

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

Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки: Химическая технология

Отделение школы (НОЦ): Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Исследование влияния добавок на состав смолисто-асфальтовых компонентов мазута в процессе термообработки

УДК 665.637.040

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Арышева Анастасия Дмитриевна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ИШХБМТ	Кукурина Ольга Сергеевна	к.х.н.		
М. н. с. ИХН СО РАН	Чешкова Татьяна Викторовна	к.х.н., с.н.с.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГТ	Креницина Зоя Васильевна	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОКид	Король Ирина Степановна	к.х.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ	Бондалетова Людмила Ивановна	к.х.н., доцент		

Томск – 2018 г.

Планируемые результаты обучения
по ООП 18.04.01 «Химическая технология» (магистр)
профиль «Химическая технология высокомолекулярных соединений»

Код результ ата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять <i>глубокие</i> естественно-научные, математические и инженерные <i>знания</i> для создания <i>новых</i> материалов
P2	Применять <i>глубокие знания</i> в области современных технологий химического производства для решения <i>междисциплинарных</i> инженерных задач
P3	Ставить и решать <i>инновационные задачи инженерного анализа</i> , связанные с созданием материалов и изделий, с использованием системного анализа и моделирования объектов и процессов химической технологии
P4	Разрабатывать химико-технологические процессы, <i>проектировать</i> и использовать <i>новое</i> оборудование для создания материалов, конкурентоспособных на <i>мировом</i> рынке
P5	Проводить теоретические и экспериментальные <i>исследования</i> в области создания <i>новых</i> материалов, современных химических технологий, нанотехнологий
P6	Внедрять, <i>эксплуатировать</i> современные высокотехнологичные линии автоматизированного производства, обеспечивать их <i>высокую эффективность</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды
<i>Универсальные компетенции</i>	
P7	Использовать <i>глубокие знания</i> по <i>проектному менеджменту</i> для ведения <i>инновационной</i> инженерной деятельности с учетом юридических аспектов защиты интеллектуальной собственности
P8	<i>Активно</i> владеть <i>иностранным языком</i> на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности
P9	Эффективно работать индивидуально, в качестве <i>члена и руководителя группы</i> , состоящей из специалистов различных направлений и квалификаций, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность <i>следовать корпоративной культуре</i> организации
P10	Демонстрировать <i>глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов</i> инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах <i>устойчивого развития</i>
P11	<i>Самостоятельно учиться</i> и непрерывно <i>повышать квалификацию</i> в течение всего периода профессиональной деятельности

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

Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки: Химическая технология

Отделение школы (НОЦ): Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Бондалетова Л.И.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ6А	Арышева Анастасия Дмитриевна

Тема работы:

Утверждена приказом директора (дата, номер)	№ 9666/с от 08.12.2017
---	------------------------

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	<i>объект исследования:</i> <i>мазут нефти Усинского месторождения.</i> <i>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>
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<i>Аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области;</i> <i>Задачи исследования:</i> <ol style="list-style-type: none"><i>1. Провести термоллиз мазута в автоклаве при температуре 450 С без и в присутствии феросфер .</i><i>2. Провести деструкцию сульфидных и эфирных связей в молекулах смол и асфальтенов выделенных из исходного мазута и продуктов его термоллиза с</i>

	<p>использованием селективных химических реагентов (борида никеля и трибромида бора)</p> <p>3. Изучить состав продуктов хемолита смолисто-асфальтовых компонентов с использованием современными физико-химическими методами исследования (ИКС, ХМС).</p> <p>Содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе.</p>
Перечень графического материала	<p>1. Сегментирование рынка</p> <p>2. Оценка конкурентоспособности технических решений</p> <p>3. Матрица SWOT</p> <p>4. График проведения и бюджет НИИ</p> <p>5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ</p> <p>6. Потенциальные риски</p> <p>7. Схема размещения светильников на потолке</p> <p>8. План эвакуации</p> <p>9. Балансовая схема образования суммарных выбросов</p>

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Креницына Зоя Васильевна
Социальная ответственность	Король Ирина Степановна
Раздел на иностранном языке	

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках: Литературный обзор

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	10.02.2018
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
М. н. с.	Чешкова Татьяна Викторовна	к.х.н., с.н.с.		
Доцент ИШХБМТ	Кукурина Ольга Сергеевна	к.х.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Арышева Анастасия Дмитриевна		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 106 с., 16 рис., 35 табл., 54 источника, 1 прил.

Ключевые слова: нефть, смолисто-асфальтеновые компоненты, химическая деструкция, десульфуризация, эфирные и сульфидные мостики,

Объектами исследования является мазут тяжелой нефти Усинского месторождения.

Целью работы являлось исследование структурно-групповых характеристик смол и асфальтенов выделенных из мазута тяжелой нефти Усинского месторождения

В процессе исследования проводились реакции деструкции эфирных и сульфидных мостиков и десульфуризация в смолисто-асфальтеновых компонентах.

В результате исследования получили данные о фрагментах смол и асфальтенов, в процессе их термической обработки.

Область применения: нефтехимия

Экономическая эффективность/значимость работы: выбран наиболее эффективный вариант решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

ГХ-МС	-	газовая хромато-масс-спектрометрия
ИК	-	инфракрасная спектроскопия
УВ	-	Углеводороды
АУ	-	ароматические углеводороды
ГАС	-	гетероатомные соединения
САВ	-	смолисто-асфальтеновые вещества
ВМГС	-	высокомолекулярные гетероорганические соединения
N	-	Азот
S	-	сера
O	-	Кислород
H	-	Водород
НДС	-	нефтяные дисперсные системы
ТГФ	-	Тетрагидрофуран
МУН	-	Мазут нефти Усинского месторождения

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	9
ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР	11
1.1 Классификация тяжелой нефти	11
1.1.1 Транспортировка и добыча тяжелых нефтей	13
1.2 Общие сведения о мазуте	13
1.2.1 Свойства мазута.....	14
1.2.2 Применение мазутов	15
1.3 Переработка тяжелых нефтяных остатков	15
1.4 Мазут на рынке и экспорт из России.	19
1.5 Состав и структура смолисто-асфальтеновых веществ мазута нефти Усинского месторождения	19
1.6 Гетерокомпоненты в составе нефтяных ВМГС	25
1.7 Химическая деструкция смол и асфальтенов.....	27
1.8 Методы определения функциональных групп в составе смолисто- асфальтеновых компонентов нефтей	28
ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	32
2.1 Объекты исследования	32
2.2 Методы исследования.....	33
ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.....	35
5.1. Предпроектный анализ	35
5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования	35
5.1.2 FAST-анализ	35
5.1.3. Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	38
5.1.4 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования.....	39
5.2 Инициация проекта	40
5.2.1 Цели и результат проекта.....	40
5.2.2. Организационная структура проекта	41
5.2.3. Ограничения и допущения проекта.	42

5.2.4 План проекта.....	42
5.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	44
5.3.1 Расчет материальных затрат НТИ	44
5.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для экспериментальных работ	45
* -амортизация	46
5.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы.....	46
5.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	47
5.3.5 Накладные расходы.....	47
5.4 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	50
5.5 Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	51

ВВЕДЕНИЕ

На данный момент в мире, остро встает вопрос о истощении запасов легких нефтей. Поэтому вопрос об увеличении глубины переработки и вовлечение в производство нетрадиционного сырья становится всё более актуальным [1].

Вопрос о увеличении на действующих нефтеперерабатывающих заводах выход легких фракций можно решить путём создания вторичных процессов переработки тяжелых нефтяных остатков, а так же разработки новых способов крекинга остаточных фракций. Получение «синтетической нефти» из водорододефицитного сырья (мазута, тяжёлых нефтей, природных битумов, асфальтитов) позволило бы использовать это сырьё без существенной модернизации действующих нефтеперерабатывающих заводов. [1]

Одним из способов переработки мазута и тяжелых нефтей является процесс инициированного крекинга, и может быть использован для получения дистиллятных фракций. Метод заключается во внесении в них активирующей добавки на основе оксида меди с последующим термокрекингом при температуре 400-450°C, при этом активирующую добавку вносят в количестве 10-15 мас.%. На сегодняшний день в качестве инициирующей добавки помимо оксида меди используют оксид железа и железоксидные минералы в процессе термической переработки тяжелого углеводородного сырья, что увеличивает выход светлых нефтепродуктов. [2]

Причина по которой переработка тяжелого нефтяного сырья затрудняется является высокое содержание (суммарно до 45 мас. %) смол и асфальтенов. В их молекулах концентрируется большая часть металлов и гетероатомов, присутствующих в исходном сырье [3, 4]. Соединения имеют высокую молекулярную массу, склонны к «уплотнению» и образованию кокса при переработке, дезактивируют катализаторы, что усложняет переработку тяжелого сырья. Показано [5], что уже при температурах 160–200 °С начинаются процессы преобразования структур смол и асфальтенов, что создаёт трудности даже на первичных стадиях переработки тяжёлых нефтей с высоким содержанием смол и асфальтенов.

Недостаточная изученность смолисто-асфальтеновых компонентов тяжелых нефтей различного типа затрудняет дальнейший поиск способов ее глубокой переработки. Целью работы являлось исследование структурных фрагментов смол и асфальтенов, связанных через сульфидные и эфирные связи исходного мазута тяжелой нефти и продуктов его термического превращения. Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие *задачи*:

4. Провести термолиз мазута в автоклаве при температуре 450 С без и в присутствии феросфер .
5. Провести деструкцию сульфидных и эфирных связей в молекулах смол и асфальтенов выделенных из исходного мазута и продуктов его термолиза с использованием селективных химических реагентов (борида никеля и трибромида бора)
6. Изучить состав продуктов хемолиза смолисто-асфальтеновых компонентов с использованием современными физико-химическими методами исследования (ИКС, ХМС).

ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Классификация тяжелой нефти

Тяжелая нефть – это высоковязкая нефть, обладающая повышенной плотностью, которая вследствие своих физических свойств не может быть извлечена на поверхность традиционными способами.

Существует следующая мировая классификация нефти по плотности:

Таблица 1 – Мировая классификация нефти по плотности

Название	Плотность	Градусы АРІ
Суперлегкая (super light)	до 0,780 г/см ³	свыше 50
Сверхлегкая (extra light)	0,781 - 0,820 г/см ³	41,1 - 50,0
Легкая (light)	0,821 - 0,870 г/см ³	31,1 - 41,0
Средняя (medium)	0,871 - 0,920 г/см ³	22,3 - 31,0
Тяжелая (heavy)	0,921 - 1,000 г/см ³	10,0 - 22,2
Сверхтяжелая (extra heavy)	свыше 1,000 г/см ³ (вязкость менее 10 000 мПа·с)	до 10
Природный битум	свыше 1,000 г/см ³ (вязкость	до 10

(natural bitumen)	более 10 000 мПа·с)	
--------------------------	---------------------	--

Однако говоря о тяжелой нефти, обычно подразумевают также и сверхтяжелую нефть и природные битумы, т.е. нефти с плотностью более 0,920 г/см³. В тяжелых нефтях, а особенно в природных битумах, в значительно большем количестве, чем в легких нефтях, присутствуют смолисто-асфальтеновые вещества, азот-, хлор-, кислород- и серосодержащие соединения, а также металлы [8].

Наибольшее скопления запасов тяжелой нефти находится на границах геологических бассейнов. Считается, что такая нефть является остатком более легкой нефти, которая утратила низкомолекулярные компоненты вследствие разрушения бактериями, вымывания водой и испарения. По оценкам, запасы тяжелой нефти на нашей планете более, чем в два раза превосходят традиционные. Однако коэффициент извлечения нефти для таких месторождений колеблется в пределах от 5 до 30%. По данным Института Мировых Ресурсов, значительные залежи тяжелой нефти и нефтяных песков приходятся на территорию Канады и Венесуэлы [9].

Естественно, что добыча, транспортировка и переработка тяжелых нефтей представляет собой серьезную проблему. В частности, для уменьшения давления и требуемой мощности для прокачки высоковязкой нефти по нефтепроводу, ее необходимо либо разбавлять, либо нагревать. Обычно в качестве разбавителя выступает нефтяной конденсат.

Трудность извлечения, транспортировки, а также повышенные затраты на переработку и очистку сырья и получаемых нефтепродуктов от высокого содержания сернистых соединений, приводит заметному удешевлению тяжелых нефтей на рынке. Тем не менее, добыча таких нефтей в некоторых регионах становится все более актуальна, а методам повышения нефтеотдачи трудно-извлекаемых запасов уделяется большое внимание [2,8].

1.1.1 Транспортировка и добыча тяжелых нефтей

В настоящее время процессы комплексной переработки тяжелых нефтей и природных битумов либо отсутствуют, либо достаточно дорогие. Современными методами добычи получается добыть лишь малую часть тяжелой нефти [2]. При добычи высоковязких нефтей плотность которой составляет $0,9340 \text{ г/см}^3$ самыми результативными являются тепловые методы. Большинство проектов теплового воздействия на пласт с помощью пара реализуется за рубежом на месторождениях с плотностью нефти от 10 оAPI ($1,000 \text{ г/см}^3$) до 20 – 18 оAPI ($0,9340 - 0,9465 \text{ г/см}^3$) и редко успешный результат достигается при плотности нефти свыше 10 оAPI ($1,000 \text{ г/см}^3$) [28]. Для интенсификации добычи высоковязких тяжелых нефтей используют вторичные и третичные методы: гидроразрыв пласта, вибрационное воздействие, кислотные и паротепловые обработки, внутрислоевого горения и др. [16 - 18]. Главная проблема при добыче и транспорте тяжелых нефтей, заключена в их составе: тяжелые нефти содержат значительные количества высокомолекулярных гетероатомных соединений – смол и асфальтенов (по сравнению с легкими нефтями и нефтями средней плотности), которые осложняют процессы добычи и транспортировки нефти из-за образования так называемых асфальтено-смоло-парафиновых отложений (АСПО), «закупоривающих» трубопроводные системы [21,24,25]. Единого мнения о механизме образования АСПО у исследователей нет, так как, по-видимому, он может быть разным в зависимости от конкретных условий добычи нефтей, инициаторами образования АСПО могут быть как наноагрегаты асфальтенов, так и парафины [73].

1.2 Общие сведения о мазуте

Мазут это смесь углеводородов, нефтяных смол, асфальтенов, карбонов, карбоидов и органических соединений. От степени отгона дистиллятных фракций и химического состава исходной нефти зависят свойства мазута.

Очень часто мазуты применяют для котельных установок, промышленных печей и паровых котлов в качестве топлива. В расчете на исходную нефть выход мазута может достигать до 50% по массе. Так как возникает проблема добычи легких нефтей, тяжелые нефтяные остатки, такие как мазут подвергают дальнейшей переработки, с целью увеличения выхода более легких продуктов, отгоняя под вакуумом дистилляты, выкипающие в пределах 350-420, 350-460, 350-500 и 420-500°С. Сырьем для получения моторных топлив и дистиллятных смазочных масел служат вакуумные дистилляты. Остаток вакуумной перегонки мазута используют для переработки на установках термического крекинга и коксования, в производстве остаточных смазочных масел и гудрона, затем перерабатываемого на битум [6].

С помощью дополнительной перегонки из мазута получают смазочные масла, которые используются для смазки различных механизмов. Чтобы снизить температуру кипения углеводородов, давление при перегонке уменьшаем. Для того чтобы избежать разложение углеводородов при нагревании. Конечным продуктом перегонки мазута является гудрон. Гудрон – это нелетучая темная масса, которая в основном используется в асфальтирование дорогий [6].

1.2.1 Свойства мазута

Химический состав мазутов: углерод, водород, кислород, азот, сера и зола. В составе вязких мазутов – до 88,5% углерода, до 11,55% водорода, а также повышенный процент серы и азота. В составе маловязких мазутов для углерода меньше, что снижает такие параметры, как вязкость и плотность.

Мазуты имеют следующие свойства:

- вязкость 8-80 мм/с (при 100 градусах)
- плотность 0,89-1 г/м³ (при 20 градусах)
- температура застывания 10-40 градусов
- содержание серы 0,5-3,5%
- содержание золы до 0,3%

-наименьшая теплота сгорания 39,4-40,7 МДж/моль

1.2.2 Применение мазутов

Основные потребители мазута – морской и речной флот, сфера ЖКХ, промышленность.

Сфера применения мазутов:

- как топливо для паровых котлов, всевозможных котельных установок и промышленных печей.
- как сырье для производства флотского мазута, тяжелого моторного топлива и бункерного топлива.
- как сырье для производства моторных масел, кокса, битумов, смазочных масел [7].

Выход мазута по массе – около 50% от исходной нефти. Поскольку нефть нуждается во все большей глубине переработки, остаток ее в виде мазута также перерабатывают как можно полнее путем отгонки под вакуум дистиллятов, выкипающих в пределах 350-500 градусов. Из таких вакуумных дистиллятов получают моторные топлива, а их остатки используют для получения остаточных смазочных масел и гудрона, который далее перерабатывается на битум.

1.3 Переработка тяжелых нефтяных остатков

Известно, что на данный момент в России тяжелые нефтяные остатки, перерабатываются путем смешения с более легкими нефтями (до 20%), а далее перерабатываются по стандартным схемам НПЗ с вторичными процессами или без них [6, 22]. При переработки нефти получают около 30% тяжелых нефтяных остатков, таких как мазут, смолистый экстракт, нефтяной пек, крекинг-остаток, гудрон, полугудрон [26]. Но в связи с тем, что количество поступающих тяжелых нефтей в последнее время значительно увеличилось, доля нефтяных остатков возрастает. Условно существует 4

группы способов переработки тяжелых нефтяных остатков: процессы с добавлением водорода (гидрокрекинг), с удалением углерода (коксование), с использованием активных добавок (инициированный термокрекинг) и процессы нетрадиционного воздействия на нефтяное сырье (озонолиз, механообработка, обработка пучком высокоэнергетических электронов и т.д.). В современной промышленности при переработке нефтяных остатков в основном используются такие как: висбрекинг, флюидкокинг (термоконтактный крекинг), замедленное коксование, коксование в псевдооживленном слое и флексикокинг (термоконтактный крекинг в сочетании с последующей газификацией кокса). Для того чтобы решить проблему углубленной переработки тяжелых нефтяных остатков применяют такие процессы как каталитический крекинг, гидрокрекинг, гидрообессеривание, замедленное коксование, термоконтактное коксование, флексикокинга [22, 25]. Но в связи с тем что тяжелые нефтяные остатки содержат большое количество смол и асфальтенов. А так же сернистых соединений. Это прилично осложняет процесс атмосферно-вакуумной перегонки, в результате чего увеличивается коррозия оборудования и происходит термодеструкция высокомолекулярных соединений (смол и асфальтенов) нефти. Вследствие этого необходимо проводить процессы десальтизации и обезвоживания на первых этапах переработки. В результате этого значительная часть высокомолекулярных и сернистых соединений переходит в асфальтено-смолистый концентрат (АСК). Далее АСК используется в производстве битумов, лаков, мягчителей и др. А в это время деасфальтенизат направляется на атмосферно-вакуумную перегонку для последующего выделения из него дизельной, бензиновой и масляной фракций. Тяжелые нефтяные остатки после атмосферно- вакуумной разгонки приносят малое количество светлых продуктов, всего лишь 10 – 20 % от общего количества. Вследствие этого приходится использовать процессы вторичной переработки, которые являются достаточно дорогими. [15].

Поэтому [18] предлагается несколько вариантов технологий, рассмотрим одну из вариантов технологии переработки тяжелого нефтяного сырья. В начале проводят озонирование над продуктом, затем под воздействием частиц высокой энергии совершают разложение озонидов, которые образовались. В итоге молекула озона примыкает к молекулам смол и асфальтенов и это приводит к образованию продуктов с меньшей молекулярной массой, а также способствует последующее разложение озонидов. Если эти продукты подвергнуть фракционированию, то можно получить небольшое количество светлых нефтепродуктов. Применения модифицированных промышленных ускорителей электронов высокой мощности для переработки тяжелых нефтяных остатков является хорошим выходом из положения. Другой способ переработки нефтяных остатков является введение механоактивированного гематита и обработка перегретым водяным паром, это позволяет остаток от дистилляции нефти преобразовать в газообразные продукты и дистиллятные фракции около 50%, при условии что давление 0,2 МПа и температура 480 °С [18]. Также предложен способ переработки тяжелого нефтяного сырья методом инициированного термического крекинга его мазута на примере тяжелой монгольской нефти. Магнитные фракции ферросфер энергетических зол ТЭЦ обычно используют в качестве активирующих добавок в инициированном крекинге. Предполагается, что при введении в реакцию ферросфер в количестве от 2 до 20% мас., существенно снижается количество смол и асфальтенов, а также парафинов. Но существенно увеличивается выход дистиллятных фракций, он возрастает с 24,5 до 64,0 %. [13]. Так же рассмотрим новый процесс радиационно-термического крекинга тяжелого углеводородного сырья, который позволяет получить до 80% бензиновых и дизельных фракций, а также базовых масел, с качественными показателями соответствующими эксплуатационным свойствам промышленных масел. Положительным побочным эффектом является то, что в процессе радиационно-термического

крекинга отмечается обессеривание продуктов. По получению светлых нефтепродуктов из тяжелого углеводородного сырья за рубежом существует пару промышленных установок - одна из них спроектирована фирмой «Петровен», другая - компанией «Юнион Ойл». Пройдя гидроочистку в количестве от 10 – 15 % , но не больше ,так как испортиться качество топлива. Продукты перемешивают с обычной нефтью и далее уже идут на переработку и получают масла и моторные топлива [22]. Нефть обезвоживается, обессоливается и добавляется бензиновая фракция с блока АТ, это происходит на первом этапе. Затем на блоке АТ отгоняются бензиновая фракция и дизельное топливо. Вторая ступень происходит на блоке ВТ отгоняется фракция при температуре 350 – 450 °С, из которой получают либо масло с ИВ = 100, либо бензин, дизельное топливо, газ и компонент котельного топлива. Остаток выше 450 °С на третьей ступени окисляется и выходит битум и битумный лак. В городе Паскагуль (США) тяжелые нефтяные остатки, исключая стадию образования «синтетической нефти», перерабатывается непосредственно в моторные топлива на комбинированной установке [22]. Так же существует абсолютно новый и эффективный процесс переработки. Это процесс гидрогенизационной подготовки тяжелого нефтяного сырья с использованием наноразмерных катализаторов. В последующем возможна переработка вакуумного дистиллята по технологиям каталитического крекинга и гидрокрекинга. За счет разрушения смолисто-асфальтеновых компонентов ,значительно возрастает выход дистиллятных фракций. В связи с выше сказанным можно сделать вывод о том, что тяжелые нефтяные остатки перерабатывать более результативно и эффективно необходимо иметь знания о структуре , основных свойствах и превращениях его основных компонентов – смол и асфальтенов. [1, 2, 9].

1.4 Мазут на рынке и экспорт из России.

В 2012 – 2017 годы потребление мазута на российском рынке – примерно 11 миллион тонн в год. Мировые цены на мазут превышали внутренние более чем в 1,5 раза, поэтому экспорт мазута вырос на 13,9%. Так, средняя цена мазута в России в 2012 году была \$355,8 за тонну, что ниже средней мировой цены на 77,4%. В 2009 году доля мазута в структуре экспорта нефтепродуктов из России составляла 53%, в 2010 году – 55%, а в 2011 году Россия отгрузила на экспорт 53 миллиона тонн мазута.

1.5 Состав и структура смолисто-асфальтеновых веществ мазута нефти Усинского месторождения

В тяжелой части нефти содержатся *смолисто-асфальтеновые вещества*. Это сложная смесь наиболее высокомолекулярных соединений, представляющих собой гетероорганические соединения со сложной гибридной структурой, включающей серу, кислород, азот и некоторые другие металлы. Наиболее богаты смолисто-асфальтеновыми веществами молодые нефти с высоким содержанием ароматических соединений [12].

Молекулярную структуру смолисто – асфальтеновых веществ очень сложно изучить и рассмотреть, поэтому до сегодняшнего времени не установлена . Современные методы исследования такие как электронная микроскопия, n-d-M-метод, рентгеноструктурная, ЭПР- и ЯМР-спектроскопия, и т.д.) и некоторые знания дают нам лишь представления о структуре и о количестве конденсированных нафтено-ароматических циклов, а также других характеристиках и построить среднестатистические теоретические модели гипотетических молекул смол и асфальтенов. В практике исследования состава и строения нефтяных, угле- и коксохимических остатков широко используется сольвентный способ Ричардсона, основанный на различной растворимости групповых

компонентов в органических растворителях (слабых, средних и сильных). По этому признаку различают следующие условные групповые компоненты:

- 1) растворимые в слабых растворителях таких как изооктане, петролейном эфире — это масла и смолы (*мальтены*). Смолы извлекают из мальтенов адсорбционной хроматографией (на силикагеле или оксиде алюминия);
- 2) нерастворимые в низкомолекулярных алканах C_5-C_8 , но растворимые в бензоле, толуоле, четырёххлористом углероде — *асфальтены*;
- 3) нерастворимые в бензине, толуоле и четырёххлористом углероде, но растворимые в сероуглероде и хинолине — *карбены*;
- 4) нерастворимые ни в каких растворителях — *карбоиды*.

Смолы — это очень вязкие жидкости или аморфные твердые тела от тёмно-коричневого до темно-бурого цвета с плотностью около единицы или несколько больше. Они представляют собой плоскоконденсированные системы, содержащие пять-шесть колец ароматического, нафтенового и гетероциклического строения, соединенные посредством алифатических структур.

Асфальтены — это аморфные, но кристаллоподобной структуры твёрдые тела тёмно-бурого или черного цвета с плотностью несколько больше единицы. Если их нагреть они не плавятся, а переходят в пластическое состояние при температуре около $300\text{ }^{\circ}\text{C}$, а при более высокой температуре разлагаются с образованием газообразных и жидких веществ и твердого остатка — *кокса*. Асфальтены в отличие от смол образуют пространственные, в большей степени конденсированные кристаллоподобные структуры. Наиболее существенные отличия смол и асфальтенов проявляются по таким основным показателям, как растворимость в низкомолекулярных алканах, отношение C:H, молекулярная масса, концентрация парамагнитных центров и степень ароматичности.

Смолы образуют истинные растворы в маслах и топливных дистиллятах. Отличительной особенностью их является полициклическая

конденсированная система из 4-5 колец, 1-3 метильных групп и одного длинного алкильного (C_3-C_{12}) заместителя. Эти молекулы могут состоять из одного или нескольких фрагментов. Характерным отличием смол является обязательное наличие гетероатомов в молекуле. Содержание серы в смолах, выделенных из нефтей различных месторождений, колеблется от сотых долей до 9%, относительное содержание азота 52-63 %. Так как атомы серы и азота в смолах входят обязательно в циклическую ароматическую структурную единицу типа тиофена, пиррола или пиридина, то часть ароматических циклов будут гетероароматическими. Молекулы смол преимущественно бифрагментарны, причём каждый фрагмент содержит два конденсированных ароматических (гетероароматических) кольца. В смолисто-асфальтеновых веществах кислород (1-5 %) входит в состав функциональных групп: карбоксильной, фенольной, спиртовой, сложноэфирной и карбонильной. На основании детального исследования состава и свойств нейтральных смол, Сергиенко предложена следующая модельная структурная формула [13] :

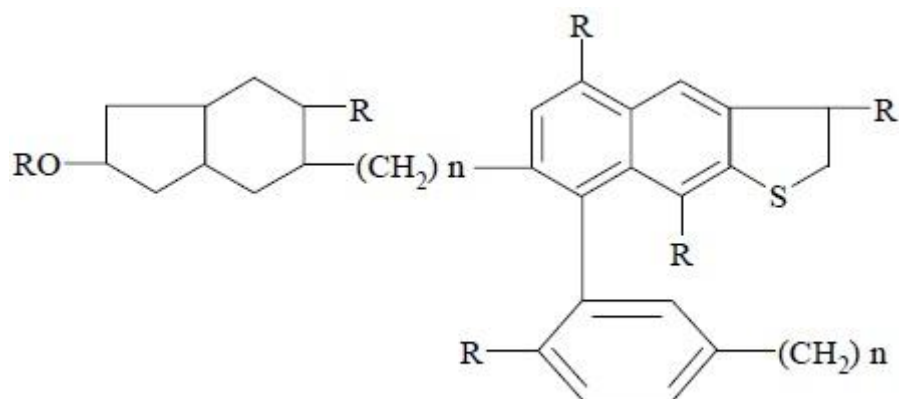


Рисунок 1 – Модельная структура смол по Сергиенко

Асфальтены в тяжёлых нефтяных остатках находятся в коллоидном состоянии. Благодаря межмолекулярным взаимодействиям, асфальтены могут образовывать ассоциаты – надмолекулярные структуры. По своему химическому строению асфальтены — это полициклические, сильно конденсированные, ароматические системы, связанные с пяти- и

шестичленными гетероциклами. Они резко отличаются от остальных компонентов тем, что их фрагменты имеют три ароматических кольца, а молекулы состоят из 4-5 фрагментов. Благодаря трём конденсированным ароматическим кольцам, структурные фрагменты асфальтенов имеют практически плоское пространственное строение. По-видимому, за счёт π -электронных облаков и полярных групп фрагменты асфальтенов собираются в пачки параллельно расположенных плоскостей. Рентгенструктурным анализом были обнаружены образования, состоящие из 4-5 параллельных слоёв, не упорядоченных относительно оси, перпендикулярной к этим плоскостям [15]:

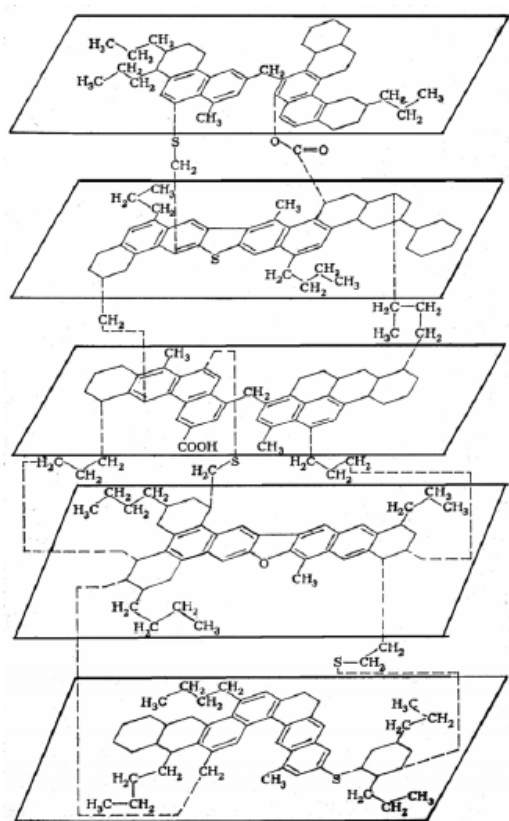


Рисунок 2 – Гипотетические модели асфальтеновых молекул по Залке

Смолы и асфальтены являются сложными компонентами системы, и до сих пор нет однозначного мнения об их строении. Десятилетиями оставался спорным вопрос о молекулярной массе асфальтенов и смол. Модель асфальтеновой молекулы, в которой единственное ядро, представляющее

собой плоскую систему конденсированных ароматических колец, окружено «коронай» боковых алифатических цепочек, получила название «континентальной». На рис. 1 представлены модели молекул асфальтенов типа «континенталь».

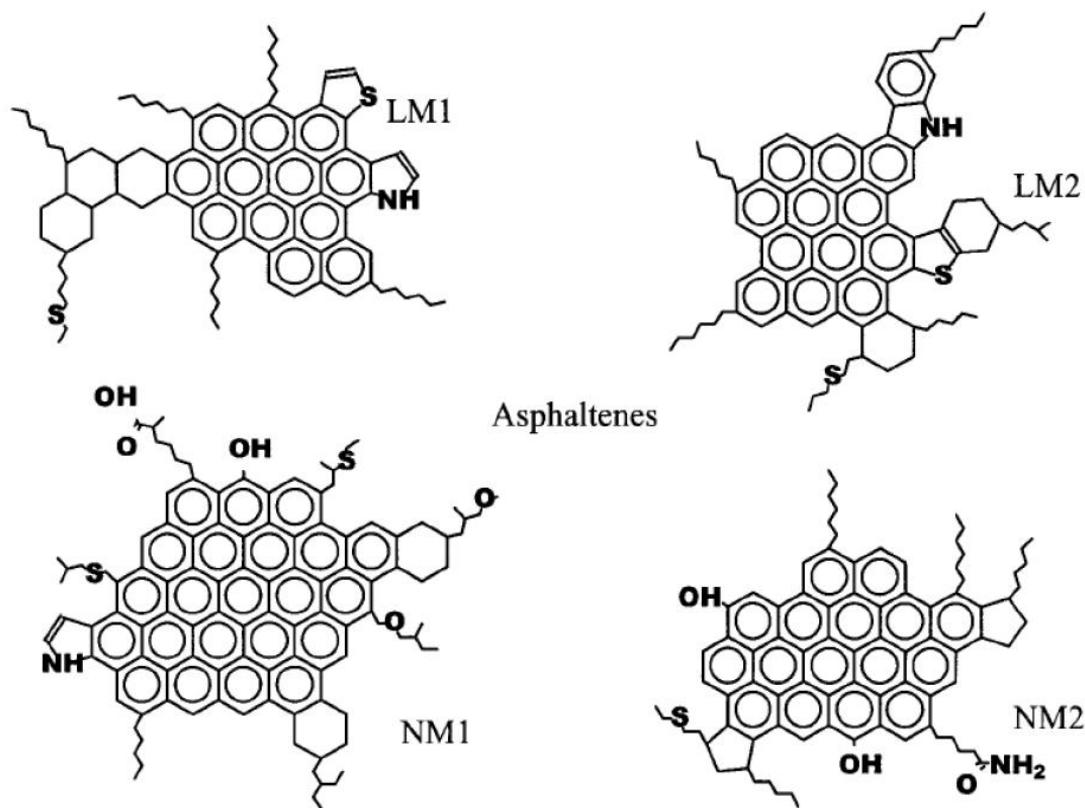


Рисунок 3 – Модели молекул асфальтенов типа «континенталь»

Среди молекул «континентального» типа, в зависимости от доли ароматического ядра в них, выделяют молекулы «пропагаторы» и «терминаторы». «Пропагаторы» - это молекулы с большим конденсированным ароматическим ядром и бедным алкильным окружением, характеризующиеся пониженным отношением водород/углерод (H/C), повышенным фактором ароматичности и высокой склонностью к агрегированию. «Терминаторы» - с небольшим ароматическим ядром и богатым алкильным окружением, которые, в свою очередь, характеризуются повышенным H/C , пониженным фактором ароматичности и низкой склонностью к формированию агрегатов.

Однако, «континентальная» модель в последнее время подвергается критике, и все большее число исследователей начинают считать, что наиболее адекватными моделями асфальтеновых молекул могут быть макромолекулярные структуры типа «архипелаг», согласно этой асфальтеновая молекула состоит из небольших ароматических кластеров, соединенных между собой алифатическими $-(CH_2)_n-$, сульфидными $-S-$, сложноэфирными $-C(O)-O$ и эфирными $-O-$ мостиками. На рисунке 2 представлены модели молекул типа «архипелаг».

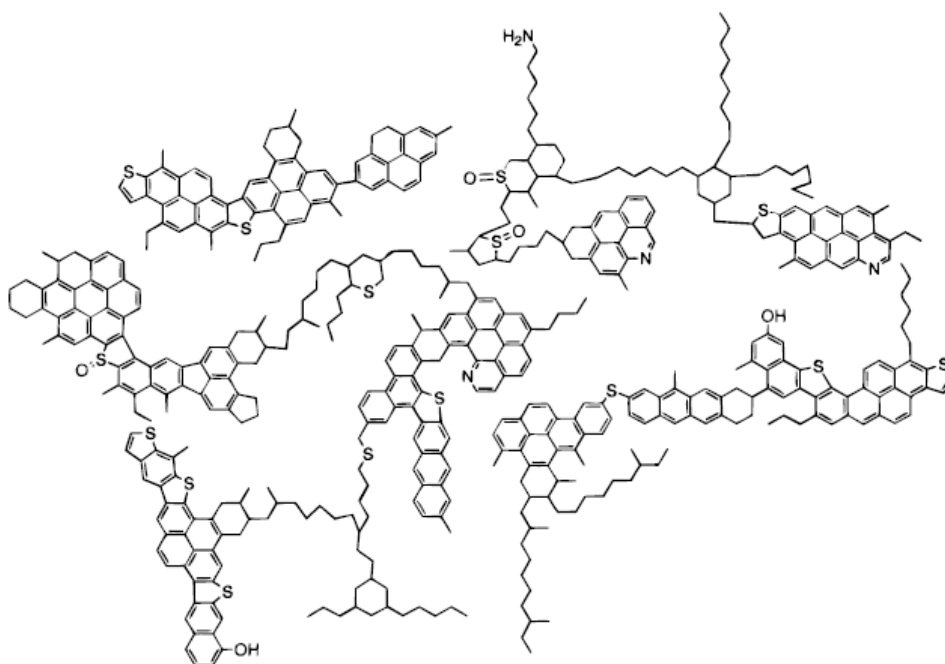


Рисунок 4 – Модель молекул асфальтенов типа «архипелаг»

Периферийные функции, обусловленные замещениями водорода в ядрах и боковых цепях, могут быть представлены неразветвленными и разветвленными алифатическими цепями, гидроксильными $-OH$, карбоксильными $-C(O)-OH$ и т.д. группами. Впервые подобная структура асфальтеновой молекулы была выявлена в битуме Атабаски. Рядом авторов показано, что асфальтены из других источников имеют схожее распределение боковых и мостиковых цепочек между ароматическими областями и/или насыщенными кольцами.

Асфальтены типа «архипелаг», в зависимости от количества активных центров (функциональных групп) в них, также делятся на молекулы-

пропагаторы (много активных центров) и молекулы-терминаторы (единичные активные центры), которые, соответственно, склонны и не склонны к ассоциации.

Комплексное исследование асфальтенов и их отдельных фракций с различной растворимостью позволило доказать существование в асфальтенах молекулярных структур обоих типов – «континент» и «архипелаг». Ряд авторов, используя различные соотношения в двойном растворителе (толуол/н-гептан, толуол/н-пентан, метилхлорид/н-пентан, ацетон/н-гептан), а также путем образования комплекса асфальтенов с паранитрофенолом, разделили асфальтены на фракции. Фракцию, выпадающую из асфальтенового раствора при добавлении двойного растворителя с минимальным содержанием н-алкана, или выпадающую в осадок при добавлении паранитрофенола, в разных работах называли тяжелой, нерастворимой, полярной [23].

1.6 Гетерокомпоненты в составе нефтяных ВМГС

Кислород, азот и сера, являются частью гетероатомов которая является частью смолисто-асфальтенового углеводородного сырья [37]. Смолисто-асфальтеновые компоненты на 60% состоят в основном из серы [36, 37]. Изучение состава и структуры гетероатомов является главной целью для переработки тяжелых нефтяных остатков [1]. Наличие серы и кислорода в смолисто-асфальтеновых веществах значительно превышает содержание азота. Между серой и азотом есть определенная зависимость она гласит: чем выше количество серы, тем больше азота. В составе смол и асфальтенов могут присутствовать пиррольные, пиридиновые, пиперидиновые кольца, в амидной или аминной форме, считается, что в циклических структурах конденсированной ароматической части атомы азота содержатся в основном в ароматической части молекул ВМГС, при термолизе большая часть азота переходит в кокс [15, 21, 22]. Азот в виде порфирино подобных структур

входит в состав комплексов с металлами и конденсированными циклическими соединениями. Содержание кислорода в САВ почти всегда больше содержания серы. Поверхностную активность смолисто-асфальтовых веществ определяют кислородсодержащие группы. В состав эфирных и сложноэфирных, гидроксильных, карбоксильных, карбонильных, сульфоксидных, функциональных групп, а также насыщенных и ароматических циклических структур входят атомы кислорода. При выделении асфальтенов из неокисленных битумов и нефтей, основная часть кислорода содержится в карбонильных группах, а при окислении битумов и нефтей – наибольшее содержание приходится на сложноэфирные группы [15].

Определенная зависимость присутствует между сопоставлением содержания серы в асфальтенах и нефтях, а также между содержанием серы и ванадия в смолах и асфальтенах и количеством смолисто-асфальтовых веществ. В смолах и асфальтенах сера может присутствовать в следующих состояниях: в составе тиофенового кольца (ароматический), в насыщенном фрагменте – алифатической цепи (алкилсульфидный) и нафтеновом кольце (тиациклановый), а также может содержаться в небольших количествах в тиольных, сульфоксидных, сульфоновых, ди- (поли-) сульфидных и арилсульфидных формах [15].

Сераорганические соединения в качестве сульфидного соединения нециклического строения (тиоэфиры, меркаптаны, дисульфиды), содержатся в легких и среднестиллятных фракциях нефти, серосодержащие гетероциклические соединения с одним, двумя, тремя и более циклами (преобладают бенз- и дибензиофены) чаще входят в состав высококипящих и остаточных фракций нефти. Преобладание серы в гетероциклической структуре, обуславливается ее генетической тенденцией и увеличением цикличности и конденсированностью в смолистой фракции [4, 22].

Унифицирование и количественная оценка содержания сульфидных групп в молекулах ВМГС нефти, определение вероятных структурных фрагментов, которые соединяются через сульфидные связи друг с другом или

с ГПЦНА ядрами смол или асфальтенов, можно осуществить при помощи десульфуризации (расщепление сульфидных групп) асфальтенов и смол, как на бориде Ni_2B , так и на $NaBH_4$ (или $NaBD_4$) [24]. Снижение термической стабильности смол и асфальтенов, обусловлено связью углерод-сера, в частом случае, в мостиковых алифатических группах. При термоллизе асфальтенов и смол при разных температурах, которые соответствуют температуре распада серосодержащих структур и последующем анализе масел, которые образуются в ходе термоллиза масс-спектрометрическим методом, существует возможность обнаружить сераорганические соединения, которые являются структурными фрагментами молекул смол и асфальтенов, и возможность оценки их количественного содержания.

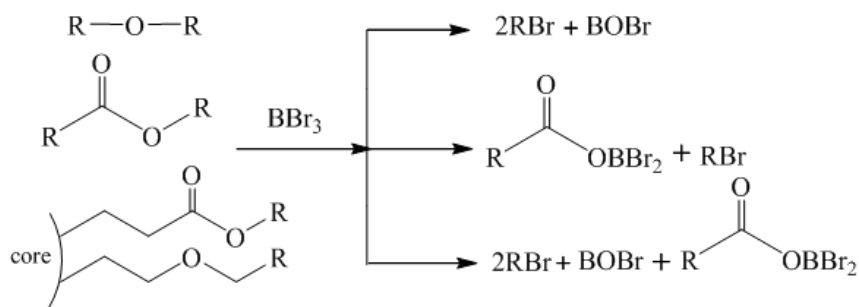
1.7 Химическая деструкция смол и асфальтенов

Вопрос о химическом составе и структуре высокомолекулярных соединений нефти (смолы и асфальтены) остается спорным и нерешенным. На сегодняшний день самым распространенным методом изучения строения смол и асфальтенов относится их термическая деструкция в широком температурном интервале с детальным анализом получаемых продуктов. Недостатком предлагаемого подхода является образование продуктов вторичных реакций, что делает неоднозначной информацию о нативной структуре исследуемых компонентов. Так продуктами вторичных реакций могут быть фрагменты макромолекул асфальтенов, представленные конденсированными ароматическими углеводородами, их фенилпроизводными и дибензотиофенами [13].

В последнее время, все больше распространение получают методы, направленные на мягкую селективную деструкцию САВ и анализ получаемых продуктов, позволяющие установить детали строения «блоков», из которых состоят макромолекулы смол и асфальтенов [14]. Один из таких методов – химическая деструкция.

На основании исследования продуктов селективной химической деструкции могут быть получены данные о наличии и качественном составе алифатических $-(CH_2)_n-$, сульфидных-S-, сложноэфирных $-C(O)-O$ и эфирных $-O-$ связей в структуре смол и асфальтенов.

Для разрыва простых и сложноэфирных связей в молекулах смол и асфальтенов химическим путем используют как щелочной гидролиз, так и реакции с BBr_3 , протекающие по следующей схеме:



R-алкил

1.8 Методы определения функциональных групп в составе смолисто-асфальтеновых компонентов нефтей

Методами, позволяющими определить те или иные функциональные группы в составе молекул САВ мазута и получить дополнительную информацию об особенностях их структуры, являются метод щелочного гидролиза (с $NaOH$), метод RICO (*Ruthenium-ion catalyzed oxidation*) - селективное окисление асфальтенов катализируемое ионами рутения, и реакции с бромидом бора для определения эфирных и сложноэфирных связей [6, 7]; десульфуризация на бориде никеля, $NaNH_4$ или $NaBD_4$ [8]; мягкое каталитическое гидрирование смол и асфальтенов [9,10]; термолиз в сочетании с ГХ-МС образующихся продуктов реакции [11, 12, 13, 14, 15]; а также неразрушающие рентгеновские спектроскопические методы [16, 17, 18, 19 - 28].

Метод щелочного гидролиза и реакции с BBr_3 позволяют установить

наличие простых эфирных и сложноэфирных связей в молекулах ВМГС нефти. Рентгеновскими спектроскопическими методами можно определить и количественно оценить функциональные группы, в которые входят атомы азота или серы. В процессе каталитического гидрирования растворов смол и асфальтенов под давлением при сравнительно небольших температурах идет реакция гидрогенолиза связей углерод-гетероатом, не затрагивая связи углерод-углерод углеродного скелета молекул смол и асфальтенов. В данном процессе образуются гидрогенизаты, практически не содержащие гетероатомов и с не очень снизившимися молекулярными массами, что свидетельствует о том, что большая часть гетероатомов входит в циклические структурные фрагменты молекул асфальтенов и смол, а не в алифатические мостики. Следовательно, атомы серы располагаются преимущественно в циклических структурных фрагментах смол и асфальтенов, а не в алкилсульфидных фрагментах и мостиковых связях. Метод RICO позволяет определить длину алкильных мостиковых связей в молекулах САВ нефти. Термолиз в сочетании с ГХ-МС (особенно в проточном непрерывном режиме) может дать наиболее полную информацию о соединениях, которые, вероятнее всего, будут являться структурными фрагментами молекул САВ нефти.

Для идентификации и оценки функционального типа сернистых структур, входящих во фрагменты молекул асфальтенов и смол в настоящее время существуют три типа методов. Химическая деструкция (восстановление, окисление), неразрушающий рентгеновский спектроскопический анализ, и различные варианты термической деструкции (термолиз, флэш-пиролиз и др.) с отбором жидких и газообразных продуктов и последующим их анализом методами газовой хроматографии и масс-спектрометрии.

Для оценки типов серусодержащих фрагментов молекул смол и асфальтенов в последнее время также используется метод ионно-

циклотронно-резонансной масс-спектрометрии с Фурье-преобразованием и ионизацией в «электроспрее» (поток электронов в форме спрея) - *ESI-FT-ICR-MS* (*Electrospray Ionization Fourier Transform Ion Cyclotron Resonance Mass Spectrometry*)

Такие методы как рентгеновская адсорбция (*extended x-ray absorption fine structure spectroscopy – EXAFS; x-ray absorption near-edge structure spectroscopy XANES, xray photoelectron spectroscopy - XPS*), основанные на обработке ближней или дальней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения, а также на измерении энергетических спектров электронов, вылетающих при воздействии на твердое тело монохроматическим рентгеновским излучением [29 - 31], позволяют проанализировать практически все функциональные типы сернистых структур в составе асфальтенов и смол, используя для идентификации и количественной оценки модельные сероорганические соединения.

Десульфуризация (расщепление сульфидных групп) асфальтенов и смол как на бориде никеля Ni_2B , так и на тетраборате натрия NaBH_4 (или NaBD_4) [32, 33] позволяет идентифицировать и количественно оценить содержание сульфидных групп в молекулах САВ нефти, а также определить возможные структурные фрагменты соединенные через сульфидные связи друг с другом или с ядрами смол или асфальтенов. Стоит отметить, что данным методом практически невозможно определить серу, входящую в ароматические кольца (бенз -, дибенз – и нафтобензтиофеновую) и тиациклановую серу (рис. 3).

Расщепление связей C-S в сульфидных структурах асфальтенов можно проводить с помощью метилиодида [34]. Данный реагент не затрагивает C-S связи в циклических сульфидных структурах. Как и в случае десульфуризации на бориде никеля (или тетрагидроборате натрия), данный метод не позволяет идентифицировать и количественно оценить тиациклановые и ароматические серусодержащие структуры.

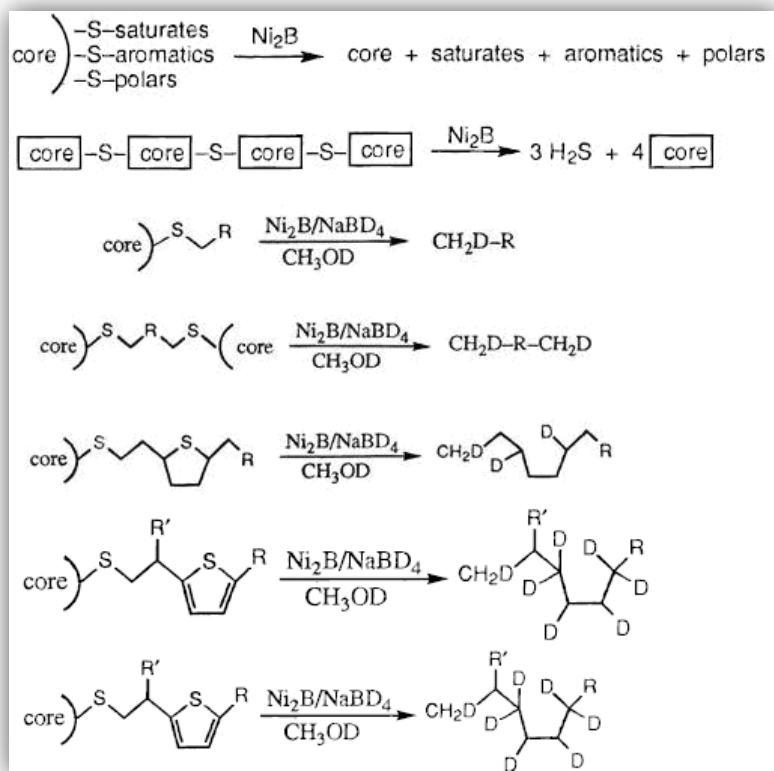


Рисунок 5 – Схемы реакций восстановительной десульфуризации САВ нефти.

ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1 Объекты исследования

В качестве объекта исследования взяли образцы мазута нефти Усинского месторождения.

Усинское месторождение расположено в Тимано-Печорской нефтегазоносной провинции. Усинская нефть является нафтеноароматической, тяжелой ($\rho > 934 \text{ кг/м}^3$) высоковязкой ($v_{50} > 31$), высокосернистой (1,98 % мас.), с малым количеством светлых фракций и твердых парафинов, но с высоким содержанием смол, асфальтенов и гетероатомов [1].

Таблица 2 – Физико-химические свойства мазута нефти Усинского месторождения

Показатели	Значения
Плотность при 20 С, кг/м ³	976,5
Содержание, масс. %:	
Асфальтенов	8,5
Смол	37,0
Масел	54,5
Температура застывания	82,0
Молекулярная масса, а.е.м.	620
Фракционный состав;	
н.к., С	350

2.2 Методы исследования

Различают несколько видов анализа мазута: элементный, индивидуальный, групповой, структурно-групповой. Развитие техники современных физико-химических методов анализа смесей позволило перейти от определения элементного состава мазута к исследованиям группового и индивидуального состава мазутных фракций.

При анализе смолисто-асфальтеновых составляющих мазута удается идентифицировать пока лишь некоторые индивидуальные соединения. Групповое разделение этих фракций, включающих гибридные структуры, — также достаточно сложная и не вполне решенная задача. С использованием масс-спектрологии, ЯМР-спектрологии и других современных методов проводят структурно-групповой анализ высокомолекулярных нефтяных фракций.

ИК-спектры регистрировали на FTIR-спектрометре NICOLET 5700 в области $400 - 4000 \text{ см}^{-1}$. Образцы в растворе четыреххлористого углерода наносили в виде пленки на пластинки из бромида калия. Обработку ИК-спектров проводили с использованием программного обеспечения «OMNIC 7.2» Thermo Nicolet Corporation. Электронные спектры поглощения получали на спекрофотометре «Uvikon 943» в ультрафиолетовой области $\lambda = 190-400$ нм и видимой области $\lambda = 400-700$ нм.

Хромато-масс-спектры получали на DFS приборе «Thermo Scientific». В газовом хроматографе использовали кварцевую капиллярную колонку TR5MS длиной 30 м и внутренним диаметром 0,25 мм. Хроматографирование проводили в режиме программированного подъема температуры от 80 до 300 °С со скоростью 4 град/мин и затем в течение 30 мин при конечной температуре. Газ носитель – гелий. Сканирование масс-спектров осуществлялось каждую секунду в диапазоне масс до 500 а.е.м. Обработку полученных результатов проводили с помощью программы Xcalibur. Идентификацию соединений выполняли с использованием

литературных данных и компьютерной библиотеки масс-спектров NIST 02. Относительную распространенность каждого типа соединений рассчитывали как частное от деления суммарной площади идентифицированных пиков различных типов соединений к сумме площадей всех установленных типов соединений. Идентификацию соединений выполняли с использованием литературных данных и компьютерной библиотеки масс-спектров NIST 02.

Элементный состав исследуемых объектов определяли методом сожжения: С, Н, N – в реакторе Покровского с последующим газохроматографическим анализом продуктов деструкции; S – колбовым методом по Шенигеру [38].

Для *определения плотности* нефти использовали методику, которая соответствует [39]. Метод основан на определении относительной плотности - отношения массы испытуемого продукта к массе воды, взятой в том же объеме и при той же температуре.

ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

5.1. Предпроектный анализ

5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования

Таблица 10 – Сегментирование рынка

/	Химия нефти	Переработка нефти	Высокомолекулярные соединения нефти
Исследовательские центры университетов			
Научные центры			
Нефтяные компании			

Были определены рынки сегментирования: наиболее интересным представляется исследование химии нефти, т.к. уровень конкуренции на данном сегменте более низок.

5.1.2 FAST-анализ

В рамках магистерской диссертации в качестве объекта FAST-анализа выступает объект исследования – смолисто-асфальтеновые компоненты (САВ) нефтей.

Таблица 11- Классификация функций, выполняемых объектом исследования

Наименование процесса	Выполняемая функция	Ранг функции		
		Главная	Основная	Вспомогательная

Химическая деструкция	Разрыв эфирных и сульфидных мостиков	X		
Жидкостно-адсорбционная хроматография	Разделение на полярную и неполярную фракции на силикагеле		X	
Сушка	Доведение до постоянной массы			X

Таблица 12-Матрица смежности

	Функция 1	Функция 2	Функция 3
Функция 1	=	<	<
Функция 2	>	=	>
Функция 3	>	<	=

Таблица 13 - Матрица количественных соотношений функций

	Функция 1	Функция 2	Функция 3	Итого	Значимость функции
Функция 1	1	0,5	0,5	2	0,23
Функция 2	1,5	1	1,5	4	0,44
Функция 3	1,5	0,5	1	3	0,33
0,5 при «<»; 1,5 при «>»; 1 при «=»				$\Sigma=9$	1

Таблица 14 - Определение стоимости функций, выполняемых объектом исследования

Процесс	Выполняемая функция	Т дн	Стоимость материала, р	Заработн ая плата, р	Себестои мость, р
---------	---------------------	---------	------------------------------	----------------------------	----------------------

Химическая деструкция	Разрыв эфирных и сульфидных мостиков	6	1128,09	3531,34	5 787,52
ЖАХ	Разделение на полярную и неполярную фракции на силикагеле	16	192,2	543	735,2
Сушка	Доведение до постоянной массы	2	-	950,74	950,74

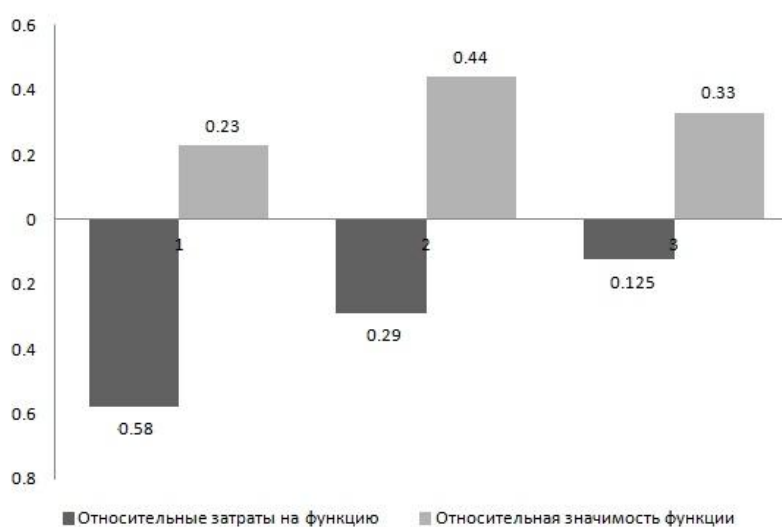


Рисунок 14 - Функционально-стоимостная диаграмма

Построенная функционально-стоимостная диаграмма позволяет выявить диспропорции между полезностью функций и затратами на них. Анализ ФСД показывает явное наличие рассогласования по функциям 1 и 3. Необходимо провести работы по ликвидации данных диспропорций.

В качестве конкретных шагов, которые необходимо предложить на данном этапе, должны выступать предложения связанные с экономией за счет: применения принципиально новых конструкторских решений; совмещения функций в сборочных единицах и деталях; оптимизации протекаемых процессов; применения новых материалов.

Результатом проведения FAST-анализа высокотехнологической и ресурсоэффективной разработки должно быть снижение затрат на единицу полезного эффекта, достигаемое путем:

- сокращения затрат при одновременном повышении потребительских свойств объекта;
- повышения качества при сохранении уровня затрат;
- уменьшения затрат при сохранении уровня качества;
- сокращения затрат при обоснованном снижении технических параметров до их функционально необходимого уровня;
- повышения качества при некотором, экономически оправданном увеличении затрат.

5.1.3. Оценка готовности проекта к коммерциализации

Таблица 15 - Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

Наименование	Степень проработанности и научного проекта	Уровень имеющихся знаний разработчика
Определен имеющийся научно-технический задел	5	4
Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического Задела	4	4
Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	5
Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	5
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	4
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	5	5
Проведены маркетинговые исследования рынков	4	4

сбыта		
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	4
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	4	3
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	4
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	3	3
Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	3
Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	3
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	5
Проработан механизм реализации научного проекта	5	5
ИТОГО БАЛЛОВ	64	62

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

$B_{\text{сум}}=62$, разработка считается перспективной, а знания разработчика достаточными для успешной ее коммерциализации.

5.1.4 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Исходя из специфики исследования следует, что для коммерциализации подходит метод *Передача интеллектуальной собственности* в уставной капитал предприятия. Поскольку полученная в ходе исследования информации о составе и строении САВ необходима для решения проблем, связанных с формированием состава нефтей, разработкой и совершенствованием технологий их добычи и переработки.

5.2 Инициация проекта

5.2.1 Цели и результат проекта

Таблица 16 - Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ	Защита магистерской диссертации
СО РАН Институт химии нефти	Выполнение проекта, предоставление полной информации по выполненной работе

Таблица 17 - Цели и результат проекта

Цели проекта:	Изучение состава и структуры смолисто-асфальтовых компонентов нефтей; оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения исследования; определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.
Ожидаемые результаты проекта:	Изучение особенностей строения САВ;
Критерии приемки результата проекта:	Наличие проведенных анализов (ИКС, ХМС) и их расшифровка Целесообразность исследования
Требования к результату проекта:	Имеются все данные по исследованию Приведены расчеты, анализы, методики исследования

5.2.2. Организационная структура проекта

Таблица 18 - Рабочая группа проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо- затраты, час.
Чешкова Т.В СО РАН Институт химии нефти ЛГОСН к.х.н., научный сотрудник	Руководи тель проекта	Ответственность за реализацию проекта в пределах заданных ограничений по ресурсам, координирование деятельности участников проекта.	135
Торломоева А.Э НИ ТПУ магистр	Исполнит ель	Проведение необходимых исследований и экспериментов	603
Рябова Н.В СО РАН Институт химии нефти ЛФХМИ	Субподря дчик	Проведение ИК- спектроскопии	9
СО РАН Институт химии нефти	Субподря дчик	Проведение ГХ-МС анализа	9
ИТОГО:			768

5.2.3. Ограничения и допущения проекта.

Таблица 19 - Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
Бюджет проекта	Бюджет ограничен, следовательно, бережное использование реактивов
Источник финансирования	Государство
Сроки проекта:	2016-2018 гг
Дата утверждения плана управления проектом	10.02.2017
Дата завершения проекта	Июнь 2018
Прочие ограничения и допущения	Использование некоторых типов реактивов

5.2.4 План проекта

Таблица 20- Календарный план-график проведения НИОКР по теме

Вид работ	Исполнители	T_{ki} , г	Продолжительность															
			Я			Фев			Март			Апр						
			3	1	2	3	1	2	3	1	2	3						
Составление и утверждение технического задания	Руководитель тики	4	■															
Подбор и изучение материалов по теме	Студент- юмник	10		■	■													
Проведение патентных исследований	Студент- юмник	10			■	■												
Выбор направления исследований	Руководитель практики, студент- дипломник	5			■	■												
Календарное планирование работ по теме	Руководитель тики	2				■												

5.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

5.3.1 Расчет материальных затрат НТИ

Таблица 21 - Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (З _м), руб.
Бензол	л	0,8	350	280
Гексан	л	0,52	705	366,6
Диэтиловый эфир	л	0,06	935	56,1
Литийалюминия гидрид	кг	0,0003866	108 554	41,96
Петролейный эфир	л	0,52	235	122,2
ТГФ	л	0,1	716	71,6
Хлороформ	л	0,0158	296	4,67
BBr ₃	л	0,0024	54 700	131,28
NaOH	г	0,12	88,5	10,62
Na ₂ SO ₄	г	0,1	58	5,8
SiO ₂ (АСК)	г	0,182	1060	192,92
HCl	л	0,008	67	0,54
Этанол	л	0,2	180	36
Итого: 1320,29				

5.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для экспериментальных работ

Таблица 22 - Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования
для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудован ия	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
1	Колба круглодонная со шлифом, 250 мл	4	139	556
2	Колба плоскодонная, 250 мл	4	60	240
3	Колба трехгорлая	1	98	98
4	Стакан мерный	6	107	642
5	Цилиндр мерный	2	581	116
6	Колонка хроматографическая	2	472	944
7	Пипетка	2	5	10
8	Холодильник обратный	1	430	430
9	Хлоркальциевая трубка	1	96	96
10	Капельная воронка с противодавлением	1	1699	1699
11	Мешалка механическая	1	2 097 [*]	2 097
12	Мешалка магнитная	2	4 968 [*]	9 936
13	Стеклянная палочка	1	11	11
14	Индикаторная бумага	1	157	157
15	Плитка электрическая	2	399	798
16	Муфельная печь	1	864, 57	864,57
17	Аппарат Сокслета	1	418	418

18	Делительная воронка	1	472	472
19	FTIR-спектрометр NICOLET 5700	1	156 250*	156 250
20	DFS прибор«Thermo Scientific»	1	186 956*	186 956
Итого: 361 926				

*-амортизация

5.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя; $F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таб. 13)

Таблица 23 - Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней:		
- выходные дни	118	118
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени:		
- отпуск	42	28
- невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	191	205

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{б}} \cdot k_{\text{р}},$$

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

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

$$Z_{\text{м}} = 17\,000 \cdot 1,3 = 22\,100 \text{ руб}; Z_{\text{дн}} = (22\,100 \cdot 11,2) / 191 = 1295,92 \text{ руб}$$

$$З_{и} = 17\ 000 * 1,3 = 22\ 100 \text{ руб}; З_{дн} = (22\ 100 * 11,2) / 205 = 1207,41 \text{ руб}$$

Таблица 24 - Расчёт основной заработной платы с января по май

Исполнители	З _б , руб.	к _р	З _м , Руб	З _{дн} , руб.	Т _р , раб. дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель	17 000	1,3	22 100	1295,92	15	19 438,8
Магистрант						9 100
Инженеры	17 000	1,3	22 100	1207,41	1	2414,82 (2 чел)

5.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

$$З_{доп} = k_{доп} \cdot З_{осн}$$

$$З_{внебюджет} = k_{внебюджет} \cdot З_{осн}$$

Таблица 25 – Расчет страховых отчислений

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	19 438,8	1915,7
Инженер	2414,82	724,45
Коэффициент отчислений внебюджетные фонды	во 0,271	
Итого: 6637,59		

5.3.5 Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на

конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

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

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов.

$$C_{\text{накл}} = 0,8 \cdot (19438,8 + 1915,7 + 2414,82 + 724,45) = 19595,02$$

Таблица 26 - Группировка затрат по статьям

Вид работ	Статьи						
	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов),	Специальное оборудование для экспериментальных работ	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Накладные расходы	Итого плановая себестоимость
Теоретическое ознакомление и подбор материала по теме работы	0	0	16 846,96	1660,27	5 015,46	16 982,35	40 505,04
Построение макетов (моделей) и проведение экспериментов	1320,29	18720	3667,16	0	0	753,65	24 461,1
Проведение анализов	0	343 206	2414,82	724,45	850,74	1 224,69	348 420,2
Оценка эффективности полученных результатов	0	0	0	0	0	0	0
Определение целесообразности проведения ОКР	0		2591,84	255,43	771,6	634,33	4 252,84

5.4 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы 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.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в табл. 16.

Таблица 27 - Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		
	Текущий проект	Исп.2*	Исп.3*
1. Материальные затраты НТИ	1320,29		
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	361 926	361454	362822
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	30 953,62	30 953,62	30 953,62
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	2684,15	2684,15	2684,15
5. Отчисления во внебюджетные фонды	6637,59	6637,59	6637,59
6. Затраты на научные и производственные командировки	-	-	-
7. Контрагентские расходы	-	-	-
8. Накладные расходы	19595,02	19595,02	19595,02
9. Бюджет затрат НТИ	363 246	362 774	364 142

*- варианты исполнения проекта (варьируемый параметр – хроматографическая колонка)

Таблица 28- Реестр рисков

Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления

Протекание колонки	негативное	4	5	высокий	Постоянно следить за установкой	Высокая скорость элюирования
Попадание инородных объектов в образец в процессе сушки	негативное	1	2	Низкий	Помещать в сушильный шкаф; Держать рабочее место в порядке	Загрязненное рабочее пространство

5.5 Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

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

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования (см. табл. 16). Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{ri}}{\Phi_{\text{max}}},$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки; Φ_{ri} – стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

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

$$I_{ri} = \sum a_i \cdot b_i,$$

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; n – число параметров сравнения.

Таблица 29- Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,1	4	5	4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	5	5	4
3. Помехоустойчивость	0,15	3	4	3
4. Энергосбережение	0,20	4	5	3
5. Надежность	0,25	4	5	3
6. Материалоемкость	0,15	4	5	4
ИТОГО	1			

$$I_{p-ucn1} = 4 \times 0,1 + 5 \times 0,15 + 3 \times 0,15 + 4 \times 0,2 + 4 \times 0,25 + 4 \times 0,15 = 4;$$

$$I_{p-ucn2} = 5 \times 0,1 + 5 \times 0,15 + 4 \times 0,15 + 5 \times 0,2 + 5 \times 0,25 + 5 \times 0,15 = 4,85;$$

$$I_{p-ucn3} = 4 \times 0,1 + 4 \times 0,15 + 3 \times 0,15 + 3 \times 0,2 + 3 \times 0,25 + 3 \times 0,15 = 3,25$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения

разработки ($I_{исп.i.}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп1} = \frac{I_{р-исп1}}{I_{финр}^{исп1}}, \quad I_{исп2} = \frac{I_{р-исп2}}{I_{финр}^{исп2}} \text{ и т.д.}$$

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

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}$$

Таблица 30 - Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,99	1	0,98
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4	4,85	3,25
3	Интегральный показатель эффективности	4,04	4,85	3,42
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	0,83	1,42	0,84

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило выбрать эффективный вариант (Исполнение 2) решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.