

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

---

Институт природных ресурсов  
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология  
Профиль Химическая технология топлива и газа  
Кафедра химической технологии топлива и химической кибернетики

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

Тема работы
<b>Исследование, расчет и модификация физико-химических свойств моторных топлив</b> УДК 665.733.038.3

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5Б	Карпова Алёна Михайловна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Самборская М.А.	К.Т.Н.		

**КОНСУЛЬТАНТЫ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Креницына З.В.	К.Т.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Раденков Т.А.			

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ХТТиХК	Юрьев Е.М.	К.Т.Н.		

Томск – 2017 г.

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕДИНЕНИЕ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ5Б	Карповой Алёне Михайловне

Институт	ИПР	Кафедра	ХТТ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	Химическая технология топлива и газа

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Бюджет научного исследования составляет 1073063,3руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды – 20%

### Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	1.1 Потенциальные потребители результатов исследования 1.2. Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения 1.3. Диаграмма Исикава
2. Разработка устава научно-технического проекта	2.1. Устав проекта 2.2. Организационная структура проекта
3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	- План проекта (календарный план НТИ) - Бюджет проекта исследования (планируемые затраты на выполнения НТИ) - Организационная структура проекта (выбор организационной структуры научного проекта)
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	4.1 Оценка сравнительной эффективности исследования

### Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Диаграмма Исикавы
3. Оценка степени готовности проекта к коммерциализации
4. Организационная структура проекта
5. Календарный план-график проведения НИОКР
6. Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

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

### Задание выдал консультант:

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

### Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5Б	Карпова Алёна Михайловна		

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
2ДМ5Б	Карповой Алёне Михайловне

<b>Институт</b>	<b>ИПР</b>	<b>Кафедра</b>	<b>ХТТ и ХК</b>
<b>Уровень образования</b>	Магистратура	<b>Направление/специальность</b>	Химическая технология топлива и газа

### Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p><i>1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения)</li> <li>– опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы)</li> <li>– негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу)</li> <li>– чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера)</li> </ul>	<p>Рабочая зона - химическая лаборатория по исследованию моторных топлив, аудитория оборудованная компьютерами. В рабочей зоне, т.е. в химической лаборатории могут наблюдаться следующие вредные факторы: опасные химические реактивы, повышенный уровень шума, недостаточная освещенность лаборатории и ее отдельных участков.</p> <p>Опасные факторы: возникновение взрывов и пожаров в результате работы с легковоспламеняющимися жидкостями, повышенная температура рабочей поверхности оборудования, поражение электрическим током.</p> <p>Выбросы вредных веществ в атмосферу: серосодержащие соединения, предельные и непредельные углеводороды и т.д. Основной угрозой является возникновение чрезвычайных ситуаций техногенного характера.</p>
<p><i>2. Перечень законодательных и нормативных документов по теме</i></p>	<p>Федеральный закон № 426-ФЗ от 28 декабря 2013 года «О специальной оценке условий труда».</p> <p>Федеральный закон №184-ФЗ «О техническом регулировании» от 27 декабря 2002 года.</p> <p>Федеральный закон № 123-ФЗ от 22.07.2008 г (ред. от 10.07 2012г) «Технический регламент о требованиях к пожарной безопасности»</p>
<p><b>Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:</b></p>	
<p><i>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой;</li> <li>– действие фактора на организм человека;</li> <li>– приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ);</li> <li>– предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства)</li> </ul>	<p>Наличие вредных веществ (бензин, этиловый спирт, анилин).</p> <p>Недостаточная освещенность помещений.</p> <p>Повышенный уровень шума.</p> <p>Негативные микроклиматические условия в холодное время года.</p> <p>Средства защиты коллективные и индивидуальные.</p>

<p>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– механические опасности (источники, средства защиты);</li> <li>– термические опасности (источники, средства защиты);</li> <li>– электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты);</li> <li>– пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения)</li> </ul>	<p>К опасным факторам относят оборудование с повышенной или пониженной температурой поверхности, токоведущие части электрооборудования, повышенное значение напряжения в электрической цепи, молнезащита (необходимо заземление), возникновение пожара.</p> <p>Используемые средства защиты: перчатки, ухваты, спецодежда.</p>
<p>3. Охрана окружающей среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– защита селитебной зоны</li> <li>– анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы);</li> <li>– анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы);</li> <li>– анализ воздействия объекта на литосферу (отходы);</li> <li>– разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.</li> </ul>	<p>Селитебная зона должна располагаться с наветренной стороны выше по течению реки. На окружающую среду воздействуют вредные вещества: бензин (особенно, ароматические соединения), анилин.</p> <p>Химическое загрязнение водотоков в результате отмывания химических отходов в канализационную сеть.</p> <p>Необходимо осуществлять отдельный сбор и хранение отходов, подвергать их переработке, утилизации или захоронению.</p>
<p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– перечень возможных ЧС на объекте;</li> <li>– выбор наиболее типичной ЧС;</li> <li>– разработка превентивных мер по предупреждению ЧС;</li> <li>– разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС;</li> <li>– разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий</li> </ul>	<p>Возможные ЧС: пожар, взрыв, разрушение зданий в результате разрядов атмосферного электричества, ураган, землетрясение.</p> <p>Наиболее актуальная ЧС – возникновение пожара. Для его ликвидации необходимо использовать огнетушитель, песок, асбестовое одеяло.</p>
<p>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны</li> </ul>	<p>Каждому работающему с химическими веществами выдаются средства индивидуальной защиты. Проводятся инструктажи, обучения.</p> <p>Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны: технический перерыв, полная изоляция от производственных источников шума и вибрации.</p>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Раденков Тимофей Александрович			

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5Б	Карпова Алёна Михайловна		

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ООП 18.04.01)

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), <b>CDIO(п. 1.1, 4.1, 4.3, 4.8)</b>
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), <b>CDIO (п. 1.1, 3.2, 4.2, 4.3, 4.5, 4.6)</b>
P3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии	Требования ФГОС (ПК-1,5,8,9, ОК-2,3), Критерий 5 АИОР (пп.1.2), <b>CDIO (1.2, 2.1, 4.5)</b>
P4	Разрабатывать <i>новые</i> технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии, <i>проектировать объекты химической технологии в контексте предприятия, общества и окружающей среды</i>	Требования ФГОС (ПК-11,26,27,28), Критерий 5 АИОР (п.1.3) (ОК-9, ОК-10, ОК-13, ПК-4, 7, 10, 12 -17, 26 ) <b>CDIO (п.1.3, 4.4, 4.7)</b>
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), <b>CDIO (п. 2.2)</b>
P6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, <i>выводить на рынок новые материалы</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.	Требования ФГОС (ПК-6,10,12,13,14,15, ОК-6,13,15), Критерий 5 АИОР (п.1.5) <b>CDIO(п. 4.1, 4.7, 4.8, 3.1, 4.6)</b>
<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), <b>CDIO (п. 2.5)</b>
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1,2,7,8,12), Критерий 5 АИОР (2.6), <b>CDIO (п. 2.4)</b>
P9	<i>Активно</i> владеть <i>иностраным языком</i> на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-14) , Критерий 5 АИОР (п.2.2), <b>CDIO (п. 3.2, 3.3)</b>
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) <b>CDIO(п. 4.7, 4.8, 3.1)</b>

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

---

Институт природных ресурсов  
Направление подготовки – Химическая технология  
Кафедра – Химической технологии топлива и химической кибернетики

УТВЕРЖДАЮ  
Зав. каф. ХТТ, к.т.н., доцент  
\_\_\_\_\_ Юрьев Е.М.  
(Подпись)      (Дата)      (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ**  
**на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Магистерской диссертации
--------------------------

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

Студенту:

Группа	Ф.И.О.
2ДМ5Б	Карповой Алёне Михайловне

Тема работы:

Исследование, расчет и модификация физико-химических свойств моторных топлив	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	от 13.12.2016 г. №762/с

Срок сдачи студентом выполненной работы	25.05.2017 г.
---	---------------

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ**

<p><b>Исходные данные к работе</b></p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам, экономический анализ и т.д.)</i></p>	Прямогонные бензиновые дистилляты различных НПЗ, октаноповышающие добавки
<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b></p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения</i></p>	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Механизмы действия присадок</li><li>2. Методы расчета октановых чисел бензинов</li></ol>

<i>достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	3. Постановка задачи исследования 4. Экспериментальная часть: постановка и выполнение экспериментов, проверка и модификация расчетных методов. 5. Выводы и рекомендации
<b>Перечень графического материала</b>	Чертеж общего вида статического смесителя
<b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b>	
<b>Раздел</b>	<b>Консультант</b>
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Креницына З.В., к.т.н., доцент каф. Мен
Социальная ответственность	Раденков Т.А., ассистент каф. ЭБЖ
<b>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</b>	
Разделы на русском языке: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Обзор литературы;</li> <li>• Объекты и методы исследования;</li> <li>• Расчет и аналитика;</li> <li>• Результаты проведенного исследования;</li> <li>• Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение;</li> <li>• Социальная ответственность.</li> </ul>	
Разделы на иностранном языке: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Обзор литературы</li> </ul>	

<b>Дата выдачи на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал руководитель:**

Должность	Ф.И.О.	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф.ХТТ и ХК	Самборская М.А.	к.т.н.		15.02.2017

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	Ф.И.О.	Подпись	Дата
2ДМ5Б	Карпова Алёна Михайловна		15.02.2017

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

Институт природных ресурсов  
 Направление подготовки (специальность) Химическая технология топлива и газа  
 Кафедра химической технологии топлива и химической кибернетики  
 Период выполнения (осенний/весенний семестр 2016/2017 учебного года)

Форма представления работы:

Магистерская диссертация
--------------------------

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН  
 выполнения выпускной квалификационной работы**

Сроки	15.02.2017 – 25.05.2017 гг.
Отбор, анализ литературы, патентный поиск	17.02.2017 – 28.02.2017 гг.
Эксперимент и обсуждение результатов	01.03.2017 – 20.04.2017 гг.
Написание и оформление работы	24.04.2017 – 21.05.2017 гг.
Допуск к защите на кафедре	05.06.2017
Рецензирование	22.05.2017-31.05.2017 гг.

Срок сдачи студентом выполненной работы: 25.05.2017
---

Дата Контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.17	Обзор литературы	15
15.03.17	Методы и объекты исследования	15
25.04.17	Расчет и аналитика	25
27.04.17	Результаты исследования	15
11.05.17	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
19.05.17	Социальная ответственность	15

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ХТТ и ХК	Самборская Марина Анатольевна	к.т.н		

Согласовано:

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

## Реферат

Магистерская работа содержит 117 страниц, 59 таблиц, 25 рисунков, 50 источников, 2 приложения.

Ключевые слова: прямогонный бензин, октановое число, экспресс-методы, эксплуатационные характеристики, антидетонационная стойкость, октаноповышающие добавки.

Объектом исследования являются прямогонные бензиновые дистилляты различных НПЗ и индивидуальные вещества, выступающие в роли октаноповышающих добавок.

Целью данной работы является исследование возможности использования расчетных методов для определения октанового числа бензинов и их смесей с высокооктановыми компонентами, используя данные по их физико-химическим свойствам.

В процессе исследования проводилась проверка возможности применения экспресс-методов для расчета октанового числа прямогонных бензиновых дистиллятов и их смесей с октаноповышающими добавками.

В результате расчетов подобраны методы и выбраны формулы, приемлемые для расчета октанового числа прямогонных бензинов и получена логарифмическая зависимость для прогнозирования октанового числа, описывающая содержание добавки.

Область применения: промышленные предприятия нефтехимической отрасли, отдельные исследования и разработки высокооктановых добавок и рецептур смешения.

## Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие нормативные документы:

1. ТР ТС 013/2011 Технический регламент Таможенного союза «О требованиях к автомобильному и авиационному бензину, дизельному и судовому топливу, топливу для реактивных двигателей и мазуту»
2. ГОСТ 511-82. Топливо для двигателей. Моторный метод определения октанового числа
3. ГОСТ 5819 – 78. Реактивы. Анилин. Технические условия.
4. ГН 2.2.5.1313 – 03. Предельно допустимые концентрации вредных веществ в воздухе рабочей зоны.
5. ГОСТ 12.1.007 – 76. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.
6. СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
7. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.
8. ГОСТ 12.1.003– 90. Система стандартов безопасности труда. Шум.
9. ГОСТ 12.1.019 – 79. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
10. ГОСТ 17.2.3.02—78. Охрана природы. Атмосфера. Правила установления допустимых выбросов вредных веществ промышленными предприятиями
11. ГОСТ 17.1.3.05—82. Охрана природы. Гидросфера. Общие требования к охране поверхностных и подземных вод от загрязнения нефтью и нефтепродуктами.
12. ГОСТ Р 22.0.02 – 94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

В настоящей бакалаврской работе применяются следующие сокращения:

ВОК – высокооктановый компонент

ДВС – двигатель внутреннего сгорания

НПЗ – нефтеперерабатывающий завод

ОЧ – октановое число

ОЧИ – октановое число по исследовательскому методу

ОЧМ – октановое число по моторному методу

ОЧД – дорожное октановое число

ЦЧ – цетановое число

## Содержание

Введение	14
1 Модификаторы и оборудование для улучшения эксплуатационных характеристик и физико-химических свойств моторных топлив	16
1.1 Модификаторы детонационной стойкости	18
1.2 Модификаторы воспламеняемости дизельного топлива	19
1.3 Статические смесители для производства топливных композиций	20
2 Механизмы действия присадок для моторных топлив и методы расчета октанового числа бензинов	26
2.1 Механизмы действия присадок для моторных топлив	26
2.2 Методы расчета октанового числа бензиновых топлив	31
3 Постановка задачи исследования	38
4 Экспериментальная часть	40
4.1 Характеристика объекта исследования	40
4.2 Исследования прямогонных бензиновых дистиллятов	40
4.2.1 Основные физико-химические свойства исследуемого прямогонного бензина	40
4.2.2 Результаты расчетов	41
4.3 Исследования смесей бензиновых дистиллятов с октаноповышающими добавками	47
4.3.1 Рецептуры и физико-химические свойства добавок	47
4.3.2 Результаты расчета	52
4.4 Проектирование узла смешения на линиях бензинового и дизельного топлива	63
4.4.1 Разработка модели смесителя в среде HYSYS	64
	12

4.4.1.1	Линия бензинового топлива	64
4.4.1.2	Линия дизельного топлива	66
4.4.2	Гидравлический и тепловой расчеты	68
4.4.3	Конструктивные и механические расчеты	70
4.5	Обсуждение результатов	75
5	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	76
6	Социальная ответственность	98
	Заключение	110
	Список публикаций	111
	Список литературы	112
	Приложение А Раздел ВКР на английском языке	118
	Приложение Б Чертеж общего вида статического смесителя	130

## Введение

Бензинами называют жидкие топлива, полученные из нефти, газа или газового конденсата, которые применяют в поршневых двигателях внутреннего сгорания (ДВС) с искровым воспламенением. По назначению различают автомобильные и авиационные бензины. Несмотря на различные условия применения, как автомобильные, так и авиационные бензины можно охарактеризовать общими показателями качества, определяющими их физико-химические свойства и эксплуатационные характеристики.

Автомобильный бензин - массовый продукт производства нефтехимической промышленности. В бензин перерабатывают четверть нефти, добываемой в мире. Также возможно ограниченное получение бензинов из альтернативных сырьевых источников: каменный уголь, сланцы, битуминозные пески и конечно, природный газ.

Бензин выделяют в качестве отдельной нефтяной фракции, имеющей температурные пределы кипения порядка 30 – 180 °С, и является смесью различных компонентов из различных технологических процессов нефтепереработки.

Бензины, в большинстве, имеют базовую составляющую, высокооктановый компонент (ВОК), антидетонационные присадки и добавки, а также присадки, улучшающие другие эксплуатационные характеристики.

В последние годы остро стоит вопрос качества автобензина, который вместе с вытекающим вопросом его применения обрели приоритетное значение, решение которых актуально для развития экономики и технического прогресса в целом. В настоящее время требования к качеству автомобильных бензинов очень высоки и постоянно растут, поэтому для улучшенных двигателей необходимо разрабатывать современные перспективные виды бензинов, отличающиеся улучшенными физико-химическими свойствами и эксплуатационными характеристиками.

Детонационная стойкость бензина – важнейший показатель его качества, характеризующийся октановым числом. В данном исследовании изучена возможность применения расчетных экспресс-методов для определения ОЧ бензинового топлива, как с добавками, так и без них. Подобные методы позволят быстро оценивать и прогнозировать качество бензиновых композиций

## **1 Модификаторы и оборудование для улучшения эксплуатационных характеристик и физико-химических свойств моторных топлив**

Номенклатура модификаторов топлив включает более 20 основных видов, а число композиций, имеющих практическое применение, насчитывает более сотни. Большая часть предназначена для совершенствования процессов горения топлива, что влечет к снижению токсичности продуктов сгорания [1]. Краткая номенклатура добавок, имеющих положительное влияние на эксплуатационные характеристики моторных топлив, представлена в таблице 1.

Добавки к топливу не должны изменять к худшему их физико-химические и эксплуатационные свойства. Однако, приемлемы отклонения показателей от нормы, по которым можно косвенно охарактеризовать качество нефтепродукта. Подобные отклонения зафиксированы в технической документации на добавки к топливу. При этом, такие отклонения стоит рассматривать как временные и создавать добавки, исключаяющие эти недостатки.

Рассмотрим рецептуры присадок, добавок и разработки оборудования на базе российских публикаций и патентов, обладающие дополнительными характеристиками, которые улучшают качество моторных топлив.

Таблица 1 – Ассортимент присадок

Присадки	Назначение
Антиоксиданты и стабилизаторы	Повышение окислительной способности топлива, предотвращение смоло- и осадкообразования
Деактиваторы металлов	Связывание промоторов окисления у/в: меди, железа и других металлов в неактивные комплексы
Моющие	Препятствие образованию отложений на деталях двигателя и топливной аппаратуры. Обладают дополнительными антиобледенительными и антикоррозионными свойствами
Антидымные	Снижение концентрации дыма в отработавших газах дизельных двигателей, незначительно влияют на выбросы других токсичных компонентов
Антинагарные	Снижение нагарообразования в камере сгорания, на клапанах и распылителях форсунок дизельных двигателей
Антисажевые	Уменьшение температуры выгорания сажи на поверхности сажевых фильтров
Антидетонаторы	Предотвращение детонационного горения бензинов
Промоторы воспламенения	Улучшение воспламеняемости дизельных топлив
Антистатические	Предотвращение накопления зарядов статического электричества в топливе
Биоциды	Предотвращение порчи топлива микроорганизмами
Диспергирующие	Повышение физической стабильности остаточных топлив, улучшение их смесеобразования с воздухом, дополнительные защитные свойства
Катализаторы горения	Повышение эффективности горения остаточных топлив

## 1.1 Модификаторы детонационной стойкости бензинов

Существует большое количество патентов, авторы которых предлагают различные композиции добавок к бензиновому топливу. Так авторами патента РФ №2155793 изобретена добавка, улучшающая антидетонационные и эксплуатационные свойства бензинов. Добавка содержит 6,5-70% масс. N-метиланилина, 0,2-27% масс. третичного бутилового спирта, не более 6,0% масс. моющей присадки, 0,1-25% масс. эфиров уксусной кислоты и сивушного масла и до 100 масс. метил-трет-бутилового эфира. Добавка предназначена для использования в автомобильных бензинах любых марок в концентрации до 20 мас.%. Добавка обладает высокой антидетонационной эффективностью, малой гигроскопичностью, стабильна при низких температурах [2].

Авторы патента РФ №2524955 предлагают многофункциональную добавку к углеводородсодержащему топливу, включающую смесь из одного или нескольких простых смешанных эфиров, с одним или несколькими оксигенатами. В качестве простых смешанных эфиров используют N-метил-пара-анизидин и/или N-метил-пара-фенетидин, в качестве оксигенатов используют диметилкарбонат и/или диэтилкарбонат, и/или метилацетат, и/или этилацетат, и/или метилаль. Добавка содержит 0,1-99,9 %масс. простых смешанных эфиров, 0,1-99,9 %масс. оксигенатов. Предназначена для углеводородсодержащих топливных композиций в количестве 0,01-30 мас.%, по отношению к весу топливной композиции. Топливная композиция по заявленному изобретению обладает высокой антиокислительной стабильностью, высокой экологичностью, детонационной стойкостью, полнотой сгорания, низким нагарообразованием и отложениями на деталях двигателя [3].

В патенте РФ №2473670 предлагается комплексная добавка к автомобильному бензину. Добавка вводится до 10 %масс. и представляет собой в %масс.: монометиланилин 15-18, метилбензоат 5-6, спирты в сумме

20-40, эфиры в сумме остальное до 100. В качестве эфиров используют диизопропиловый, и/или метил-трет-бутиловый, и/или метил-трет-амиловый, и/или этил-трет-бутиловый, и/или этил-трет-амиловый эфир. В качестве спиртов используют изопропиловый, и/или изоамиловый, и/или изобутиловый спирт. Технический результат - увеличение октанового числа топлива, снижение токсичности отработавших газов, уменьшение расхода топлива, увеличение мощностных показателей двигателя, отсутствие расслоения и выпадения осадка в топливе с присадкой при отрицательных температурах [4].

Унифицированный модификатор для бензина предлагают авторы патента РФ №2457238. Модификатор содержит в своем составе амиловый эфир уксусной кислоты и глиоксаль в твердой фазе при следующем соотношении компонентов, % масс.: амилацетат 99,5-99,9; глиоксаль 0,1-0,5. Технический результат - повышение октанового числа топлива, увеличение мощности двигателя, снижение выбросов оксида углерода (CO) с отработавшими газами, снижение расхода топлива, улучшение моющих свойств топлива [5].

Таким образом, можно сделать вывод, что октаноповышающие добавки используют для изготовления автомобильных бензинов в пределах от 0,01 до 30 % масс. и они являются экономически и технологически оправданным методом улучшения антидетонационной характеристики автобензинов.

## **1.2 Модификаторы воспламеняемости дизельного топлива**

Существует большое количество патентов, авторы которых предлагают различные композиции добавок к дизельному топливу. Так авторами патента РФ № 2451718 изобретена присадка для повышения цетанового числа дизельного топлива. Присадка состоит из предварительно смешанных циклогексилнитрата или 2-этилгексилнитрата и пероксидов, выбранных из группы: ди-трет-бутилпероксид, дикумилпероксид, кумилгидропероксид при массовом соотношении указанных компонентов от 3:1 до 1:3. При этом в

дизельное топливо присадка вводится в количестве 0,1-0,5 %масс. Технический результат - повышение цетанового числа дизельного топлива и снижение содержания оксидов азота в отработавших газах [6].

Авторы патента РФ № 2309975 предлагают присадку для повышения цетанового числа дизельного топлива. Присадка состоит из предварительно смешанных циклогексилнитрата и фракции парафиновых углеводородов нормального строения от C<sub>9</sub> до C<sub>20</sub> при массовом соотношении указанных компонентов от 4:1 до 1:4. Дизельное топливо содержит эту присадку в количестве 0,05-0,75 %масс. Присадка обладает синергетическим эффектом. Прирост цетанового числа дизельного топлива от ее использования превышает суммарный эффект от использования каждого составляющего компонента. Присадка за счет ее большей растворимости облегчает процесс смешения с топливом [7].

В патенте РФ № 2525552 авторами предлагается присадка для повышения ЦЧ дизельного топлива на основе алкилнитрата. Добавка является алкилнитритсодержащим продуктом нитрования фракции НК-195°С, выделенной из кубового остатка производства бутиловых спиртов и содержащей изопентанол от 0 до 5,0 %масс., изогептанола от 5,0 до 10,0 %масс., диметилциклогексанола от 5,0 до 10,0 %масс., изооктанола от 10,0 до 40,0 %масс., полибутоксидбутаны от 0 до 15,0 %масс., дибутоксидбутаны остальное. Применение присадки в количестве 0,2-0,5 %масс позволяет повысить цетановое число дизельного топлива на 6-9 ед [8].

Цетаноповышающие присадки применяют при изготовлении дизельных топлив и они являются экономически и технологически целесообразным способом улучшения воспламеняемости дизельных топлив.

### **1.3 Статические смесители для производства топливных композиций**

Существует большое количество патентов, авторы которых предлагают различные конструкции для производства топливных композиций. Так

авторами патента РФ №2221631 представлен статический смеситель, который может использоваться для смешения фаз с различной плотностью (рисунок 1). Смеситель содержит профильные слои, расположенные в кольцевом пространстве и включающие взаимно пересекающиеся наклонные каналы. На участках поверхности, образующих канал, между наружным и внутренним краем гофры выполнены диагональные сгибы (рисунок 2).

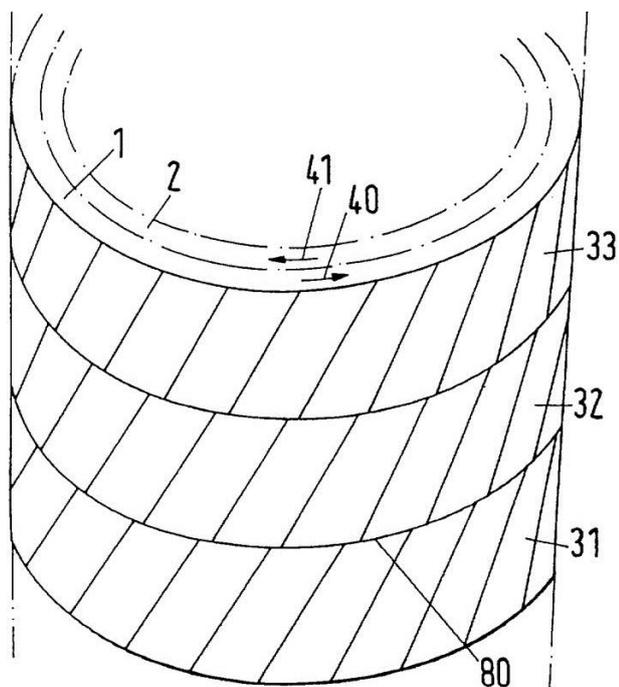


Рисунок 1 – Конфигурация с множеством смесительных элементов, которые образуют смеситель

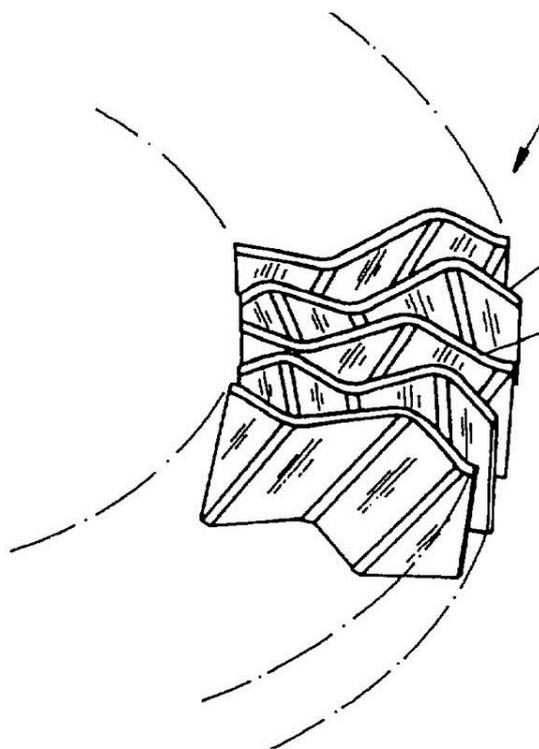


Рисунок 2 – Смесительный элемент, который содержит радиальные слои структуры пересекающихся каналов

Текущая смесь транспортируется в осевом направлении при осуществлении смешивания. Каждый слой расположен вдоль поверхности, которая образует замкнутую периферию, расположенную поперечно оси. Каждый слой содержит каналы, которые расположены с внутренней или наружной стороны слоя на одинаковом по длине расстоянии от первого до второго поперечного сечения кольцевого пространства так, что каждый канал накладывает азимутальный скоростной компонент на текущую смесь, проходящую по ним, который имеет одинаковое значение для всех эквивалентных каналов.

Технический результат состоит в улучшении смешения текучей смеси, состоящей из фаз с различной плотностью [9].

Авторами патента РФ № 2509601 изобретено смесительное устройство непрерывного действия, которое применимо для получения однородных смесей и эмульсий путем перемешивания жидкостных и газовых потоков в разных областях нефтехимической и химической промышленности,

нефтепереработке, фармацевтике, жилищно-коммунальном хозяйстве и пищевой отрасли (рисунок 3).

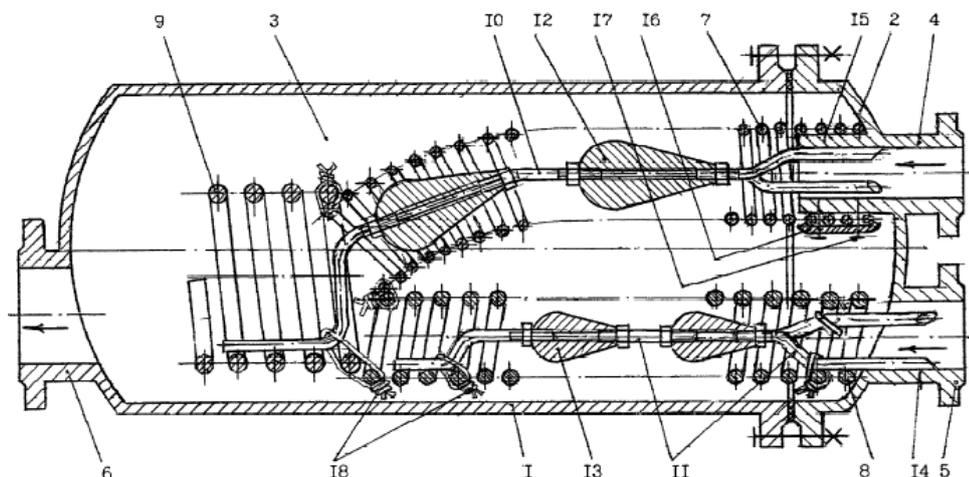


Рисунок 3 – Продольный разрез смесителя

Смесительное устройство состоит из цилиндрического корпуса с дном и фланцем и герметично закрепленной на нем торцевой крышкой. Крышка оснащена штуцерами входа для смешения потоков, а дно - штуцером выхода получаемой смеси. На внутренней стороне крышки на отверстиях входных штуцеров вмонтированы смесительные насадки, представляющие собой винтовые цилиндрические пружины, которые закручивают и завихряют смешиваемые потоки. Внутри насадок жестко закреплены штанги с установленными на них каплевидными растекателями, которые направляют смешиваемые потоки к винтовым поверхностям пружинных смесительных насадок. К концу штанги растекателя может быть установлен винтовой цилиндрический змеевик теплообменника, выполняющий как свое прямое назначение, так и смесительную функцию.

Устройство смесителя представляет собой простую бесшумную конструкцию без движущихся частей. Винтовые цилиндрические пружины, являющиеся смесительными элементами, располагаются в свободном или слабонагруженном состоянии, поэтому могут быть произведены не из дорогостоящей пружинной проволоки, а навиты из более дешевого материала. Технический результат изобретения обоснован повышением эффективности смешения [10].

Согласно патенту РФ № 2457020 авторами разработан статический смеситель для перемешивания различных компонентов, который может быть использован в нефтеперерабатывающей и химической промышленности (рисунок 4). Статический смеситель изготовлен из корпуса с коническими днищами, включающими патрубки для ввода основного и добавляемого компонентов и вывода готовой смеси. В корпусе находятся смесительные элементы, изготовленные в виде наискось срезаемых участков труб, которые установлены под углом к его продольной оси. Каждый последующий смесительный элемент повернут относительно предыдущего на угол, определяемый по формуле:  $\alpha = 360/(n-1)$ , где  $n$  - количество смесительных элементов (рисунок 5).

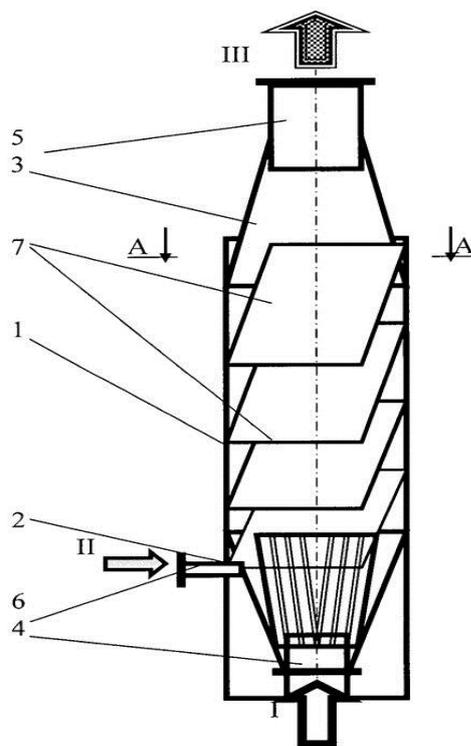


Рисунок 4 – Статический смеситель, общий вид, совмещенный с разрезом (смесительные элементы условно показаны в одном положении)

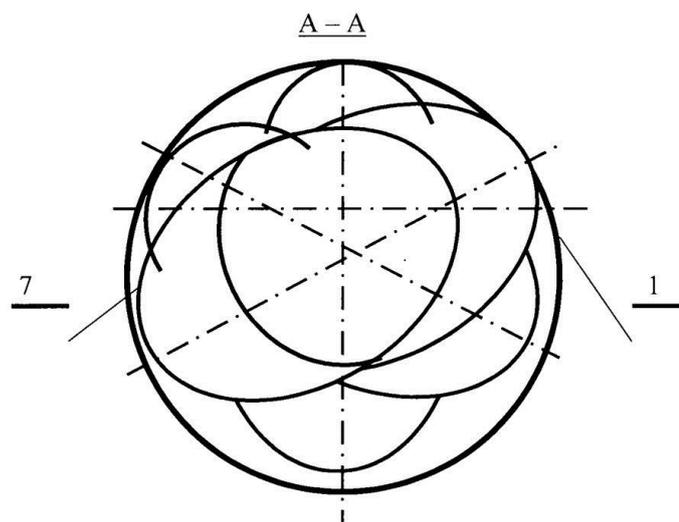


Рисунок 5 – Истинное расположение смесительных элементов внутри корпуса смесительного устройства

Специфическая установка смесительных элементов в корпусе под углом к его оси позволила интенсифицировать процесс смешения, что связано с возможностью радиального перемещения сред по сечению всего корпуса. К недостатку смесителя такой конструкции можно отнести ограниченную степень перемешивания смешиваемых компонентов, обусловленную низкой скоростью радиального перемещения потоков в смесительных элементах [11].

Патентный поиск показал наличие множества статических смесителей различного назначения, что подтверждает актуальность их применения и говорит о наличии большого ассортимента.

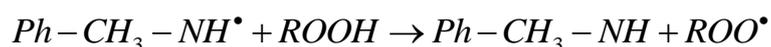
## 2 Механизмы действия присадок для моторных топлив и методы расчета октанового числа бензинов

### 2.1 Механизмы действия присадок для моторных топлив

#### а) Механизм действия антидетонационных присадок

Большинство исследователей придерживаются пероксидной теории для объяснения механизма действия антидетонационных присадок. Согласно этой теории антидетонаторы предотвращают распад продуктов предпламенного окисления топлива с взрывом, который может произойти до начала нормального горения топливной композиции. При сжатии топливной смеси в камере сгорания формируется повышенная температура и начинается процесс окисления углеводородов с образованием большого количества пероксидов. Пероксиды являются химически неустойчивыми соединениями и разлагаются с взрывом. Препятствовать их накоплению можно разрушая пероксиды антидетонаторами.

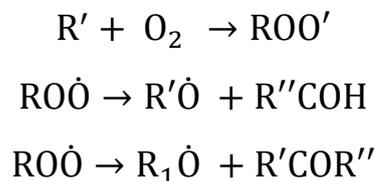
Например, пероксиды могут быть разрушены ароматическими аминами (N-метиланилина), в этом случае механизм действия присадки протекает по следующей реакции:



Энергетический положительный эффект реакции равен 59 кДж/моль (14 ккал/моль) [12]. Эффективность антидетонатора оценивается по степени легкости образования свободных радикалов, которые реагируют с пероксидами.

Автор ряда статей Яблонский А.В. рассматривает донорно-акцепторный механизм действия антидетонационных добавок с позиции квантово-химической теории. Согласно исследованиям автора, потенциал ионизации добавки влияет на взаимодействие присадки с топливом и эффективность антидетонатора. А ионные и ион-радикальные реакции имеют приоритетное значение, как в самом процессе горения, так и на стадии предпламенных реакций [13].

По результатам исследований кинетики реакций Магарил Р.З. выявил, что при условии высокой температуры в двигателе внутреннего сгорания образование гидроперекиси практически не возможно. Поэтому им предложен механизм альдегидной теории горения [14,15]:



Согласно теории в условиях высокой температуры и давления в бензиновом двигателе происходит распад пероксидных радикалов с последующим формированием:

- альдегидов, обладающих низкой детонационной стойкостью, при условии наличия радикалов со вторичным углеродным атомом  $R_{BT}O\dot{O}$ ;
- кетонов, обладающих высокой детонационной стойкостью, при условии наличия пероксидных радикалов с третичным углеродным атомом  $R_{TP}O\dot{O}$  [14, 15].

Также авторами Томского Политехнического университета предлагается описать механизм реакции взаимодействия антидетонатора с топливом дифференциальным уравнением первого порядка, которое характеризует скорость изменения ОЧ от содержания добавляемых веществ:

$$a \frac{dOЧ}{dC} + bOЧ + c = 0 \tag{1}$$

при начальных условиях:  $C = 0$ ;

$$OЧ = OЧ_0.$$

где  $OЧ_0$  – октановое число исходного топлива [16].

При этом учитывается, что ОЧ смеси имеет экспоненциальную зависимость от концентрации антидетонатора [17, 18].

Данное дифференциальное уравнение позволяет представить количественное описание действия присадки через следующее уравнение:

$$\Delta OЧ = A \cdot (1 - e^{-B \cdot C}) \tag{2}$$

где  $C$  – содержание антидетонационной добавки;

$\Delta OЧ$  – прирост октанового числа;

$A$  и  $B$  – коэффициенты, отражающие эффективность присадки по описанному выше механизму (оценены по экспериментальным данным из литературных источников) [16].

Преобразовав вышеописанное уравнение (2) получили математическую модель характеризующую процесс компаундирования, с учетом влияния антидетонаторов на повышение ОЧ бензина:

$$OЧ_i = OЧ_0 + П \cdot \Delta OЧ_{\max} \cdot (1 - e^{-K_{\text{эфф}} \cdot C_{\text{пр}}}) , \quad (3)$$

$$C_{\text{пр}} = \frac{C_i}{C_{\max}} \quad (4)$$

где  $П$  - показатель, отражающий приемистость топлива к присадкам;

$K_{\text{эфф}}$  - коэффициент эффективности добавки, который устанавливает скорость реакции разложения пероксидов по механизму, описанному выше;

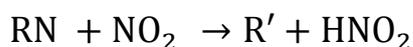
$C_{\text{пр}}$  - приведенная концентрация добавки, показывает отношение концентрации добавки  $C_i$  к предельно допустимой концентрации добавки в топливе  $C_{\max}$  [16].

Таким образом, эффективность антидетонаторов прежде всего характеризуется скоростью и полнотой дезактивации продуктов распада менее термически стабильных парафиновых углеводородов и продуктов распада, приемистость к которым у добавок выше [1]. Приемистость топлива к антидетонаторам в ряду углеводородов следующая: парафины > нафтены > олефиновые углеводороды > ароматика [12].

#### б) Механизм действия промоторов воспламенения

Промоторы воспламенения, в отличие от антидетонационных присадок, не подавляют предпламенные реакции, а ускоряют их. Промоторы способствуют образованию разветвленных окислительных цепей и созданию новых реакционных центров, посредством замены первичной реакции

разложения углеводородов в топливе на более выгодную по энергетическому эффекту реакцию разложения присадки [19]:



В данном механизме протекания реакций радикалы  $\text{HOO}'$  содействуют накоплению пероксидов,  $\text{HO}$  инициируют развитие окислительных цепей, а  $\text{NO}_2$  и  $\text{NO}$  участвуют в образовании дополнительных центров высокотемпературного воспламенения.

Принцип действия промоторов воспламенения объясняется легким распадом молекул по связи  $\text{O-O}$  и  $\text{O-N}$  с небольшой энергией активации (порядка 150 кДж/моль) [12]. При этом образующиеся свободные радикалы инициируют воспламенение топлива на начальных стадиях процесса горения.

Рассмотрим такой распад молекул на примере пероксидов, у которых энергия разрыва связи  $\text{RO-OR}$  составляет 142-155 кДж/моль [20]:

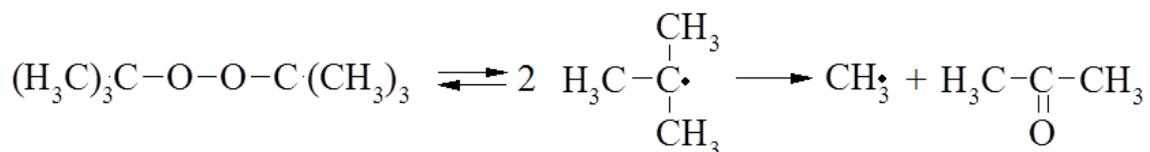
- 1) Распад связи  $\text{O-O}$  в гидропероксидах и пероксидах, азо-бис-нитрилах:



- 2) Самораспад пероксида водорода на радикалы в диапазоне температур 50-115 °C:



- 3) Распад связи  $\text{O-O}$  у третичных алкилпероксидов (пероксиды третичного бутила):



### в) Механизм действия депрессорных присадок

В условиях пониженной температуры, парафины нормального строения, которые содержатся в топливе, начинают образовывать кристаллы. Помутнение топливной композиции говорит о начале процесса кристаллизации. Дальнейший рост кристаллов до определенных размеров и концентрации приводит к образованию пространственной структуры. Как следствие, топливо малоподвижно и слабо прокачиваемо по трубопроводам и через фильтры. Для препятствия росту и ассоциации кристаллов используют депрессорные присадки. Механизм действия депрессоров окончательно не изучен, но широко распространены два обоснованных предположения [12].

Согласно мнению изложенному G.A. Holder, механизм действия присадок основан на способности адсорбироваться на выделяющихся из раствора кристаллах парафина и препятствовать образованию плотной кристаллической структуры. При этом, дальнейший рост кристаллов парафина затруднен, уменьшается возможность их ассоциации и образованию упорядоченной структуры. Присадки соединяются с молекулами парафинов нормального строения, этим предотвращая рост кристаллической решетки в месте кристаллизации, что позволяет получить топливо с улучшенными низкотемпературными показателями [19, 21].

Другой механизм, согласно K. Bormann, J. Stocker, предполагает сокристаллизацию парафина и депрессора. В этом случае, молекула депрессорной присадки своей неполярной частью адсорбируется на кристалле парафина, а внешние полярные части отталкивают новые молекулы парафина и не дают им осесть на кристалле, затормаживая его дальнейший рост [22].

Уже известно, что в зависимости от природы депрессоров может проявляться тот или иной механизм [23]. При этом практическое значение имеет предположение о взаимодействии молекулы депрессорной присадки

(или ее части) с растущим кристаллом, что обосновывает отсутствие ее влияния на температуру помутнения топливной композиции.

## **2.2 Методы расчета октанового числа бензиновых топлив**

Октановое число (ОЧ) – условный показатель, характеризующий способность топлива обеспечивать работу двигателей с принудительным воспламенением без детонации. Октановое число имеет численный эквивалент процентному содержанию изооктана в эталонной смеси с н-гептаном, который определяет детонационную стойкость на установке со стандартным одноцилиндровым двигателем. Измерения проводят в жестком режиме (при частоте вращения коленчатого вала 900 об/мин) и мягком (при 600 об/мин), что соответствует моторному и исследовательскому октановому числу (ОЧМ и ОЧИ) [24].

Метод определения ОЧ на стационарной одноцилиндровой установке достаточно дорогостоящий и трудоемкий процесс. Определение октанового числа по данным хроматографического исследования также затратный и достаточно длительный анализ. Полученные при этом данные не могут быть использованы для влияния на ход процесса компаундирования. Процесс предлагается сократить благодаря использованию экспресс-методов оценки детонационной стойкости бензинов.

Октановое число - важный показатель качества прямогонного и автомобильного бензина, на который влияет природа нефтепродукта, строение углеводородов, фракционный состав, химическая и физическая стабильность, содержание серы и др.

Известные из литературы и рассмотренные далее методы определения ОЧ бензиновых топлив условно можно разделить на три категории:

- учитывающие фракционный, групповой или углеводородный состав бензина,
- связывающие значение октанового числа с физико-химическими показателями топлива, такими как плотность и анилиновая точка,

- основанные на корреляции октанового и цетанового чисел.

К первой группе можно отнести следующие методы определения октанового числа:

- с учетом группового состава

Gra и соавторы впервые описали линейную зависимость между ОЧИ и данными по соотношению водородов групповых составляющих бензинов [25]. Они сопоставили ОЧИ с соотношением ароматических и алифатических атомов водорода, следующим образом:

$$\text{ОЧИ} = A * (\% \text{Нар}) / (\% \text{Нал}) + B, \quad (5)$$

где А – коэффициент равный 2,453;

В – коэффициент равный 41,71.

Miihl и Srca также установили соотношение между октановым числом бензина и данными по соотношению водородов групповых составляющих бензинов, рассчитав октановое число на основе корреляции между ОЧИ и содержанием ароматического, олефинового и алифатического водорода. Они обнаружили, что наилучшее соотношение наблюдалось, при учете содержания ароматического и олефинового водорода [26]:

$$\text{ОЧИ} = A + B * (\% \text{Нар}) + C * (\% \text{Нол}), \quad (6)$$

где А – коэффициент равный 83,14;

В – коэффициент равный 0,48;

С – коэффициент равный 1.02.

Однако, было известно, что исследовательское октановое число также зависит от содержания парафинов и изопарафинов. Кроме того, это уравнение не применяется для расчета ОЧИ меньше, чем 83.

Поэтому для устранения этого недостатка и нахождения простой корреляции между ОЧИ и данными как для соотношения по водороду, так и по углероду, Wolf. G. Hiller предложил уравнение, которое включает содержание алифатических, олефиновых и ароматических частей [27]:

$$\text{ОЧИ} = A_1 * (\% \text{Хал}) + A_2 * (\% \text{Хол}) + A_3 * (\% \text{Хар}), \quad (7)$$

где Х = Н, С (Н - водород, С - углерод).

Параметры  $A_1$ ,  $A_2$  и  $A_3$  для различных фракций приведены в таблицах 2 и 3 [27].

Таблица 2 – Расчетные параметры для данных по водороду

Фракция	$A_1$	$A_2$	$A_3$
Бензин	0,823	2,136	1,436
Реформат	0,924	2,067	1,066
Нафта	0,677	4,871	1,827
Бензин + Реформат + Нафта	0,680	4,796	1,805

Таблица 3 – Расчетные параметры для данных по углероду

Фракция	$A_1$	$A_2$	$A_3$
Бензин	0,87	1,009	1,115

- по отношению Н к С

Корреляционная формула соотношения атомов углерода и водорода в молекулах смеси и октанового числа:

$$\text{ОЧМ} = -406.14 + 508.04 \cdot (\text{Н/С}) - 173.55 \cdot (\text{Н/С})^2 + 20.17 \cdot (\text{Н/С})^3, \quad (8)$$

где Н/С – усреднённое отношение количества атомов водорода и углерода в молекулах смеси [28].

- с учетом фракционного состава

Для бензинов с ОЧМ больше 62 [16]:

$$\text{ОЧ} = 1020,7 - 64,84 \left[ 4 \left( \frac{\lg 141,5}{\rho_{15}^{1,5}} - 131,5 \right) + 2 \lg \left( \frac{9}{5} t_{10\%} + 32 \right) + 1,3 \lg \left( \frac{9}{5} t_{90\%} + 32 \right) \right] \quad (9)$$

Определение ОЧИ бензинов также с учетом плотности [28]:

$$\text{ОЧИ} = 120 - 2 * \frac{T_{\text{ср}} - 58}{5\rho}; \quad T_{\text{ср}} = \frac{T_{\text{н.к.}} - T_{\text{к.к.}}}{2}, \quad (10)$$

где  $T_{\text{ср}}$  – средняя температура кипения топлива;

$T_{\text{н.к.}}$  – температура начала кипения топлива;

$T_{\text{к.к.}}$  – температура конца кипения топлива;

$\rho$  – плотность топлива при 20°C, г/см<sup>3</sup>.

- с учетом индивидуального состава

Также интерес представляют прогнозирование ОЧ на основе индивидуального состава с использованием различных индексов. Связь «структура молекулы - ее свойство» позволяет получать соединения с определенным набором необходимых свойств.

Наличие связи между структурной формулой молекулы и соответствующим ей молекулярным графом, позволяет проводить анализ структурной формулы, при этом молекулярный граф (МГ) обрабатывается методами теории графов. Для этого необходимо представить молекулярную структуру в виде графов. К каждому графу можно сопоставить различные матрицы, содержащие численную информацию о графе. Такое отображение молекул позволяет описывать их топологические характеристики: цепи, циклы, разветвления и т.п. Графы, заданные в виде матрицы, позволяют работать с компьютерными моделями топливных смесей.

В случае с углеводородсодержащим топливом, центрические индексы Балабана дают чувствительную характеристику разветвлений, имеющих в ряду ароматических углеводородов и коррелируют с октановым числом.

Центрический индекс Балабана выражается через следующую формулу:

$$B = \sum_i \delta_i^2, \quad (11)$$

$$C = 1/2(B - 2n + U), \quad (12)$$

где  $\delta_i$  – вершины каждого шага;

U – символ Кронекера, зависящий от соотношения числа вершин  $n$ .

$$CI = \sum_{i=1}^n BF_i, \quad (13)$$

$$BF_i = \sum_{j=1}^n I_j * V_j * D_{ij}, \quad (14)$$

где  $I_j$  – внутреннее расположение атомов  $j$ ;

$V_j$  – это уровень вершины  $j$ ;

$D_j$  – расстояние между атомами  $i$  и  $j$  [29].

Ко второй группе относят методы определения октанового числа:

- по анилиновой точке

Для бензинов прямой перегонки, термического крекинга, термического риформинга у которых  $t_{a.t.} < t_{10\%} < 2t_{a.t.}$  (где а.т. – анилиновая точка, °С) предложены уравнения [28]:

$$\text{ОЧМ} = 100 - \rho_4^{20} \frac{(t_{к.к.} + t_{a.t.})}{\delta t_{к.к.}} * \frac{1}{\alpha^{\text{ГОСТ}}} + \delta - \alpha^{\text{ГОСТ}}, \quad (15)$$

где  $\rho_4^{20}$  – относительная плотность;

$t_{к.к.}$  – температура конца кипения фракции, °С;

$t_{a.t.}$  – температура анилиновой точки, °С;

$\delta$  – коэффициент испаряемости бензинов,

$$\delta = \frac{t_{10\%} + t_{50\%} + t_{90\%}}{100}, \quad (16)$$

где  $t_{10\%}$ ,  $t_{50\%}$ ,  $t_{90\%}$  – температуры кипения фракции при 10%, 50% и 90% отгоне соответственно, °С;

$\alpha$  – наклон кривой разгонки бензина,

$$\alpha^{\text{ГОСТ}} = t_{90\%} - t_{10\%}/80 \quad (17)$$

Последнее уравнение справедливо при  $(t_{к.к.}/t_{10\%}) * \alpha^{\text{ГОСТ}} > 1,9$ .

Если это условие не выполняется, то можно воспользоваться уравнением:

$$\text{ОЧ} = \left[ 100 \frac{(t_{к.к.} + t_{a.t.}) t_{к.к.}}{10P \rho_4^{20} \delta \sqrt{t_{к.к.}}} \right] \left( \rho_4^{20} + \rho_4^{20} \alpha^{\text{ГОСТ}} + \frac{t_{к.к.}}{10P} + \rho_4^{20} \delta \alpha^{\text{ГОСТ}} \right), \quad (18)$$

где P – анилиновая точка бензина.

- по плотности

Для определения ОЧМ прямогонных бензинов фракции с началом кипения 200°С [28]:

$$\text{ОЧМ} = -140 + 246,9 * \rho_4^{20}, \quad (19)$$

где  $\rho_4^{20}$  – относительная плотность.

Третья группа методов, связывает октановое и цетановое число.

Как известно, октановое число – показатель детонационной стойкости бензинов. И вероятность детонации при работе двигателя обуславливается химическим составом топлива. Наибольшую детонационную стойкость имеют ароматические и изопарафиновые углеводороды, а склонны к

детонации парафиновые углеводороды нормального строения [30]. ОЧ низкокипящих фракций, как правило, выше, чем у высококипящих.

Цетановое число дизельных топлив, в свою очередь, обуславливается фракционным и химическим составом. Олефиновые углеводороды и н-алканы имеют самые высокие значения ЦЧ, а ароматические углеводороды – наоборот, самые низкие значения цетановых чисел [30]. ЦЧ высококипящих фракций, как правило, выше, чем у низкокипящих.

Следовательно, низкое октановое число подразумевает высокое цетановое число. Поэтому естественно предположить, что эти параметры взаимосвязаны.

Формула для расчета ОЧМ через ЦЧ:

$$\text{ОЧМ} = (105,9 - \text{ЦЧ})/0,94 \quad (20)$$

Кроме того, существует формулы, позволяющие с высокой точностью рассчитать ЦЧ углеводородных смесей, например [1]:

- по анилиновой точке

$$\text{ЦЧ} = T_a - 15,5, \quad (21)$$

где  $T_a$  – анилиновая точка, т.е. температура взаимной растворимости равных объемов исследуемой топливной композиции и анилина, °С.

- по групповому составу

$$\text{ЦЧ} = 0,85 * П + 0,1 * Н - 0,2 * А, \quad (22)$$

где П, Н, А – содержание в топливе соответственно парафиновых, нафтеновых и ароматических углеводородов, масс. %.

- по фракционному составу

$$\text{ЦЧ} = 256,18 - 0,445 T_a - 10,44 \sqrt{T_c} - \frac{2,605 \rho}{2^3 \sqrt{T_c}}, \quad (23)$$

где  $\rho$  – плотность бензина при 20°С, г/см<sup>3</sup>;

$T_a$  – температура анилиновой точки, °С;

$T_c = T_{10\%} + 0,53 * T_{50\%} + 0,17 * T_{90\%}$ .

- по плотности

По данным разных авторов формулы для расчета цетанового числа для различных фракций приведены в таблице 4 [24].

Таблица 4 – Формулы расчета цетанового числа

Фракция, °С	Формула	
150-350	$ЦЧ=263-254*\rho$	$ЦЧ=52-324*(\rho-0,83)$
200-350	$ЦЧ=305,2-297,5*\rho$	$ЦЧ=51,4-378*(\rho-0,85)$
240-350	$ЦЧ=368,3-367,4*\rho$	

Таким образом, можно сделать вывод, что разработка приемлемых экспресс-методов расчета является экономически выгодным, простым и перспективным направлением для прогнозирования октанового и цетанового числа моторных топлив, соответственно, и качества бензинов. Однако, требуется знать основные физико-химические свойства исследуемого топлива, для этого необходимо провести ряд экспериментов, описанных в следующем разделе.

### **3 Постановка задачи исследования**

Определение октанового числа (ОЧ) – задача, не теряющая актуальность в промышленном производстве моторных топлив. На основании значений ОЧ продуктовых потоков выполняют их компаундирование. Экспериментальное определение октанового числа по исследовательскому или моторному методам требует стационарной установки и денежных вложений. Определение ОЧ по данным хроматографических исследований также дорогостоящий, длительный и недостаточно достоверный процесс.

Поэтому наличие надежных экспресс-методов актуально, как для промышленных предприятий, так и для исследователей, разрабатывающих рецептуры смешения и высокооктановые добавки.

Целью данной работы является исследование возможности использования расчетных методов для определения октанового числа бензинов и их смесей с высокооктановыми компонентами, используя данные по их физико-химическим свойствам.

В качестве объекта исследования выбраны прямогонные бензиновые дистилляты различных НПЗ и индивидуальные вещества, выступающие в роли октаноповышающих добавок.

Для достижения цели необходимо:

- Выполнить анализ информационных источников и поиск методов расчета октанового числа;
- Установить физико-химические свойства углеводородов и смесей, влияющие на октановое число бензинов;
- Сделать анализ физико-химических свойств нескольких проб прямогонных бензиновых дистиллятов по стандартным методикам;
- Провести проверку найденных методов расчета;

- Разработать рецептуры и определить физико-химические свойства некоторых октаноповышающих добавок;
- Выполнить эксперимент для получения смесей прямогонных бензиновых дистиллятов с октаноповышающими компонентами и определить их октановое число;
- Провести проверку выбранных методов расчета для смесей;
- Выполнить модификацию расчетных методов при условии добавления октаноповышающих компонентов;
- Сделать выводы по полученным результатам.

## **4 Экспериментальная часть**

### **4.1 Характеристика объекта исследования**

Объектом исследования является прямогонный бензин и его смеси с октаноповышающими компонентами. В данной работе исследовались прямогонные бензины НПЗ г. Анжеро-Судженск и Яя, а также НПЗ Северный Кузбасс и НПЗ п. Семилужки и их смеси с однокомпонентными октаноповышающими добавками: толуол, моно-метил-анилин (ММА), метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ) и изопропиловый спирт.

Прямогонный бензин является преобладающим (по объему) компонентом базового бензина.

Наиболее распространена схема получения прямогонного компонента бензина в процессе атмосферной перегонки нефти с отбором широкой фракции до 180°C и последующей вторичной перегонкой этой фракции на более узкие. В процессе вторичной перегонки получают «головную» фракцию бензина (н.к. - 62°C или н.к. - 85°C), которую используют в качестве компонента для приготовления товарных бензинов или передают на дальнейшее облагораживание, например в процессе каталитической изомеризации.

Тяжелую часть бензиновой фракции (85 - 180°C, 105 - 180°C или 140 - 180°C) чаще всего направляют на установку каталитического риформинга с целью получения высокооктанового компонента бензинов. Фракция 140 - 180°C может использоваться в качестве компонента для реактивного топлива.

### **4.2 Исследования прямогонных бензиновых дистиллятов**

#### **4.2.1 Основные физико-химические свойства исследуемого прямогонного бензина**

По результатам ранее проведенных исследований [31] получены данные по физико-химическим свойствам шести проб прямогонных бензинов НПЗ г. Анжеро-Судженск и Яя, которые представлены в таблице 5.

Таблица 5 - Основные физико-химические свойства исследуемых прямогонных бензинов

Показатель	Проба					
	1	2	3	4	5	6
1) Групповой состав:						
коэффициент преломления	1,39	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
максимальная анилиновая точка, °С	55,2	55,4				
анилиновая точка, °С	59,3	59,6				
2) Содержание углеводородов, % масс.						
Ароматические	4,25	4,44	5,53	3,76	3,85	4,33
Нафтеновые	30,7	38,47	34,31	34,28	32,86	50,60
Парафиновые	65,1	57,09	60,16	61,96	63,29	45,1
3) Плотность относительная	0,697	0,704				
4) Молекулярная масса (хроматограмма)	92,88	97,99	99,39	92,75	94,24	
5) Фракционный состав, °С						
t н.к.	32	40				
t к.к.	133	144				
6) Октановое число						
ОЧМ	75,3	72,7				
ОЧИ	78,7	79,2				
7) Октановое число (хроматограмма)						
ОЧМ	62,10	59,31	59	55	52	58
ОЧИ	59,73	57,46	52	62	58	58

#### 4.2.2 Результаты расчетов

В таблицах 6, 7 и 8 представлены результаты расчета октановых чисел для шести проб исследуемого прямогонного бензина по различным формулам.

Таблица 6 - Результаты расчета октанового числа шести проб исследуемого прямогонного бензина формулами первой группы

Формула	$\text{ОЧИ} = 2,453 * (\% \text{Нар}) /$ $/(\% \text{Нал}) + 41,71$	ОЧИ эксп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	41,73	59,73	30,14
Проба 2	41,74	57,46	27,36
Проба 3	41,74	52	19,73
Проба 4	41,72	62	32,71
Проба 5	41,72	58	28,07
Проба 6	41,73	58	28,05
Формула	$\text{ОЧИ} = 83,14 + 0,48 * (\% \text{Нар}) +$ $+ 1,02 * (\% \text{Нол})$	ОЧИ эксп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	83,95	59,73	40,55
Проба 2	84,41	57,46	46,90
Проба 3	84,90	52	63,27
Проба 4	84,65	62	36,53
Проба 5	83,75	58	44,40
Проба 6	86,91	58	49,84
Формула	$\text{ОЧМ} = - 406.14 +$ $508.04 * (\text{Н/С}) -$ $- 173.55 * (\text{Н/С})^2 + 20.17 * (\text{Н/С})^3$	ОЧМ эксп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	86,17	62,10	38,76
Проба 2	85,40	59,31	43,99
Проба 3	84,57	59	43,34
Проба 4	85,26	55	55,02
Проба 5	85,78	52	64,96
Проба 6	80,93	58	39,53

Продолжение таблицы 6

Формула	$\text{ОЧИ} = 120 - 2 \cdot (\text{Тср} - 58) / 5\rho;$ $\text{Тср} = (\text{Тн.к.} - \text{Тк.к.}) / 2$	ОЧИ эксп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	72,63	78,70	7,71
Проба 2	67,69	79,2	14,53
Проба 3	68,38	52	31,50
Проба 4	70,14	62	13,13
Проба 5	65,32	58	12,62
Проба 6	-	58	-

Таблица 7 - Результаты расчета октанового числа шести проб исследуемого прямогонного бензина формулами второй группы

Формула	$\text{ОЧМ} = -140 + 246,9 \cdot \rho$	ОЧМ эксп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	31,99	62,10	48,49
Проба 2	33,69	59,31	43,20
Проба 3	35,05	59	40,59
Проба 4	30,36	55	44,80
Проба 5	31,60	52	39,23
Проба 6	40,41	58	30,33
Формула	$\text{ОЧМ} = 100 - \rho_4^{20} \frac{(t_{к.к.} + t_{а.т.})}{\delta t_{к.к.}} * \frac{1}{\alpha^{\text{ГОСТ}}} +$ $+ \delta - \alpha^{\text{ГОСТ}}$	ОЧМ эксп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	101,37	62,10	63,24
Проба 2	101,66	59,31	71,40
Проба 3		59	
Проба 4		55	
Проба 5		52	
Проба 6		58	

Таблица 8 - Результаты расчета октанового числа шести проб исследуемого прямогонного бензина формулами третьей группы

Формула	$\text{ЦЧ} = 0,85 \cdot \text{П} + 0,1 \cdot \text{Н} - 0,2 \cdot \text{А}$	$\text{ОЧМ} = (105,9 - \text{ЦЧ}) / 0,94$	ОЧМ эсп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	57,51	51,48	62,10	17,10
Проба 2	51,49	57,88	59,31	2,41
Проба 3	53,46	55,79	59	5,45
Проба 4	55,34	53,79	55	2,21
Проба 5	56,31	52,76	52	1,45
Проба 6	42,5	67,45	58	16,29
Формула	$\text{ЦЧ} = \text{Тa} - 15,5$	$\text{ОЧМ} = (105,9 - \text{ЦЧ}) / 0,94$	ОЧМ эсп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	39,7	70,43	62,10	13,41
Проба 2	39,9	70,21	59,31	18,38
Проба 3			59	
Проба 4			55	
Проба 5			52	
Проба 6			58	
Формула	$\text{ЦЧ} = 263 - 254 \cdot \rho$	$\text{ОЧМ} = (105,9 - \text{ЦЧ}) / 0,94$	ОЧМ эсп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	88,25	18,78	62,10	69,76
Проба 2	83,93	23,37	59,31	60,59
Проба 3	82,91	24,46	59	58,55
Проба 4	87,74	19,32	55	64,87
Проба 5	86,47	20,67	52	60,25
Проба 6	77,40	30,32	58	47,73

Продолжение таблицы 8

Формула	$\text{ЦЧ} = 52-324*(\rho-0,83)$	$\text{ОЧМ} = (105,9-\text{ЦЧ})/0,94$	ОЧМ эсп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	98,01	8,39	62,10	86,48
Проба 2	92,50	14,26	59,31	75,96
Проба 3	91,20	15,64	59	73,49
Проба 4	97,36	9,09	55	83,48
Проба 5	95,74	10,81	52	79,21
Проба 6	84,17	23,12	58	60,14

Проанализируем полученные результаты и определим адекватность применения расчетных экспресс - методов для нахождения октанового числа для прямогонных бензинов.

Формулы первой группы методов, учитывающие фракционный, групповой или покомпонентный состав бензина, показали значительные отклонения. Однако, доработка формулы определения ОЧ по фракционному составу ( $\Delta\text{ср} = 13,25\%$ ) может дать адекватные результаты.

Формулы второй группы методов, основанные на расчете октанового числа по физико-химическим свойствам бензинов, например через плотность, анилиновую точку, дали достаточно большую погрешность определений,  $\Delta\text{ср} = 41,11\%$ , следовательно, требуют дополнительной доработки.

Формулы третьей группы методов, основанные на корреляции октанового и цетанового чисел, дали адекватный результат при использовании формулы для расчета ЦЧ по групповому составу,  $\Delta\text{ср} = 5,22\%$ .

Таким образом, для расчета октанового числа пригодной оказалась экспресс-метод основанный на корреляции октанового и цетанового чисел. Рекомендуемая формула расчета цетанового числа – по групповому составу.

Для проверки адекватности выбранных выше формул взяли результаты хроматографического исследования 4 проб бензинового катализата, полученного на НПЗ Северный Кузбасс (таблица 9).

Таблица 9 – Характеристики бензинового катализата НПЗ Северный Кузбасс

Характеристика	Проба			
	1	2	3	4
Групповой состав, %масс.				
Парафиновые углеводороды	43,05	43,93	42,56	44,92
Нафтеновые углеводороды	22,29	21,82	20,75	20,11
Ароматические углеводороды	34,66	34,25	36,69	33,87
Относительная плотность	0,764	0,761	0,767	0,735
Фракционный состав, °С				
Т н.к.	41	40	41	41
Т к.к.	221	221	221	221
ОЧИ	86	86	86	86
ОЧМ	78	78	78	78

Результаты расчета приведены в таблице 10.

Таблица 10 – Результаты расчета

Формула	Проба	Расчетное значение				Эксп. значение			Δ
		ОЧИ	ОЧМ	ОЧД	ЦЧ	ОЧИ	ОЧМ	ОЧД	
$ОЧИ = 83,14 + 0,48 * (\%Нап) + 1,02 * (\%Нол)$	1	84,23				86			1,77
	2	84,19				86			1,81
	3	84,25				86			1,75
	4	84,05				86			1,95
$ОЧИ = 120 - 2 * ((Т_{нк} + Т_{кк}) / 2 - 58) / 5ρ$	1			81,78				82	0,22
	2			81,89				82	0,11
	3			81,93				82	0,07
	4			80,27				82	1,73
$ЦЧ = 0,85 * П + 0,1 * Н - 0,2 * А$	1				31,89				
	2				32,68				
	3				30,92				
	4				33,42				
$ОЧМ = (105,9 - ЦЧ) / 0,94$	1		78,73				78		0,73
	2		77,9				78		0,1
	3		79,77				78		1,77
	4		77,11				78		0,89

Из расчета получили подтверждение адекватности формулы расчета через корреляцию октанового и цетанового чисел ( $\Delta_{ср} = 0,87$ ), при расчете

цетанового числа с использованием данных по групповому составу. Данная формула дает адекватный результат расчета октанового числа с допустимой погрешностью в один пункт (согласно ГОСТ 511-82).

### 4.3 Исследования смесей бензиновых дистиллятов с октаноповышающими добавками

#### 4.3.1 Рецептуры и физико-химические свойства добавок

Для прогноза рецептур смешения прямогонного бензина с октаноповышающей добавкой, требуются знание ряда свойств и допустимые концентрации в составе бензинов, согласно ТР ТС - 013 - 2011, которые представлены в таблице 11.

Таблица 11 – Характеристики добавок

Показатель\Добавка	МТБЭ	Толуол	ММА
ОЧИ	110	99/115	280
ОЧМ	125	88/102	250
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	740	867	975
Допустимая концентрация, % масс.	15	1	15

Алгоритм расчета объемного содержания компонентов в смеси представлен ниже:

1) Вычисление объема компонентов смеси, м<sup>3</sup>.

По известному содержанию обоих компонентов (%масс.), объем вычисляется по следующей формуле:

$$V_i = \frac{m_i}{\rho_i}, \quad (24)$$

где  $V_i$ - объем  $i$ -го компонента, м<sup>3</sup>;

$m_i$  – массовая доля  $i$ -го компонента;

$\rho_i$  – плотность  $i$ -го компонента, кг/м<sup>3</sup>.

2) Вычисление объемной доли добавки:

$$v_d = \frac{V_d}{V_d + V_6}, \quad (25)$$

где  $v_d$  – объемная доля добавки;

$V_d$  и  $V_6$  – объем добавки и бензина, соответственно, м<sup>3</sup>.

Аналогично рассчитывается объемная доля бензина.

- 3) Расчет содержания компонентов в смеси, в нашем случае в 200мл:

$$V_i = v_i * 200, \quad (26)$$

где  $V_i$  – содержание  $i$  - го компонента, мл.

Результаты расчета представлены в таблицах 12 и 13.

Таблица 12 – Рецептуры смешения бензина НПЗ г. Анжеро-Судженск

№ смеси	Состав	Содержание, масс. доля	$V, \cdot 10^3 \text{ м}^3$	Объемная доля	Содержание в 200 мл. смеси, мл
1	МТБЭ	0,080	0,108	0,076	15
	Бензин	0,920	1,320	0,924	185
2	МТБЭ	0,120	0,162	0,114	23
	Бензин	0,880	1,263	0,886	177
3	МТБЭ	0,150	0,203	0,159	32
	Бензин	0,850	1,076	0,841	168
4	Толуол	0,050	0,058	0,041	8
	Бензин	0,950	1,363	0,959	192
5	Толуол	0,100	0,115	0,082	16
	Бензин	0,900	1,291	0,918	184
6	Толуол	0,150	0,173	0,124	25
	Бензин	0,850	1,220	0,876	175
7	ММА	0,008	0,008	0,006	1
	Бензин	0,992	1,423	0,994	199
8	ММА	0,010	0,010	0,007	1,5
	Бензин	0,990	1,484	0,993	198,5

Таблица 13 – Рецептуры смешения бензина НПЗ г. Яя

№ смеси	Состав	Содержание, масс. доля	$V, \cdot 10^3 \text{ м}^3$	Объемная доля	Содержание в 200 мл. смеси, мл
9	МТБЭ	0,080	0,108	0,076	15
	Бензин	0,920	1,307	0,924	185
10	МТБЭ	0,120	1,622	0,115	23
	Бензин	0,880	1,250	0,885	177

Продолжение таблицы 13

11	МТБЭ	0,150	0,203	0,160	32
	Бензин	0,850	1,065	0,840	168
12	Толуол	0,050	0,058	0,041	8
	Бензин	0,950	1,349	0,959	192
13	Толуол	0,100	0,115	0,083	16
	Бензин	0,900	1,278	0,917	184
14	Толуол	0,150	0,173	0,125	25
	Бензин	0,850	1,207	0,875	175
15	ММА	0,008	0,008	0,006	1
	Бензин	0,992	1,409	0,994	199
16	ММА	0,010	0,010	0,007	1,5
	Бензин	0,990	1,406	0,993	198,5

Для полученных, согласно рассчитанным рецептурам, смесей с октаноповышающими компонентами измерили ОЧИ и ОЧМ, оценили их прирост. Полученные значения представлены в таблице 14.

Таблица 14 – Оценка смесей с различным содержанием октаноповышающих компонентов по октановому числу

Проба	ОЧИ	ОЧМ	Прирост ОЧИ, абс	Прирост ОЧМ, абс
Прямогонный бензин Анжерского НПЗ	78,8	75,4		
+МТБЭ 8%масс	88,8	82,6	10,0	7,2
+МТБЭ 12%масс	92,1	84,9	13,3	9,5
+МТБЭ 15%масс	94,3	85,7	15,5	10,3
+Толуол 5% масс	79,1	75,6	0,3	0,2
+Толуол 10% масс	79,4	75,8	0,6	0,4
+Толуол 15% масс	81,2	77,2	2,4	1,8
+ММА 0,8% масс	77,2	74,2	-1,6	-1,2
+ММА 1,0 % масс	78,2	75,0	-0,6	-0,4
Прямогонный бензин Яйского НПЗ	79,1	75,6		
+МТБЭ 8%масс	90,0	83,4	10,9	7,8
+МТБЭ 12%масс	92,6	85,1	13,5	9,5
+МТБЭ 15%масс	94,6	85,8	15,5	10,2

Продолжение таблицы 14

+Толуол 5% масс	79,7	76,0	0,6	0,4
+Толуол 10% масс	81,1	77,1	2,0	1,5
+Толуол 15% масс	82,9	78,4	3,8	2,8
+ММА 0,8% масс	79,2	75,7	0,1	0,1
+ММА 1,0 % масс	79,7	76,0	0,6	0,4

Для оценки прироста ОЧ построим графики зависимости ОЧ смеси от содержания в смеси октаноповышающей добавки (рисунок 5-10).

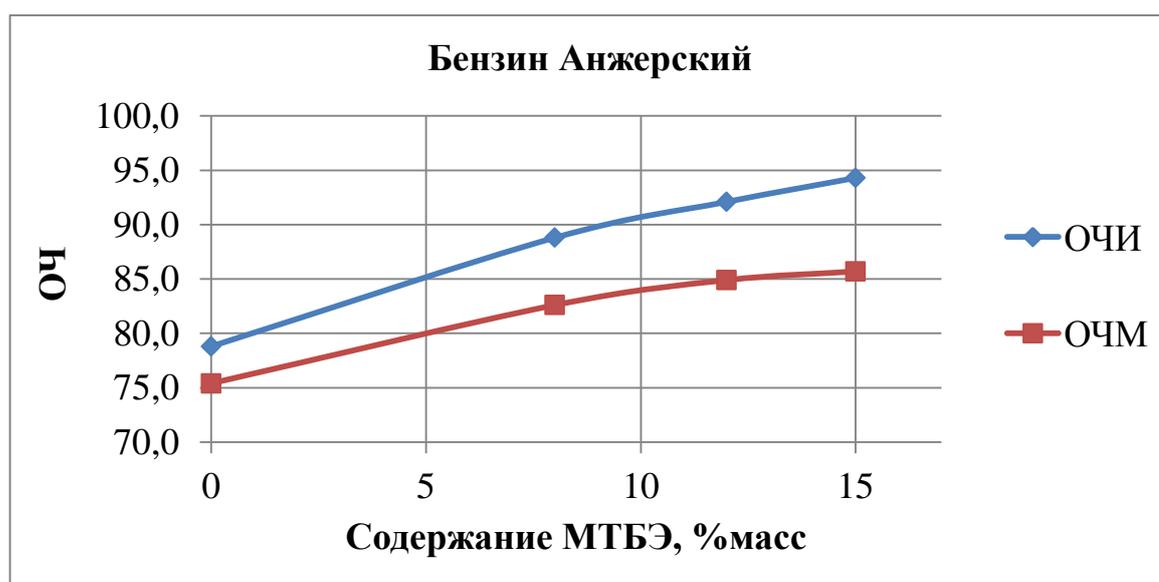


Рисунок 5 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина Анжерского НПЗ и МТБЭ

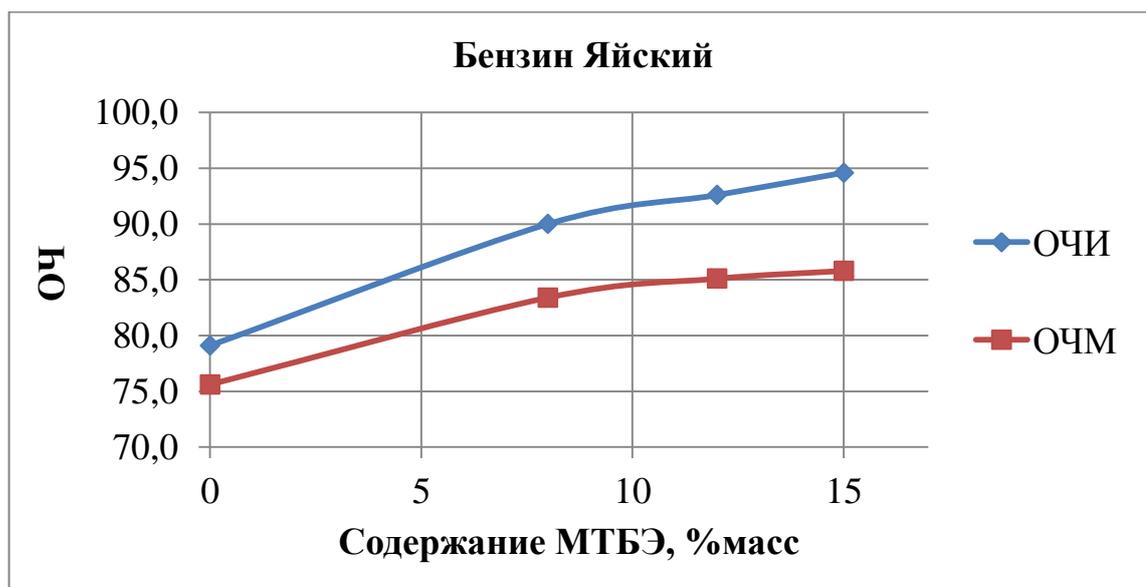


Рисунок 6- Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина Яйского НПЗ и МТБЭ

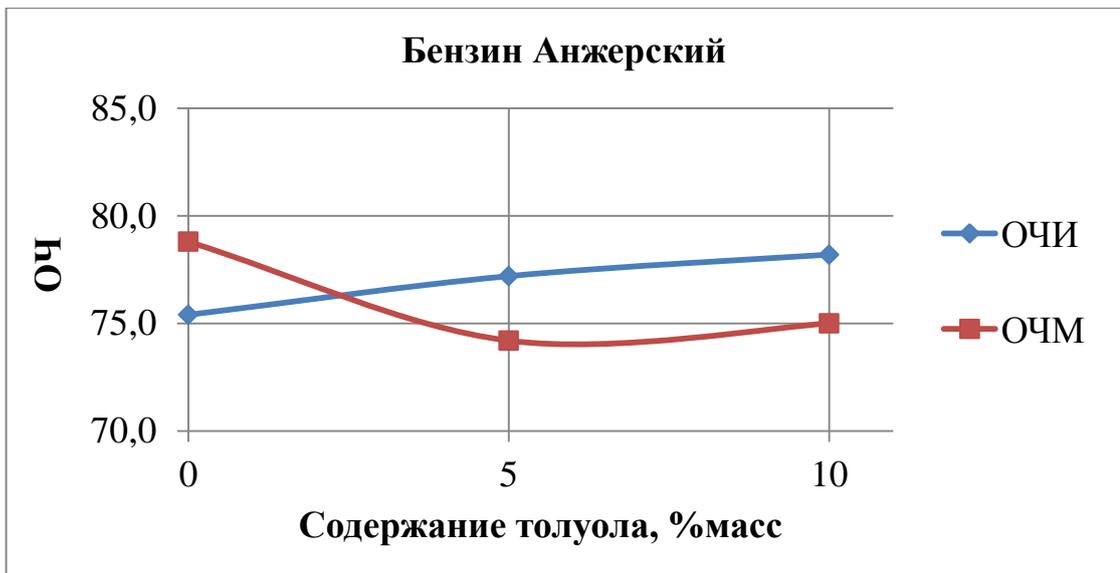


Рисунок 7 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина Анжерского НПЗ и толуола

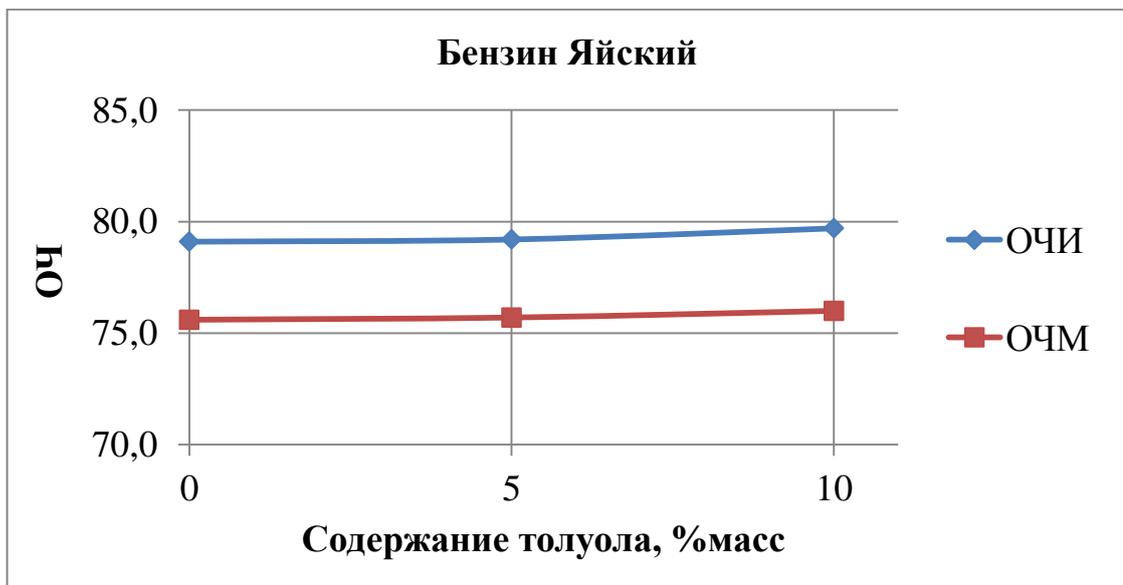


Рисунок 8 - Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина Яйского НПЗ и толуола

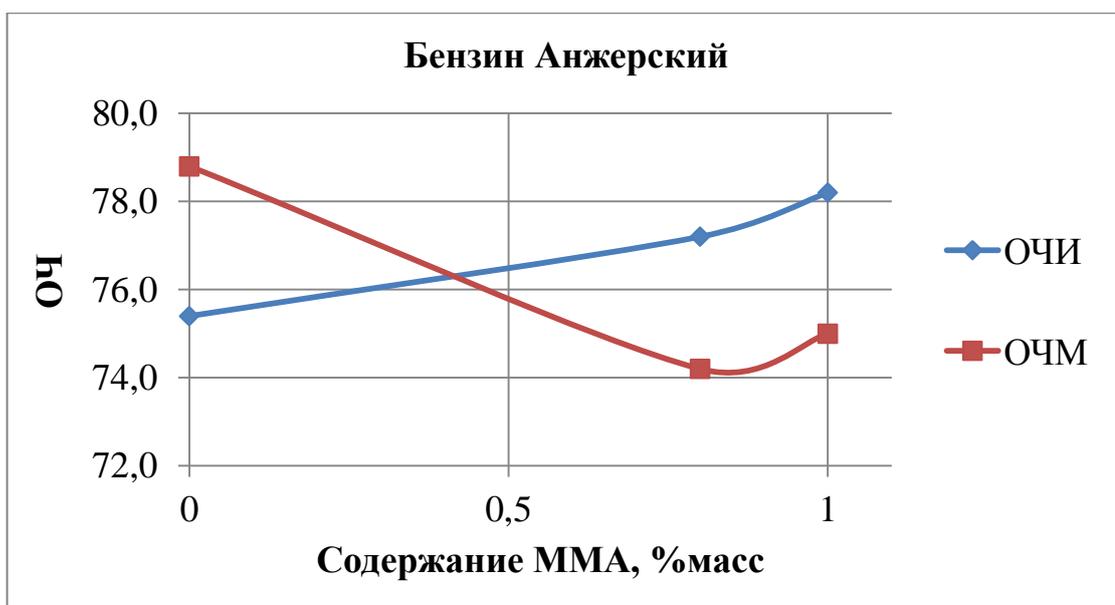


Рисунок 9 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина Анжерского НПЗ и толуола

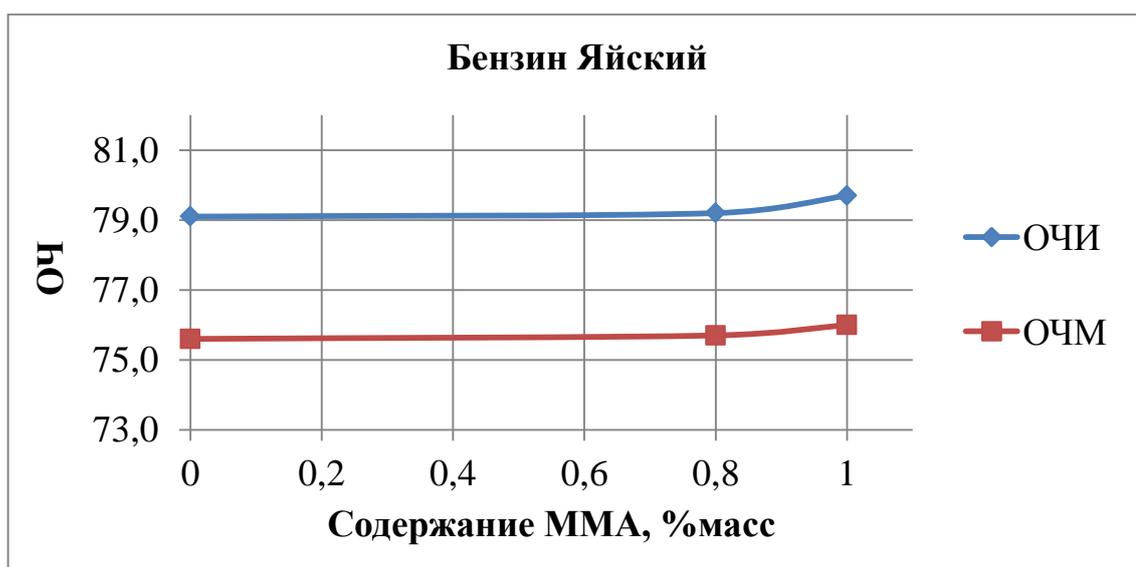


Рисунок 10 - Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина Яйского НПЗ и толуола

Из графиков видно, что добавление МТБЭ к прямогонному бензину дает наибольший прирост ОЧ.

#### 4.3.2 Результаты расчета

Для формул (6), (10), (20) для расчета октанового числа смеси бензинового дистиллята с толуолом различных концентраций выполнили проверку. Цетановое число рассчитали по формулам (21) и (22).

Для этого пересчитали групповой состав по толуолу для смесей (таблица 15).

Таблица 15 – Групповой состав смесей

Проба	Аром. у/в	Нафтены	Парафины
Бензин Анжеро-Судженск	4,253	30,694	65,053
+Толуол 5% масс.	8,812	29,232	61,955
+Толуол 10% масс.	12,957	27,904	59,139
+Толуол 15% масс.	16,742	26,69	56,568
Яйский дистиллят	4,438	38,47	57,092
+Толуол 5% масс.	8,989	36,638	54,373
+Толуол 10% масс.	13,125	34,973	51,902
+Толуол 15% масс.	16,903	33,452	49,645

Выполнили расчет ОЧИ по формуле (6) и проверили формулу на адекватность. Результаты расчета в таблице 16.

Таблица 16 – Результаты расчета

Проба	ОЧИ = $83,14+0,48*(\%Нап)+1,02*(\%Нол)$	ОЧИ	Δ
Бензин Анжеро-Судженск	83,95	78,8	5,15
+Толуол 5% масс.	84,19	79,1	5,09
+Толуол 10% масс.	84,13	79,4	4,73
+Толуол 15% масс.	84,09	81,2	2,89
Яйский дистиллят	84,41	79,1	5,33
+Толуол 5% масс.	84,43	79,7	4,73
+Толуол 10% масс.	84,35	81,1	3,25
+Толуол 15% масс.	84,22	82,9	1,32

Рассчитали ЦЧ по формуле (22) для полученных смесей бензина с толуолом различной концентрации. Далее рассчитали ОЧМ по формуле (20) и оценили применимость формул. Результаты расчетов приведены в таблице 17.

Таблица 17 – Результаты расчета

Проба	ЦЧ	$OЧ=(105,9-ЦЧ)/0,94$	ОЧМ	$\Delta$
Бензин Анжеро-Судженск	57,51	51,47	75,4	23,93
+Толуол 5% масс.	53,82	55,40	75,6	20,20
+Толуол 10% масс.	50,47	58,97	75,8	16,83
+Толуол 15% масс.	47,40	62,23	77,2	14,97
Яйский дистиллят	51,49	57,89	75,6	17,71
+Толуол 5% масс.	48,08	61,51	76,0	14,49
+Толуол 10% масс.	44,99	64,80	77,1	12,30
+Толуол 15% масс.	42,16	67,81	78,4	10,59

Проверили формулу (21) для расчета ЦЧ по анилиновой точке и рассчитали по полученным значениям ОЧМ по формуле (20). Для расчета ЦЧ приняли значение АТ смешения толуола равным 10°, согласно литературным источникам, и по правилу аддитивности рассчитали значения АТ смесей бензина с толуолом различных концентраций. Оценили адекватность формул. Результаты расчетов приведены в таблице 18.

Таблица 18 – Результаты расчета

Проба	АТ	ЦЧ	$OЧ=(105,9-ЦЧ)/0,94$	ОЧМ	$\Delta$
Бензин Анжеро-Судженск	59,3	43,8	66,06	75,4	9,34
+Толуол 5% масс	56,84	41,34	68,69	75,6	6,91
+Толуол 10% масс	54,37	38,87	71,31	75,8	4,49
+Толуол 15% масс	51,91	36,41	73,93	77,2	3,27
Яйский дистиллят	59,6	44,1	65,74	75,6	9,86
+Толуол 5% масс	57,12	41,62	68,38	76,0	7,62
+Толуол 10% масс	54,64	39,14	71,02	77,1	6,08
+Толуол 15% масс	52,16	36,66	73,66	78,4	4,74

Из вышеприведенных расчетов получили, что результаты для расчета ОЧ смесей бензина с октаноповышающей присадкой (толуол) не показали достаточной точности, возможные погрешности связаны с прибором для измерения ОЧ – октанометром, который недостаточно точно измеряет ОЧ смеси.

Как выяснили ранее, наибольший прирост ОЧ наблюдается при добавлении к прямогонным бензинам МТБЭ в различных соотношениях,

поэтому продолжили расчеты для определения ОЧ смешения добавок на примере МТБЭ.

Для этого сведем необходимые данные в таблицу 19.

Таблица 19 – Данные для расчета ОЧ смешения МТБЭ с бензином

Проба	ОЧИ	ОЧМ
Бензин Анжерский	78,8	75,4
Бензин Яйский	79,1	75,6
МТБЭ чистый	125	110
Яя 92% + МТБЭ 8% (масс.)	88,8	82,6
Яя 88% + МТБЭ 12% (масс.)	92,1	84,9
Яя 85% + МТБЭ 15% (масс.)	94,3	85,7
Анжерка 92% + МТБЭ 8% (масс.)	90,0	83,4
Анжерка 88% + МТБЭ 12% (масс.)	92,6	85,1
Анжерка 85% + МТБЭ 15% (масс.)	94,6	85,8
Яя 92,4% + МТБЭ 7,6% (объемн.)	88,8	82,6
Яя 88,6% + МТБЭ 11,4% (объемн.)	92,1	84,9
Яя 84,1% + МТБЭ 15,9% (объемн.)	94,3	85,7
Анжерка 92,4% + МТБЭ 7,6% (объемн.)	90,0	83,4
Анжерка 88,5% + МТБЭ 11,5% (объемн.)	92,6	85,1
Анжерка 84% + МТБЭ 16% (объемн.)	94,6	85,8

Для расчета ОЧ смешения добавки используем следующую зависимость:

$$\text{ОЧ смешения} = \frac{\text{ОЧ}_{\text{смеси}} - (\text{ОЧ}_б \cdot C_б)}{C_д}, \quad (27)$$

где  $C_б$  – массовая доля бензина в смеси;

$C_д$  – массовая доля добавки в смеси.

Результаты расчетов приведены в таблице 20.

Таблица 20 – Результаты расчета ОЧ смешения МТБЭ

Анжерский бензин	
ОЧИ смешения	масс. доля МТБЭ
218,8	0,08
193,8	0,12
184,1	0,15
125,0	1

Продолжение таблицы 20

ОЧМ смешения	масс. доля МТБЭ
175,4	0,08
156,2	0,12
144,7	0,15
110	1
Яйский бензин	
ОЧИ смешения	масс. доля МТБЭ
200,4	0,08
187,4	0,12
180,4	0,15
125	1
ОЧМ смешения	масс. доля МТБЭ
163,1	0,08
153,1	0,12
142,9	0,15
110	1

По данным таблицы 20 построим графики зависимости ОЧ смешения добавки от массовой доли этой добавки в смеси (рисунок 11-14).

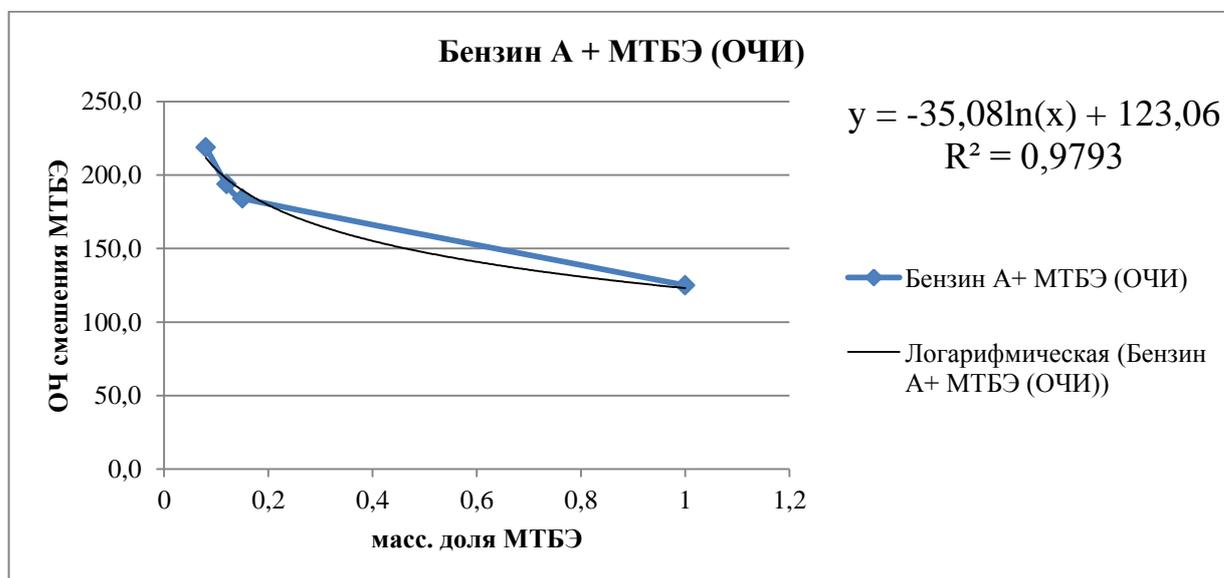


Рисунок 11 – Зависимость ОЧИ смешения МТБЭ от его массовой доли

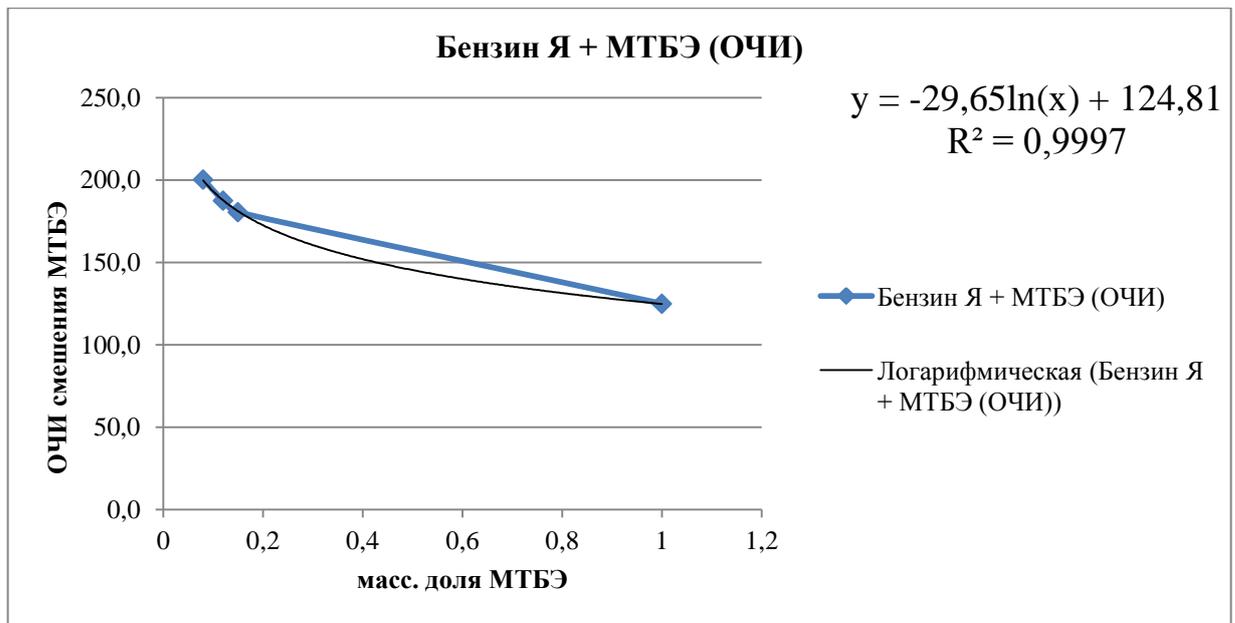


Рисунок 12 – Зависимость ОЧИ смешения МТБЭ от его массовой доли

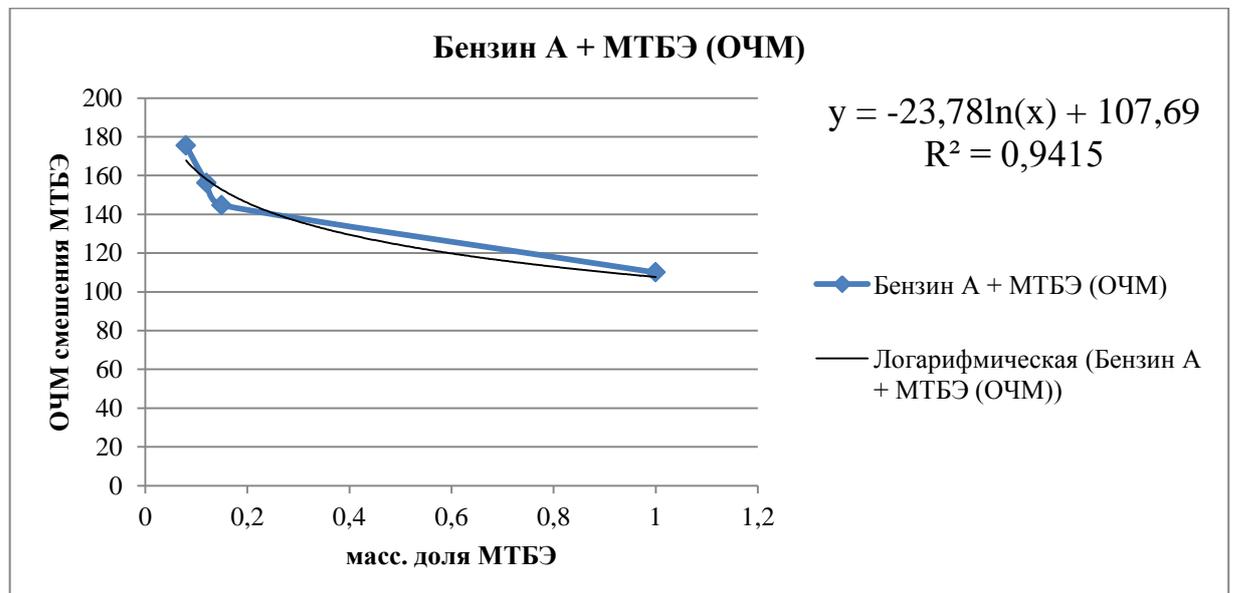


Рисунок 13 – Зависимость ОЧМ смешения МТБЭ от его массовой доли

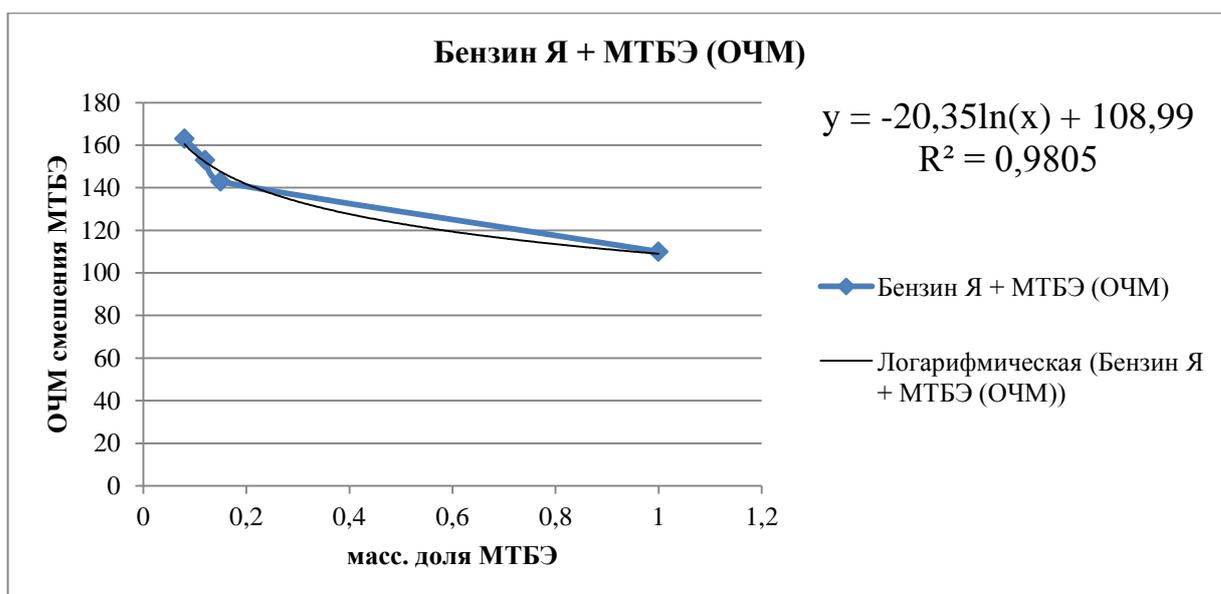


Рисунок 14 – Зависимость ОЧМ смешения МТБЭ от его массовой доли

Рассчитаем ту же зависимость, пересчитав массовые доли в объемные.

Результаты расчетов приведены в таблице 21.

Таблица 21 – Результаты расчета ОЧ смешения МТБЭ

Анжерский бензин	
ОЧИ смешения	объемн. доля МТБЭ
226,2	0,076
199,9	0,114
178,2	0,159
125	1
ОЧМ смешения	объемн. доля МТБЭ
180,7	0,076
159,7	0,115
140,4	0,160
110	1
Яйский бензин	
ОЧИ смешения	объемн. доля МТБЭ
206,7	0,076
193,1	0,114
174,7	0,159
125	1
ОЧМ смешения	объемн. доля МТБЭ
167,7	0,076
156,5	0,115
138,7	0,160
110	1

По данным таблицы 21 построим графики зависимости ОЧ смешения добавки от объемной доли этой добавки в смеси (рисунок 15-18).

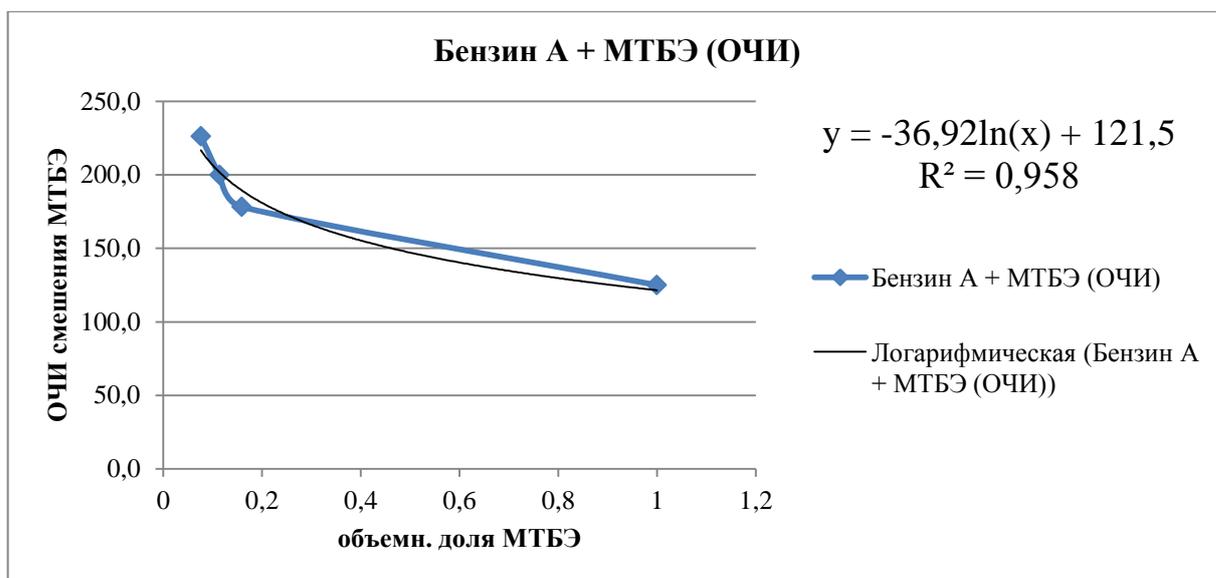


Рисунок 15 – Зависимость ОЧИ смешения МТБЭ от его объемной доли

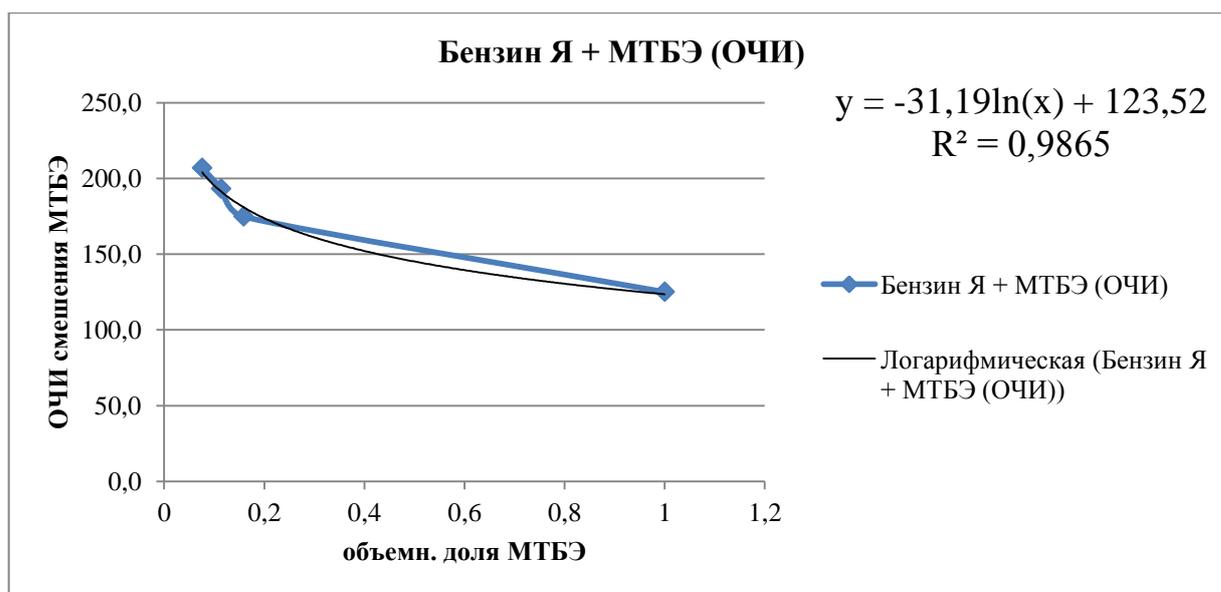


Рисунок 16 – Зависимость ОЧИ смешения МТБЭ от его объемной доли

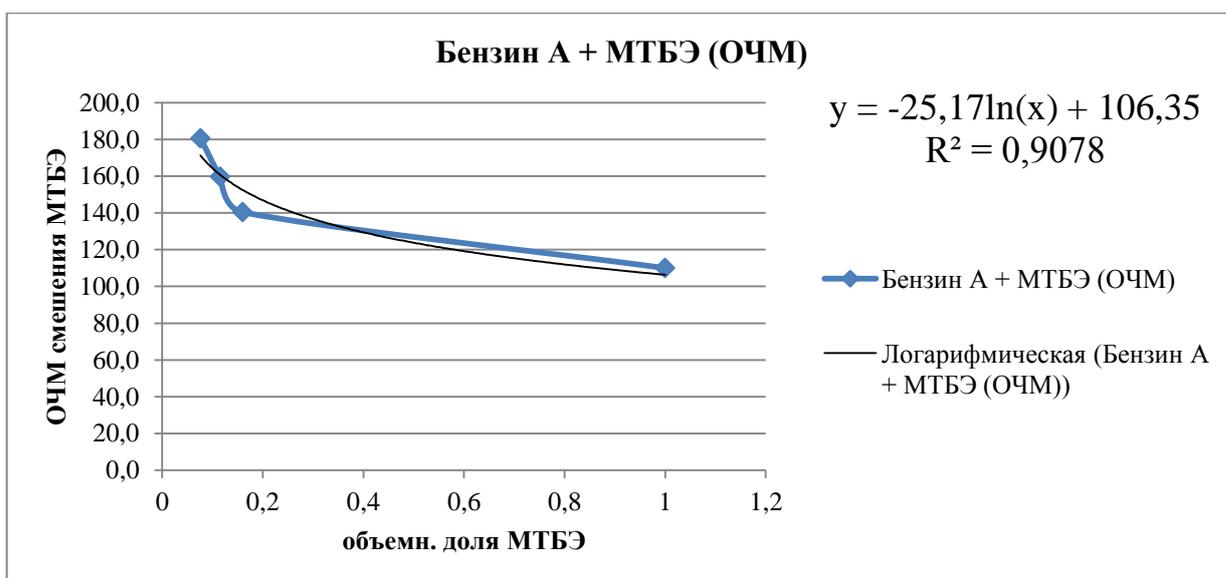


Рисунок 17 – Зависимость ОЧМ смешения МТБЭ от его объемной доли

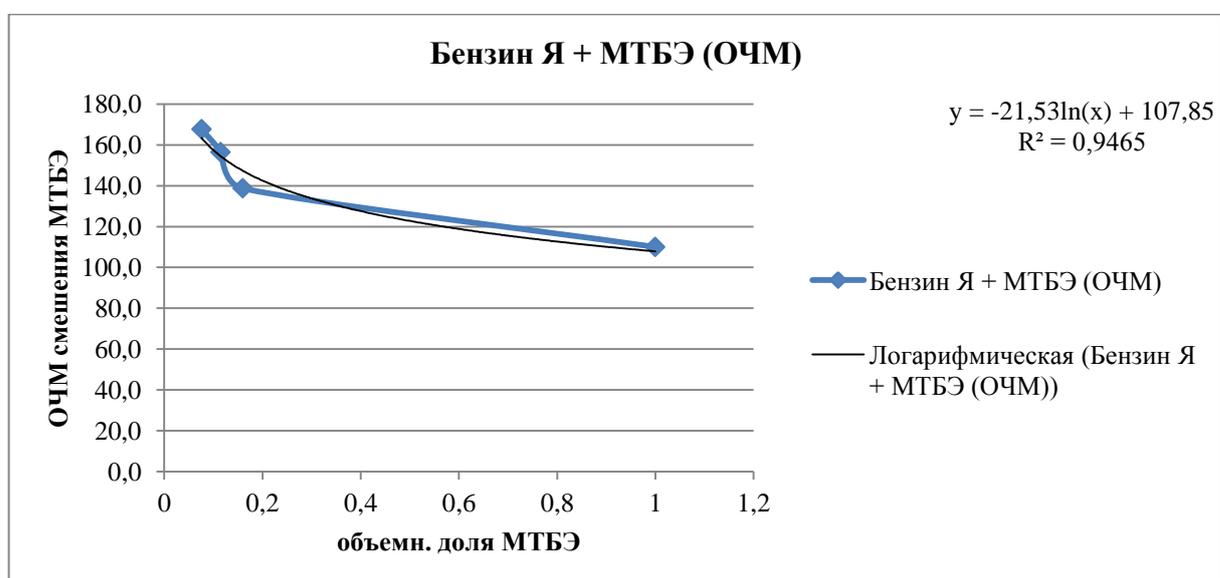


Рисунок 18 – Зависимость ОЧМ смешения МТБЭ от его объемной доли

Обработка результатов эксперимента позволила выявить логарифмическую зависимость ОЧ смешения октаноповышающей добавки от ее содержания в смеси и характеристик базового компонента – прямогонного бензина. Свободный член в уравнениях близок по значению к ОЧ чистой добавки, коэффициент перед логарифмом зависит от свойств прямогонного бензина.

Проверим полученную логарифмическую зависимость на другой смеси прямогонного бензина и другой октаноповышающей добавке. Для эксперимента и расчета взяли бензин НПЗ Семилужки и изопропанол.

Данные для расчета ОЧ смешения изопропанола с бензином приведены в таблице 22.

Таблица 22 – Данные для расчета ОЧ смешения изопропанола с бензином

Проба	ОЧИ	ОЧМ
Бензин Семилужки	80,3	77,2
Изопропанол чистый	122	98
Бензин 95% + изопропанол 5% (масс.)	95,2	85,5
Бензин 93% + изопропанол 7% (масс.)	95,4	85,6
Бензин 92% + изопропанол 8% (масс.)	95,4	85,6
Бензин 90% + изопропанол 10% (масс.)	95,6	85,8
Бензин 88% + изопропанол 12% (масс.)	98,8	85,8

Результаты расчетов приведены в таблице 23.

Таблица 23 – Результаты расчета ОЧ смешения изопропанола

Бензин Семилужки	
ОЧИ смешения	масс. доля изопропанола
378,3	0,05
296,0	0,07
269,1	0,08
233,3	0,1
122	1
ОЧМ смешения	масс. доля изопропанола
243,2	0,05
197,2	0,07
182,2	0,08
163,2	0,1
98	1

По данным таблицы 23 построим графики зависимости ОЧ смешения добавки от массовой доли этой добавки в смеси.

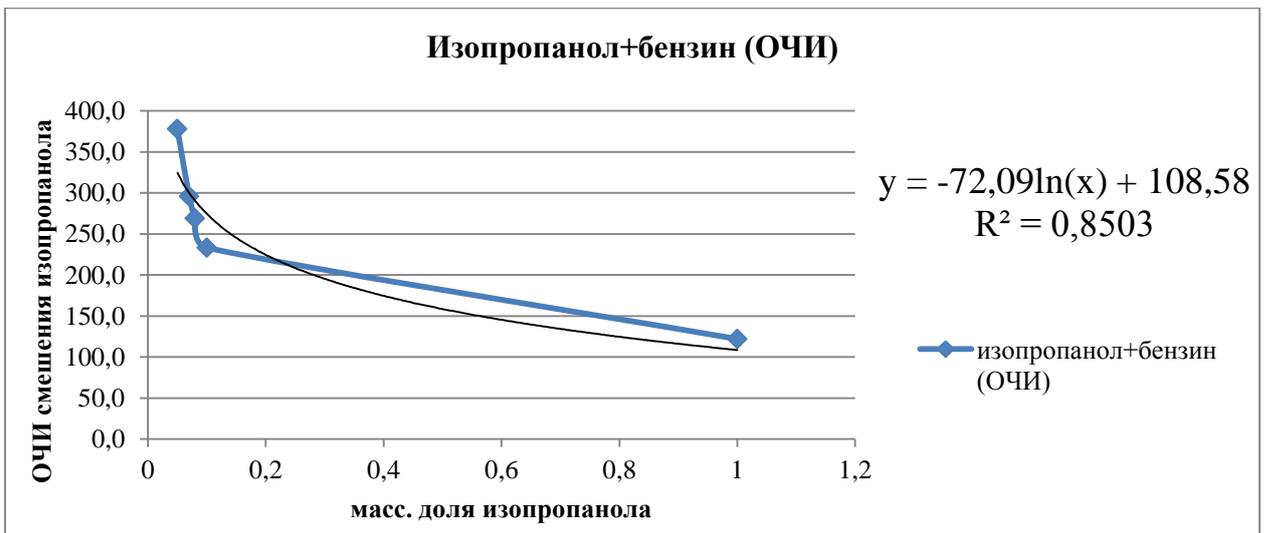


Рисунок 19 – Зависимость ОЧИ смешения изопропанола от его массовой доли

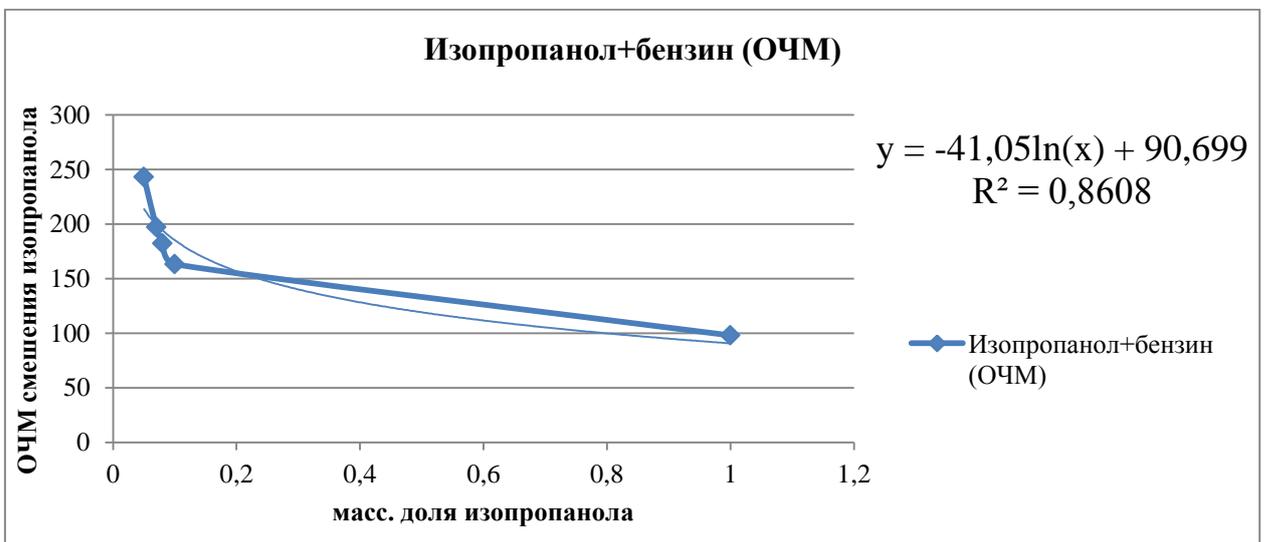


Рисунок 20 – Зависимость ОЧМ смешения изопропанола от его массовой доли

Выполним проверку, рассчитав ОЧ смеси с массовыми долями изопропанола в исследуемом интервале и за его пределами по следующей формуле:

$$\text{ОЧ смеси} = \text{ОЧ}_{\text{смеш.д}} \cdot C_{\text{д}} + \text{ОЧ}_{\text{б}} \cdot C_{\text{б}}, \quad (28)$$

Результаты проверки представлены в таблице 24.

Таблица 24 – Проверочный расчет ОЧ смеси

ОЧИ смешения добавки	С добавки, масс. доля	ОЧИ бензина	С бензина, масс. доля	ОЧИ смеси расч.	ОЧИ смеси эксп.	Δ
300,3	0,07	80,3	0,93	95,7	95,4	0,2
261,4	0,12		0,88	102,0	98,8	3,2
ОЧМ смешения добавки	С добавки, масс. доля	ОЧМ бензина	С бензина, масс. доля	ОЧИ смеси расч.	ОЧ смеси эксп.	Δ
199,9	0,07	77,2	0,93	85,8	85,6	0,2
177,7	0,12		0,88	89,3	85,8	3,5

Анализ результатов показал, что предложенная логарифмическая зависимость дает адекватный результат расчета октанового числа по исследовательскому и моторному методу в исследуемых интервалах с допустимой погрешностью в один пункт (согласно ГОСТ 511-82).

#### 4.4 Проектирование узла смешения на линиях бензинового и дизельного топлива

Исходные данные для проектирования приведены в таблицах 25 и 26.

Таблица 25 – Исходные данные по бензину

Расход прямогонного дизельного дистиллята – 200 тыс.т./год
Содержание цетаноповышающих присадок 0,1-0,5 %масс.

Таблица 26 – Исходные данные по дизельному топливу

Расход прямогонного бензинового дистиллята – 100 тыс.т./год
МТБЭ 8-15 %масс.
Толуол 5-15 %масс.
ММА 0,8-1,0 % масс.

#### 4.4.1 Разработка модели смесителя в среде HYSYS

Схема потоков в смесителе изображена на рисунке 21.

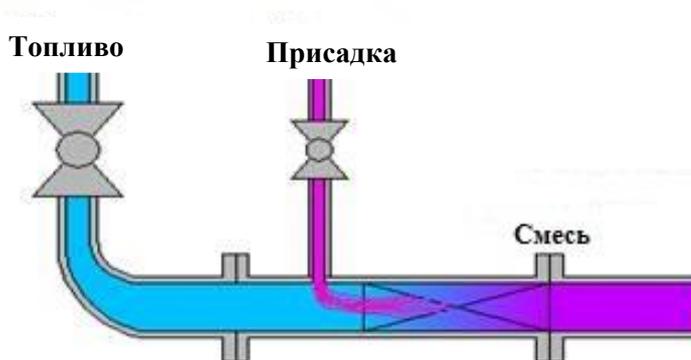


Рисунок 21 – Схема потоков в смесителе

##### 4.4.1.1 Линия бензинового топлива

В таблице 27 приведены данные по фракционному составу бензиновой фракции, которые использовались при расчете смесителя в среде HYSYS.

Таблица 27 – Исходные данные для расчета в среде HYSYS

Отгон, %	Т по объему, °С
0,5	25
5	27,8
10	27,84
15	36
20	60,3
25	68,7
30	68,74
35	80,7
40	90
45	91,9
50	98,4

Продолжение таблицы 27

55	100,9
60	100,93
65	116,7
70	119,4
75	125,7
80	139,1
85	150,8
90	167,8
95	203,2
98	235,4
99,5	262

При помощи программы AspenHYSYS получили материальный баланс для различных концентраций добавок бензине (таблица 28).

Таблица 28 – Материальный баланс

Название присадки	Концентрация присадки, масс. доля	Массовый расход присадки, кг/ч	Массовый расход бензина, кг/ч	Смесь на выходе, кг/ч
МТБЭ	0,08	913,24	10502,29	11415,53
	0,12	1369,86	10045,67	11415,53
	0,15	1712,33	9703,2	11415,53
Толуол	0,05	570,78	10844,75	11415,53
	0,10	1141,55	10273,98	11415,53
	0,15	1712,33	9703,2	11415,53
ММА	0,008	91,32	11324,21	11415,53
	0,01	114,16	11301,37	11415,53

При составлении теплового баланса использовались данные по материальному балансу и результаты расчета теплоемкости смешиваемых потоков и их плотностей в среде HYSYS. Результаты представлены в таблице 29.

Таблица 29 – Тепловой баланс

Бензин			Присадка			Смесь		
t <sub>н</sub> , °С	G <sub>н</sub> , кг/ч	C <sub>н</sub> , Дж/(кг*С)	t <sub>н</sub> , °С	G <sub>н</sub> , кг/ч	C <sub>н</sub> , Дж/(кг*С)	t <sub>к</sub> , °С	G <sub>к</sub> , кг/ч	C <sub>к</sub> , Дж/(кг*С)
30	9703,2	2057	40	1712,3	2079	31,52	11416	2060
598784472,0 Дж/ч			142397362,8 Дж/ч			741224061,5 Дж/ч		
741,2 МДж/ч						741,2 МДж/ч		

Для более эффективного перемешивания требуется турбулентный режим движения жидкости ( $Re > 10000$ ). Примем критерий Рейнольдса с запасом,  $Re = 27000$ .

Находим ориентировочный диаметр:

$$d = \frac{2 \cdot G \cdot \rho}{Re \cdot \mu \cdot \pi} \quad (29)$$

$$d = \frac{2 \cdot 16,14/3600 \cdot 699,8}{27000 \cdot 0,000385 \cdot 3,14} = 0,192 \text{ м}$$

По данным расчета подбираем трубный статический смеситель [32].

Таблица 30 - Параметры трубного статического смесителя

Наименование	Производительность, м <sup>3</sup> /ч	Диаметр, мм	Длина, мм	Масса, кг
СМТ 80-960	20	195	960	21,4

#### 4.4.1.2 Линия дизельного топлива

В таблице 31 приведены данные по фракционному составу бензиновой фракции, которые использовались при расчете смесителя в среде HYSYS.

Таблица 31 – Исходные данные для расчета в среде HYSYS

Отгон, %	T по объему, °С
0,5	163
10	192
50	263
90	347
95	370
99,5	377

В таблице 32 представлены состав и свойства выбранной цетаноповышающей присадки.

Таблица 32 – Состав и основные свойства присадки

Состав присадки	Формула	Молярная масса М, г/моль	Массовая доля	Мольная доля
Гептанон-3	$C_7H_{14}O$	114,20	0,17	0,17
Бутилбутионат	$C_8H_{16}O_2$	144,20	0,20	0,16
2,3,5-триметилгептан	$C_{10}H_{22}$	142,30	0,23	0,19
2-этилгексанол-1	$C_8H_{18}O$	130,20	0,15	0,13
2-метилпропанол-1	$C_4H_{10}O$	74,12	0,12	0,19
Метилциклогексан	$C_7H_{14}$	98,19	0,13	0,16
Присадка		116,20	1,00	1,00

При помощи программы AspenHYSYS рассчитали материальный баланс (таблица 33).

Таблица 33 – Материальный баланс

Концентрация присадки, %масс.	Массовый расход присадки, кг/ч	Массовый расход ДТ, кг/ч	Смесь на выходе, кг/ч
0,1	22,83	22808,22	22831,05
0,5	114,16	22716,89	22831,05

Для составления теплового баланса данными материального баланса и результатами расчета теплоемкости смешиваемых потоков и их плотностей в среде HYSYS. Результаты представлены в таблице 34.

Таблица 34 – Тепловой баланс

Дизельное топливо			Присадка			Смесь		
$t_n, ^\circ C$	$G_n, \text{кг/ч}$	$C_n, \text{Дж/(кг}\cdot\text{C)}$	$t_n, ^\circ C$	$G_n, \text{кг/ч}$	$C_n, \text{Дж/(кг}\cdot\text{C)}$	$t_k, ^\circ C$	$G_k, \text{кг/ч}$	$C_k, \text{Дж/(кг}\cdot\text{C)}$
40	22717	1923	40	114,16	2068	40	22831	1923
1747383179 Дж/ч			9443315 Дж/ч			1756164366 Дж/ч		
1756 МДж/ч						1756 МДж/ч		

Для более эффективного перемешивания требуется турбулентный режим движения жидкости ( $Re > 10000$ ). Примем критерий Рейнольдса,  $Re = 10000$ .

Находим ориентировочный диаметр по формуле (29):

$$d = \frac{2 \cdot 27,58 / 3600 \cdot 810,5}{10000 \cdot 0,002253 \cdot 3,14} = 0,219 \text{ м}$$

По данным расчета подбираем трубный статический смеситель [32].

Таблица 35 – Параметры трубного статического смесителя

Наименование	Производительность, м <sup>3</sup> /ч	Диаметр, мм	Длина, мм	Масса, кг
СМТ 100-1120	30	220	1120	22,1

#### 4.4.2 Гидравлический и тепловой расчеты

##### а) Гидравлический расчет

Исходя из технологических соображений, принимаем диаметр для смесителя на линиях бензинового и дизельного топлив равным 220 мм.

Тогда для бензинового топлива, критерий Рейнольдса будет равным:

$$Re = \frac{2 \cdot 0,22 \cdot 699,8}{0,000385} = 798285$$

Для дизельного топлива:

$$Re = \frac{2 \cdot 0,22 \cdot 810,5}{0,002253} = 158286$$

Для потоков бензинового и дизельного топлива при диаметре смесителя 220 мм обеспечивается турбулентный режим ( $Re > 10000$ ).

Примем абсолютную шероховатость стенок аппарата  $\Delta = 0,1 \cdot 10^{-3}$ .

Следовательно относительная шероховатость стенок аппарата:

$$e = \frac{\Delta}{D} = \frac{0,1 \cdot 10^{-3}}{0,22} = 0,00045. \quad (30)$$

Определяем коэффициент трения по следующей формуле:

$$\lambda = 0,11 \left( e + \frac{68}{Re} \right)^{0,25} = 0,11 \cdot \left( 0,00045 + \frac{68}{158286} \right)^{0,25} = 0,019 \quad (31)$$

Рассчитаем гидравлическое сопротивление аппарата:

$$\Delta p = \lambda \frac{L \cdot \omega^2 \rho}{D \cdot 2} = 0,019 \cdot \frac{1,12 \cdot 2^2 \cdot 810,5}{0,22 \cdot 2} = 156,79 \text{ Па} \quad (32)$$

где  $L$  – длина аппарата, м;

$D$  – диаметр аппарата, м.

Для того, чтобы найти величину перепада давления, при движении потока смеси через неподвижный слой насадки, воспользуемся уравнением Эргуна [33]:

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{1,75\rho(1 - \varepsilon_{св})}{d_3 \varepsilon_{св}^3} \omega^2 + \frac{150\mu(1 - \varepsilon_{св})^2}{d_3^2 \varepsilon_{св}^3} \omega, \quad (33)$$

где  $\mu$  и  $\rho$  – динамическая вязкость и плотность жидкости, Па·с и кг/м<sup>3</sup>;

$\varepsilon_{св}$  – порозность среды, м<sup>3</sup>/м<sup>3</sup>;

$d_3$  – эквивалентный диаметр, м.

$$\begin{aligned} \frac{\Delta P}{L} &= \frac{1,75 \cdot 810,5 \cdot (1 - 0,974)}{36,3 \cdot 10^{-3} \cdot 0,974^3} \cdot 2^2 + \frac{150 \cdot 0,002253 \cdot (1 - 0,974)^2}{(36,3 \cdot 10^{-3})^2 \cdot 0,974^3} \cdot 2 \\ &= 4398,23 \frac{\text{Па}}{\text{м}} \end{aligned}$$

Помножим на длину аппарата:

$$\Delta P = 4398,23 \cdot 1,12 = 4926,02 \text{ Па}$$

б) Тепловой расчет

Толщина теплоизоляции рассчитывается по формуле (3.1) [34].

$$\delta_{из} = \frac{\lambda_{из}}{\alpha_n} \cdot \frac{(t_{ст} - t_{из})}{(t_{из} - t_{окр})}, \quad (34)$$

где  $\delta_{из}$  – толщина теплоизоляции;

$\lambda_{из}$  – коэффициент теплопроводности материала изоляции;

$\alpha_n$  – коэффициент теплоотдачи в окружающую среду (воздух);

$t_{ст}$ ,  $t_{окр}$ ,  $t_{из}$  – температура наружной стенки аппарата, окружающей среды и наружной поверхности теплоизоляционного слоя (принимаем 40, 20 и 25<sup>0</sup> С, соответственно)[34].

Коэффициент теплоотдачи рассчитывается по приближенному уравнению [32]:

$$\alpha_n = 9,74 + 0,07 \cdot \Delta t = 9,74 + 0,07 \cdot 5 = 10,09 \text{ Вт/м}^2 \cdot \text{К},$$

где  $\Delta t = t_{\text{из}} - t_{\text{окр}} = 25 - 20 = 5^0 \text{ C}$ .

В качестве изоляции выбираем материал совелит, для которого  $\lambda_{\text{из}} = 0,098 \text{ Вт/м}^2 \cdot \text{К}$ , тогда:

$$\delta_{\text{из}} = \frac{\lambda_{\text{из}} \cdot (t_{\text{см}} - t_{\text{из}})}{\alpha_n \cdot (t_{\text{из}} - t_{\text{окр}})} = \frac{0,098 \cdot (40 - 25)}{10,09 \cdot (25 - 20)} = 0,029 \text{ м} = 29 \text{ мм}.$$

Примем толщину изоляции 30 мм.

#### 4.4.3 Конструктивные и механические расчеты

##### а) Расчет толщины обечайки

Для материала обечайки и днищ выберем сталь 09Г2С (ГОСТ 5520-79). Данная сталь используется в нефтяной и химической отраслях.

При работе элементов химической аппаратуры в условиях любых отрицательных температур за расчетную температуру принимают 20 °С.

Исполнительную толщину тонкостенной гладкой цилиндрической обечайки, нагруженной внутренним избыточным давлением, рассчитываем по формуле:

$$s \geq \frac{P \cdot D}{2 \cdot [\sigma] \cdot \varphi - P} + c \quad (35)$$

Для обечайки  $D \geq 200$  мм должно соблюдаться условие:

$$(s - c) / D \leq 0,1.$$

Суммарную прибавку к номинальной расчетной толщине стенки определяем по формуле:

$$c = c_1 + c_2 + c_3. \quad (36)$$

где  $c_1$  - прибавка на коррозию (1мм);

$c_2$  – прибавка на минусовое отклонение по толщине листа, примем 0,7 мм;

$c_3$  – технологическая прибавка, примем 0,5 мм.

$$c = 1 + 0,7 + 0,5 = 2,3 \text{ мм}$$

Допускаемое напряжение для выбранного материала сталь марки 09Г2С рассчитывается по следующей формуле [35]:

$$[\sigma] = \eta \cdot \sigma^* , \quad (37)$$

где  $\eta = 0,9$  – коэффициент для взрывоопасных и пожароопасных сред;

$\sigma^* = 183$  МПа – допускаемое напряжение для стали 09Г2С при 20 °С.

$$[\sigma] = 0,9 \cdot 183 = 164,7 \text{ МПа},$$

где  $\varphi = 0,9$  – коэффициент прочности сварных швов: стыковых, выполненных автоматической или полуавтоматической сваркой с одной стороны, с флюсовой или керамической подкладкой, при контроле 100 % длины шва.

Толщину стенки обечайки рассчитываем по формуле:

$$S \geq \frac{P \cdot D}{2 \cdot [\sigma] \cdot \varphi - P} + c = \frac{0,1 \cdot 0,220}{2 \cdot 164,7 \cdot 0,9 - 0,1} + 0,0023 = 0,0024 \text{ м.}$$

Примем толщину стенки обечайки равной 4 мм.

Проверка условия:  $\frac{4-2,3}{183} = 0,0077 \leq 0,1$ .

Допускаемое давление в обечайке определяем по формуле[34]:

$$P_d = \frac{2 \cdot \sigma_d \cdot \varphi (s - C_k)}{D_b + (s - C_k)} = \frac{2 \cdot 164,7 \cdot 0,9 (4 - 1)}{220 + (4 - 1)} = 3,99 \text{ МПа.}$$

б) Входная камера

Исходя из конструкторских соображений, примем диаметр входной камеры равным диаметру смесителя: 220 мм; длину 400 мм. Подберем фланец по ГОСТ 1255-67.

Таблица 36 – Конструктивные размеры фланца

D <sub>y</sub>	d <sub>н</sub>	D <sub>ф</sub>	D <sub>б</sub>	D <sub>1</sub>	Болты		Тип фланцев – 1	
					d <sub>б</sub>	z	ГОСТ 1255-67	
мм							h, мм	Масса, кг
225	245	340	305	282	M16	8	17	5,93

в) Расчет и подбор штуцеров

Рассчитаем условный проход штуцера для ввода потока присадки во входную камеру смесителя. Скорость потока в штуцере примем равной 2 м/с.

Известна плотность присадки при 20°C:

$$\rho^{20} = 770,8 \frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}$$

Температура присадки  $t = 40^\circ\text{C}$ .

$$\rho_4^{40} = \rho_4^{20} - \alpha(40 - 20), \quad (38)$$

где  $\alpha$  – температурная поправка на 1°C равная 0,000962.

$$\rho_4^{40} = 0,7708 - 0,000962(40 - 20) = 0,7516$$

Или

$$\rho^{40} = 751,6 \frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}$$

Тогда:

$$d_{\text{п}} = \sqrt{\frac{4 \cdot G_{\text{п}}}{\pi \cdot \omega_{\text{п}} \cdot \rho_{\text{п}}}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 114,2/3600}{3,14 \cdot 2,0 \cdot 751,6}} = 0,012 \text{ м} = 12 \text{ мм.}$$

Рассчитанный диаметр округляем до ближайшего большего значения:

$d = 15 \text{ мм.}$

Размеры фланца приведены в таблице 25. Подберем фланцы по ГОСТ 1255-67. На рисунке 21 представлен тип штуцера для  $P_y 1 - 10 \text{ кгс/см}^2$  [35].

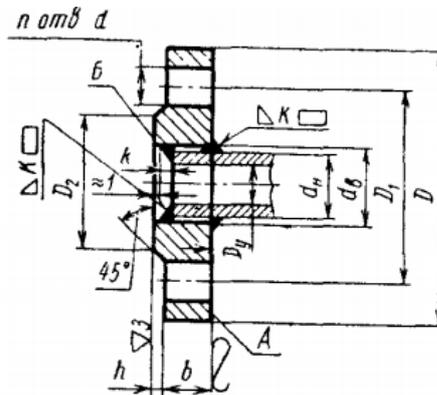


Рисунок 21 - Штуцер

Таблица 36 – Конструктивные размеры штуцеров

$D_y$	$d_n$	$D_{\text{ф}}$	$D_6$	$D_1$	Болты		Тип фланцев – 1	
					$d_6$	$z$	ГОСТ 1255-67	
мм					М12	4	h, мм	Масса, кг
15	18	80	55	40				

г) Выбор насадки



Рисунок 22 – Элемент насадки «Инжехим-2000»

а) с гладкой поверхностью; б) с шероховатой поверхностью.

Насадка «Инжехим-2000» (рисунок 22) позволяет повысить эффективность распределения газовой и жидкой фаз по сечению аппарата. Является современной альтернативой кольцам Паля, Рашига и другим аналогичным насадкам. При равной толщине слоя она обеспечивает большую производительность и меньшее удельное гидравлическое сопротивление. Насадка изготавливается из листа или ленты из нержавеющей или углеродистой стали толщиной от 0,3 до 1 мм, способна работать с загрязненными средами. Поверхность листа подвергается специальной обработке, улучшающей растекание жидкости по насадке [36].

Таблица 37 – Основные технические характеристики

Размер элемента D, мм	35
Толщина материала, мм	0,5
Количество элементов в м <sup>2</sup> , шт.	18750
Удельная поверхность, м <sup>2</sup> /м <sup>3</sup>	107,4
Свободный объем, м <sup>3</sup> /м <sup>3</sup>	0,974
Эквивалентный диаметр, мм	36,3

Масса насадки:

$$m_H = (1 - \varepsilon_{CB}) \cdot L \cdot 0,785 \cdot D_{BH}^2 \cdot \rho_{CT}, \quad (39)$$

где  $\varepsilon_{CB} = 0,974 \text{ м}^3/\text{м}^3$  – свободный объем насадки;

L – длина слоя насадки в смесителе, м;

$\rho_{CT}$  – плотность материала насадки (сталь).

$$m_H = (1 - 0,974) \cdot 1,12 \cdot 0,785 \cdot 0,22^2 \cdot 7900 = 8,74 \text{ кг.}$$

д) Расчет опор аппарата

Объем смесителя:

$$V = L \cdot F = L \cdot \frac{\pi \cdot D^2}{4} = 1,12 \cdot \frac{3,14 \cdot 0,22^2}{4} = 0,043 \text{ м}^3$$

Масса смеси в смесителе будет равна:

$$M_{\text{см}} = \rho_{\text{см}} \cdot V = 810,5 \cdot 0,043 = 34,85 \text{ кг.}$$

Масса обечайки:

$$M_{\text{об}} = L \cdot \pi \cdot D \cdot s \cdot \rho_{\text{стали}} = 1,12 \cdot 3,14 \cdot 0,22 \cdot 0,004 \cdot 7860 = 24,33 \text{ кг}$$

Масса насадки:

$$M_{\text{н}} = (1 - \varepsilon_{\text{св}}) \cdot L \cdot 0,785 \cdot D_{\text{вн}}^2 \cdot \rho_{\text{ст}} = (1 - 0,974) \cdot 1,12 \cdot 0,785 \cdot 0,222^2 \cdot 7900 = 8,7 \text{ кг}$$

Общая масса аппарата с добавкой на другие детали 30% равна:

$$M = 1,3(M_{\text{ф}} + M_{\text{об}} + M_{\text{см}} + M_{\text{н}}).$$

$$M = 1,3 \cdot (5,93 + 34,85 + 24,33 + 8,7) = 95,95 \text{ кг.}$$

Тогда вес аппарата равен 940,3 Н, примем количество опор равное 2, следовательно, на каждую опору нагрузка равна 470,2 Н или 0,0004702 МН.

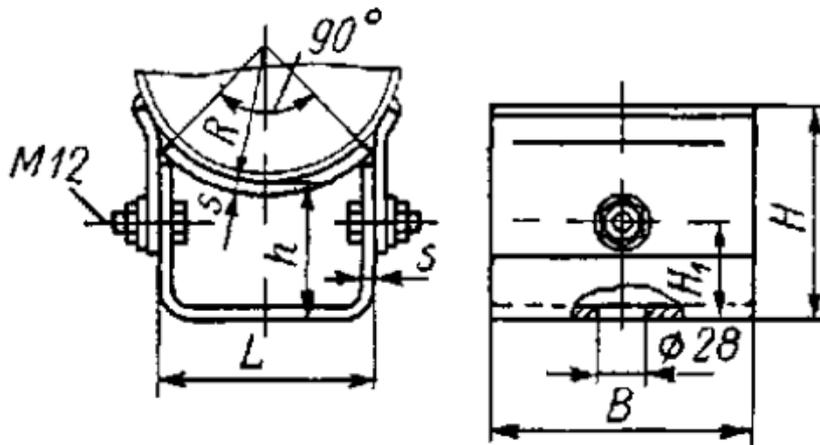


Рисунок 23 – Опора

Таблица 38 – Параметры и размеры опор

$D_{\text{н}}$	L	B	H	$H_1$	h	R	s	Масса, кг
мм								
159	125	150	120	55	75	80	8	5,18

Чертеж общего вида статического смесителя приведен в приложении Б.

## 4.5 Обсуждение результатов

Обобщая проделанную работу, пришли к следующим заключениям:

- Выполнены экспериментальные исследования свойств прямогонных бензиновых дистиллятов и их смесей с октаноповышающими добавками;
- Проведен поиск расчетных формул;
- Выполнен расчет по выбранным формулам;
- Определены формулы, адекватно описывающие и прогнозирующие ОЧ бензиновых топлив, выполнена их проверка;
- Рассчитаны рецептуры октаноповышающих добавок и определены основные физико-химические свойства добавок;
- Выполнены расчеты для смесей бензиновых дистиллятов с октаноповышающими добавками;
- Предложен способ расчета ОЧ смешения кислородсодержащих октаноповышающих добавок
- Получены формулы, адекватно описывающие и прогнозирующие ОЧ смесей бензиновых топлив с добавками, выполнена их проверка;
- Разработана модель статического смесителя на линиях бензинового и дизельного топлива в среде Aspen HYSYS;
- Выполнены конструктивные и механические расчеты аппарата смешения.

## **5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение**

### **5.1 Потенциальные потребители результатов исследования**

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

Целевой рынок – сегменты рынка, на котором будет продаваться в будущем разработка. В свою очередь, сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками [37,38].

Результат НИР – применение расчетных экспресс-методов для определения октанового числа моторных топлив. Для данной работы целевым рынком являются лаборатории предприятий нефтехимической отрасли, научно-исследовательские нефтехимические институты, нефтехимические университеты и отдельные исследователи.

### **5.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения**

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок [37,38].

В таблице 39 приведена оценочная карта, включающая конкурентные технические разработки для определения октанового числа бензинового топлива.

Таблица 39 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>
1	2	3	4	5	6	7	8
Теоретические критерии разработки							
1. Точность исследования	0,3	5	5	4	1,5	1,5	1,2
2. Длительность определения	0,3	5	5	4	1,5	1,5	1,2
Экономические критерии оценки эффективности							
3. Затраты на определение	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
4. Срок эксплуатации	0,2	5	4	3	1	0,8	0,6
5. Послепродажное обслуживание разработки	0,1	5	3	4	0,5	0,3	0,4
Итого:	1				5,0	4,5	3,8

где Б<sub>ф</sub> – расчетные методы определения октановых чисел (продукт проведенной исследовательской работы);

Б<sub>к1</sub> – установка УИТ-85М для определения октановых чисел;

Б<sub>к2</sub> – определение октановых чисел на газовом хроматографе «Кристалл 5000».

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum V_i \cdot B_i \quad (40)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

V<sub>i</sub> – вес показателя (в долях единицы);

B<sub>i</sub> – балл i-го показателя.

На основании таблицы 39 можно сделать вывод, что результаты, исследовательской работы могут составить конкуренцию уже имеющимся на российском рынке методам определения ОЧ. Главные преимущества разработки: достаточная точность при минимальном времени определения, неограниченный срок службы при сравнительно низких затратах.

### 5.3 Диаграмма Исикавы

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

Область применения диаграммы:

- Выявление причин возникновения проблемы;
- Анализ и структурирование процессов на предприятии;
- Оценка причинно-следственных связей.

Построение диаграммы начинают с формулировки проблемной области/темы, которая является объектом анализа и наносится на центральную горизонтальную стрелку диаграммы. Затем выявляются факторы/группы факторов, влияющие на объект анализа. Часто, для выявления таких факторов используется прием 6М:

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

Выявленные факторы подводят к стрелкам диаграммы первого уровня. Далее к каждой стрелке подводят стрелки второго уровня, к которым, в свою очередь, подводят стрелки третьего уровня и т. д. до тех пор, пока на диаграмму не будут нанесены все стрелки, обозначающие факторы, оказывающие заметное влияние на объект анализа [37,38].

Исходя из данных диаграммы на рисунке 24, можно сделать вывод, что для эффективного использования разработки необходимо минимизировать влияние человеческого фактора на результаты, следить за изменением требований к сырью.



Рисунок 24 – Причинно-следственная диаграмма Исикавы

#### 5.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На любой стадии жизненного цикла научной разработки полезно оценивать степень ее готовности к коммерциализации и уровень собственных знаний для ее проведения. В таблице 2 отразим показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта.

При проведении анализа по таблице по каждому показателю ставится оценка по пятибалльной шкале. Оценка готовности научного проекта к коммерциализации (или уровень имеющихся знаний у разработчика) определяется по формуле [37,38]:

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i , \quad (41)$$

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

$B_i$  – балл по  $i$ -му показателю.

Результаты расчетов приведены в таблице 40. Значение  $B_{\text{сум}}$  позволяет говорить о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации. Так как в данном случае, значение  $B_{\text{сум}}$  получилось 60, то такая разработка считается перспективной, а знания разработчика достаточными для успешной ее коммерциализации.

Таблица 40 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
Определен имеющийся научно-технический задел	5	5
Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	5	5

Продолжение таблицы 40

Определены отрасли и технологии для предложения на рынке	5	5
Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	4
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	4
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	4	4
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	4
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	3
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	4	4
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	4
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	2
Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	2	2
Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	4
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	5
Проработан механизм реализации научного проекта	5	5
<b>ИТОГО БАЛЛОВ</b>	<b>60</b>	<b>60</b>

#### **5.4.1 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования**

На основании анализа методов коммерциализации проекта, а также с учётом степени готовности разработки, для успешного продвижения расчетных методов определения октанового числа бензинов является инжиниринг, который подразумевает усовершенствование имеющихся лабораторных методов определения октанового числа.

#### **5.5 Инициация проекта**

В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать, и влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в Уставе проекта.

Устав проекта документирует бизнес-потребности, текущее понимание потребностей заказчика проекта, а также новый продукт, услугу или результат, который планируется создать.

Устав научного проекта имеет следующую структуру:

- Цели и результат проекта. В данном разделе приведем информацию о заинтересованных сторонах проекта, иерархии целей проекта и критериях достижения целей. Информацию по заинтересованным сторонам проекта представим в таблице 41.

Таблица 41 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидание заинтересованных сторон проекта
Научно-исследовательские институты	Прогноз октанового числа бензинов
Отдельные исследователи	Экспресс-расчет октанового числа бензинов
Лаборатории предприятий нефтехимической отрасли	Экспресс-расчет октанового числа бензинов с использованием лабораторных результатов

В таблице 42 представим информацию об иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Таблица 42 – Цели и результат проекта

Цели проекта	Исследование возможности применения расчетных методов для определения октанового числа бензинов, в том числе с добавками, используя данные по их составу и свойствам
Ожидаемые результаты проекта:	Применение расчетных методов для экспресс определения октанового числа бензинов их смесей с октаноповышающими добавками, используя данные по их составу и свойствам
Критерии приемки результата проекта:	Возможность применения экспресс-методов для расчета октанового числа бензинов и их смесей с добавками, используя данные по их составу и свойствам
Требования к результату проекта:	- Адекватность расчетных методов и воспроизводимость результатов - Возможность расчета октанового числа для бензинов и компаундированных смесей

- Организационная структура проекта. На данном этапе работы решаются следующие вопросы: кто будет входить в рабочую группу данного проекта, определить роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте. Эту информацию представим в табличной форме (таблица 43).

Таблица 43 - Рабочая группа проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо- затраты, час.
Самборская М.А., НИ ТПУ, Доцент кафедры ХТТ и ХК	Руководитель магистерской диссертации	Координирует деятельность магистранта	78
Креницына З.В., НИ ТПУ, Доцент кафедры Менеджмента	Эксперт проекта	Координирует выполнение раздела финансовый менеджмент	15
Раденков Т.А., НИ ТПУ, Ассистент кафедры ЭБЖ	Эксперт проекта	Координирует выполнение раздела социальная ответственность	15
Сыскина А.А., НИ ТПУ, Доцент кафедры ИЯПР	Эксперт проекта	Координирует выполнение раздела на иностранном языке	12
Карпова А.М., НИ ТПУ, студент	Магистрант	Исполнитель работы по проекту	1000
ИТОГО:			1120

- Ограничения и допущения проекта

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а так же «границы проекта» - параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованы в рамках данного проекта. Ограничения проекта отображены в таблице 44.

Таблица 44 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/допущения
Сроки проекта	
Дата утверждения плана управления проектом	10.02.2017
Дата завершения проекта	31.05.2017

## 5.6 Планирование научно-исследовательских работ

### 5.6.1 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный график проекта. Линейный график представляется в виде таблицы 45.

Таблица 45 – Календарный план проекта

Код работы	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Составление и утверждение задания	5	10.02.2017	14.02.2017	Самборская М.А.
2	Подбор и изучение теоретических материалов, соответствующих теме задания	8	15.02.2017	22.02.2017	Карпова А.М.
	Постановка задачи исследования	3	23.02.2017	27.02.2017	Самборская М.А. Карпова А.М.
	Патентный поиск	3	28.02.2017	1.03.2017	Карпова А.М.
	Календарное планирование работ по теме	1	02.03.2017	02.03.2017	Самборская М.А. Карпова А.М.
3	Проведение экспериментов	33	03.03.2017	04.04.2017	Карпова А.М.
	Проведение расчетов	9	05.04.2017	13.04.2017	Карпова А.М.
	Проектирование смесителя	16	14.04.2017	29.04.2017	Карпова А.М.
4	Оценка эффективности полученных результатов	5	30.05.2016	04.05.2016	Самборская М.А. Карпова А.М.
	Анализ результатов	11	05.05.2016	15.05.2016	Самборская М.А. Карпова А.М.
	Оформление дипломной работы	16	16.05.2016	31.05.2016	Самборская М.А. Карпова А.М.
Итого:		110	10.02.2017	31.05.2017	

На основе таблицы 45 построим календарный план-график в таблице 46 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени дипломирования.

Таблица 46 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

Вид работ	Исполнители	Т <sub>к</sub> , кал, дн	Продолжительность выполнения работ												
			фев		март			апрель			май				
			2	3	1	2	3	1	2	2	1	2	3		
Составление и утверждение задания	Руководитель	5	■												
Подбор и изучение теоретических материалов, соответствующих теме задания	Магистр	8		■											
Постановка задачи исследования	Руководитель Магистр	3		■											
Патентный поиск	Магистр	3		■											
Календарное планирование работ по теме	Руководитель Магистр	1			■										
Проведение экспериментов	Магистр	33			■	■	■	■							
Проведение расчетов	Магистр	9						■							
Проектирование смесителя	Магистр	16							■	■					
Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель Магистр	5											■		
Анализ результатов	Руководитель Магистр	11											■	■	
Оформление дипломной работы	Руководитель Магистр	16											■	■	■

■ – магистр; ■ – руководитель

## 5.7 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения [37,38]. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на специальное оборудование для научных исследований
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

### 5.7.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. В стоимость материальных затрат включают транспортно-заготовительные расходы (3 – 5 % от цены). В эту же статью включаются затраты на оформление документации (канцелярские принадлежности, тиражирование материалов). Результаты по данной статье заносятся в таблицу 47.

Таблица 47 – Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Марка, размер	Количество	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Бензин прямогонный		10 (л)	118	1180
Добавка	МТБЭ	1 (л)	330	330
Добавка	ММА	1 (л)	150	150
Добавка	Толуол	1 (л)	100	100
Добавка	Изопропанол	1 (л)	300	300
Всего за материалы				2060
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				102
Итого по статье С <sub>м</sub>				2162

### 5.7.2 Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме. Определение стоимости спецоборудования производится по действующим прейскурантам, а в ряде случаев по договорной цене [37,38].

Таблица 48 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

Наименование	Марка, размер	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб	Сумма амортизационных отчислений, руб.
Октанометр	«Октан-М»	1	52340,0	52340,0	8723,3
Газовый хроматограф	Кристалл 5000	1	920000,0	920000,0	92000,0
Итого				972340,0	1073063,3

Для оборудования нужно рассчитать величину годовой амортизации по следующей формуле:

$$A_{\text{год}} = \frac{C_{\text{перв}}}{T_{\text{пи}}}, \quad (41)$$

где  $C_{\text{перв}}$  – первоначальная стоимость, руб.;

$T_{\text{пи}}$  – время полезного использования, год.

Результаты расчетов приведены в таблице 48.

### 5.7.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Для расчета основной заработной платы используем месячный оклад руководителя, консультанта ЭЧ, консультанта СО.

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ

по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы (размер определяется Положением об оплате труда). Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату [37,38].

$$Z_{zn} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (42)$$

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

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

Основная заработная плата ( $Z_{осн}$ ) руководителя от предприятия рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p, \quad (43)$$

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

$Z_{дн}$  – среднедневная заработная плата работника, руб;

$T_p$  – продолжительность работ, выполняемых научно – техническим работником, раб. дни.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (44)$$

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

$M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года;

при отпуске в 24 раб. дня  $M=11,2$  месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней  $M=10,4$  месяца, 6-дневная неделя;

$F_d$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно – технического персонала, раб. дни.

В таблице 49 приведен баланс рабочего времени каждого работника НТИ.

Таблица 49 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Консультант ФМ	Консультант СО
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней выходные/праздничные дни:	118	118	118
Потери рабочего времени отпуск:	48	48	48
невыходы по болезни:	0	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	199	199	199

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_b \cdot (1 + k_{пр} + k_d) \cdot k_p, \quad (45)$$

где  $Z_b$  – базовый оклад, руб.;

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

$k_d$  – коэффициент доплат и надбавок (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: определяется Положением об оплате труда);

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

Расчет основной заработной платы приведен в таблице 50.

Таблица 50 – Расчет основной заработной платы

Категория	$Z_b$ , руб.	$k_d$	$k_p$	$Z_m$ , руб.	$Z_{дн}$ , руб.	$T_p$ , раб. дн.	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель							
ППСЗ	23264,9	0,35	1,3	40830	2133,8	11	23471,8
Консультант ЭЧ							
ППСЗ	23264,9	0,35	1,3	40830	2133,8	11	23471,8
Консультант СО							
ППС4	14584,3	0,35	1,3	25596	1337,7	2	2675,4

Общая заработная плата исполнителей работы представлена в таблице 51.

Таблица 51 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнитель	$Z_{осн}$ , руб.	$Z_{доп}$ , руб.	$Z_{зн}$ , руб.
Руководитель	23471,8	2816,6	26288,4
Консультант ЭЧ	23471,8	2816,6	26288,4
Консультант СО	2675,4	321	2996,4

#### **5.7.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)**

В данной статье расходом отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников [37,38].

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$C_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}), \quad (46)$$

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

На 2016г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2016 году водится пониженная ставка – 20%.

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 52.

Таблица 52 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	23471,8	2816,6
Консультант ЭЧ	23471,8	2816,6
Консультант СО	2675,4	321
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,20	
Итого:	11114,6	

### 5.7.5 Накладные расходы

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

$$Z_{\text{накл}} = k_{\text{нр}} \cdot (\text{сумма статей } 1 \div 5), \quad (47)$$

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

Величину коэффициента накладных расходов  $k_{\text{нр}}$  допускается взять в размере 16%. Результаты расчета накладных расходов на НТИ приведены в таблице 53.

### 5.7.6 Бюджет затрат научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции [37,38].

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект приведен в таблице 53.

Таблица 53 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание	Аналог 1	Аналог 2
1. Материальные затраты НТИ	2162	Таблица 9	1760	3645
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	1073063,3	Таблица 10	7000000	1500000
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	49619,0	Таблица 14	47154	84569,2
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	5954,2	Таблица 14	10145,6	9215,2
5. Отчисления во внебюджетные фонды	11114,6	Таблица 14	15897	17264
6. Накладные расходы	182706,1	16 % от суммы ст. 1-5	1131993,1	258350,9
7. Бюджет затрат НТИ	1141913,1	Сумма ст. 1-6	7074956,6	1614693,4

На основании таблицы 53 можно сделать вывод, что основные затраты НТИ приходятся на специальное оборудование для проведения экспериментальных работ.

### 5.8 Организационная структура проекта

В качестве организационной структуры магистерской диссертации выберем проектную структуру. Проектные структуры управления комплексными видами деятельности требуют непрерывной координации квалифицированных сотрудников различных функциональных и линейных подразделений при жестких ограничениях по срокам, качеству работ и затратам на материальные, финансовые и трудовые ресурсы [37,38]. На рисунке 25 отразим организационную структуру проекта.



Рисунок 25 – Проектная структура научного исследования

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

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности [37,38].

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (48)$$

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

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

$\Phi_{\text{max}}$  – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{1141913,1}{7074956,6} = 0,16$$

$$I_{\Phi}^{a1} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{7074956,6}{7074956,6} = 1,00$$

$$I_{\Phi}^{a2} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{1614693,4}{7074956,6} = 0,23$$

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

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (49)$$

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

$a_i$  – весовой коэффициент  $i$ -го варианта исполнения разработки;

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

Таблица 54 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,1	5	5	4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	5	4	4
3. Конкурентоспособность	0,15	5	5	5
4. Энергосбережение	0,20	5	4	5
5. Надежность	0,25	5	5	4
6. Материалоемкость	0,15	4	3	4
ИТОГО	1	4,83	4,33	4,33

$$I_{\text{тп}} = 5*0,1+5*0,15+5*0,15+5*0,2+5*0,25+5*0,15 = 5,0$$

$$\text{Аналог 1} = 5*0,1+4*0,15+5*0,15+4*0,2+5*0,25+3*0,15 = 4,35$$

$$\text{Аналог 2} = 4*0,1+4*0,15+5*0,15+5*0,2+4*0,25+3*0,15 = 4,20$$

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

$$I_{исп.1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{финр}^{исп.1}}, \quad I_{исп.2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{финр}^{исп.2}} \text{ и т.д.}$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (таблица 55) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта ( $\mathcal{E}_{ср}$ ):

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}} \quad (50)$$

Интегральный показатель эффективности разработки и аналога определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p} = \frac{5,00}{0,16} = 31,25$$

$$I_{финр}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_\phi^{a1}} = \frac{4,35}{1,00} = 4,35$$

$$I_{финр}^{a2} = \frac{I_m^{a2}}{I_\phi^{a2}} = \frac{4,20}{0,23} = 18,26$$

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

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a1}} = \frac{4,35}{31,25} = 0,14$$

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a2}} = \frac{18,26}{31,25} = 0,58$$

где  $\mathcal{E}_{ср}$  – сравнительная эффективность проекта;

$I_m^p$  – интегральный показатель разработки;

$I_m^a$  – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 55 – Сравнительная эффективность разработки

№	Показатели	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,16	1,00	0,23
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	5,00	4,35	4,20
3	Интегральный показатель эффективности	31,25	4,35	18,26
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения		0,14	0,58

Сравнительный анализ интегральных показателей эффективности показывает, что предпочтительным является разработка по текущему проекту исполнения, так как данный вариант исполнения является наиболее экономичным и ресурсоэффективным.

## Заключение

Из литературных источников выбраны экспресс-методы определения октанового и цетанового числа расчетным путем и составлена их классификация.

В ходе работы над технико-экономическим обоснованием выделены основные модификаторы и оборудование, улучшающие эксплуатационные характеристики моторных топлив.

Проведено исследование прямогонных бензиновых дистиллятов различных НПЗ, в ходе которого определены их основные физико-химические свойства, необходимые при расчете ОЧ.

Проведен расчет октановых чисел подобранными методами и проверка выбранных формул, на основании которой выявлено, что расчет на основе корреляции октанового и цетанового числа является наиболее приемлемой. Для расчета ЦЧ рекомендуется использовать формулу расчета по групповому составу.

Разработаны рецептуры смешения прямогонных бензинов с октаноповышающими индивидуальными компонентами и проведены проверочные расчеты октанового числа через наиболее перспективные формулы, по результатам которых определили невозможность их применения для определения ОЧ смеси. Поэтому выполнена модификация методов определения, в результате которой получена адекватная логарифмическая зависимость для прогнозирования ОЧ смешения кислородсодержащих октаноповышающих добавок.

## Список публикаций

1. Карпова А.М., Терновая И.С. «Теоретические и экспериментальные исследования методов расчета детонационной стойкости бензинов». Сборник статей «Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XVI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых, посвященной 115-летию со дня рождения профессора Л.П. Кулёва»: в 2 т., - Томск: ТПУ, 2015 - Т. 2 - С. 50-51.
2. Карпова А.М., Терновая И.С. «Исследование и модификация методов расчета октанового числа бензина». Сборник статей «Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XVII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени профессора Л.П.Кулева, посвященной 120-летию Томского политехнического университета», Томск, 17-20 Мая 2016. - Томск: ТПУ, 2016 - С. 347-348