Z_{\text{осн}} &= \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}} \cdot T_{\text{раб}} = \frac{13824 \cdot 1,3 \cdot 10,4}{299} \cdot 91 = 56822,74 \text{ руб.} \\ C_{\text{зп}} &= Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}} = 56822,74 + 0,1 \cdot 56822,74 = 62511,015 \text{ руб.} \\ Z_{\text{отч}} &= C_{\text{зп}} - 0,3 \cdot C_{\text{зп}} = 62511,015 - 0,3 \cdot 62511,015 = 43757,71 \text{ руб.} \end{aligned} \quad (5.5)$$

Для студента:

$$Z = 2500 \cdot 5 = 12500 \text{ руб.},$$

Общая заработная плата составляет: $Z_{\text{сумм}} = 12,5 + 43,76 = 56,26 \text{ т.руб.}$

Заработная плата, приходящаяся на один чел.-дн.:

$$Z_{1\text{ч/д}} = \frac{Z_{\text{сумм}}}{T_{\text{раб}}} = \frac{56260}{91} = 0,618 \text{ т.руб} \quad (5.6)$$

где М – количество месяцев работы без отпуска в течение года, М = 10,4 месяца (6-дневная неделя), $T_{\text{раб}}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, 91 раб.дн; $F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала в 2015 году, 299 раб. дней.

5.7. Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта представлены в Таблице 5.12.

Таблица 5.12 – Реестр рисков

№	Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Изменение требований к продукту	Изменение и расширение методов исследования	2	4	Средний	Предварительное расширение функционала разработки, детальное исследование конкурентных решений	Изменение технологии производства
2	Низкое качество полученного продукта	Снижение перспектив выхода на рынок и коммерциализации продукта	3	5	Высокий	Контроль исполнения разработки на всех этапах проведение проверок моделей, привлечение согласующих лиц	Слабо организованная работа, низкий уровень обучения исполнителей
3	Изменение условий рынка	Сложности выхода на рынок, замедление сроков коммерциализации	2	3	Средний	Расширение функционала разработки, подстройка под реалии рынка	Изменение ситуации на рынке
4	Прекращение финансирования проекта	Замедление сроков реализации проекта, технические сложности	2	3	Низкий	Переход на самостоятельное финансирование или поиск альтернативных источников	Изменение ситуации в организации
5	Изменения в структуре организации, от которой зависит проект	Сложности регистрации продукта, изменение условий патентования	2	3	Низкий	Координация с другими организациями, поиск спонсоров и партнёров	Изменение ситуации в организации
6	Ошибки планирования проекта	Снижение репутации на рынке, нарушение временных рамок исполнения работы	2	4	Средний	Тщательное изучение объемов работы, технических сложностей и анализ временных ресурсов	Слабо организованная работа, низкий уровень обучения исполнителей

7	Негативные оценки проекта	Снижение репутации на рынке и в научном сообществе	2	5	Высокий	Тщательная и скоординированная работа исполнителей, поддержание партнерских связей	Слабо организованная работа, низкий уровень обучения исполнителей
---	---------------------------	--	---	---	---------	--	---

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

5.8.1 Оценка сравнительной 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 показатель финансовой эффективности научного исследования был получен в ходе оценки бюджета затрат для трех вариантов исполнения научного исследования. Данные занесены в Таблицу.

Интегральный финансовый показатель разработки равен:

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{200000 \text{ р.}}{5000000 \text{ р.}} = 0,04 \quad (5.7)$$

Интегральный финансовый показатель первого аналога равен:

$$I_{\phi}^{A1} = \frac{\Phi_{A1}}{\Phi_{\max}} = \frac{4100000 \text{ р.}}{5000000 \text{ р.}} = 0,82 \quad (5.8)$$

где I_{ϕ}^p - интегральный финансовый показатель разработки; Φ_{pi} - ориентировочная стоимость варианта исполнения текущей разработки; $\Phi_{\max}$ - максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в качестве максимальной стоимости взята стоимость существующей на рынке системы HoneywellOpenBPC в базовой комплектации; стоимость системы BOSS составляет ориентировочно 4100000 р.).

Интегральный показатель ресурсоэффективности аналогов проекта определяется следующим образом:

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a, \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p \quad (5.9)$$

где I_m – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов; a_i – весовой коэффициент i -го параметра; b_i^a , b_i^p – бальная оценка i -го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания; n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя приведен в Таблице 5.8.

Таблица 5.8 – Сравнительная оценка характеристик аналогов проекта

Критерии \ ПО	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1 (BOSS)	Аналог 2 (OpenBPC)
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,1	5	5	5
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	4	5	5
3. Помехоустойчивость	0,15	4	4	4
4. Энергосбережение	0,20	4	3	3
5. Надежность	0,25	3	5	4
6. Материалоемкость	0,15	5	4	3
ИТОГО	1	4	4,3	3,9

Разработка: $I_m^p = 5*0,1 + 4*0,15 + 4*0,15 + 4*0,2 + 3*0,25 + 5*0,15 = 4$

Аналог 1 (BOSS): $I_m^{A1} = 5*0,1 + 5*0,15 + 4*0,15 + 3*0,2 + 5*0,25 + 4*0,15 = 4,3$

Аналог 2 (OpenBPC): $I_m^{A2} = 5*0,1 + 5*0,15 + 4*0,15 + 3*0,2 + 4*0,25 + 3*0,15 = 3,9$

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{финр}^p$):

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p} = \frac{4}{0,04} = 100 \quad (5.10)$$

Интегральный показатель эффективности аналога №1:

$$I_{финр}^{A1} = \frac{I_m^{A1}}{I_\phi^p} = \frac{4,3}{0,82} = 5,243 \quad (5.11)$$

Интегральный показатель эффективности аналога №2:

$$I_{финр}^{A2} = \frac{I_m^{A2}}{I_\phi^p} = \frac{3,9}{1} = 3,9 \quad (5.12)$$

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

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{A1}} = \frac{100}{5,243} = 19,073, \mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{A2}} = \frac{100}{3,9} = 25,641 \quad (5.13)$$

где $\mathcal{E}_{cp}$ – сравнительная эффективность проекта; $I_{m\mathcal{E}}^p$ – интегральный показатель разработки; $I_{m\mathcal{E}}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 5.9 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Текущий проект	Аналог 1 (BOSS)	Аналог 2 (OpenBPC)
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,04	0,82	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4	4,3	3,9
3	Интегральный показатель эффективности	100	5,243	3,9
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	-	19,073	25,641

Сравнение значений интегральных показателей эффективности (Таблица 5.9) позволяет сделать вывод, что текущая разработка вследствие своей низкой цены и широкого функционала является эффективной по сравнению с представленным на рынке программным обеспечением.