

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

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

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Моделирование эксплуатационных характеристик моторных топлив
УДК 665.733:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Нелюбова Дарья Михайловна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Самборская Марина Анатольевна	К.Т.Н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Якимова Т.Б.	К.Э.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД	Сечин А.А.	К.Т.Н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2020 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС ВПО, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Профессиональные компетенции</i>		
P1	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности	Требования ФГОС (ПК-1,2,3,19,20), Критерий 5 АИОР (п.1.1), CDIO(п. 1.1, 4.1, 4.3, 4.8)
P2	Применять знания в области современных химических технологий для решения производственных задач	Требования ФГОС (ПК-7,11,17,18, ОК-8), Критерий 5 АИОР (пп.1.1,1.2), CDIO (п. 1.1, 3.2, 4.2, 4.3, 4.5, 4.6)
P3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии	Требования ФГОС (ПК-1,5,8,9, ОК-2,3), Критерий 5 АИОР (пп.1.2), CDIO (1.2, 2.1, 4.5)
P4	Разрабатывать <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) CDIO (п.1.3, 4.4, 4.7)
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий	Требования ФГОС (ПК-4,21,22,23,24,25, ОК-4,6), Критерий 5 АИОР (п.1.4), CDIO (п. 2.2)
P6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, <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, 16; ОК-6,13,15), Критерий 5 АИОР (п.1.5) CDIO (п. 4.1, 4.7, 4.8, 3.1, 4.6)
<i>Общекультурные компетенции</i>		
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-5,9,10,11), Критерий 5 АИОР (пп.2.4,2.5), CDIO (п. 2.5)
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1,2,7,8,12), Критерий 5 АИОР (2.6), CDIO (п. 2.4)
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), CDIO (п. 3.2, 3.3)
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, <i>демонстрировать лидерство в инженерной деятельности и инженерном предпринимательстве</i> , ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.	Требования ФГОС (ОК-3,4), Критерий 5 АИОР (пп.1.6, 2.3) CDIO (п. 4.7, 4.8, 3.1)

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

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

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Мойзес О.Е.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Бакалаврской работы

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

Студенту:

Группа	ФИО
2Д6В	Нелюбова Дарья Михайловна

Тема работы:

Моделирование эксплуатационных характеристик моторных топлив	
Утверждена приказом директора (дата, номер) 153-53/с	От 01.06.2020

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</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>	<p>Углеводороды, оксигенаты и смеси, данные по структуре, свойствам и эксплуатационным характеристикам.</p>
---	---

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Технико-экономическое обоснование: Современные технологии производства моторных топлив, в т.ч. и из возобновляемого сырья.</p> <p>Аналитический обзор: Экспериментальные и расчетные методы определения товарных свойств моторных топлив. Связь структуры и свойств.</p> <p>Постановка задачи исследования.</p> <p>Экспериментальная часть: Исследование связи физико-химических и эксплуатационных свойств индивидуальных компонентов и топливных смесей, в т.ч. и оксигенатами.</p> <p>Выводы и рекомендации</p>
<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	<p>Результаты исследований (таблицы,графики)</p>
<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i></p>	
<p>Раздел</p>	<p>Консультант</p>
<p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p>	<p>Якимова Т.Б., к.э.н., доцент ОСГН</p>
<p>Социальная ответственность</p>	<p>Сечин А.А., к.т.н., ассистент ООД</p>
<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>	
<p>_____</p>	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	27.01.2020 г.
--	---------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	М.А. Самборская	к.т.н.		27.01.2020 г.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Нелюбова Д.М.		27.01.2020 г.

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

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

Форма представления работы:

Бакалаврская работа

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	20 мая 2020г.
--	---------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
12.03.2020	Анализ актуальности темы исследования. Подготовка раздела «Введение».	10
23.03.2020	Анализ основных эксплуатационных свойств моторных топлив и методов их определения. Анализ современных технологий производства моторных топлив. Анализ перспективных методов расчета октановых и цетановых чисел моторных топлив.	20
07.04.2020	Выбор объектов и методов исследования. Постановка цели и определения задач исследования. Выполнение расчетов.	40
30.04.2020	Анализ результатов. Выводы и рекомендации	10
17.05.2020	Подготовка раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». Подготовка раздела «Социальная ответственность»	20

Составил руководитель ВКР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Самборская Марина Анатольевна	к.т.н.		

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Нелюбова Дарья Михайловна		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Мойзес О.Е.	к.т.н., доцент		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕДИНЕНИЕ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2Д6В	Нелюбова Дарья Михайловна

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Химическая технология

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

1. Стоимость ресурсов исследования: материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Стоимость выполняемых работ, материальных ресурсов, согласно применяемой техники и технологии, в соответствии с рыночными ценами. Оклады в соответствии с окладами сотрудников «НИ ТПУ».
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	- районный коэффициент- 1,3; - коэффициент доплат – 0,35 - накладные расходы – 16%; - норма амортизации 20%.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Отчисления во внебюджетные фонды – 30,2 %

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Анализ потенциальных потребителей, анализ конкурентных технических решений, оценка готовности проекта к коммерциализации
2. Планирование и формирование бюджета проекта	Определение затрат на проектирование (смета затрат)
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Расчет интегрального показателя эффективности проекта

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Карта сегментирования рынка
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет проекта

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Якимова Татьяна Борисовна	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Нелюбова Дарья Михайловна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2Д6В	Нелюбова Дарья Михайловна

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Химическая технология

Тема ВКР:

Моделирование эксплуатационных характеристик моторных топлив	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p>Объект исследования - моторные топлива. Методика: моделирование свойств топлив. Рабочая зона - химическая лаборатория по исследованию бензинов и дизельных топлив.. Область применения: Промышленные предприятия нефтехимической отрасли.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> – ТК РФ от 30.12.2001 N 197-ФЗ; – ПНД Ф 12.13.1-03; – СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03.
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<ul style="list-style-type: none"> – отклонение показателей микроклимата; – отсутствие или недостаток естественного и искусственного света на рабочем месте; – повышенная температура поверхностей оборудования, материалов; – повышенный уровень шума.
3. Экологическая безопасность:	<ul style="list-style-type: none"> – воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – воздействия объекта на литосферу (отходы).
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<ul style="list-style-type: none"> – техногенного характера (аварийная ситуация в лаборатории); – социального характера

	(террористический акт); – наиболее типичная - техногенного характера.
--	--

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД	Сечин Андрей Александрович	К.Т.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Нелюбова Дарья Михайловна		

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. ГН 2.2.5.1313 – 03. Предельно допустимые концентрации вредных веществ в воздухе рабочей зоны.
4. ГОСТ 12.1.007 - 76. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.
5. СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
6. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.
7. ГОСТ 12.1.003– 90. Система стандартов безопасности труда. Шум.
8. ГОСТ 12.1.019 - 79. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
9. ГОСТ 17.2.3.02—78. Охрана природы. Атмосфера. Правила установления допустимых выбросов вредных веществ промышленными предприятиями.

10. ГОСТ 17.1.3.05—82. Охрана природы. Гидросфера. Общие требования к охране поверхностных и подземных вод от загрязнения нефтью и нефтепродуктами.

11. ГОСТ Р 22.0.02 - 94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

В настоящей бакалаврской работе применяются следующие сокращения:

ДВС – двигатель внутреннего сгорания

НПЗ – нефтеперерабатывающий завод

ОЧ – октановое число

ОЧИ – октановое число по исследовательскому методу

ОЧМ – октановое число по моторному методу

ПЭТ – первичные эталонные топлива

ТИ – топологические индексы

ТСМ – топливо-смазочные материалы

ЦЧ – цетановое число

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 118 страниц, 32 таблицы, 50 рисунков, 32 источника литературы, 3 приложения.

Ключевые слова: моторное топливо, октановое число, цетановое число, детонационная стойкость, эксплуатационные свойства, расчетные методы.

Объектами исследования являются моторные топлива.

Целью работы является разработка методов расчета ОЧ и ЦЧ моторных топлив различного состава.

Для достижения цели были решены следующие задачи:

- выполнен анализ адекватности существующих методов расчета;
- разработаны корреляции ОЧ-ЦЧ для различных групп соединений;
- рассчитаны топологические индексы для различных классов соединений и построены корреляционные зависимости ТИ-ОЧ и ТИ-ЦЧ;
- произведен расчет ОЧИ, ОЧМ и ТИ для суррогатных смесей топлива и построены корреляционные зависимости ТИ - ОЧИ(эксп.) и ТИ - ОЧМ(эксп.) для этих смесей.
- Выполнен расчет ОЧИ, ОЧМ и ЦЧ для суррогатных смесей топлива с помощью метода группового вклада и построены корреляции ОЧИ - ОЧИ(эксп.), ОЧМ - ОЧМ(эксп.), ЦЧ - ОЧИ(эксп.), ЦЧ - ОЧМ(эксп.)

Область применения: промышленные предприятия нефтехимической отрасли, НПЗ и лаборатории по исследованию свойств топлива

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	16
1 ТЕХНИКО – ЭКОНОМИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ	18
1.1 Современные технологии производства моторных топлив, в том числе из возобновляемого сырья	18
2 АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОБЗОР	21
2.1 Основные эксплуатационные свойства моторных топлив	21
2.2 Диэлектрическая проницаемость и показатель преломления нефтепродуктов	25
2.3 Экспериментальные и расчетные методы исследования свойств бензинов	28
2.3.1 Определение основных физико-химических свойств бензинов	28
2.3.2 Экспериментальные методы определения ОЧ	33
2.3.3 Расчетные методы определения ОЧ	33
2.4 Методы исследования свойств дизельных топлив	36
2.4.1 Экспериментальное определение ЦЧ	37
2.4.2 Расчетные методы определения ЦИ и ЦЧ дизельных топлив	38
2.5 Связь состава и структуры со свойствами моторных топлив	41
2.5.1 Использование топологических индексов для расчета ОЧ и ЦЧ	42
2.5.2 Метод группового вклада для оценки ОЧ и ЦЧ	47
2.5.3 Использование суррогатных топлив для определения ОЧ	48
3 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ	50
4 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ	52
4.1 Объект и методы исследования	52
4.2 Построение корреляционных зависимостей октанового и цетанового чисел	52
4.3 Расчет топологических индексов	55
4.4 Применение суррогатных топлив для расчета октанового числа	67
4.5 Определение октанового числа с помощью метода групповых вкладов	73
5 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ	78

5.1 Предпроектный анализ	78
5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	78
5.1.2. SWOT – анализ	80
5.2.1 Структура работ в рамках исследования	82
5.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ	83
5.2.3 Разработка графика проведения исследования.....	84
5.3 Бюджет технического исследования.....	88
5.3.1 Расчет материальных затрат технического исследования.....	89
5.3.2 Расчет затрат на специальное оборудования для экспериментальных работ	90
5.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы.....	92
5.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	94
5.3.5 Накладные расходы.....	95
5.3.6 Формирование бюджета затрат научно – исследовательского проекта.....	95
5.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования ..	97
6 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ	101
6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	101
6.1.1 Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства	102
6.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны ..	103
6.2 Профессиональная социальная безопасность	103
6.2.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования	103
6.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований	104
6.2.3 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.....	108
6.3 Экологическая безопасность.....	109
6.3.1 Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду ...	109
6.3.2 Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду .	110

6.3.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.....	111
6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	112
6.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований	112
6.4.2 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.....	112
6.4.3 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС	113
Заключение	115
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	116
Приложение А	119
Приложение Б	122
Приложение В.....	130

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время основным потребителем нефтяного топлива является автомобильный транспорт.

В данный момент предполагается, что такие виды альтернативного топлива, как сжатый и сжиженный природный газ, сжиженный нефтяной газ, спирт, водород и т.д. заменят автомобильные бензины нефтяного происхождения. Однако исследование альтернативных видов топлива является трудоемким и экономически затратным процессом, следовательно, высока вероятность того, что в ближайшие несколько десятилетий топливо нефтяного происхождения будет одним из основных как для двигателей внутреннего сгорания, так и дизельных двигателей.

Для обеспечения надежной и долговечной работы систем и механизмов топливо-смазочные материалы должны отвечать требованиям ГОСТ. Вместе с тем качество ТСМ зависит от их физико-химических свойств.

Необходимо, чтобы автомобильный и авиационный бензины соответствовали ряду требований для достижения экономичной и надежной работы двигателя и эксплуатационных требований: оптимальный групповой и углеводородный состав, необходимый для стабильного процесса сгорания без детонации при любом режиме работы двигателя; чтобы получить оптимальный состав однородной воздушно-топливной смеси при различных температурах требуется хорошее испарение; определенные компоненты и характеристики для продления срока хранения топлива и долговечности резинотехнических изделий, резервуаров и деталей топливной системы и т.п.

Экологические свойства топлива в последние годы выходят на первый план.

В связи с ужесточением экологических требований растут требования к снижению расхода топлива, что требует значительных

усилий для повышения эффективности сгорания при одновременном удовлетворении требований по качеству выбросов.

Исследование физико-химических и эксплуатационных свойств компонентов топлива и топливных смесей – трудоемкий и затратный процесс, требующий много времени. Надежные методы прогноза данных характеристик позволят сократить время и затраты на создание топливных композиций как на основе традиционных, так и альтернативных источников. Разработка методов определения основных характеристик топлива – октанового и цетанового числа является актуальной и значимой задачей.

1 ТЕХНИКО-ЭКОНОМИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ

1.1 Современные технологии производства моторных топлив, в том числе из возобновляемого сырья

В настоящее время приоритетным направлением экономического развития становится переход на альтернативные виды топлива из возобновляемых сырьевых ресурсов. Все это диктует необходимость пересмотра традиционных подходов к производству моторных топлив. Одним из путей решения этих вопросов может стать широкое использование оксигенатов в качестве добавок либо компонентов автомобильных бензинов.

Так, авторы патента [1] предлагают способ получения топливной композиции, включающий смешение бензина с бутиловым и этиловым спиртами, при этом этиловый спирт предварительно смешивают с бутиловым спиртом в соотношении $1:1 \div 1:0.2$, осуществляют гомогенизацию полученной смеси в виброкавитационном гомогенизаторе при удельном расходе смеси не более $2,5 \text{ г/см}^2$ рабочей поверхности ротора в секунду и окружной скорости его вращения не менее 20 м/с , после чего полученную смесь этилового спирта с бутиловым спиртом смешивают с бензином в соотношении: смесь этилового спирта с бутиловым спиртом (90-30) об. %, бензин (10-70) об. % и повторно подают в упомянутый гомогенизатор с объемной скоростью $5-500 \text{ л/мин}$. Технический результат заключается в получении стабильных топливных композиций с равномерным распределением компонентов по объему топливной композиции, устойчивых в течение не менее шести месяцев в широком диапазоне температур.

Также ужесточились требования к качеству моторных топлив по содержанию серы, азота и ароматических углеводородов. Это привело к росту разработок по производству базовых моторных топлив из альтернативных возобновляемых сырьевых ресурсов. Одним из способов получения экологически чистого сырья для производства моторных топлив

является метод синтеза Фишера-Тропша, предусматривающий использование оксида углерода и водорода с заданным соотношением (синтез-газ) в качестве исходных компонентов, получаемых газификацией биомассы, природного или попутного нефтяного газов, угля, сланцев и т.д.

В патенте [2] представлен способ получения среднестиллятных фракций из смесового сырья, полученного смешением синтетической и сырой природной нефтей. Способ предусматривает процесс гидрооблагораживания – гидроизомеризации синтетической нефти, полученной методом Фишера-Тропша, для удаления кислородсодержащих и непредельных соединений, а также превращения нормальных парафинов в изопарафины. Процесс проводят при парциальном давлении водорода 0,5-12 МПа, объемной скорости подачи сырья 0,1-10,0 ч⁻¹, кратности циркуляции водород/сырье 50-1000 н.л/л при температуре 180-400°C в присутствии катализатора гидрооблагораживания/гидроизомеризации.

Полученный гидроизомеризат синтетической нефти с температурой застывания не выше минус 30°C предлагают смешивать с сырой нефтью в произвольном соотношении при температуре окружающей среды с последующим выделением фракций бензина, керосина, газойля и других продуктов на установке по перегонке сырой нефти и дальнейшей переработкой их в продукты требуемого качества.

Недостатком этого способа является экономически невыгодное расходование обогороженной синтетической нефти, полученной методом Фишера-Тропша, при смешении с сырой природной нефтью широкого фракционного состава, что не позволяет получение продуктов с требуемыми низкотемпературными свойствами.

Изобретение авторов [3] относится к производству автомобильных топлив из возобновляемого сырья и направлено на получение качественного биодизельного топлива, не уступающего по техническим показателям

нефтяному дизельному топливу. Способ получения биодизельного топлива из растительных масел включает:

- смешение растительного масла с водородсодержащим газом;
- нагрев полученной смеси в трубчатой печи до 250-350°C;
- подачу нагретой смеси в реактор гидрокрекинга, в котором поддерживается давление 2-5 МПа, а в нижний слой катализатора подается холодный водород;
- отделение в сепараторе высокого давления водородсодержащего газа, часть которого отводится из установки, а остальная циркуляционным компрессором подается на смешение с растительным маслом;
- жидкость из сепаратора дросселируется в трехфазный разделитель, откуда отводится углеводородный газ, а жидкость разделяется на воду и жидкую углеводородную фракцию, из которой в ректификационной колонне выделяется дизельная и бензиновая фракции, а также тяжелый остаток.

Техническим результатом является получение биодизельного топлива, которое является малосернистым и его биоразлагаемость значительно выше нефтяного дизельного топлива, а в процессе его использования содержание NO_x в выбросах в атмосферу значительно ниже.

2 АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОБЗОР

2.1 Основные эксплуатационные свойства моторных топлив

Общеизвестно, что производительность двигателя зависит от многих факторов, и качество используемого в нем топлива особенно важно. Следовательно, топливо должно соответствовать определенным эксплуатационным свойствам и характеристикам. [4].

Требования к бензиновому топливу:

- высокая теплота сгорания;
- хорошие смесеобразующие свойства, дающие возможность легкому пуску двигателя, плавному переходу с одного рабочего режима на другой и устойчивой работе двигателя во время эксплуатации в различных условиях климата;
- отсутствие детонации на каком-либо эксплуатационном режиме;
- отсутствие возможности для образования нагароотложений, которые вызывают перегрев и износ двигателя;
- не вызывать коррозию деталей как при непосредственном контакте с ними, так и от образующихся продуктов сгорания;
- сохранять стабильность при транспортировке и хранении, т.е. не изменять свои первоначальные свойства;
- иметь низкую температуру застывания для возможности хорошей прокачиваемости при отрицательных температурах окружающей среды;
- не оказывать вредного воздействия на экологию и человека.

На эксплуатационные характеристики бензинового топлива влияют следующие физические свойства [4]:

1. Теплота сгорания. Количество тепла, выделяемое при сгорании топливо-воздушной смеси, зависит от теплоты сгорания топлива и состава смеси. Чем выше теплотворная способность, тем ниже стоимость топлива на единицу мощности.

2. Воспламенение топливовоздушной смеси зависит от ее состава и типа топлива. На воспламенение смеси влияют температура и давление. С увеличением их значений предел воспламеняемости также увеличивается. Различают верхний и нижний пределы воспламеняемости. Верхний предел - это содержание топлива в воздухе, где дальнейшее обогащение смеси делает ее невоспламеняемой. Нижний предел определяется недостатком топлива в воздухе, то есть состоянием смеси, при котором дальнейшее обеднение делает ее невоспламеняемой.

3. Полнота сгорания топлива зависит от *испаряемости* и характеризуется фракционным составом. Фракция - это часть бензина, выкипающая в определенных диапазонах. Фракционный состав определяют по ГОСТ 2177-82 с использованием специального оборудования.

4. Детонация происходит из-за очень быстрого завершения процесса самовозгорания части рабочей смеси и образования ударных волн, которые распространяются со сверхзвуковыми скоростями (1500-2000 м / с). При нормальном сгорании смеси средняя скорость распространения пламени составляет 10-40 м/с. Стойкость бензина к детонации зависит от его углеводородного состава. Ароматические углеводороды имеют самую высокую взрывостойкость, в то время как изопарафины имеют более низкую взрывостойкость. Детонационная стойкость бензинов оценивается октановым числом (ОЧ). Детонация связана с повышенным образованием гидропероксидов в бензиновых парах. Они окисляются кислородом, который содержится в воздухе, и происходит резкий энергосрыв.

По сравнению с карбюраторными двигателями дизельные двигатели характеризуются высокой эффективностью, поскольку работают с более высокой степенью сжатия (12 ... 20 вместо 4 ... 10) и коэффициентом избытка воздуха = 1,4 ... 1,5. В результате их удельный расход топлива на 25 ... 30% ниже, чем у карбюраторных двигателей. [4].

Чтобы обеспечить долгосрочную и экономичную эксплуатацию дизельных двигателей, дизтопливо должно соответствовать следующим требованиям:

1. обеспечение тонкого распыла, хорошее смесеобразование и воспламеняемость;
2. полное сгорание топлива и мягкая работа двигателя;
3. обладать соответствующей вязкостью;
4. иметь низкую температуру застывания для возможности хорошей прокачиваемости при отрицательных температурах окружающей среды;
5. предотвращение нагарообразования на клапанах, поршнях и поршневых кольцах, зависания игл и закоксовывания распылителей форсунок;
6. не содержать сернистых соединений, водорастворимых кислот и щелочей, механических примесей и воды.
7. отсутствие коррозионного воздействия на детали двигателя, топливоподающую систему, топливопроводы и топливные баки;
8. высокая химическая стабильность.

На эксплуатационные характеристики дизельного топлива влияют следующие физические свойства [4]:

1. Самовоспламеняемость дизельного топлива (цетановое число).

Самовоспламеняемость дизельного топлива обычно оценивается путем сравнения ее с самовоспламеняемостью эталонных топлив. Используемыми эталонными топливами являются гексадекан (цетан, $C_{16}H_{34}$), который имеет малый период задержки самовоспламенения (обычно самовоспламеняемость цетана условно составляет 100), и ароматический углеводород α -метилнафталин ($C_{10}H_7CH_3$), который имеет большой период задержки самовоспламенения (его самовоспламеняемость условно составляет 0). Оптимальное цетановое число для дизеля составляет 40-55 единиц.

2. Вязкость и плотность дизельного топлива влияют на процессы испарения и образования смеси. Уменьшение или увеличение кинематической вязкости (для различных марок топлива оптимальное значение находится в диапазоне 1,5-6,0 мм²/с) приводит к прерыванию процесса подачи топлива оборудованием, процесса образования смеси и сгорания рабочей смеси. Плотность дизельного топлива нормируется при температуре +20°C (согласно отечественным стандартам): летнее топливо не превышает 860 кг / м³, зимнее топливо не превышает 840 кг / м³, а арктическое - не более 830 кг / м³.

3. Низкотемпературные свойства дизеля оценивается путем установления предельно низкой температуры окружающей среды (воздуха), при которой его подача из топливного бака к двигателю происходит бесперебойно. *Температура помутнения* - это температура, при которой топливо теряет прозрачность из-за осаждения кристаллов н-алканов или микрокристаллов льда, при этом не теряя текучести. *Температура застывания* - это температура, при которой дизель не проявляет текучести при наклоне под углом 45 ° в течение 1 минуты. Бесперебойная подача обеспечивается при температуре помутнения топлива на 5-10 °С ниже температуры окружающего воздуха, при которой эксплуатируется автомобиль.

4. Фракционный состав и испаряемость дизельного топлива зависят от его физико-химических свойств. Если вязкость топлива оказывает решающее влияние на первую ступень образования смеси (распыливание), то на вторую стадию (испарение) влияние оказывает испаряемость. Согласно ГОСТ 305-82 испаряемость дизельного топлива, характеризуемая фракционным составом, определяется температурами выкипания 50% и 96% топлива ($t_{50\%}$ и $t_{96\%}$ соответственно). Температура начала кипения отечественного дизельного топлива обычно находится в диапазоне 170-200 °С, $t_{60\%}$ составляет 255-280 °С, а температура в конце дистилляции ($t_{96\%}$) составляет около 330-360 ° С. Температура $t_{96\%}$ указывает на содержание

высококипящих углеводородов в топливе (трудно испаряющихся фракций). В процессе работы эти углеводороды медленно и не полностью испаряются в камере сгорания. Увеличение доли этой фракции ухудшает образование смеси и приводит к неполному сгоранию топлива, затрудняя запуск дизельного двигателя, снижая эффективность дизельного двигателя и увеличивая количество выхлопных газов. Поэтому дизель должен обладать оптимальной испаряемостью.

2.2 Диэлектрическая проницаемость и показатель преломления нефтепродуктов

Углеводородное топливо, как все другие среды, обладает диэлектрической проницаемостью. Данное свойство, наряду с показателем преломления используется для расчета ОЧ и ЦЧ.

Показатель преломления является важной характеристикой относительного содержания водорода в углеводородах смеси. Отношение Н/С влияет на многие свойства смеси, в т.ч. на плотность, среднюю молекулярную массу и ОЧ.

В источнике [5] приведена зависимость октановой характеристики от показателя преломления по литературным (1) и экспериментальным (2) данным.

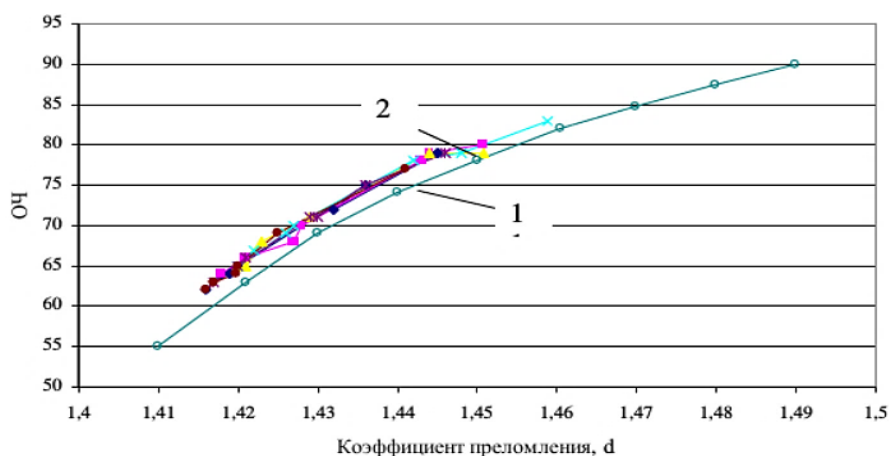


Рисунок 1 - зависимость октановой характеристики от показателя преломления по литературным (1) и экспериментальным (2) данным.

Из приведенной зависимости следует, что с увеличением показателя преломления значения ОЧ возрастают, причем зависимость имеет гиперболический вид и кривая спрямляется при высоких содержаниях ароматических углеводородов в бензине.

Введение в молекулу углеводорода одной полярной группы вызывает характерное увеличение диэлектрической проницаемости и проводимости (потерь).

У всех нефтепродуктов диэлектрическая проницаемость ϵ достаточно сильно различается в зависимости от их химического строения. Также для углеводородов различной структуры значения ϵ неодинаковы. Наибольшей диэлектрической проницаемостью характеризуются ароматические углеводороды, которые, в основном, определяют октановое число бензинов, а наименьшей – н-алканы.

Диэлектрическая проницаемость нефтепродуктов увеличивается при возрастании плотности, увеличении молекулярного веса и при переходе от насыщенных к ненасыщенным соединениям.

Значения диэлектрической проницаемости ϵ для нефтяных фракций с указанием их плотности ρ , при температуре 18°C, приведены в таблице 1 [6].

Таблица 1- Диэлектрическая проницаемость нефтяных фракций [6]

Нефть и нефтепродукты	Температура выкипания, °C	Диэлектрическая проницаемость, ϵ	Плотность, ρ_{18} , г/см ³
Петролейный эфир	56 – 80	1,724	0,6550
Керосины	140 - 200	1,958	0,8057
Дизтопливо	190 - 250	1,963	0,8081
Нефть	50 - 300	2,183	0,8627
Бензины	60 - 150	1,887	0,7668
Мазут	Больше 300	2,401	0,9388

Наблюдая данные из табл. 1, видно, что значение средней диэлектрической проницаемости бензиновых фракций (сырых,

низкооктановых бензинов), измеренное на частотах до 10 ГГц, составляет 1,877. Бензины товарные имеют немного большую диэлектрическую проницаемость, так как содержат в своем составе высокооктановые присадки, включая ароматические углеводороды.

Опираясь на данные из источника [6], была построена среднестатистическая зависимость октанового числа компонентов бензинов от диэлектрической проницаемости при температуре 20 °С (рисунок 2).

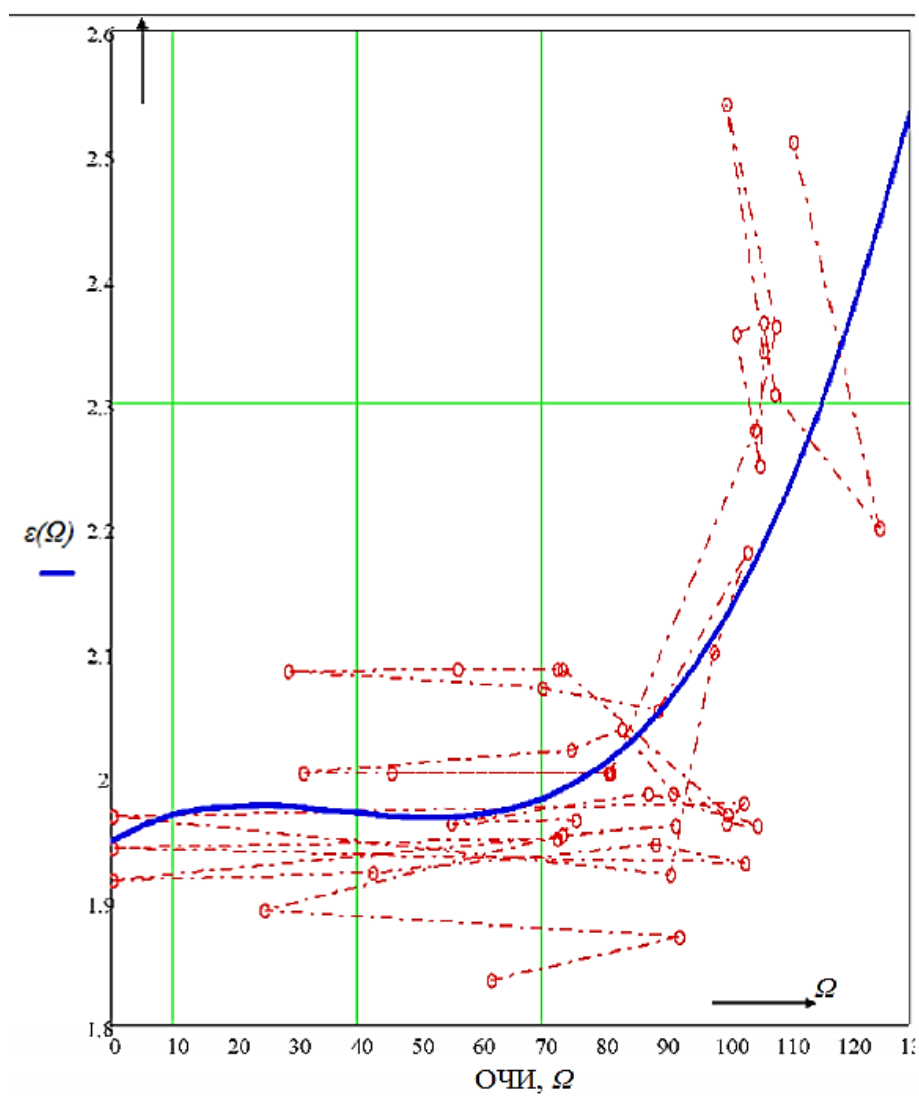


Рисунок 2 - Среднестатистическая зависимость октанового числа компонентов бензинов от диэлектрической проницаемости при температуре 20 °С при аппроксимации полиномом 3 степени [6]

Из рис.2 видно, что с увеличением октанового числа углеводородов значения их диэлектрической проницаемости, в целом, возрастают, хотя имеются существенные отклонения от этой закономерности.

Как отмечалось ранее, основными эксплуатационными характеристиками для моторных топлив являются: коррозионная устойчивость, химическая стабильность, отсутствие сернистых соединений, невозможность образовывать нагароотложения, высокая детонационная стойкость (для бензинов), хорошая воспламеняемость (для дизелей) и др. Важнейшими показателями являются ОЧ и ЦЧ.

2.3 Экспериментальные и расчетные методы исследования свойств бензинов

2.3.1 Определение основных физико-химических свойств бензинов

Основными эксплуатационными характеристиками моторного топлива являются: октановое число (по моторному и исследовательскому методам), и связанные с ним свойства: плотность, фракционный состав и вязкость.

Эти характеристики определяются по методикам, представленным в ГОСТах:

- Плотность [7] – определяется относительная плотность, как отношение плотности нефтепродукта при 20 °С к плотности дистиллированной воды при 4 °С или отношение массы нефтепродукта при 20 °С к массе того же объема дистиллированной при 4 °С. Обозначение относительной плотности – ρ_4^{20} . По этой методике вначале определяют водное число пикнометра, затем относительная плотность нефти/нефтепродукта. При необходимости выполняют пересчет относительной плотности на плотность при давлении, отличном от атмосферного по формуле:

$$\rho_4^{20} = (0.99823 - 0.0012)\rho + 0.0012 \quad (1)$$

- Фракционный состав [8] - при разгонке нефти устанавливается температура начала кипения и температуры отгонки 10, 50, 90, 97 объемных % от начальной пробы, также остаток (в %) и температура конца кипения. В основе данного метода лежит перегонка 100 см³ образца, в условиях, соответствующих природе продукта, при необходимости постоянного наблюдения за показаниями термометра и объемами конденсата. Во время перегонки регистрируется температура выкипания и объем конденсата. Перегонка продолжается до 300 °С. После того, как достигнута температура, нормируемая документацией на испытуемый продукт, испытание прекращается, необходимо в течение 5 минут дать стечь конденсату и записывается объем жидкости в цилиндре.

- Вязкость [9] – определяется кинематическая вязкость. В ходе эксперимента калиброванным вискозиметром измеряется истечение времени (в секундах) определенного объема требуемой жидкости при постоянной температуре под действием силы тяжести. Произведение постоянного значения вискозиметра в течение измеренного времени истечения является кинетической вязкостью.

При отличии последних трех результатов на 0,2 %, кинетическая вязкость ν , мм² / с, рассчитывается как среднее арифметическое по формуле:

$$\nu = C \cdot \tau \quad (2)$$

Динамическая вязкость η , мПа·с, исследуемой нефти вычисляется по формуле:

$$\eta = \nu \cdot \rho \quad (3)$$

- Определение группового состава [10], заключается в удалении ароматических углеводородов путем адсорбции на силикагеле, определении максимальной анилиновой точки и использованием метода равных объемов для деароматизированной фракции. Удаление аренов проводят методом

жидкостно–адсорбционной хроматографией, путем пропускания наблюдаемой фракции через колонку, заполненную адсорбентом (силикагель). Для каждой взятой фракции должен быть определен показатель преломления. Фракции, различающиеся показателем преломления не более, чем на 0.0005, выливают вместе, и для них определяют анилиновую точку с использованием метода равного объема.

- Максимальная анилиновая точка [11] -на практике определяется как температура помутнения, т.е. начало расслоения двух жидкостей. Выявленная наибольшая температура процесса растворения фракции в анилине и окажется значением критической температуры растворения (наибольшей анилиновой точкой). Установление анилиновой точки с помощью методов равных объемов определяется, как температура помутнения одинакового объема образца и анилина.

Массовая доля аренов A , % определяется по следующей формуле:

$$A = K(T - T_0), \quad (4)$$

Массовая доля циклоалканов H_1 в деароматизированной фракции:

$$H_1 = K_1(T_1 - T), \quad (5)$$

Массовая доля алканов Π , %:

$$\Pi = 100 - (\Phi + H_2). \quad (6)$$

- Молекулярная масса прямогонного бензинового дистиллята определяется на установке КРИОН-1 (установка криоскопического определения молекулярной массы).

Принцип действия основан на измерении депрессии температуры - разности температур кристаллизации чистого растворителя и исследуемых веществ, которые используются для расчета молекулярной массы исследуемых веществ по формуле:

$$M = K \cdot \frac{1}{\Delta T} \cdot \frac{G_1}{G_2} \cdot 1000, \quad (7)$$

где M – молекулярная масса испытуемого вещества, г/моль;

K – криоскопическая постоянная растворителя, °С*г/моль;

ΔT – депрессия температуры, °С;

G_1 – масса испытуемого вещества, г;

G_2 – масса растворителя (бензола), г.

Масса пробы рассчитывается как:

$$G_1 = m_2 - m_1, \quad (8)$$

Масса бензола рассчитывается как:

$$G_2 = m_3 - m_2, \quad (9)$$

где m_1 – масса пустой колбы; m_2 – масса колбы с образцом; m_3 – масса колбы со смесью образца и бензола.

- Определение октанового числа с помощью октанометра [12] – широко используемого метода в лабораторных условиях. Конечно, в реальности данный метод абсолютно не схож с измерением октанового числа. Принцип работы октанометра заключается в замере диэлектрической проницаемости топлива и дальнейшем установлении октанового числа по предварительно построенной калибровочной зависимости.

С целью построения калибровочных зависимостей применяются н-гептан и топлива с известным октановым числом, определенным при помощи моторной установки (в России УИТ-65 или УИТ-85).

В основе данного принципа измерения лежит сравнение октановых (цетановых) чисел исследуемого образца топлива с аттестованными образцами бензинов или дизельных топлив.

При наличии экспериментальных данных для различных видов топлива легко построить графики зависимости октанового числа от диэлектрической проницаемости (рисунок 3).

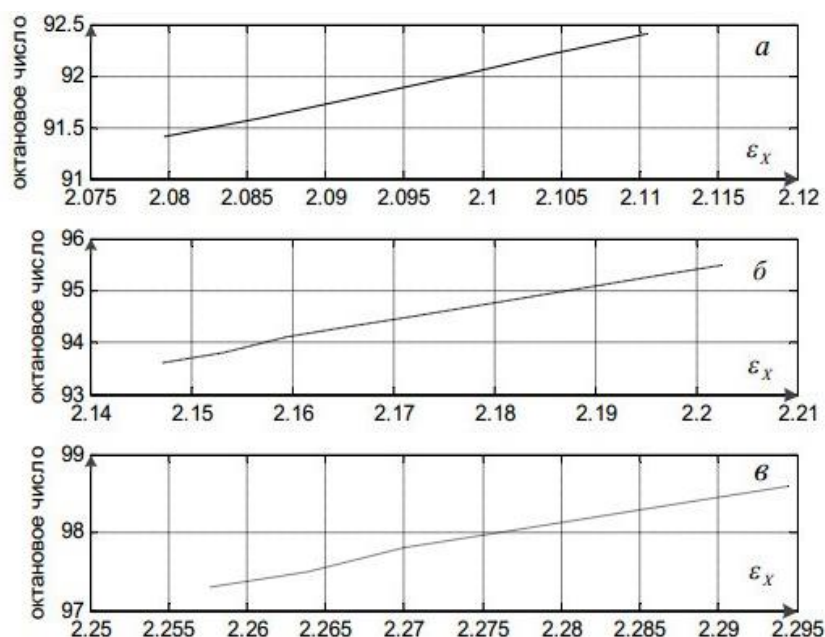


Рисунок 3 – Графики зависимости октанового числа от диэлектрической проницаемости: а – для 92 бензина, б – для 95 бензина, в – для 98 бензина [12]

Возможность получения представленной зависимости объясняется тем, что в настоящий период времени основной поток бензина получают не с помощью прямой перегонки, а при помощи смешения (компаундирования) большого количества компонентов.

Компонентный состав бензина зависит, в основном, от его марки, и определяется набором технологических установок на нефтеперерабатывающем заводе.

Основными компонентами для производства автомобильных бензинов обычно являются бензины каталитического риформинга или каталитического крекинга.

Как можно наблюдать из вышеуказанного графика, диэлектрическая проницаемость увеличивается с 2.075 до 2.3 в зависимости от ОЧ бензина 91-100.

У данного метода измерения существуют и недостатки, к ним можно отнести:

- невозможность идентификации незаявленного бензина;
- сложность оценки влияния внешних воздействий на результат измерения.

2.3.2 Экспериментальные методы определения ОЧ

Существует два вида октанового числа - исследовательское октановое число (ОЧИ) и моторное октановое число (ОЧМ), названия которых зависят от метода их определения – исследовательского и моторного метода соответственно.

Исследовательское октановое число (ОЧИ) (англ. Research Octane Number — RON) определяется с помощью одноцилиндровой установки с переменной степенью сжатия при частоте вращения коленчатого вала 600 об/мин, температуре всасываемого воздуха 52 °С и угле опережения зажигания 13°. Данное число демонстрирует, как ведёт себя бензин в режимах малых и средних нагрузок. [12].

Моторное октановое число (ОЧМ) (англ. Motor Octane Number — MON) также определяется на одноцилиндровой установке, но уже при частоте вращения коленчатого вала 900 об/мин, температуре всасываемой смеси 149 °С и переменном угле опережения зажигания. ОЧМ имеет более низкие значения, чем ОЧИ. ОЧМ отражает поведение бензина в режимах больших нагрузок.

2.3.3 Расчетные методы определения ОЧ

Метод определения ОЧ на стационарной одноцилиндровой установке является достаточно дорогим и трудным процессом. Расчет октанового числа по данным хроматограммы также является дорогостоящим и довольно длительным анализом. Процесс предлагается сократить за счет использования быстрых методов оценки детонационной стойкости бензина.

Известные из литературы и обсуждаемые далее способы определения ОЧ бензинового топлива можно разделить на три категории:

- учитывающие фракционный состав бензина;
- связывающие значение октанового числа с составом и физико-химическими свойствами;
- основанные на корреляции октанового и цетанового чисел.

1. По фракционному составу

Для бензинов с ОЧМ больше 62 [13]:

$$\text{ОЧ} = 1020.7 - 64.84 \left[4 \frac{\lg 141.5}{p_{15}^{15}} - 131.5 \right] + 2 \lg \left(\frac{9}{5} t_{10\%} + 32 \right) + 1.3 \lg \left(\frac{9}{5} t_{90\%} + 32 \right), \quad (10)$$

где $t_{10\%}$, $t_{90\%}$ – температуры кипения фракции при 10% и 90% отгоне соответственно, °C.

Определение ОЧИ бензинов также с учетом плотности [14]:

$$\text{ОЧИ} = 120 - 2 \cdot \frac{T_{\text{ср}} - 58}{5\rho}; \quad T_{\text{ср}} = \frac{T_{\text{нк}} - T_{\text{кк}}}{2}, \quad (11)$$

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

$T_{\text{нк}}$ – температура начала кипения топлива °C;

$T_{\text{кк}}$ – температура конца кипения топлива °C;

ρ – плотность топлива при 20°C, г/см³.

2. Ко второй группе относят методы определения октанового числа:

- по анилиновой точке и фракционному составу

Для бензинов прямой перегонки, термического крекинга, термического риформинга у которых $t_{\text{а.т.}} < t_{10\%} < 2t_{\text{а.т.}}$ (где а.т. – анилиновая точка, °C) предложены уравнения [14]:

$$\text{ОЧМ} = 100 - \rho_4^{20} \frac{(t_{\text{к.к}} + t_{\text{а.т.}})}{\delta t_{\text{к.к}}} \cdot \frac{1}{\alpha^{\text{ГОСТ}}} + \delta - \alpha^{\text{ГОСТ}}, \quad (12)$$

где ρ_4^{20} – относительная плотность;

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

$t_{\text{а.т.}}$ – температура анилиновой точки, °С;

δ – коэффициент испаряемости бензинов:

$$\delta = \frac{t_{10\%} + t_{50\%} + t_{90\%}}{100}, \quad (13)$$

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

α – наклон кривой разгонки бензина:

$$\alpha^{\text{ГОСТ}} = t_{90\%} - t_{10\%}/80, \quad (14)$$

Последнее уравнение справедливо при $(t_{\text{к.к}}/t_{10\%}) \cdot \alpha^{\text{ГОСТ}} > 1.9$

Если это условие не выполняется, то можно воспользоваться уравнением:

$$\text{ОЧ} = [100 \frac{(t_{\text{к.к}} + t_{\text{а.т.}})t_{\text{к.к}}}{10P\rho_4^{20}\delta\sqrt{t_{\text{к.к}}}}](\rho_4^{20} + \rho_4^{20}\alpha^{\text{ГОСТ}} + \frac{t_{\text{к.к}}}{10P} + \rho_4^{20}\delta\alpha^{\text{ГОСТ}}), \quad (15)$$

где P – анилиновая точка бензина

- по плотностям

Для определения ОЧМ прямогонных бензинов фракции с началом кипения 200°С [14]:

$$\text{ОЧМ} = -140 + 246.9 \cdot \rho_4^{20}, \quad (16)$$

где ρ_4^{20} – относительная плотность.

3. Третья группа методов связывает октановое и цетановое число.

Как известно, октановое число является показателем детонационной стойкости бензинов. А вероятность детонации при работе двигателя определяется химическим составом топлива. Ароматические и изопарафиновые углеводороды имеют наибольшую детонационную стойкость, а парафиновые углеводороды нормальной структуры склонны к детонации [15]. ОЧ с низкокипящими фракциями обычно выше, чем у высококипящих.

Цетановое число дизельного топлива, в свою очередь, обусловлено фракционным и химическим составом. Олефиновые углеводороды и на- алканы имеют самые высокие значения ЦЧ, а ароматические углеводороды - наоборот, самые низкие значения цетановых чисел. [15]. 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 [15]:

$$\text{ОЧМ} = (105.9 - \text{ЦЧ})/0.94 \quad (17)$$

2.4 Методы исследования свойств дизельных топлив

Наиболее важным показателем качества дизельного топлива является цетановое число, которое характеризует воспламеняемость дизельного топлива и определяет период задержки воспламенения смеси (промежуток времени от впрыска топлива в цилиндр до начала его горения). Чем больше цетановое число, тем меньше задержка воспламенения и тем более плавно горит топливная смесь.

Для обеспечения оптимальной работы современных дизельных двигателей применяются дизельные топлива с цетановым числом от 45 до 55. Если цетановое число меньше 40, то резко возрастает задержка горения и

скорость роста давления в камере сгорания, при этом прогрессирует износ двигателя. Стандартное дизтопливо имеет цетановое число от 48 до 52 единиц, топливо высшего качества (премиальное) характеризуется цетановым числом от 51 до 55 единиц. В соответствии с российским стандартом и стандартом Таможенного Союза [16,17], цетановое число летнего и зимнего дизельного топлива должно составлять не менее 48 единиц, согласно [18] — не менее 45 единиц. Вместе с тем, технические условия для зимних марок с депрессорными присадками допускают производство арктического топлива с цетановым числом не менее 40. При достижении цетанового числа больше 60 единиц снижается полнота сгорания топлива, также увеличивается степень дымности выхлопных газов, возрастает расход топлива.

В дополнение к показателям ЦЧ используются и другие расчетные показатели, такие как «цетановый индекс (ЦИ)» и «дизельный индекс (ДИ)». Первый является средством для оценки ЦЧ дистиллятных топлив. ЦИ применяют для оценки ЦЧ дизельного топлива в ситуациях, когда невозможно или не целесообразно определять это свойство на испытательной установке.

2.4.1 Экспериментальное определение ЦЧ

Цетановое число дизельного топлива определяют согласно стандартам ASTM D613, ГОСТ 32508-2013 и ISO 5165, сравнивая характеристики сгорания исследуемого топлива с характеристиками сгорания смесей эталонных топлив, для которых известны значения цетанового числа. Испытания проводят в специальном двигателе Cooperative Fuel Research (CFR) Engine (США) или его российском аналоге ИДТ-90, при стандартных рабочих условиях.

Сравнение проводят с двумя образцами эталонных топлив со значениями цетановых чисел большим и меньшим, чем у образца (процедура,

называемая "взятие в вилку"). Изменяют степень сжатия до получения на маховике определенного угла задержки воспламенения. Полученное значение должно лежать между показаниями маховика, измеренными для двух взятых эталонов. Неизвестное цетановое число дизельного топлива вычисляется далее по простой формуле методом линейной интерполяции. [19].

Данный метод определения цетанового числа дизельного топлива, называемый моторным, используется с 40-х годов 20-го века. Он долгое время считался не имеющим альтернативы, при этом имея следующие недостатки:

- крупное, дорогостоящее и шумное оборудование, требующее специально оборудованного машзала;
- высокий объем пробы, требуемый для одного анализа (до 1 л);
- высокая длительность проведения анализа (иногда занимает несколько часов);
- низкие показатели прецизионности.

Вследствие вышеизложенных недостатков в нефтяной отрасли стабильно ведутся исследования, нацеленные на поиск альтернатив моторным методам определения цетанового числа.

2.4.2 Расчетные методы определения ЦИ и ЦЧ дизельных топлив

Цетановый индекс дизельных топлив можно рассчитать в соответствии с международным стандартом ISO 4264 «Petroleum products – Calculation of cetane index of middle-distillate fuels by the four variable equation» [20], регламентирующим метод расчета ЦИ для среднестиллятных топлив по уравнению, включающему четыре переменных.

Сущность метода состоит в определении по стандартным методам плотности при температуре 15 °С и температур, при которых перегоняется 10

об.%, 50 об.% и 90 об.% пробы и расчете цетанового индекса по этим данным.

Цетановый индекс рассчитывается исходя из уравнения ниже, при этом подставляя в него измеренные величины:

$$\begin{aligned} \text{ЦИ} = & 42.5 + 0.0892 \cdot T_{10N} + (0.131 + 0.901B) \cdot T_{50N} + \\ & + (0.0523 - 0.42B) \cdot T_{90N} + [0.00049 \cdot (T_{10N}^2 - T_{90N}^2)] + 107B + 60B^2; \end{aligned} \quad (18)$$

$$T_{10N} = T_{10\%} - 215; \quad T_{50N} = T_{50\%} - 260; \quad T_{90N} = T_{90\%} - 310;$$

$$B = [\exp(-0.0035 \cdot D_N)] - 1; \quad D_N = D - 850;$$

где ЦИ – цетановый индекс; $T_{10\%}$, $T_{50\%}$, $T_{90\%}$ – температура кипения 10%, 50%, 90%-ной (по объему) фракции, °C; D – плотность топлива при 15 °C, кг/м³.

Также возможно рассчитать цетановый индекс дизельных топлив по ГОСТ 27768-88 «Топливо дизельное. Определение цетанового индекса расчетным методом» [21]. Метод базируется на определении плотности дизельного топлива при 15 °C и средней температуры кипения 50 %-ной (по объему) фракции дизельного топлива.

Цетановый индекс (ЦИ) рассчитывается из уравнения:

$$\begin{aligned} \text{ЦИ} = & 454.74 - 1641.416 \cdot \rho_4^{15} + 774.74 \cdot (\rho_4^{15})^2 - 0.554t + 97.803 \\ & \cdot (\lg t)^2 \end{aligned} \quad (19)$$

где ρ_4^{15} – плотность при 15 °C, определенная по ГОСТ 3900-85, г/см³;

t – температура кипения 50%-ной (по объему) фракции с учетом поправки на нормальное барометрическое давление 101,3 кПа, определяется по ГОСТ 2177-82, °C.

Цетановый индекс дизтоплива в свою очередь можно приближенно рассчитать по формуле:

$$\text{ЦИ} = \nu^{20} + 17.8 \cdot \left(\frac{1.5879}{\rho^{20}} \right), \quad (20)$$

где ν^{20} – вязкость топлива при 20 °С, мм² /с; ρ^{20} – плотность топлива при 20 °С, г/см³.

Имеет место быть нижеприведенная эмпирическая зависимость между цетановым индексом и октановым числом топлива (формула Гуреева) [22]:

$$\text{ЦИ} = 60 - 0.5 \cdot \text{ОЧ} \quad (21)$$

Для определения цетанового индекса нефтяных фракций используется также следующее уравнение:

$$\text{ЦИ} = 415.26 - 7.673\gamma + 0.186T_{\text{ср}} + 3.503 \cdot \lg T_{\text{ср}} - 193.816 \cdot \lg T_{\text{ср}} \quad (22)$$

где γ – относительный удельный вес нефтяных фракций; $T_{\text{ср}}$ – средняя температура разгонки топлива, °F.

Кроме того, существует формулы, позволяющие с высокой точностью рассчитать ЦЧ углеводородных смесей, например [22]:

- по анилиновой точке

$$\text{ЦЧ} = T_a - 15.5, \quad (23)$$

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

- по групповому составу

$$\text{ЦЧ} = 0.85 \cdot \text{П} + 0.1 \cdot \text{Н} - 0.2 \cdot \text{А}, \quad (24)$$

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

По данным разных авторов формулы для расчета цетанового числа для различных фракций приведены в таблице 2 [22].

Таблица 2 – Формулы расчета цетанового числа

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

2.5 Связь состава и структуры со свойствами моторных топлив

Очевидно, что все свойства моторных топлив зависят от их состава.

Например, склонность какого-либо моторного топлива к детонации определяется составом и природой углеводородов, входящих в его состав, и их процентным соотношением.

Нормальные парафины при окислении в условиях камеры сгорания образуют активные промежуточные соединения - перекиси, гидроперекиси, провоцирующие детонационное горение, поэтому нормальные парафины обладают низкими октановыми числами и устойчивость к детонации уменьшается с ростом молекулярной цепочки.

Изопарафины более устойчивы к окислению, причем увеличение степени разветвленности, симметричное расположение метильных групп и приближение их к центру молекулы способствуют повышению детонационной стойкости изопарафинов.

Циклопарафины или нафтены достаточно широко представлены в топливах, они более устойчивы, по сравнению с парафинами, к окислению в высокотемпературных условиях и имеют более высокие октановые числа.

В моторных топливах также содержатся непредельные углеводороды - олефины (алкены). В молекуле углеводорода могут присутствовать одна или две двойные связи, обуславливающие химическую нестабильность бензинов и дизельных топлив.

Ароматические углеводороды обладают очень высокой детонационной стойкостью (октановое число более 100), однако склонны к образованию сажи, гигроскопичны, растворяют резиновые материалы, поэтому присутствие их в топливе нежелательно.

Установлено, что в топливных смесях имеют место межмолекулярные взаимодействия, обусловленные полярностью молекул компонентов смеси. Данные взаимодействия приводят к изменению конфигураций молекул, а также являются причиной склонности к ассоциации углеводородных и неуглеводородных компонентов, что приводит к образованию ассоциатов – надмолекулярных структур. Образование в топливной смеси надмолекулярных структур оказывает влияние на свойства смеси в целом, в том числе и на ОЧ и ЦЧ.

2.5.1 Использование топологических индексов для расчета ОЧ и ЦЧ

Чтобы определить взаимосвязь между строением и свойствами соединений, в зависимости от природы исследуемых химических соединений и анализируемых свойств, применяются различные методы математического моделирования. Особо интересующее место занимают топологические подходы, опирающиеся на использовании только информации, которую содержит в себе структурная формула исследуемого соединения. Для установления корреляции «структура – свойство» топологический подход является довольно быстрым и удобным, так как отличается высокой информативностью и широкими аналитическими и прогнозирующими возможностями, что указывает на его перспективность. Топологическая оценка структуры соединений является распространенным методом описания характеристик химических структур. [23].

Во время изучения взаимосвязи «структура-свойства» важно преобразовать молекулярную структуру соединения в единый

характеристический структурный дескриптор, который выражается числовым (топологическим) индексом.

ТИ используются с целью кодирования химической информации, оценки реакционной способности молекул, при проведении планирования химических экспериментов и для количественной оценки химических структур во время анализа взаимосвязи между молекулярными структурами и их свойствами. [24].

Преимущество топологических показателей заключается в том, что для них не требуются сложные экспериментальные определения или квантово-химических расчеты, их расчет производится непосредственно исходя из структурной формулы соединения. Данное преимущество особенно важно при оценке свойств гипотетических структур, для которых могут отсутствовать различные данные. Основными недостатками ТИ являются невозможность учесть все характеристики молекулярной структуры и сложность ее физико-химической интерпретации. Однако полученные с их помощью корреляции оказались очень полезными для решения различных практических задач.

Многие физико-химические характеристики дают корреляции с ТИ (температура кипения, температура плавления, плотность, теплота образования и распыления, молекулярная поляризуемость и преломление, растворимость, молярный объем, диамагнетизм, октановое число, цетановое число и т. д.) и величинами, характеризующими биологическую активность соединений.

Следовательно, структурный анализ должен проводиться в рамках проблемы «структура-свойство», которая сводится к использованию методов теории графов для работы с соответствующей абстрактной математической структурой.

Молекулярный граф - это двумерное изображение молекул, в которых вершины соответствуют атомам, а ребра соответствуют химическим связям молекул. В этом случае обычно рассматриваются атомы скелета (без учета атомов водорода) и связи между атомами. [25].

Существуют наиболее известные топологические индексы. К ним относят индексы Винера, Рандича, Балабана, индекс среднего расстояния и другие.

Индекс Винера (также называемый числом Винера) [26] – это топологический индекс молекулы, определяемый как сумма длин кратчайших путей между всеми парами вершин в химической формуле вещества или, точнее, сумма всех атомов углерода в молекулярном углеродном скелете.

Чтобы рассчитать индекс Винера, строится матрица расстояний и находится сумма наддиагональных или поддиагональных элементов матрицы или половина суммы матричных элементов. Матрица расстояний включает в себя количество ребер, соединяющих все пары вершин в химической формуле вещества.

Индекс Винера можно рассчитать по формуле [26]:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N dij, \quad (25)$$

где dij – это недиагональные элементы матрицы, или кратчайшие расстояния между вершинами i и j , при $i \neq j$;

N - число таких вершин в молекулярном графе.

Формула для расчета недиагональных элементов матрицы расстояний:

$$dij = \frac{1}{b_{kl}} \frac{36}{z_k \cdot z_l}, \quad (26)$$

где z_k , z_l – заряды ядер (порядковый номер) атомов i и j , связанных между собой; b – порядок связи.

При $i = j$ диагональные элементы матрицы расстояний определяются следующим образом:

$$d_{ii} = 1 - \frac{6}{z_i}, \quad (27)$$

где z_i – число всех валентных электронов.

Индексы связанности Рандича [27] показывают информацию о числе всех атомов в молекуле соединения, их связях и наличии разветвлений.

Рассчитывается индекс связанности Рандича для различных уровней связанности атомов в молекуле между собой.

Формула для расчета индекса связанности нулевого порядка:

$$\chi^0 = \sum (\delta_i)^{-1/2}, \quad (28)$$

где δ_i – валентная величина.

Формула для расчета валентной величины:

$$\delta_i = z_i - h_i, \quad (29)$$

где z_i – число электронов валентной оболочки i -го атома, h_i – число атомов водорода, связанных с i -ым атомом.

Индекс связанности первого порядка рассчитывается по формуле:

$$\chi^1 = \sum (\delta_i \cdot \delta_j)^{-1/2}, \quad (30)$$

где δ_i и δ_j – валентные величины для двух атомов связи q , i и j – атомы, образующие данную связь.

Существует обобщённый структурный параметр χ порядка u . Его вычисляют по формуле [27]:

$${}^u\chi = \sum_{i=1}^n \sqrt{\delta_i^1 \delta_i^2 \delta_i^3 \dots \delta_{iu}}, \quad (31)$$

Для некоторых гетероатомных группировок валентные величины приведены в таблице 3.

Таблица 3 - Валентные величины для гетероатомных группировок [27]

Группа	δ	Группа	δ
-NH ₂	3	-ОН	5
>NH	4	О (в фуране)	6
>N-	5	>CO	6
N (в пиридине, хиолине)	5	F	-20
N (в нитрогруппе)	6	Cl	0.690
-CN	5	Br	0.254
-O-	6	I	0.085

Индекс среднего расстояния (D_{ADTI}) [28] рассчитывается также с использованием матрицы расстояний. Формула состоит из суммирования элементов матрицы расстояний, а затем деления на число атомов углерода, составляющих соединение. Другими словами, индекс равен среднему расстоянию от любого атома до всех атомов в структуре, описанным молекулярным графом. Данный молекулярный дескриптор используется для моделирования «структура – свойство».

$$D_{ADTI} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N D_{ij}, \quad (32)$$

где N – количество атомов углерода в соединении, D_{ij} – элементы матрицы расстояний молекулярного графа G , представляющие наименее короткую дистанцию между вершинами i и j графа G .

Центрический индекс Балабана [29] предложен для описания нециклических молекул:

$$B = \sum_{i=1}^r \delta_i^2, \quad (33)$$

где δ_i^2 - количество концевых вершин (атомов) молекулярного графа на i -той итерации «стирания» (отсечения) вершин молекулярного графа концевых. В порядке нахождения центра или бицентра молекулярного графа типа «дерево» удаляются вершины 1 степени и ребра, связывающие эти вершины, удаляемые с остальными вершинами молекулярного графа; эта операция повторяется до тех пор, пока не удалится бицентр молекулы. Данную операцию называют обрезанием дерева.

2.5.2 Метод группового вклада для оценки ОЧ и ЦЧ

Методы группового вклада используются для корреляции свойств сгорания топлива, включая температуру самовоспламенения, время задержки зажигания, октановое число и цетановое число. [30].

Методы группового вклада имеют преимущество относительно простого подхода к описанию молекулярной структуры. Эти методы не требуют вычисления абстрактных топологических индексов или сложных описаний трехмерных структур, поэтому методы группового вклада легкодоступны широкому кругу научных и инженерных кругов.

Данные методы оценки могут быть использованы для оптимизации химического процесса путем адаптации селективности реакции, это может сократить количество операций на единицу, потребление сырья и энергопотребление, что повышает общую экономичность процесса и снижает выбросы парниковых газов.

Корреляция структура-свойство для октанового числа и для цетанового числа намного сложнее, чем термодинамические свойства жидкостей и газов, потому что они связаны с кинетикой горения.

Целью данного метода является разработка надежной корреляции структура – свойство для оценки цетановых и октановых чисел углеводородов и кислородсодержащих углеводородов по химической структуре. Хотя такая корреляция не заменит потребность в фактических измерениях, она будет очень полезным инструментом скрининга для оценки топлива на ранних стадиях процесса исследований и разработок. ЦЧ и ОЧ указывают на качество топлива и, следовательно, его экономическую ценность.

Расчет по методу групповых вкладов производится с использованием уравнения четвертого порядка:

$$Z_k = a_k + b_k \cdot x_k + c_k \cdot x_k^2 + d_k \cdot x_k^3 + e_k \cdot x_k^4, \quad (34)$$

где a_k, b_k, c_k, d_k, e_k – эмпирические константы

Z_k – определяемое свойство (ОЧИ, ОЧМ, ЦЧ)

x_k - сумма групповых факторов вклада для свойства k

$$x_k = \sum G_{j,k} \cdot n_j, \quad (35)$$

где $G_{j,k}$ - вклад группы j в свойство k, а n_j - число j групп в молекуле.

2.5.3 Использование суррогатных топлив для определения ОЧ

По мере роста спроса на энергоносители в мире растет и потребность в более эффективных автомобильных транспортных средствах. Одной из основных проблем и ограничивающих факторов в автомобильной промышленности является детонация двигателя. [31].

Виды топлива, такие как бензин, дизельное и реактивное топливо представляют собой сложные смеси сотен различных компонентов, поэтому химия самовоспламенения товарного топлива очень сложна и ее трудно предсказать.

Для упрощения этой проблемы предложено моделировать поведение топлива с помощью простых смесей (суррогатов), которые имитируют реальные свойства топлива при определенных условиях. Изооктан является самым простым заменителем бензина и обычно используется для описания распространения пламени. Однако свойства самовоспламенения реального бензина не могут быть адекватно описаны изооктаном из-за его высоких октановых чисел ($OCH = OCM = 100$). Поэтому для соответствия октановых чисел бензина используются первичные эталонные топлива (ПЭТ), которые представляют собой смеси н-гептана и изооктана.

По определению, ПЭТ имеют нулевую чувствительность, которая определяется как разница между OCH и OCM . Следовательно, для соответствия реальным октановым числам бензина необходимы два разных ПЭТ. Товарные бензиновые топлива имеют чувствительность до 11 из-за содержания значительного количества разветвленных парафинов, олефинов и ароматических соединений. Таким образом, к смеси ПЭТ должен быть добавлен чувствительный компонент, чтобы соответствовать октановым числам и чувствительности реального бензина, данным компонентом может являться ароматическое соединение, такое как толуол.

По результатам аналитического обзора, можно сделать вывод, что некоторые методы определения основных характеристик топлива (OC и $ЦЧ$), например, при помощи ТИ и суррогатных смесей, обладают преимуществом над другими методами, т.к. не требуют калибровки на образцах топлива с известными $OC/ЦЧ$ и могут давать меньшую погрешность. Наиболее перспективными методами являются: метод корреляции $OC-ЦЧ$; $OC(ЦЧ)$ – топологические индексы и $OC(ЦЧ)$ – групповые вклады.

3 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ

Определение октанового числа (ОЧ) и цетанового числа (ЦЧ) – задача, которая всегда будет актуальна при производстве моторных топлив. Для экспериментального определения октанового и цетанового чисел требуются стационарные установки и большие денежные затраты. Определение ОЧ по данным хроматограммы – достаточно дорогостоящий, длительный и недостаточно достоверный процесс. Поэтому разработка достоверных экспресс-методов - это актуальная задача, как для промышленных предприятий, так и для исследователей, занимающихся разработкой добавок и топливных композиций.

По результатам аналитического обзора, наиболее перспективными являются: метод корреляции ОЧ-ЦЧ; ОЧ(ЦЧ) – топологические индексы и ОЧ(ЦЧ) – групповые вклады.

Цель данной работы заключается в исследовании и разработке расчетных методов для определения октанового и цетанового чисел, являющихся важнейшими эксплуатационными характеристиками моторных топлив.

Поскольку топливные композиции – это сложные многокомпонентные смеси, целесообразно на первом этапе выявить закономерности для отдельных групп углеводородов и смесей простого состава, которые достаточно хорошо изучены.

Объектами исследования является моторные топлива и их компоненты.

Для достижения цели необходимо:

- выполнить поиск и анализ адекватности существующих методов расчета;

- выполнить поиск надежных экспериментальных данных;
- разработать корреляции ОЧ-ЦЧ для различных групп соединений;
- разработать метод определения ОЧИ, ОЧМ и ЦЧ, опираясь на топологические индексы;
- произвести расчет ОЧИ, ОЧМ и ТИ для суррогатных смесей топлива;
- выполнить расчет ОЧИ, ОЧМ и ЦЧ для суррогатных смесей топлива с помощью метода группового вклада;
- оценить погрешность результатов;
- сделать выводы и дать рекомендации.

4 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

4.1 Объект и методы исследования

В данной работе объектами исследования служили:

- компоненты моторных топлив;
- различные гомологические группы углеводородов, входящие в состав моторных топлив;
- оксигенаты, используемые в качестве октаноповышающих добавок;
- суррогатные топлива.

Метод исследования – моделирование основных свойств моторных топлив.

4.2 Построение корреляционных зависимостей октанового и цетанового чисел

Для установления зависимости ОЧ и ЦЧ друг от друга были использованы данные, представленные в [32]. Корреляции ОЧ - ЦЧ приведены на рисунках 4-8:

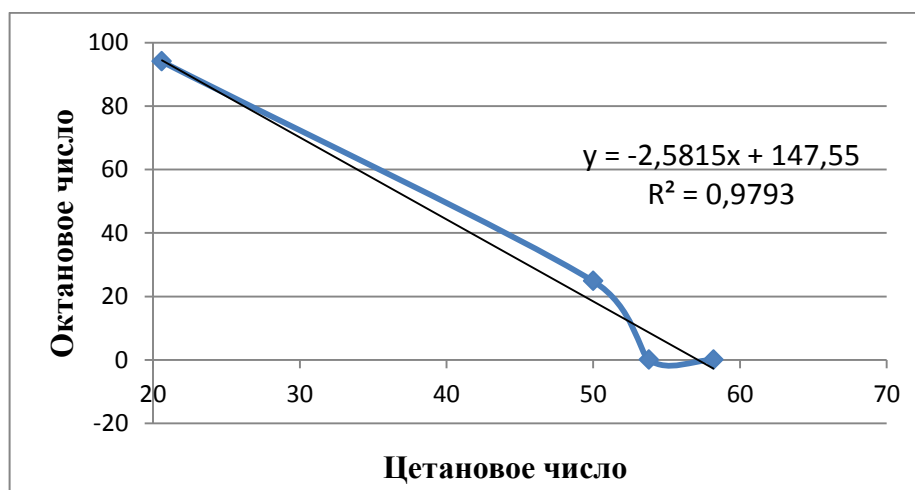


Рисунок 4 – Зависимость ЦЧ от ОЧ для алканов

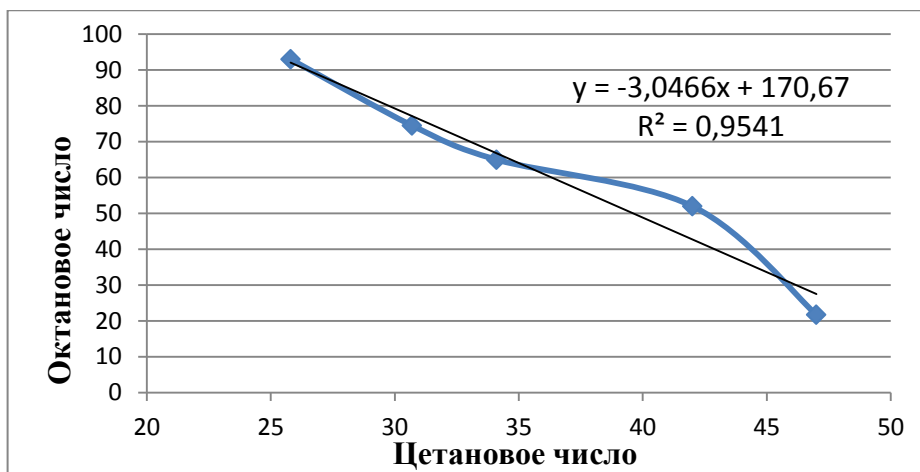


Рисунок 5 – Зависимость ЦЧ от ОЧ для изоалканов

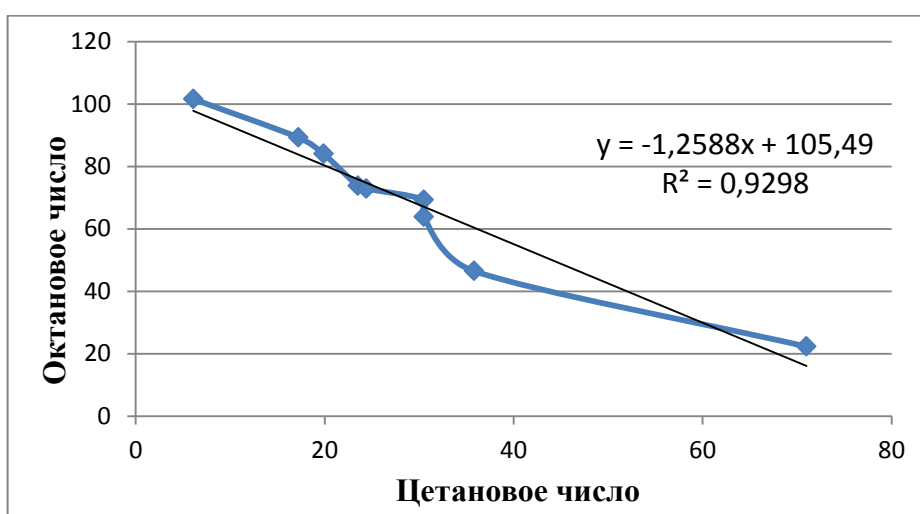


Рисунок 6 – Зависимость ЦЧ от ОЧ для циклоалканов

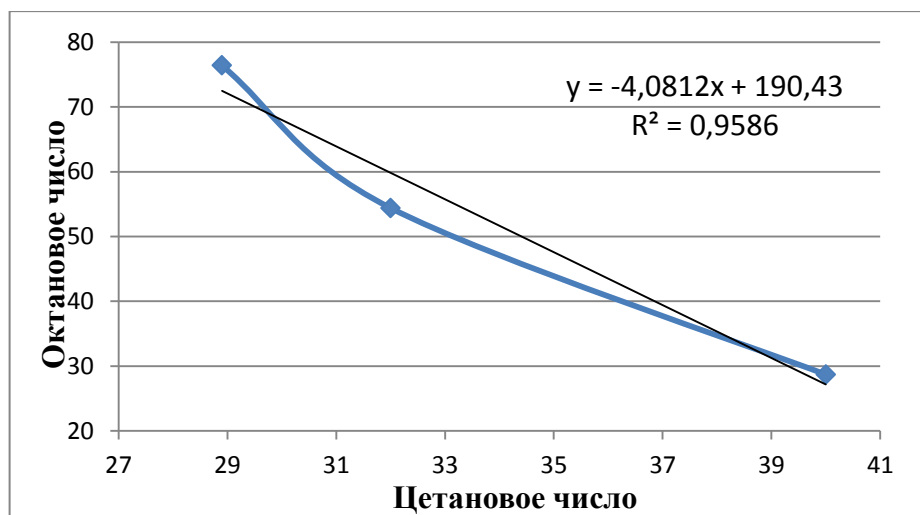


Рисунок 7 – Зависимость ЦЧ от ОЧ для алкенов

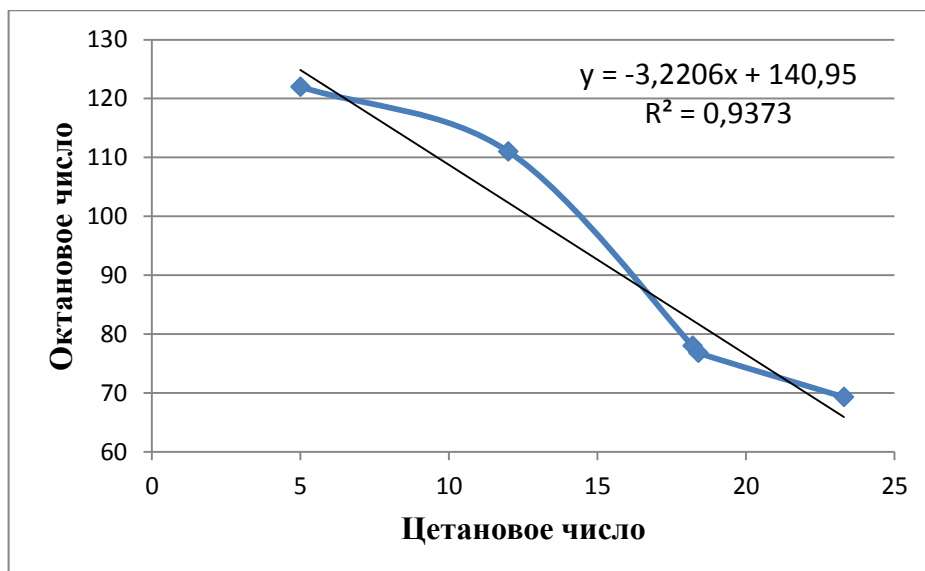


Рисунок 8 – Зависимость ЦЧ от ОЧ для спиртов

Октановое число связано с сопротивлением топлива к самовоспламенению и является важным показателем детонации двигателя, цетановое же число описывает склонность топлива к воспламенению и играет особо важную роль для воспламенения от сжатия.

Погрешность метода оценивается путем сравнения значений ОЧ компонентов, взятых из литературного источника с ОЧ, рассчитанными по полученным уравнениям. Результаты приведены в таблице 4.

Таблица 4 – Средние погрешности метода

Класс соединений	Средняя погрешность, %
алканы	58,66%
изоалканы	9,98%
циклоалканы	9,97%
алкены	6,69%
спирты	5,44%

В сущности, октановое число и цетановое число - противоположные измерения одного и того же явления. Низкое октановое число подразумевает высокое цетановое число, что и подтвердилось наглядно с помощью корреляционных зависимостей, представленных выше. Поэтому естественно подвести итог, что эти параметры взаимосвязаны. Однако для лучшей оценки

данной зависимости необходимы дальнейшие исследования на сложных смесях, содержащих октаноповышающие добавки.

4.3 Расчет топологических индексов

Расчет индексов Винера

Для расчета индекса Винера необходимо составить матрицу расстояний.

Например, для молекулы пропана матрица расстояний имеет следующий вид:

$$\begin{array}{cccc|c} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{3} & \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} & 1 & 2 & 3 \\ \mathbf{2} & 1 & \mathbf{0} & 1 & 1 \\ \mathbf{3} & 2 & 1 & \mathbf{0} & \end{array}$$

Суммируя наддиагональные элементы матрицы, индекс Винера для молекулы пропана численно равен:

$$W = 3 + 1 = 4$$

Рассчитанные в работе индексы Винера для других молекул веществ приведены в таблице А.1 (приложение А).

Расчет индексов связанности Рандича

Проведем расчет также для молекулы пропана:

Рассчитаем валентные величины по формуле (29):

$$\delta_1 = 4 - 3 = 1$$

$$\delta_2 = 4 - 2 = 2$$

$$\delta_3 = 4 - 3 = 1$$

Отсюда индекс Рандича будет равен (30):

$$\chi = 1\sqrt{1 \cdot 2 \cdot 1} = 1,41$$

Рассчитанные в работе индексы Рандича для других молекул веществ приведены в таблице А.1 (приложение А).

Расчет индексов среднего расстояния

Рассчитаем индекс среднего расстояния для молекулы пропана:

Матрица расстояний имеет вид:

	1	2	3
1	0	1	2
2	1	0	1
3	2	1	0

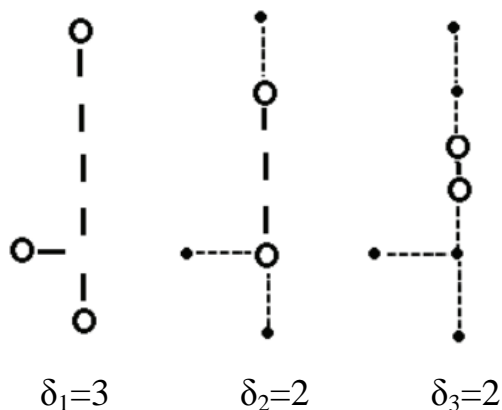
Суммируя элементы матрицы, получаем значение 8. Далее необходимо разделить эту величину на 3 (количество атомов углерода), получаем среднюю сумму расстояний от любого атома углерода до остальных атомов углерода в молекуле 2,67 единиц атомных связей.

Рассчитанные в работе индексы среднего расстояния для других молекул веществ приведены в таблице А.1 (приложение А).

Расчет центрических индексов Балабана

Проведем расчет центрического индекса Балабана для молекулы 2-метилгексана:

Удаляемые вершины помечены кругом, удалённые ребра помечены пунктирной линией, а удалённые вершины - •



По формуле (33) индекс равен:

$$B=3^2 + 2^2 + 2^2=17$$

На основании данных таблицы А.1 (приложение А) построены корреляционные зависимости для различных классов органических соединений их ОЧ(ЦЧ) от рассчитанных топологических индексов (рисунки 9-37).

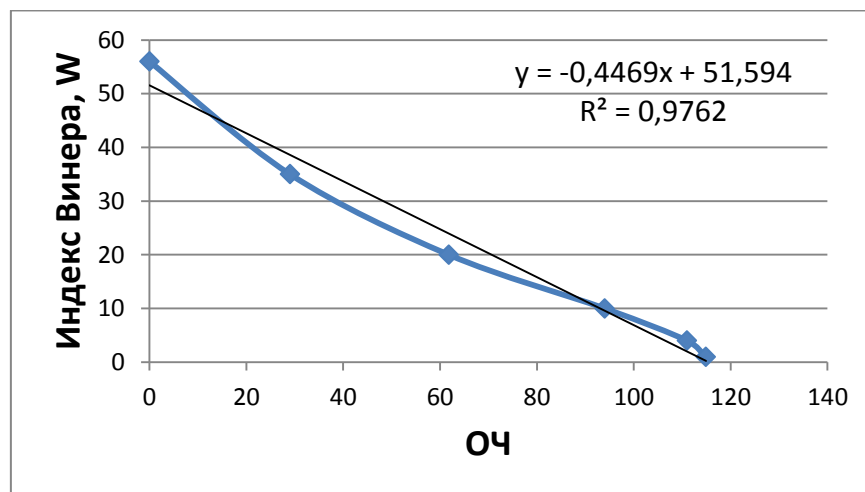


Рисунок 9 – Зависимость ОЧ от индекса Винера для n-алканов

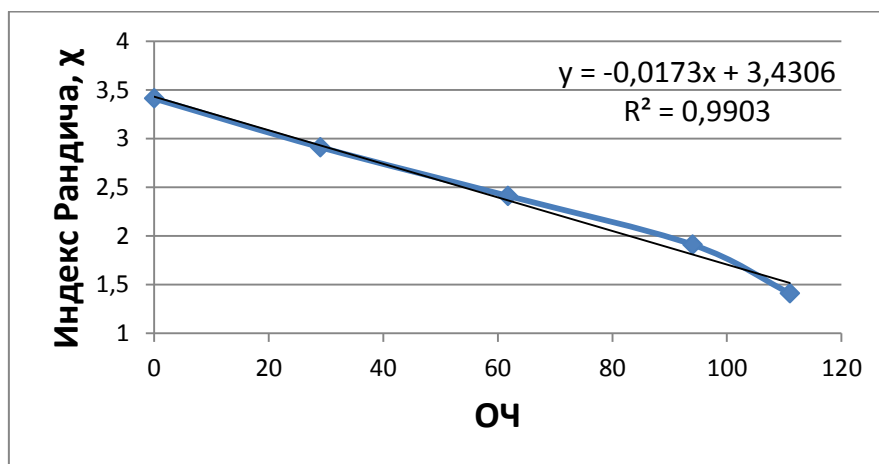


Рисунок 10 – Зависимость ОЧ от индекса Рандича для n-алканов

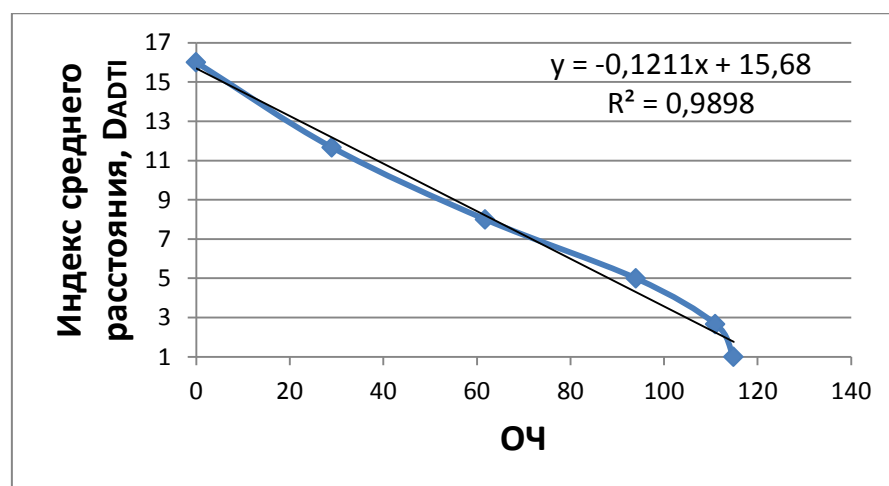


Рисунок 11 – Зависимость ОЧ от индекса среднего расстояния для н-алканов

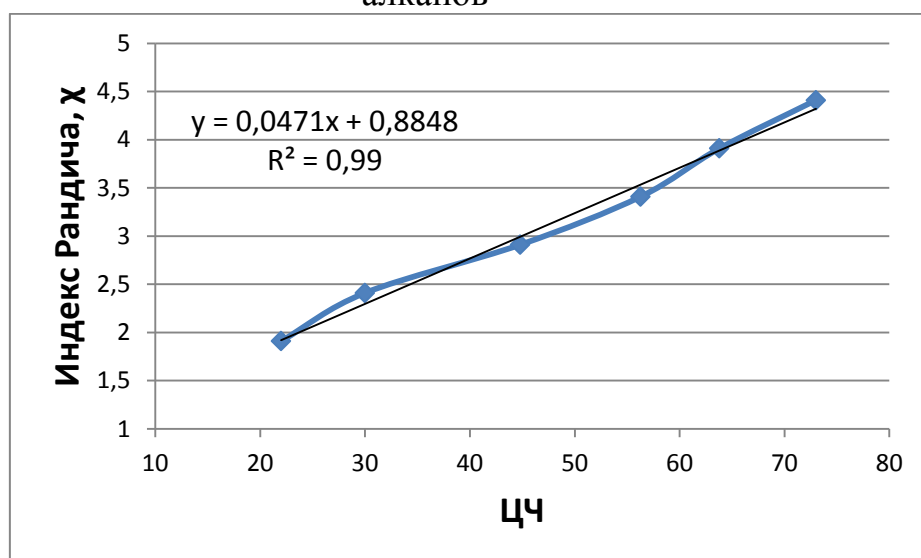


Рисунок 12 – Зависимость ЦЧ от индекса Рандича для н-алканов

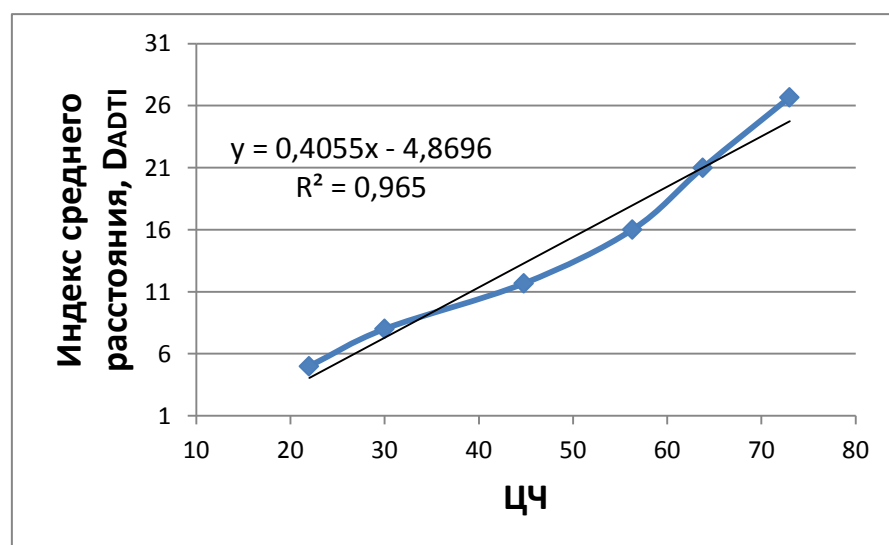


Рисунок 13 – Зависимость ЦЧ от индекса среднего расстояния для н-алканов

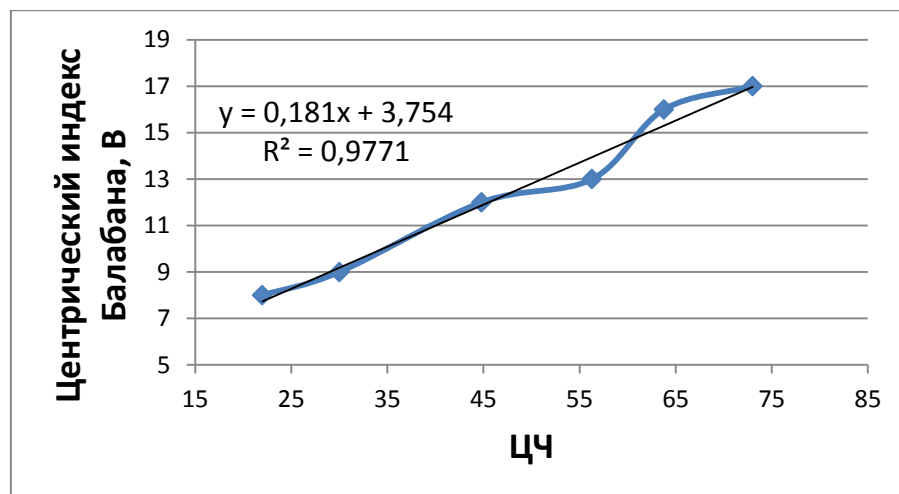


Рисунок 14 – Зависимость ЦЧ от центрального индекса Балабана для n-алканов

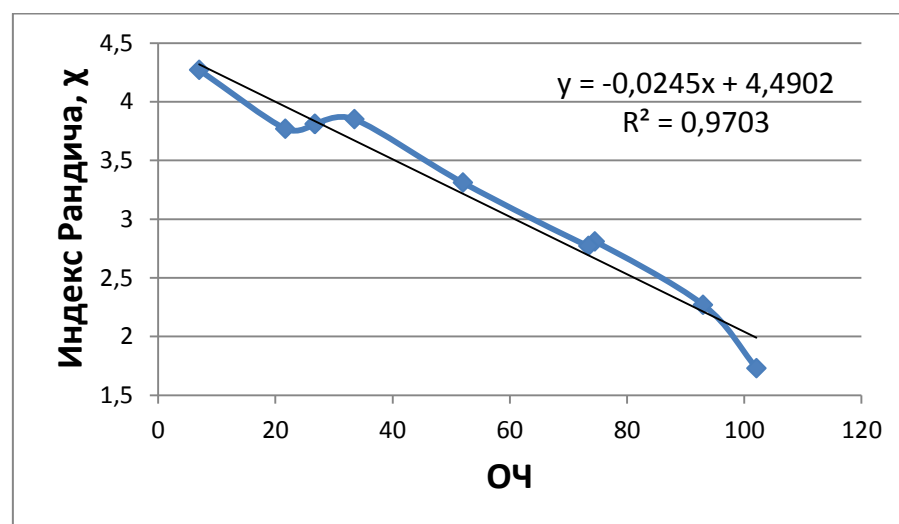


Рисунок 15 – Зависимость ОЧ от индекса Рандича для моно-замещенных алканов

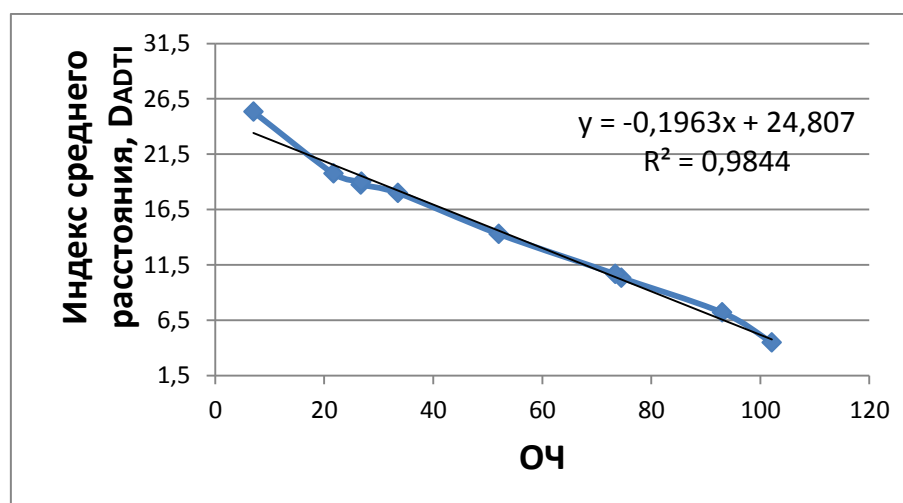


Рисунок 16 – Зависимость ОЧ от индекса среднего расстояния для моно-замещенных алканов

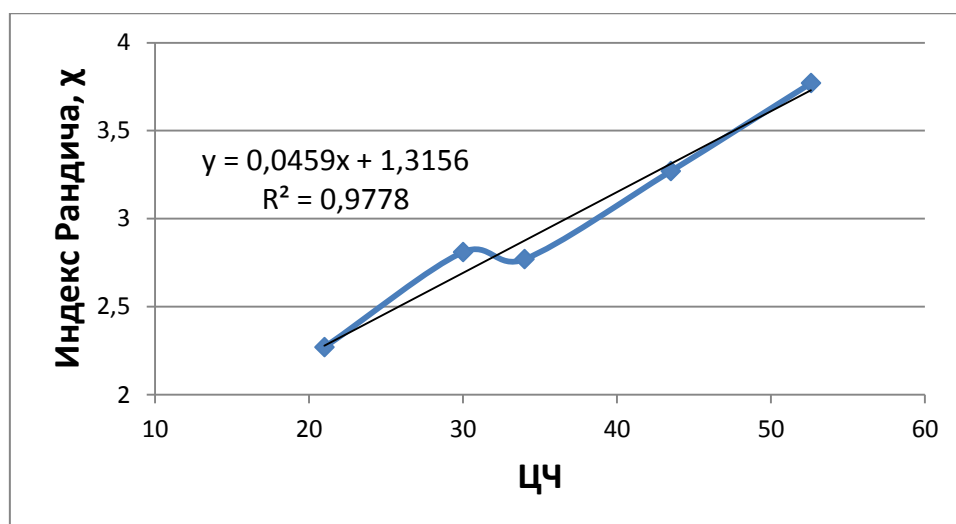


Рисунок 17 – Зависимость ЦЧ от индекса Рандича для монозамещенных алканов

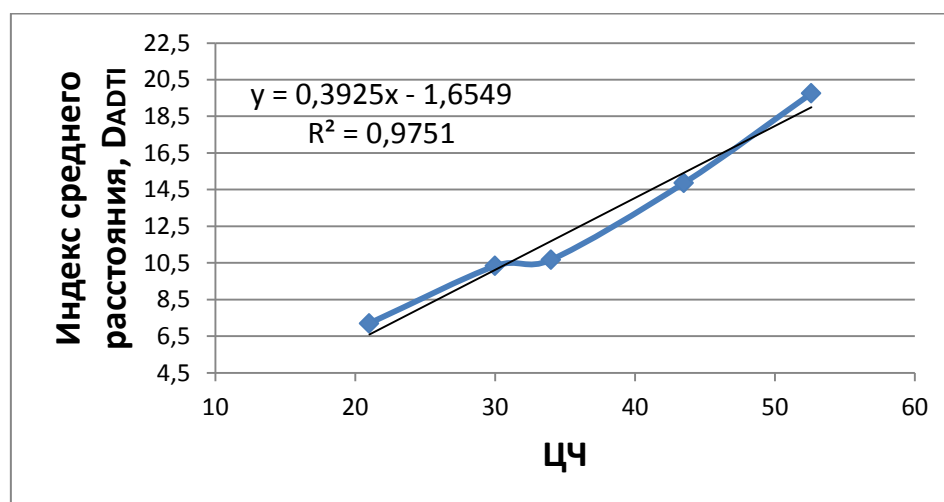


Рисунок 18 – Зависимость ЦЧ от индекса среднего расстояния для монозамещенных алканов

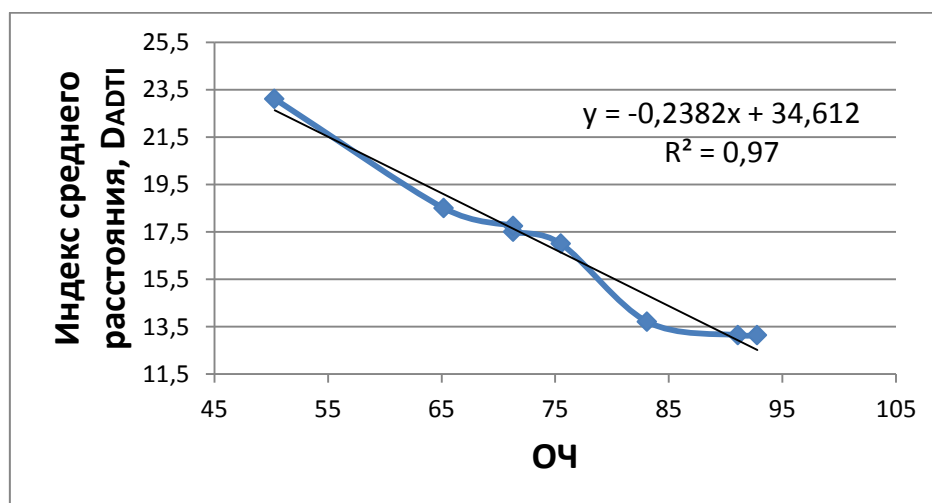


Рисунок 19 – Зависимость ОЧ от индекса среднего расстояния для дизамещенных алканов

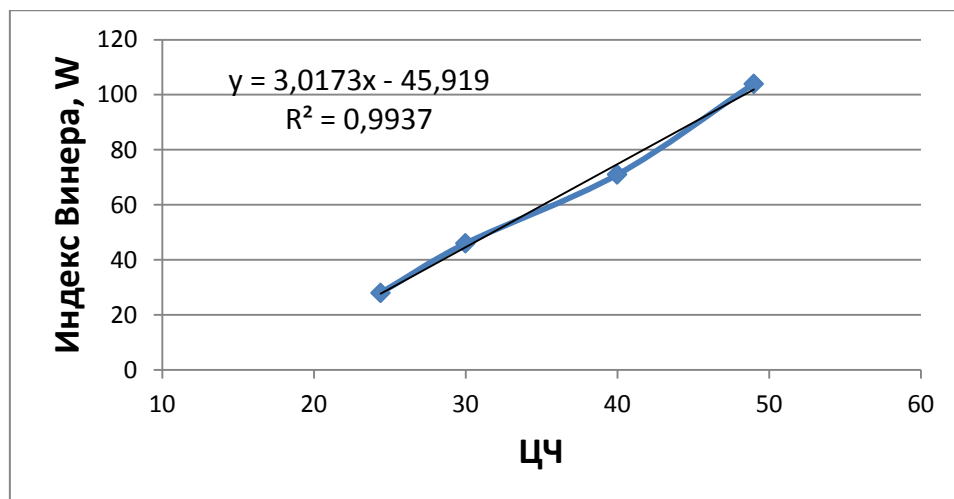


Рисунок 20 – Зависимость ЦЧ от индекса Винера для ди-замещенных алканов

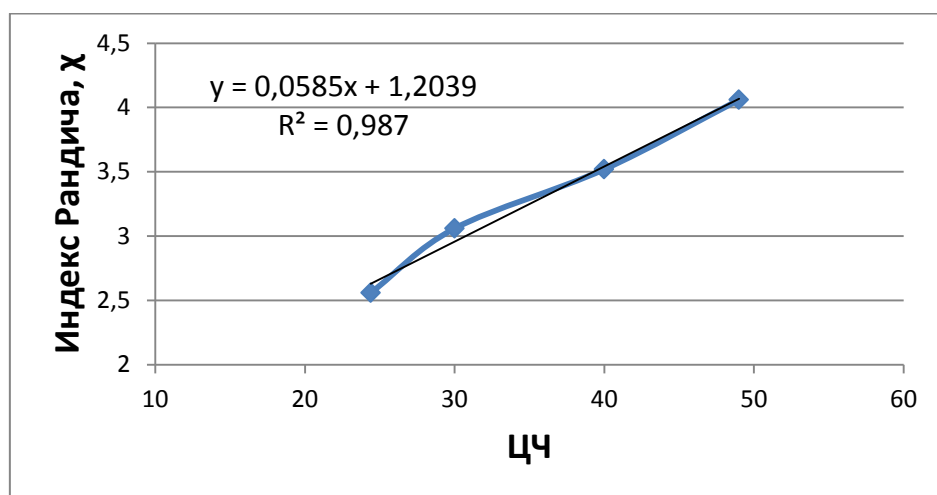


Рисунок 21 – Зависимость ЦЧ от индекса Рандича для ди-замещенных алканов

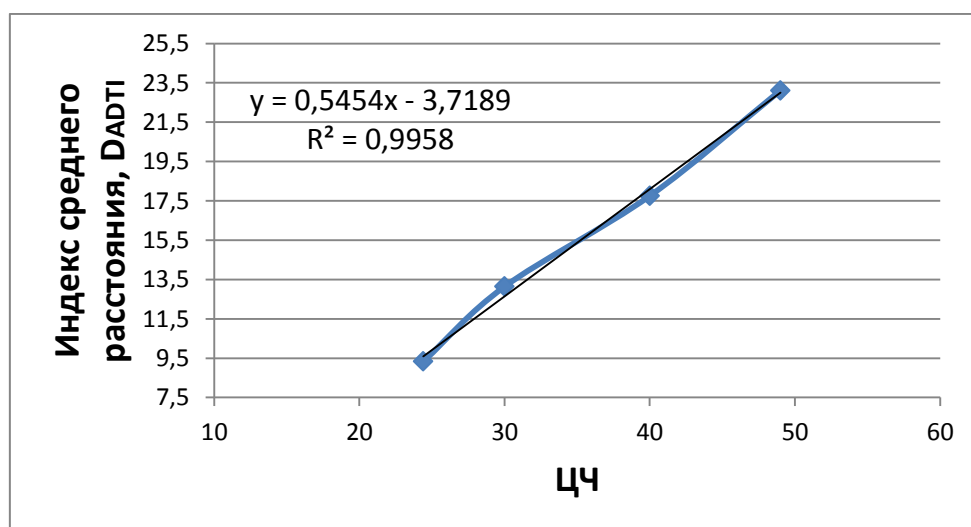


Рисунок 22 – Зависимость ЦЧ от индекса среднего расстояния для ди-замещенных алканов

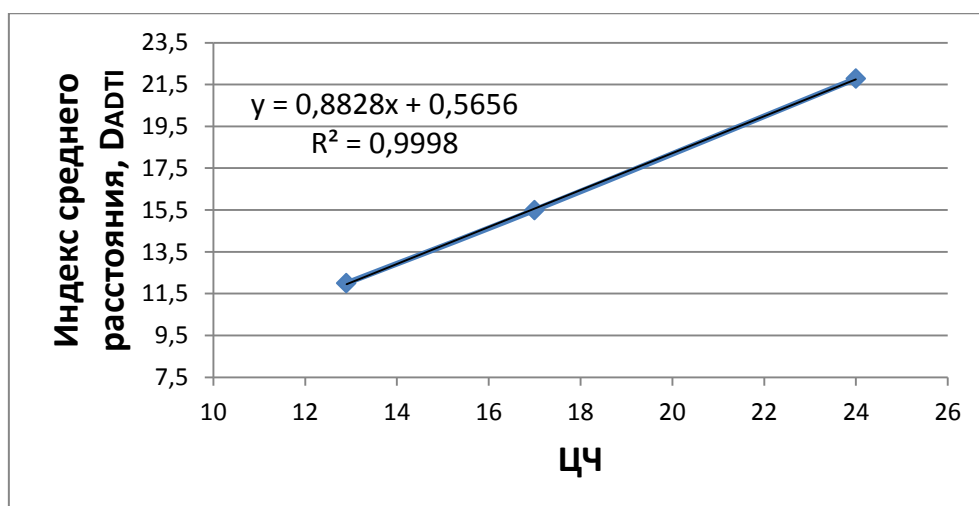


Рисунок 23 – Зависимость ЦЧ от индекса среднего расстояния для три-замещенных алканов

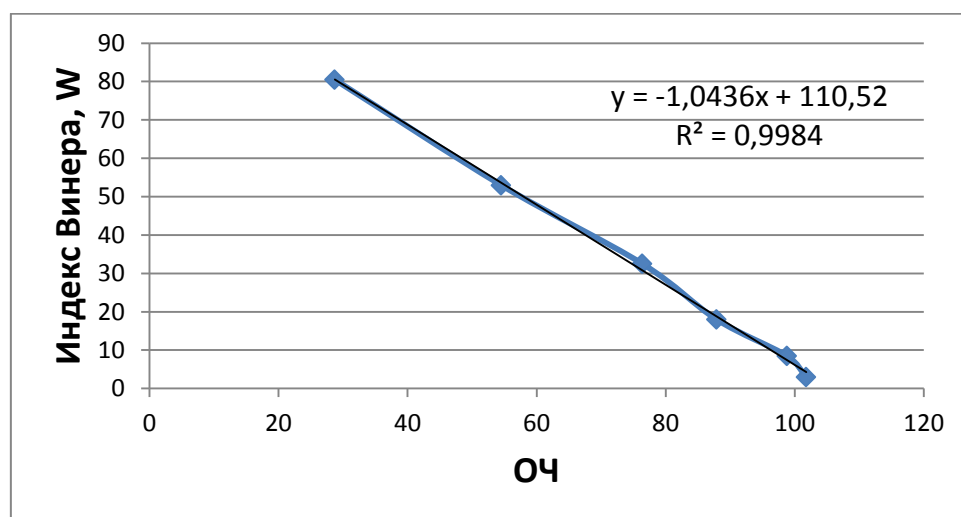


Рисунок 24 – Зависимость ОЧ от индекса Винера для алкенов

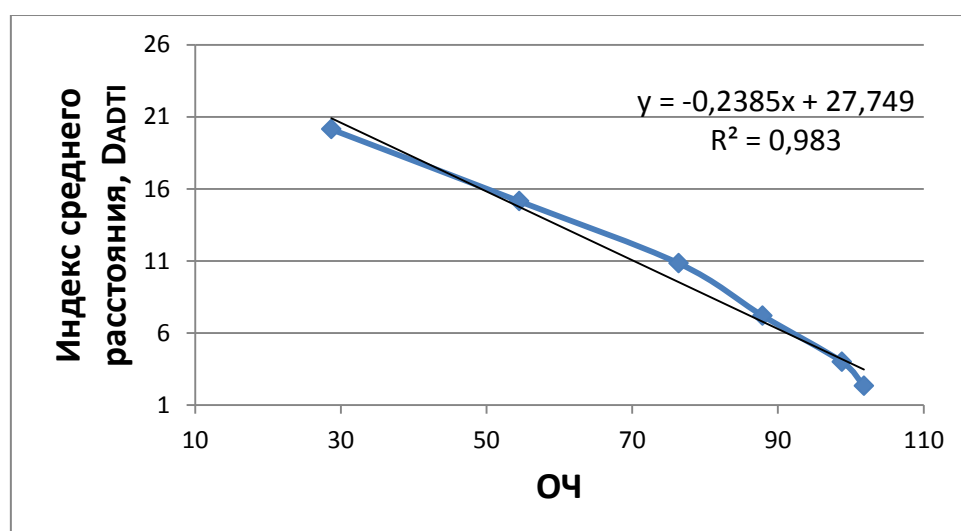


Рисунок 25 – Зависимость ОЧ от индекса среднего расстояния для алкенов

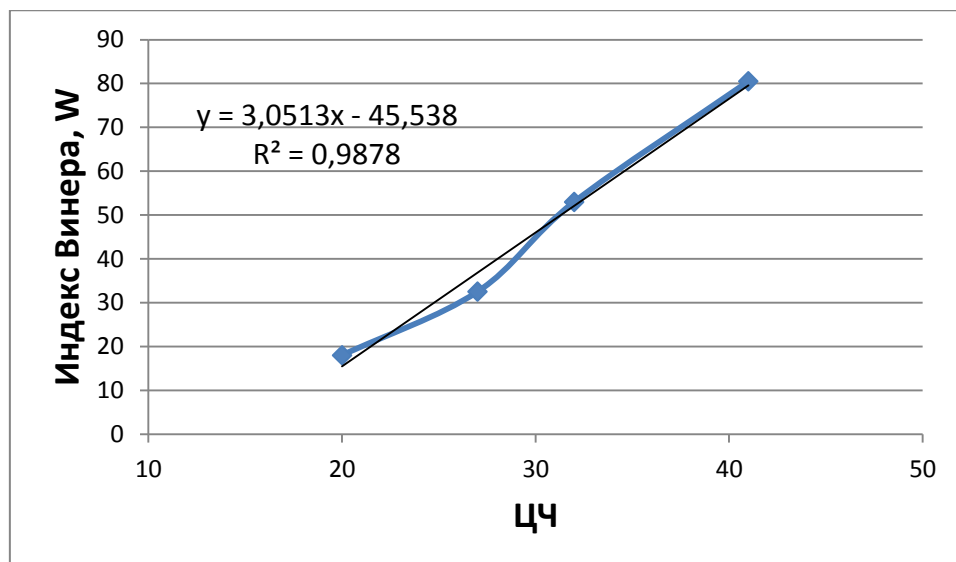


Рисунок 26 – Зависимость ЦЧ от индекса Винера для алкенов

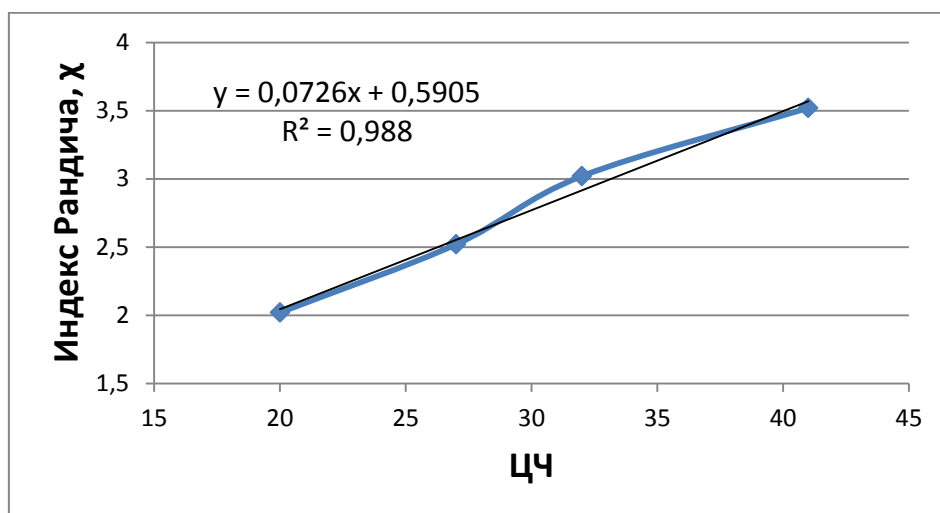


Рисунок 27 – Зависимость ЦЧ от индекса Рандича для алкенов

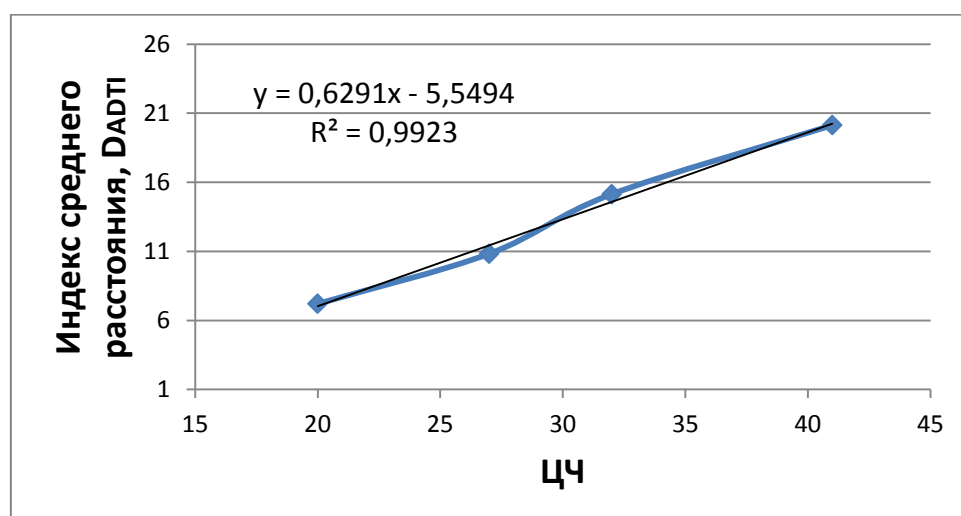


Рисунок 28 – Зависимость ЦЧ от индекса среднего расстояния для алкенов

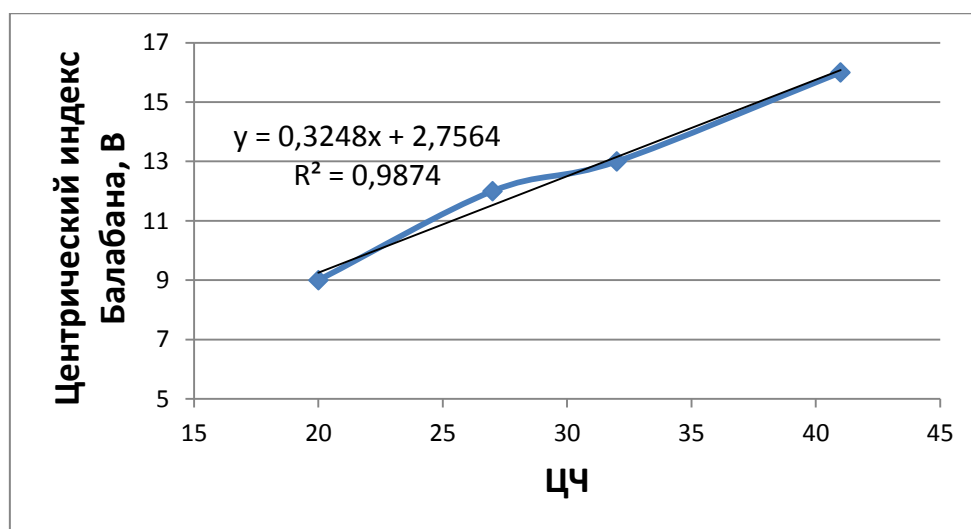


Рисунок 29 – Зависимость ЦЧ от центрального индекса Балабана для алкенов

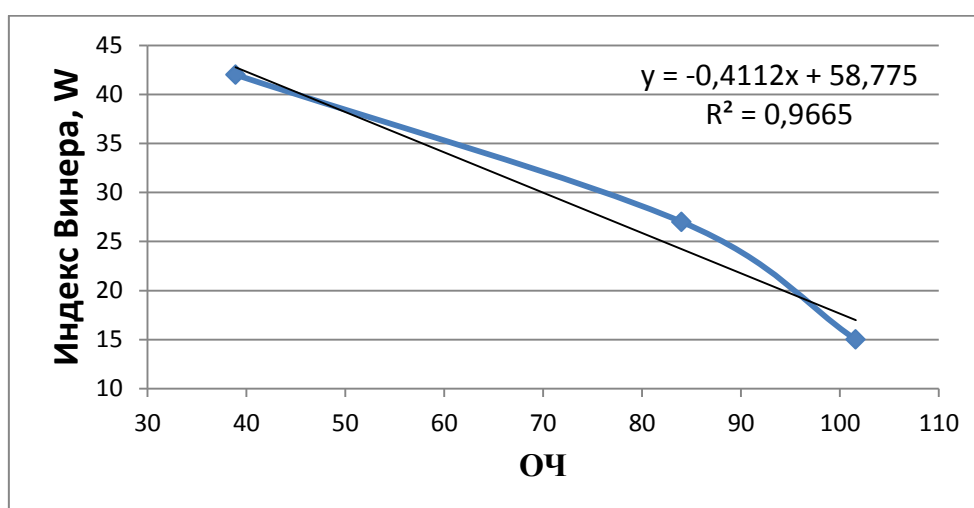


Рисунок 30 – Зависимость ОЧ от индекса Винера для нафтен

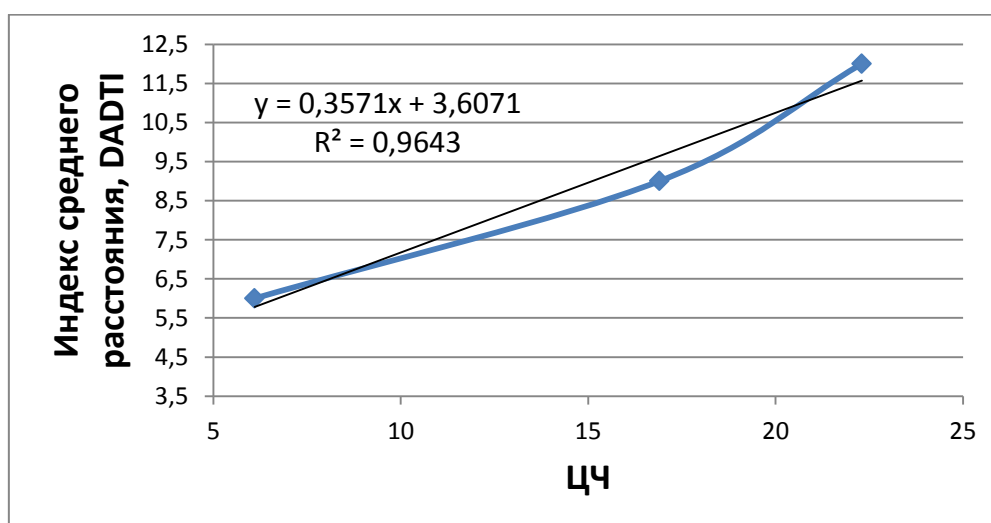


Рисунок 31 – Зависимость ЦЧ от индекса среднего расстояния для нафтен

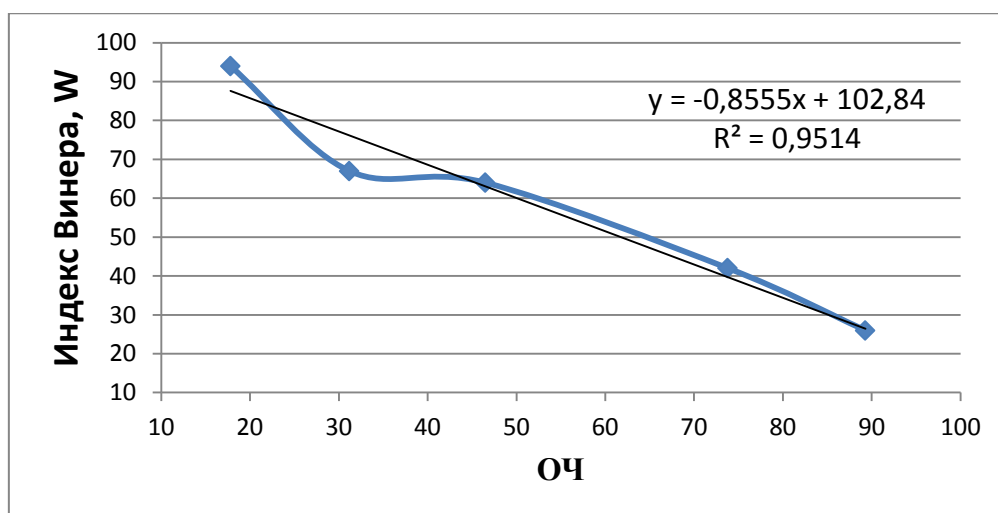


Рисунок 32 – Зависимость ОЧ от индекса Винера для моно-замещенных нафтенных

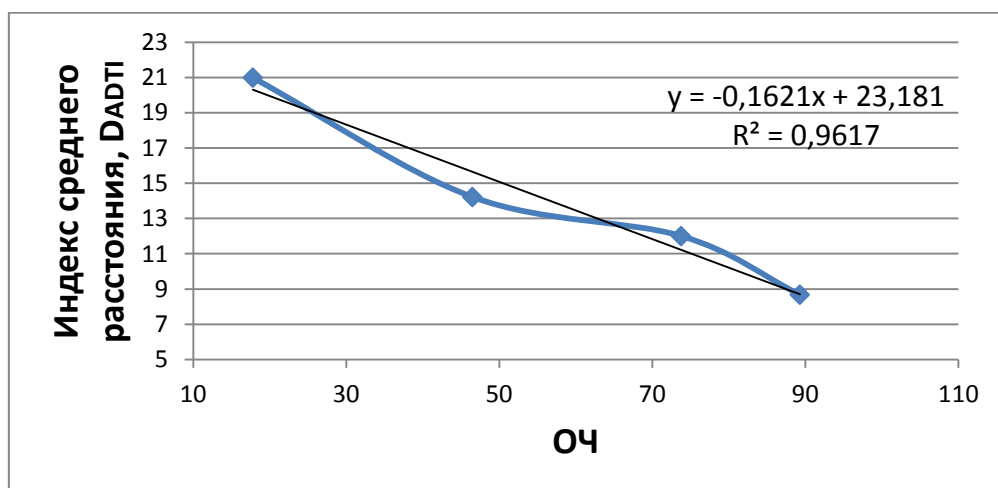


Рисунок 33 – Зависимость ОЧ от индекса среднего расстояния для моно-замещенных нафтенных

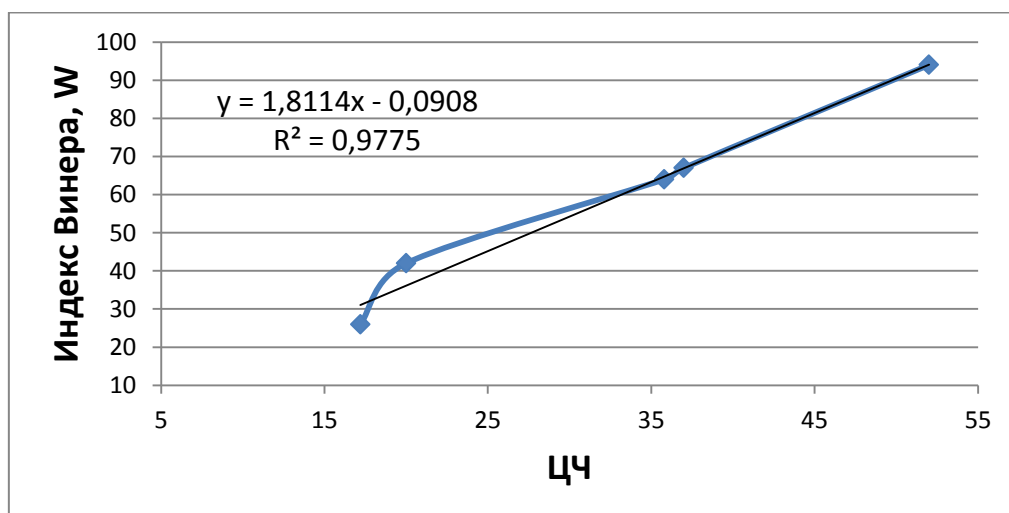


Рисунок 34 – Зависимость ЦЧ от индекса Винера для моно-замещенных нафтенных

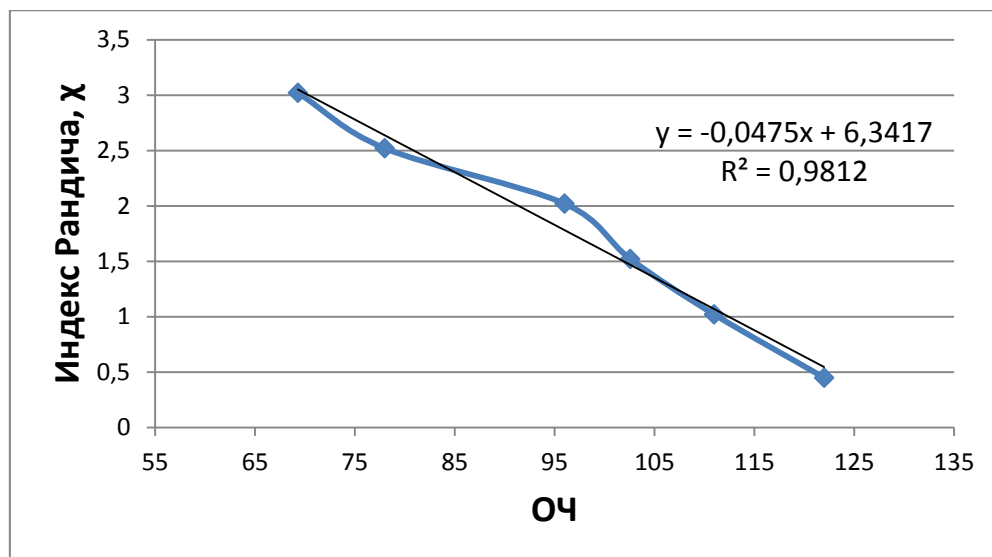


Рисунок 35 – Зависимость ОЧ от индекса Рандича для спиртов

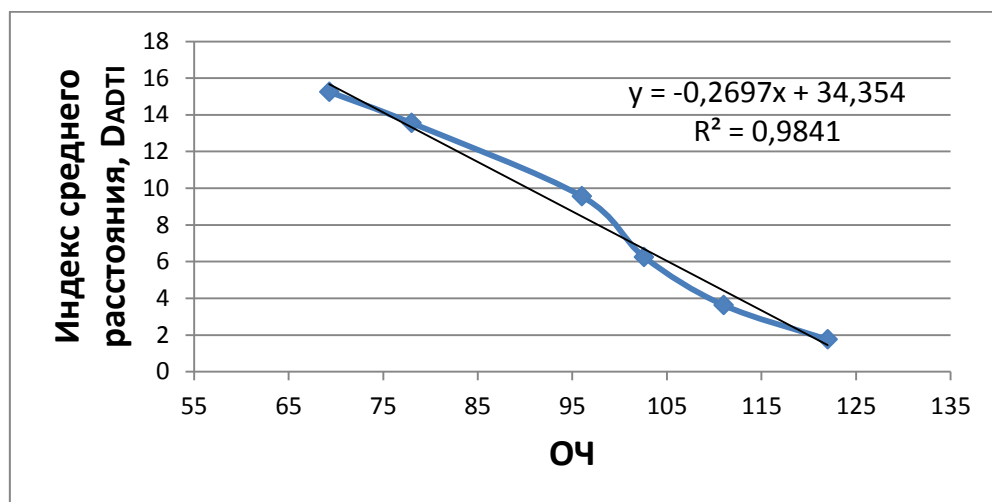


Рисунок 36 – Зависимость ОЧ от индекса среднего расстояния для спиртов

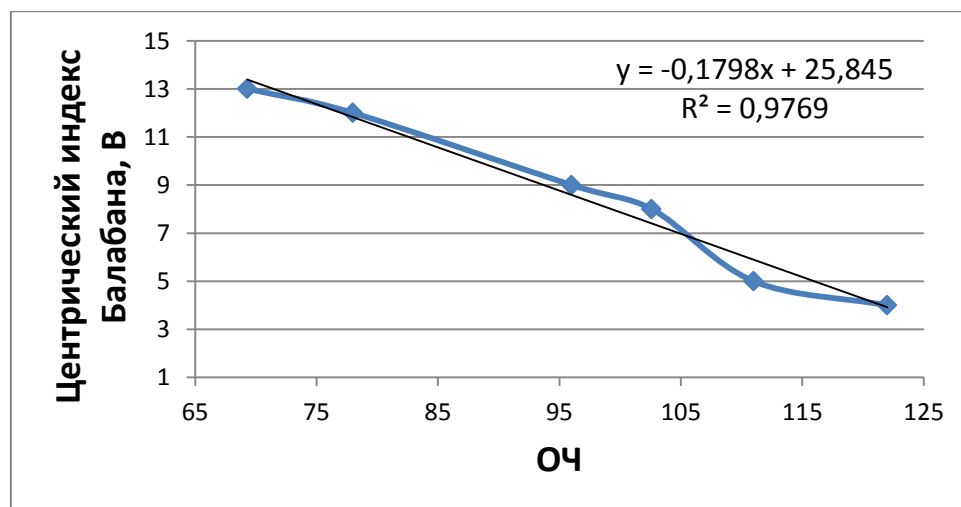


Рисунок 37 – Зависимость ОЧ от центрального индекса Балабана для спиртов

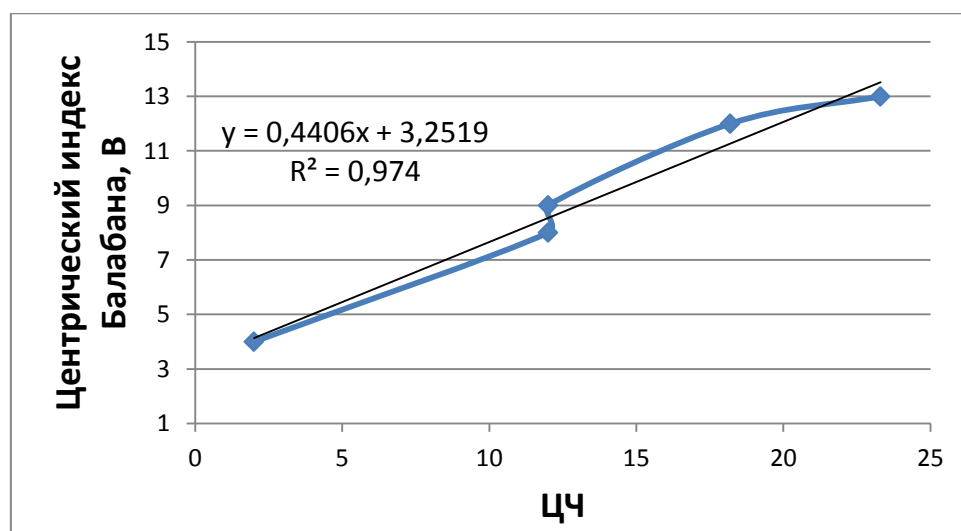


Рисунок 38 – Зависимость ЦЧ от центрического индекса Балабана для спиртов

Анализируя графики, представленные выше, можно установить, что топологические индексы достаточно хорошо коррелируют с октановым и цетановым числами, т.к. наблюдаются зависимости, близкие к линейным, причем с увеличением значений индексов компонентов их ОЧ убывает, а ЦЧ возрастает, что также подтверждает и тесную взаимосвязь ОЧ и ЦЧ, представленную в разделе 4.2.

Также, с целью оценки величины погрешности, был произведен расчет всех индексов на основании уравнений, полученных из графиков. Рассчитанные значения приведены в таблице А.1 (приложение А).

Наиболее точно исследуемые характеристики описывают индекс среднего расстояния и центрический индекс Балабана, т.к. имеют наименьшую погрешность, в сравнении с индексами Винера и Рандича. Самой меньшей точностью обладает индекс Винера, имеющий более значительные величины погрешности.

4.4 Применение суррогатных топлив для расчета октанового числа

Расчет октановых чисел можно проводить на базе компонентов, составляющих суррогатные композиции. Данный расчет производится по

правилу аддитивности, заключающегося в суммировании произведений октанового числа каждого компонента на долю его в смеси.

$$ОЧ = \sum ОЧ_i \cdot \chi_i, \quad (36)$$

В таблице 5 приведены справочные данные ОЧИ и ОЧМ для отдельных компонентов смеси, используемые при расчете аддитивных величин.

Таблица 5 – Данные для расчета аддитивных величин

	ОЧИ	ОЧМ
н-гептан	0	0
изооктан	100	100
толуол	121	103

В таблице 6 приведены различные соотношения в составах трехкомпонентной суррогатной смеси н-гептан – изооктан – толуол и их экспериментальные ОЧИ и ОЧМ:

Таблица 6– Составы суррогатных смесей н-гептан– изооктан – толуол

н-гептан, мол. %	изооктан, мол. %	толуол, мол. %	ОЧИ эксп.	ОЧМ эксп.
86,7	0,0	13,3	22,0	
54,2	32,0	13,8	48,0	46,7
0,0	85,2	14,8	102,0	99,5
74,4	0,0	25,6	28,0	
46,2	27,3	26,5	58,0	53,9
0,0	72,0	28,0	104,1	98,5
62,9	0,0	37,1	38,0	
0,0	60,0	40,0	105,6	98,3
52,1	0,0	47,9	51,4	46,0
0,0	49,1	50,9	107,7	97,0
42,0	0,0	58,0	65,9	60,0
32,6	0,0	67,4	77,0	68,0
15,4	0,0	84,6	98,6	88,5

После проведения расчета по формуле 36 были получены следующие аддитивные величины, представленные в таблице 7:

Таблица 7 – Результаты расчета аддитивных ОЧИ и ОЧМ

н-гептан, мол. %	изооктан, мол. %	толуол, мол. %	ОЧИ адд.	ОЧМ адд.
86,700	0,000	13,300	16,093	13,699
54,200	32,000	13,800	48,698	46,214
0,000	85,200	14,800	103,108	100,444
74,400	0,000	25,600	30,976	26,368
46,200	27,300	26,500	59,365	54,595
0,000	72,000	28,000	105,880	100,840
62,900	0,000	37,100	44,891	38,213
0,000	60,000	40,000	108,400	101,200
52,100	0,000	47,900	57,959	49,337
0,000	49,100	50,900	110,689	101,527
42,000	0,000	58,000	70,180	59,740
32,600	0,000	67,400	81,554	69,422
15,400	0,000	84,600	102,366	87,138

С целью сравнения близости полученных расчетных значений с экспериментальными, построены зависимости аддитивного ОЧИ(ОЧМ) смеси от экспериментального ОЧИ(ОЧМ) смеси:

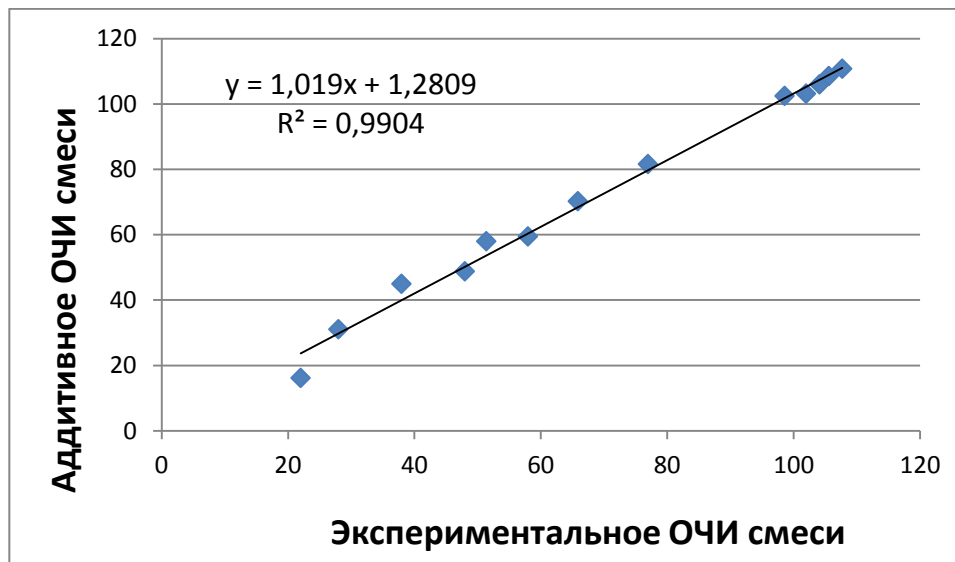


Рисунок 39 – Зависимость аддитивного ОЧИ смеси от экспериментального ОЧИ смеси

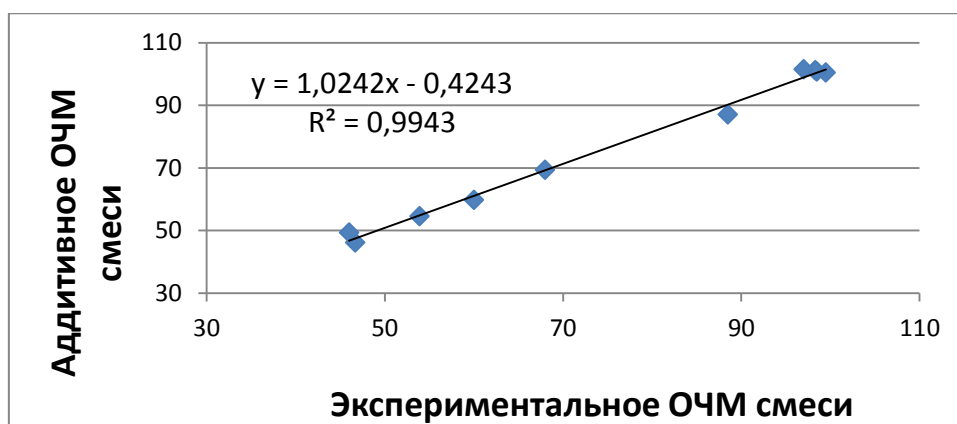


Рисунок 40 – Зависимость аддитивного ОЧМ смеси от экспериментального ОЧМ смеси

Как видно из полученных зависимостей, ОЧ суррогатных смесей, рассчитанных по правилу аддитивности, связан с экспериментально определенным ОЧ линейной зависимостью с высокой степенью точности. Дальнейшим направлением работы будет усложнение состава суррогатных смесей, включение добавок и анализ коэффициентов корреляции.

Исходя из проведенной работы, логично предположить применимость рассчитанных аддитивных величин суррогатных композиций для определения топологических индексов на основании уравнений, полученных в разделе 3.3.

Рисунки 41 - 48 демонстрируют зависимости рассчитанных топологических индексов по уравнениям для н-алканов, полученных из корреляций раздела 3.3, от экспериментальных ОЧИ и ОЧМ смесей. Аналогичные зависимости для других групп соединений приведены в приложении В.

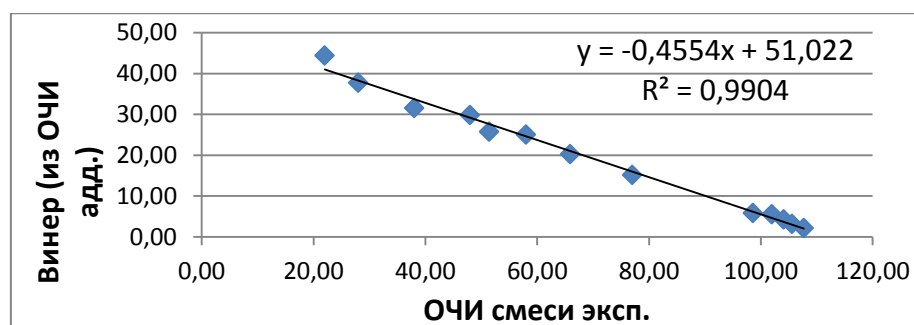


Рисунок 41 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧИ смеси

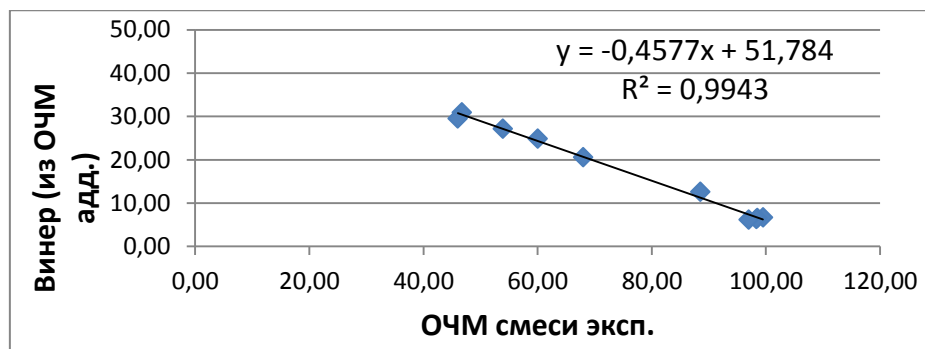


Рисунок 42 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧМ смеси

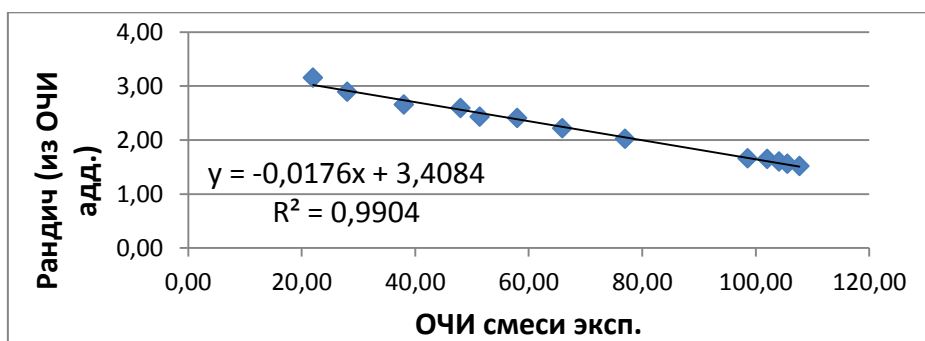


Рисунок 43 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧИ смеси

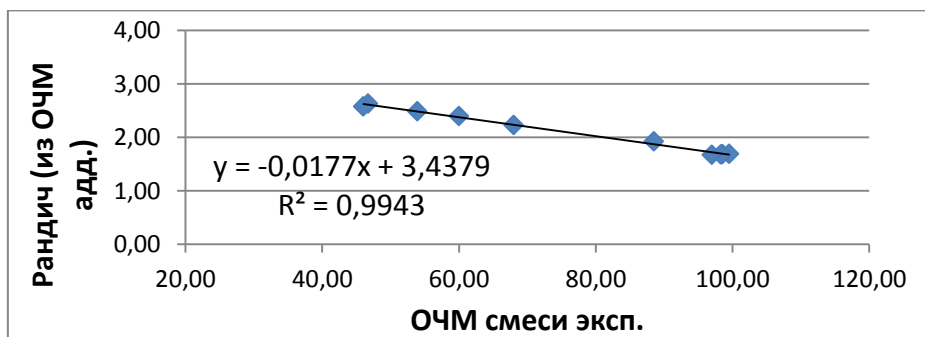


Рисунок 44 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧМ смеси для

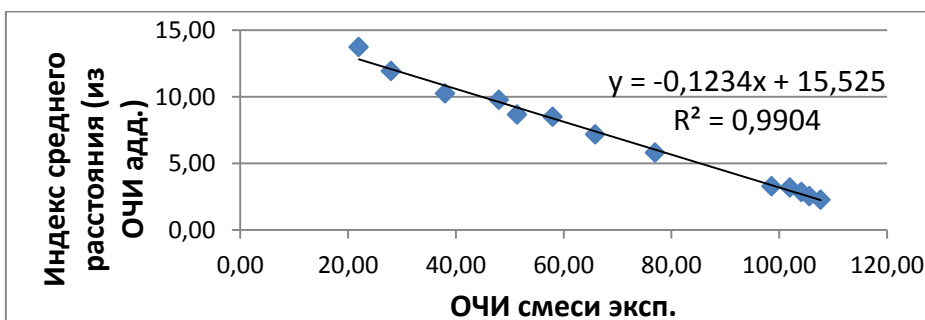


Рисунок 45 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧИ смеси

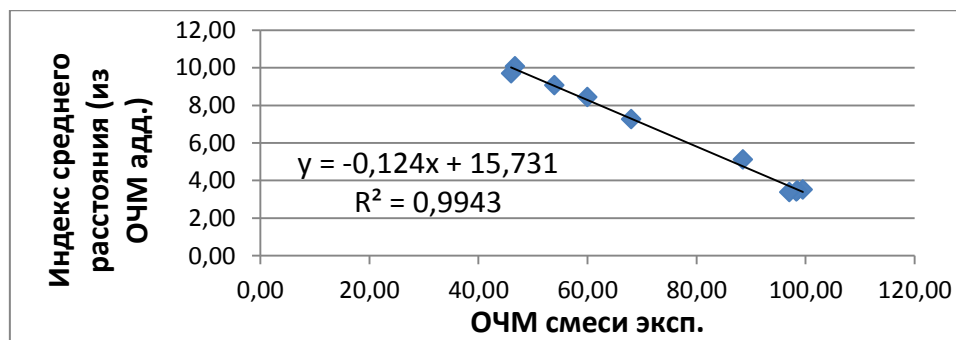


Рисунок 46 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧМ смеси

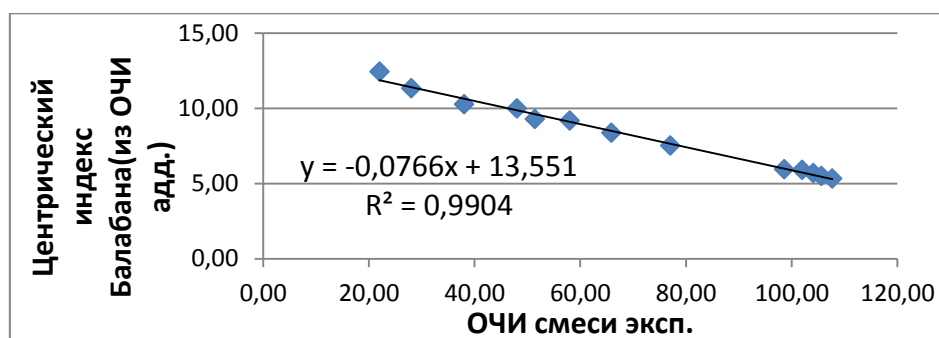


Рисунок 47 – Зависимость центрического индекса Балабана от экспериментального ОЧИ смеси

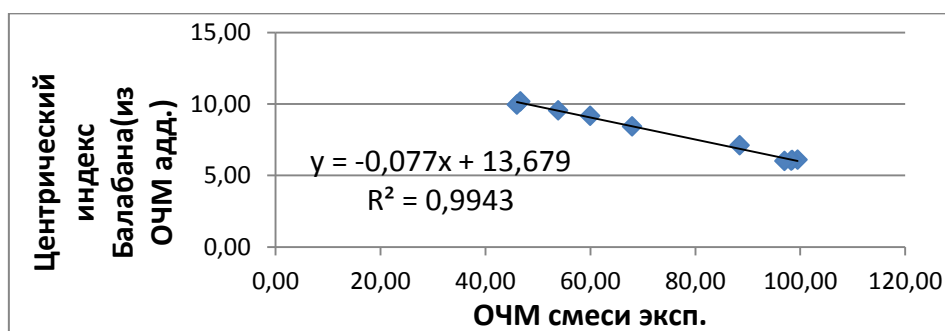


Рисунок 48 – Зависимость центрического индекса Балабана от экспериментального ОЧМ смеси

Как видно из графиков, данные зависимости имеют практически линейный характер, а это значит, что, если известен состав смеси, при появлении гомолога из какого-либо ряда не обязательно считать по различным расчетным формулам или измерять экспериментально его ОЧ, а можно воспользоваться топологическими индексами.

4.5 Определение октанового числа с помощью метода групповых вкладов

Расчет по предложенному методу производился на уже использованной ранее суррогатной смеси н-гептан-изооктан-толуол с различными соотношениями, представленными ниже:

Таблица 8 – Составы суррогатных смесей н-гептан– изооктан – толуол

№ смеси	н-гептан, мол. %	изооктан, мол. %	толуол, мол. %
1	86,7	0,0	13,3
2	54,2	32,0	13,8
3	0,0	85,2	14,8
4	74,4	0,0	25,6
5	46,2	27,3	26,5
6	0,0	72,0	28,0
7	62,9	0,0	37,1
8	0,0	60,0	40,0
9	52,1	0,0	47,9
10	0,0	49,1	50,9
11	42,0	0,0	58,0
12	32,6	0,0	67,4
13	15,4	0,0	84,6

Необходимо установить, какие группы и в каком количестве составляют молекулы н-гептана, изооктана и толуола, в таблице 9 приведены эти данные.

Таблица 9 – Группы молекул компонентов смеси

Группа \ Количество групп	н-гептан	изооктан	толуол
-CH ₃	2	5	1
-CH ₂ -	5	1	
>C< (C#=2)		2	
-CH< (C#=2)		1	
=CH- (ароматич.)			5
=C< (ароматич.)			1

Далее нужно рассчитать количество групп в смесях, путем суммирования произведений мольных долей компонентов на количество групп, входящих в эти компоненты. Результаты приведены в таблице 10.

Таблица 10 – Количество групп в суррогатных смесях

№ смеси	-CH ₃	-CH ₂ -	>C< (C#≡2)	-CH< (C#≡2)	=CH- (ароматич.)	=C< (ароматич.)
1	1,867	4,335	0	0	0,665	0,133
2	2,822	3,03	0,64	0,32	0,69	0,138
3	4,408	0,852	1,704	0,852	0,74	0,148
4	1,744	3,72	0	0	1,28	0,256
5	2,554	2,583	0,546	0,273	1,325	0,265
6	3,88	0,72	1,44	0,72	1,4	0,28
7	1,629	3,145	0	0	1,855	0,371
8	3,4	0,6	1,2	0,6	2	0,4
9	1,521	2,605	0	0	2,395	0,479
10	2,964	0,491	0,982	0,491	2,545	0,509
11	1,42	2,1	0	0	2,9	0,58
12	1,326	1,63	0	0	3,37	0,674
13	1,154	0,77	0	0	4,23	0,846

Затем необходимо произвести суммирование произведений количества групп в суррогатных смесях на их групповые вклады для каждого номера смеси, это соответствует формуле (35):

$$x_k = \sum G_{j,k} \cdot n_j,$$

где $G_{j,k}$ - вклад группы j в свойство k, а n_j - число j групп в молекуле.

В таблице 11 приведены вклады групп, необходимые для расчета.

Таблица 11 – Групповые вклады [30]

Группы	Вклады групп		
	ЦЧ	ОЧИ	ОЧМ
-CH ₃	0,529	1,566	0,272
-CH ₂ -	0,637	1,092	0,180
>C< (C#≡2)	-1,558	-4,365	-0,803
-CH< (C#≡2)	0,080	-1,257	-0,217
=CH- (ароматич.)	-0,113	0,045	-0,002
=C< (ароматич.)	-2,866	-1,715	-0,360

В таблице 12 приведены вычисленные значения

Таблица 12 - Суммы групповых факторов вклада для исследуемых свойств

№ смеси	$x_{\text{ЦЧ}}$	$x_{\text{ОЧИ}}$	$x_{\text{ОЧМ}}$
1	3,29	7,46	1,24
2	2,92	4,33	0,68
3	-0,22	-0,90	-0,26
4	2,41	6,41	1,05
5	1,26	3,70	0,56
6	-0,64	-0,75	-0,23
7	1,59	5,43	0,87
8	-1,01	-0,61	-0,21
9	0,82	4,51	0,71
10	-1,36	-0,48	-0,19
11	0,10	3,65	0,55
12	-0,57	2,85	0,40
13	-1,80	1,39	0,14

Полученные данные, фактически, являются переменными x_k в уравнении четвертого порядка:

$$Z_k = a_k + b_k \cdot x_k + c_k \cdot x_k^2 + d_k \cdot x_k^3 + e_k \cdot x_k^4, \quad (37)$$

где a_k, b_k, c_k, d_k, e_k – эмпирические константы

Z_k – определяемое свойство (ОЧИ, ОЧМ, ЦЧ)

x_k - сумма групповых факторов вклада для свойства k

Эмпирические константы a_k, b_k, c_k, d_k, e_k для уравнения даны в таблице 13.

Таблица 13 - Эмпирические константы a_k, b_k, c_k, d_k, e_k [30]

	ЦЧ	ОЧИ	ОЧМ
a_k	17,049	105,286	93,354
b_k	6,393	3,289	11,871
c_k	0,438	-0,713	-14,666
d_k	-0,044	-0,311	-36,844
e_k	0,001	0,024	12,125

Проведя расчеты по уравнению (37), получим расчетные значения, приведенные в таблице 14, которая также включает в себя экспериментальные ОЧИ и ОЧМ смесей:

Таблица 14 - Полученные расчетные ЦЧ, ОЧИ, ОЧМ

№ смеси	ЦЧ	ОЧИ	ОЧМ	ОЧИ смеси эксп.	ОЧМ смеси эксп.
1	41,35	35,37	44,05	22,00	
2	38,43	89,39	85,72	48,00	46,70
3	15,67	102,01	90,03	102,00	99,50
4	34,44	55,64	61,80	28,00	
5	25,70	96,45	90,00	58,00	53,90
6	13,18	102,57	90,32	104,10	98,50
7	28,17	73,15	75,14	38,00	
8	11,07	103,09	90,59	105,60	98,30
9	22,57	86,98	84,50	51,40	46,00
10	9,30	103,56	90,85	107,70	97,00
11	17,69	96,90	90,44	65,90	60,00
12	13,54	103,24	93,64	77,00	68,00
13	7,22	107,74	94,63	98,60	88,50

Построим корреляционную зависимость рассчитанных величин от экспериментальных. Учитывая, что применяемое в данной работе уравнение (39) имеет четвертый порядок, для оценки корреляции справедливо использовать полином четвертого порядка.

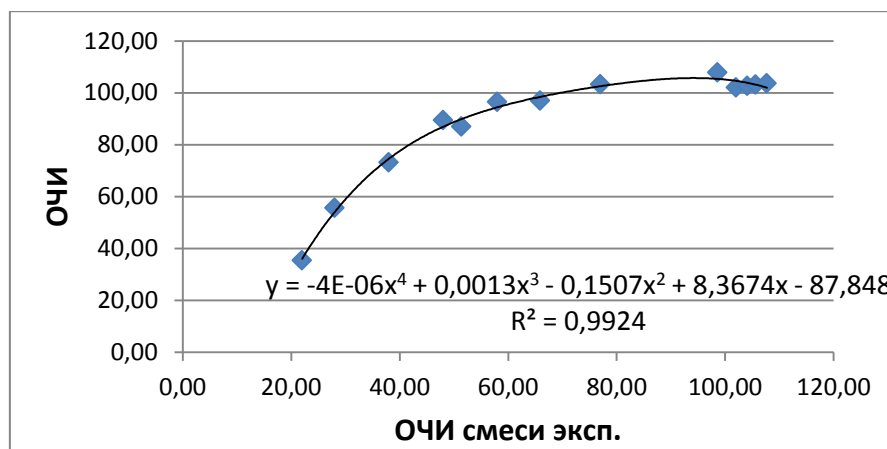


Рисунок 49 – Полиномиальная зависимость расчетного ОЧИ от экспериментального ОЧИ смеси

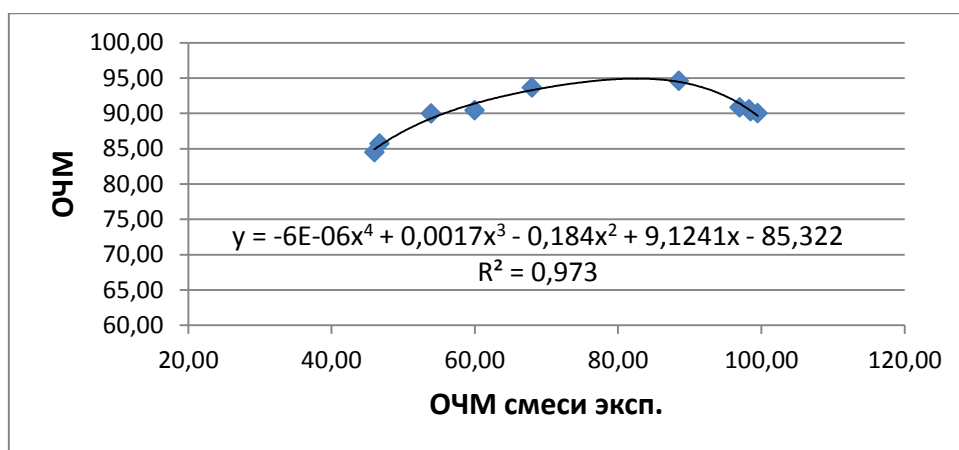


Рисунок 50 – Полиномиальная зависимость расчетного ОЧМ от экспериментального ОЧМ смеси

На рисунках 49 - 50 величины достоверности аппроксимации имеют очень близкие к единице значения, это говорит о том, что метод групповых вкладов для расчета ОЧИ и ОЧМ смесей достаточно точен.

5 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение перспективности и успешности научно-исследовательского проекта, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации.

Достижение цели обеспечивается решением задач:

- разработка общей экономической идеи проекта, формирование концепции проекта;
- организация работ по научно-исследовательскому проекту;
- определение возможных альтернатив проведения научных исследований;
- планирование научно-исследовательских работ;
- оценки коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения;
- определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.

5.1 Предпроектный анализ

5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования





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




Целевой рынок – сегмент рынка, на котором будет в дальнейшем продаваться разработка: предприятия нефтяной и нефтехимической отрасли.

Продукт – моторное топливо.

Большинство нефтехимических предприятий, научно – исследовательские центры и лаборатории нефтяной отрасли заинтересованы в производстве высокооктановых моторных топлив высокого качества, а также соответствии нормативным требованиям и стандартам, предъявляемым им, с минимизацией затрат на подготовку и и дальнейшую транспортировку. Таким образом, применение искусственных нейронных сетей (ИНС) – методов для оценки октанового числа и цетанового числа моторных топлив является минимально затратным и достаточно быстрым методом определения. Карта сегментирования приведена в таблице 15.

Таблица 15 – Карта сегментирования рынка услуг по разработке высокооктановых компонентов

		Вид продукции	
		Бензин	Дизельное топливо
Размер компании	Крупные		
	Средние		
	Мелкие		

 – Предприятия и заводы нефтехимической промышленности
 – Лаборатории, нефтехимические университеты и научно – исследовательские центры
 – Аналитические центры

В приведенной карте сегментирования показано, что основным потребителем данной работы может стать любое заинтересованное предприятие нефтехимической промышленности и их лаборатории.

5.1.2. SWOT – анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) анализ применяется для комплексной оценки научно – исследовательского проекта. Результатом анализа является описание сильных и слабых сторон проекта, выявление возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Итоговая матрица SWOT-анализа представлена в таблице 16.

Таблица 16 – Матрица SWOT

	Сильные стороны проекта:	Слабые стороны проекта:
	<i>С1.</i> Энергоэффективность и экономичность технологии. <i>С2.</i> Экспрессность. <i>С3.</i> Значимость промышленной технологии. <i>С4.</i> Достаточно квалифицированный персонал. <i>С5.</i> Ликвидность рабочего места.	<i>Сл1.</i> Недостаточное количество необходимого оборудования для проведения исследования. <i>Сл2.</i> Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой. <i>Сл3.</i> Необходимость в материалах, комплектующих и новой информации для проведения научного исследования.

Продолжение таблицы 16

<p>Возможности:</p> <p><i>B1.</i> Использование инновационной структуры ТПУ.</p> <p><i>B2.</i> Использование отечественного сырья.</p> <p><i>B3.</i> Появление дополнительного спроса на новый продукт.</p> <p><i>B4.</i> Повышение стоимости конкурентных разработок.</p> <p><i>B5.</i> Возможность модернизации технологии.</p> <p><i>B6.</i> Снижение цены на сырье.</p>	<p>С и В:</p> <p>1. Контроль качества продукции в данный период времени, что имеет особую значимость в ситуации изменения качества сырья.</p> <p>2. Исследование позволяет дальнейшее направление разработки методов для улучшения эксплуатационных свойств моторного топлива.</p> <p>3. Невысокая затратность даст возможность привлечь значительное количество исполнителей.</p>	<p>Сл и В:</p> <p>1. Преобретение нового оборудования.</p> <p>2. Создание инжиниринговой услуги для обучения персонала работе с готовой продукцией.</p> <p>3. Вовлечение новых интеллектуальных ресурсов.</p>
<p>Угрозы:</p> <p><i>У1.</i> Развитие конкуренции производства.</p> <p><i>У2.</i> Введение новых государственных требований к сертификации продукции.</p> <p><i>У3.</i> Иссякание природных ресурсов.</p> <p><i>У4.</i> Использование альтернативного топлива.</p>	<p>С и У:</p> <p>1. Создание конкурирующей готовой продукции.</p> <p>2. Стандартизация и сертификация продукта.</p> <p>3. Усовершенствование программы для увеличения спроса на продукт.</p> <p>4. Применение данных методов к альтернативным топливам.</p>	<p>Сл и У:</p> <p>1. Закупка необходимого оборудования.</p> <p>2. Вовлечение новых интеллектуальных ресурсов.</p> <p>3. Усовершенствование программы для увеличения спроса на продукт.</p> <p>4. Стандартизация и сертификация продукта.</p> <p>5. Создание конкурирующей готовой продукции.</p>

5.2.1 Структура работ в рамках исследования

В данном разделе приведен перечень этапов проведения работ в рамках исследовательской работы, также приведено распределение исполнителей по видам работ. В таблице 17 приведен порядок этапов и работ, распределение исполнителей по видам данной работы.

Таблица 17 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель темы
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследования	Руководитель
	3	Сбор и обработка материалов по теме	Инженер
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, инженер
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Теоретическое объяснение и выбор методов исследования	Руководитель, инженер
	6	Проведение экспериментов, необходимых для работы	Инженер
	7	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Инженер
Обобщение полученных результатов, вывод по выполненной работе	8	Оценка эффективности полученных результатов	Инженер
	9	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель
Проведение ОКР			
Разработка технической документации и проектирование	10	Сбор материалов и оформление социальной ответственности	Инженер
	11	Выбор и расчет конструкции	Инженер
	12	Расчет и оформление экономической части работы	Инженер

Продолжение таблицы 17

Оформление отчета по НИР (комплекта документации по ОКР)	13	Составление пояснительной записки	Инженер
	14	Сдача работы на рецензию	Инженер
	15	Предзащита дипломной работы	Инженер
	16	Подготовка к защите дипломной работы	Инженер
	17	Защита дипломной работы	Инженер

5.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Ожидаемая трудоемкость выполнения работы рассчитывается по формуле:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{mini} + 2t_{maxi}}{5}, \quad (40)$$

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

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

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

Ожидаемая трудоемкость для этапов работы рассчитывается следующим образом:

$$t_{ожі} = \frac{3 \cdot 6 + 2 \cdot 10}{5} = 7.6$$

Продолжительность отдельной работы в рабочих днях:

$$T_{Pi} = \frac{t_{ожі}}{Ч_i}, \quad (41)$$

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

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

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

Отсюда продолжительность каждой работы в рабочих днях:

$$T_{Pi} = \frac{7.6}{1} = 7.6$$

5.2.3 Разработка графика проведения исследования

Для практичности построения графика, продолжительность каждого из этапов работ следует из рабочих дней перевести в календарные. Для этого воспользуемся формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (42)$$

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

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

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

Коэффициент календарности находится по формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (43)$$

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

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

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

$$k_{\text{кал}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1.22$$

Полученные значения сведены в единую таблицу 18 и, исходя из нее, построен календарный план-график, приведенный в таблице 19.

Таблица 18 – Временные показатели проведения исследования

№	Название работы	Трудоемкость работ			Исполнители	Длительность работ в рабочих днях, T_{pi}	Длительность работ в календарных днях, T_{ki}
		t_{\min} , чел-дни	t_{\max} , чел-дни	$t_{\text{ож}}i$, чел-дни			
1	Составление и утверждение технического задания	1	2	1	Р	1	2
2	Выбор направления работы	1	2	1	Р	1	2
3	Сбор и обработка материалов по теме	20	50	32	И	32	39
4	Календарное планирование работ	1	4	2	Р,И	1	2
5	Теоретическое объяснение и подбор экспериментальных методов исследования	3	9	5	Р,И	3	4
6	Проведение экспериментов	21	30	27	И	27	33

Продолжение таблицы 18

7	Сравнение экспериментальных данных с теоретическими	3	9	5	И	5	6
8	Проведение целесообразности и ОКР	1	3	2	И	2	3
9	Оценка результативности и проведенных экспериментов	2	5	3	Р	3	4
10	Подбор информации и оформление социальной ответственности	2	6	4	И	4	5
11	Выбор и расчет конструкции	5	12	8	И	8	10
12	Расчет и оформление экономической части	3	7	5	И	5	6
13	Формирование пояснительной записки	2	5	3	И	3	4
14	Сдача работы на рецензию	1	2	1	И	1	2
15	Предзащита дипломной работы	1	2	1	И	1	2
16	Подготовка к защите дипломной работы	1	9	4	И	4	5
17	Защита дипломной работы	1	1	1	И	1	2
Итого:						Р – 9 И - 97	Р – 14 И - 123

Р – Руководитель, И – Инженер.

Таблица 19 – Календарный план – график проведения НИОКР

№	Вид работ	Исполнители	T_{ki} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ												
				февр		март			апрель			май			июнь	
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
1	Составление и утверждение технического задания	Р	2													
2	Выбор направления работы	И	2													
3	Сбор и обработка материалов по теме	И	50													
4	Календарное планирование работ	Р,И	2													
5	Теоретическое объяснение и подбор экспериментальных методов исследования	Р,И	5													
6	Проведение экспериментов	И	40													
7	Сравнение экспериментальных данных с теоретическим и данными	И	8													

Продолжение таблицы 19

8	Проведение целесообразнос ти ОКР	И	3													
9	Оценка результативнос ти проведенных экспериментов	Р	5													
10	Подбор информации и оформление социальной ответственност и	И	6													
11	Выбор и расчет конструкции	И	13													
12	Расчет и оформление экономической части	И	8													
13	Формирование пояснительной записки	И	5													
14	Сдача работы на рецензию	И	2													
15	Предзащита дипломной работы	И	2													
16	Подготовка к защите дипломной работы	И	6													
17	Защита дипломной работы	И	2													

5.3 Бюджет технического исследования

В процессе исследования бюджета используется следующая классификация затрат:

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

5.3.1 Расчет материальных затрат технического исследования

Расчет материальных затрат проводится по формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхi}, \quad (44)$$

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

$N_{расхi}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, m^2 и т.д.);

C_i – цена приобретения единицы i -го вида используемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./ m^2 и т.д.);

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно – заготовительные расходы.

Материальные затраты, необходимые для данной работы, занесены в таблицу 20.

Таблица 20 – Материальные затраты технического исследования

Наименование	Единица измерения	Расход	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Бензиновый дистиллят прямогонный	л	1,5	5,3	8
Анилин	л	0,1	1300	130
Спирт этиловый	л	0,5	170	85
Силикагель	кг	0,25	1150	288
Глицерин	л	0,5	640	320
Октаноповышающие присадки	л	0,3	300	90
Итого				921

5.3.2 Расчет затрат на специальное оборудования для экспериментальных работ

Все затраты по приобретению спецоборудования и оборудования, имеющегося в лаборатории и необходимого для выполнения экспериментальной работы для каждого исполнителя приводится в таблице 22.

Таблица 21 – Затраты на приобретение спецоборудования для проведения экспериментальной работ

№ п/п	Наименование оборудования	Количество единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб	Амортизационные отчисления, руб.
1	Аналитические весы	1	15000	15000	3000
2	Термометр	2	500	1000	-
3	Электрическая плитка	1	1400	1400	-
4	Термостат водяной	1	17000	17000	3400

Продолжение таблицы 21

6	Сушильный шкаф	1	13000	13000	2600
7	Пикнометр стеклянный	2	480	960	-
8	Колонка стеклянная	2	1200	2400	-
9	Приборка 10 мл	15	20	300	-
10	Пробирка 50 мл	1	30	30	-
11	Пипетка Градуированная 1 мл	3	145	435	-
12	Мерный цилиндр 100 мл	2	480	960	-
13	Мерный стакан 100 мл	3	77	231	-
14	Колба круглодонная 250 мл	1	330	330	-
15	Мерный стакан 50 мл	2	70	140	-
16	Шприц	2	25	50	-
Итого:				53236	9000

Для спецоборудования необходимо рассчитать величину годовой амортизации, которая рассчитывается по формуле:

$$H_a = \frac{100\%}{T_{\text{дн}}} = \frac{100\%}{5} = 20\% \quad (45)$$

$$A_{\text{год}} = \frac{C_{\text{перв}} \cdot H_a / 100}{12} \cdot T = \frac{15000 \cdot \frac{20}{100}}{12} \cdot 12 = 3000 \quad (46)$$

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

T – время использования оборудования, в мес.

$T_{\text{пи}}$ – время полезного использования, лет (в среднем время полезного использования оборудования составляет 5 лет).

5.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

В данный раздел входят основная заработная плата научных и инженерно – технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Показатель расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок. В данный раздел входят основная заработная плата работников, непосредственно занятых выполнением НИИ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату:

$$З_{\text{зп}} = З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}, \quad (47)$$

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

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

Основная заработная плата ($З_{\text{осн}}$) рассчитывается по формуле:

$$З_{\text{зп}} = З_{\text{дн}} \cdot T_p, \quad (48)$$

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

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (49)$$

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

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

- при отпуске в 28 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5 – дневная неделя;
- при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6 – дневная неделя;

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

Таблица 22 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней:		
- выходные	44	48
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени:		
- отпуск	56	28
- невыходы по болезни	2	2
Действительный годовой фонд рабочего времени	249	273

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (50)$$

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

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30 % от $Z_{\text{тс}}$);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5 (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: 15 – 20

% от Z_{TC});

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска). Расчет основной заработной платы представлен в таблице 24.

Таблица 23 – Расчет основной заработной платы

Z_{TC} , руб.	k_d	k_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб.дн	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель						
33664	0,35	1,3	72209,28	2991,9	9	26927,1
Инженер						
12130	0,35	1,3	26018,85	1078,1	97	104575,7
Итого:						131502,8

Дополнительная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн}, \quad (51)$$

где $k_{доп}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (примем равным 0,12).

Для руководителя:

$$Z_{доп} = 0,12 \cdot 26927,1 = 3231,3 \text{ рубля}$$

Для инженера:

$$Z_{доп} = 0,12 \cdot 104575,7 = 12549,1 \text{ рубля}$$

Итого : 15780,4 рубля.

5.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из:

$$З_{внеб} = k_{внеб} \cdot (З_{осн} + З_{доп}), \quad (52)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды, в ТПУ он равен 0,302.

Таблица 24 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	26927,1	3231,3
Инженер	104575,7	12549,1
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,302	
Итого:	44479,5 рубля	

5.3.5 Накладные расходы

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

$$З_{накл} = k_{нр} \cdot (\text{сумма статей } 1 \div 5), \quad (53)$$

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

Величину коэффициента накладных расходов можно принять равным 16%, полученное значение приведено в таблице 25.

5.3.6 Формирование бюджета затрат научно – исследовательского проекта

Данная расчетная величина затрат научно – исследовательской работы считается основной для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора 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 представлен в таблице 25.

Таблица 25– Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание	Исп.1, руб.	Исп.2, руб.
1. Материальные затраты НТИ	921	Таблица 6	921	921
2. Затраты на специальное оборудование для экспериментальных работ	53236	Таблица 7	53236	53236
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей работы	131502,8	Таблица 9	131502,8	131502,8
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей	15780,4	п. 9.3.3	15780,4	15780,4
5. Отчисления во внебюджетные фонды	44479,5	Таблица 10	44479,5	44479,5
6. Накладные расходы	39347,2	16 % от суммы ст. 1-5	39347,2	39347,2
Бюджет затрат НТИ	285266,9	Сумма ст. 1-6	285266,9	285266,9

Исходя из данных таблицы 25, можно сделать вывод, что основные затраты НТИ приходятся на специальное оборудование для проведения эксперимента.

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

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по формуле:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (54)$$

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

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

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно – исследовательского проекта.

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{285266,9}{285266,9} = 1$$

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить по формуле:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (55)$$

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

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i – бальная оценка i-го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Таблица 26 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерий	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Исп.1	Исп.2
1. Достоверность исследования	0,4	5	5	4
2. Продолжительность определения	0,2	5	4	4
3. Расходы на проведение работы	0,1	4	5	5
4. Срок эксплуатации	0,2	5	4	5
5. Послепродажное обслуживание разработки	0,1	4	5	4
Итого	1,0	4,8	4,6	4,2

$$I_{\text{гп}} = 0,4 \cdot 5 + 0,2 \cdot 5 + 0,1 \cdot 4 + 0,2 \cdot 5 + 0,1 \cdot 4 = 4,8;$$

$$\text{Исп.1} = 0,4 \cdot 5 + 0,2 \cdot 4 + 0,1 \cdot 5 + 0,2 \cdot 4 + 0,1 \cdot 5 = 4,6;$$

$$\text{Исп.2} = 0,4 \cdot 4 + 0,2 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 + 0,2 \cdot 5 + 0,1 \cdot 4 = 4,2.$$

В качества аналога были выбраны:

Исп.1 – Процесс компаундирования.

Исп.2 – Каталитический риформинг прямогонных бензиновых фракций при температуре 480 – 530 °С, давлении до 3,5 МПа.

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

$$I_{\text{исп.1}} = \frac{I_{p-\text{исп.1}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.1}}}, \quad I_{\text{исп.2}} = \frac{I_{p-\text{исп.2}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.2}}} \quad (56)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволяет определить сравнительную эффективность проекта (таблица 29) и выбрать наиболее эффективный вариант их представленных. Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{\text{ср}}$):

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{исп.1}}}{I_{\text{исп.2}}} \quad (57)$$

Интегральный показатель эффективности разработки и аналога определяется исходя из интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p} = \frac{4,8}{1} = 4,8$$

$$I_{\text{финр}}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_{\phi}^{a1}} = \frac{4,6}{1} = 4,6$$

$$I_{\text{финр}}^{a2} = \frac{I_m^{a2}}{I_{\phi}^{a2}} = \frac{4,2}{1} = 4,2$$

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

Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^{a1}}{I_{\text{финр}}^p} = \frac{4,6}{4,8} = 0,96 \quad (58)$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^{a2}}{I_{\text{финр}}^p} = \frac{4,2}{4,8} = 0,88$$

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

$I_{\text{тэ}}^p$ – интегральный показатель разработки;

$I_{\text{тэ}}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 27 – Сравнительная эффективность разработки

№	Показатели	Текущий проект	Исп.1	Исп.2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	1	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,8	4,6	4,2
3	Интегральный показатель эффективности	4,8	4,6	4,2
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,96	0,88

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

6 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Общее требование к моторным топливам - обеспечить надежную и экономичную работу двигателя. Оно должно иметь оптимальный химический состав для протекания устойчивого – без детонации – горения, высокую стабильность при хранении, совместимость с конструкцией и уплотнительными материалами топливной системы и оборудования для транспортирования и хранения, а также хорошие экологические свойства. Следовательно, в ходе данной работы был произведен анализ моторных топлив, также анализ прогнозирования их свойств.

В качестве объекта исследования выбраны моторные топлива.

Область применения данного исследования, с глобальной стороны, затрагивает все географические районы Российской Федерации, нуждающихся в высококачественных моторных топливах.

В лабораторных условиях применение данной работы поможет заменить дорогостоящих анализ для определения углеводородного состава на более дешевый анализ методами групповых вкладов, который также достоверно помогает определить физико – химические свойства моторных топлив.

На НПЗ данная исследовательская работа также будет очень полезным инструментом скрининга для оценки топлива на ранних стадиях процесса исследований и разработок.

6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

В данном разделе рассмотрены специальные правовые нормы трудового законодательства и их особенности, применимые к условиям

исследовательского проекта по оценке эксплуатационных свойств моторных топлив в зависимости от их физико-химических свойств.

6.1.1 Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства

В соответствии с ТК РФ от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019) работник имеет право на:

- предоставление ему работы, обусловленной трудовым договором;
- рабочее место, соответствующее государственным нормативным требованиям охраны труда и условиям, предусмотренным коллективным договором;
- своевременную и в полном объеме выплату заработной платы в соответствии со своей квалификацией, сложностью труда, количеством и качеством выполненной работы;
- отдых, обеспечиваемый установлением нормальной продолжительности рабочего времени, сокращенного рабочего времени для отдельных профессий и категорий работников, предоставлением еженедельных выходных дней, нерабочих праздничных дней, оплачиваемых ежегодных отпусков;
- полную достоверную информацию об условиях труда и требованиях охраны труда на рабочем месте, включая реализацию прав, предоставленных законодательством о специальной оценке условий труда;
- подготовку и дополнительное профессиональное образование в порядке, установленном настоящим Кодексом, иными федеральными законами;
- защиту своих трудовых прав, свобод и законных интересов всеми не запрещенными законом способами;

- возмещение вреда, причиненного ему в связи с исполнением трудовых обязанностей, и компенсацию морального вреда в порядке, установленном настоящим Кодексом, иными федеральными законами;
- обязательное социальное страхование в случаях, предусмотренных федеральными законами.

6.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны

Исследования проводились в аудитории 129, расположенной на первом этаже второго учебного корпуса Томского политехнического университета.

Данная работа осуществлялась в исследовательской лаборатории отделения химической инженерии технологии топлива и химической кибернетики. В лаборатории присутствует следующее оборудование: термостат для измерения плотности нефти и нефтепродуктов, электронные весы, электрическая плитка, сушильные шкафы, печи и т. д. Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного освещения люминесцентных ламп. Лаборатория оснащена системой вентиляции и отопления. Обработка данных происходила в аудитории 133, оборудованной компьютерами.

6.2 Профессиональная социальная безопасность

6.2.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования

Согласно ГОСТу 12.0.002-2014 установлены специальные положения в сфере обеспечения безопасности трудовой и производственной деятельности необходимые для соблюдения.

Исследование физико-химических свойств моторного топлива в лаборатории с химическими реактивами и приборами может создать вредные и опасные факторы для работников исследования.

В представленной ниже таблице показаны вредные и опасные факторы, которые могут повлиять на работников при проведении исследования.

Таблица 28 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)			Нормативные документы
	Разработка	Эксплуатация	
1.Отклонение показателей микроклимата	+	+	ГОСТ 12.0.002-2014 Естественное и искусственное освещение ГОСТ 12.2.003- 91 СанПин 2.2.4.548-96 ГОСТ 12.1.003-2014 ГОСТ 12.1.007- 76 ГОСТ 12.1.005–88 ПНД Ф 12.13.1-03 - Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях
2.Отсутствие или недостаток естественного и искусственного света на рабочем месте	+	+	
3.Повышенная температура поверхностей оборудования, материалов	+	+	
4. Повышенный уровень шума	+	+	
5, Наличие электрических приборов	+	+	

Используя данные таблицы 28, можно учесть опасные и вредные факторы, которые теоретически могут возникнуть при работе с объектом.

6.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований

Оптимальные параметры *микроклимата на рабочих местах* должны соответствовать требованиям СанПиН "Гигиенические требования к

микроклимату производственных помещений" применительно к выполнению работ различных категорий в холодный и теплый период года.

Химическая лаборатория топлива оборудована системой отопления, кондиционирования воздуха и эффективной приточно-вытяжной вентиляцией. В холодное время года в помещении холодно, температура воздуха меньше 19°C, из-за погодных условий. Для решения такой проблемы необходимо утепление оконных проемов, обеспечить лабораторию масляными обогревателями. Для химической лаборатории топлива предусмотрены нормы производственной санитарии, указанные в таблице 29.

Таблица 29 – Допустимые параметры микроклимата производственных помещений

Температура воздуха в холодный период года, °C	19,0-24
Температура воздуха в теплый период года, °C	20,0-28,0
Температура поверхностей, °C	18,0-25,0
Относительная влажность воздуха, %	15-75

Для создания оптимальной освещенности рабочего места в лаборатории имеются остекленные оконные проемы, люминесцентные лампы дневного освещения.

Плохое и неравномерное освещение приводит к снижению зрительных функций, повышается уровень утомляемости, что отрицательно влияет на общую работоспособность.

Хорошей светоотдачей обладают люминесцентные лампы, но их основной недостаток – это пульсация светового потока. Лучше всего подходят газоразрядные лампы высокого давления, так как они обладают высокой световой отдачей и устойчивы к условиям внешней среды.

Требования к освещению рабочих мест зафиксированы в СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03.

Таблица 30 – Требования к освещению рабочих мест

Рабочая поверхность и плоскость нормирования КЕО и освещенности	Горизонтальная
Высота плоскости над полом, м	0,8
Естественное освещение, КЕО, %:	
• при верхнем или комбинированном освещении	3,5
• при боковом освещении	1,2
Совмещенное освещение, КЕО, %:	
• при верхнем или комбинированном освещении	2,1
• при боковом освещении	0,7
Искусственное освещение	
• Всего, лк	500
• от общего, лк	300
• Освещенность при общем освещении, лк	400

Термические опасности в химической лаборатории топлива обусловлены наличием оборудования с повышенной и пониженной температурой поверхности.

Аппараты с повышенной температурой поверхности, например печи или термостат, защищены специальными заградительными корпусами. При работе с оборудованием с повышенной и пониженной температурой поверхности исключается их непосредственный контакт с кожными покровами, используются специальные захваты и защитные перчатки из жароустойчивого материала. Так же необходимо соблюдать правила техники безопасности и использовать средства индивидуальной защиты.

Вредным фактором химической лаборатории топлива является повышенный уровень шума при работе системы вентиляции и некоторых приборов, например установки для определения фракционного состава.

Требования по допустимому уровню звукового давления, звука и эквивалентных уровней звука выполняются в соответствии с ГОСТ 12.1.005–88.

Таблица 31 – Требования по допустимому уровню шума

Относительная доза шума, %	Эквивалентный уровень звука, дБ						
	за время действия шума						
	8 ч	4 ч	2 ч	1 ч	30 мин	15 мин	7 мин
3.2	70	73	76	79	82	85	88
6.3	73	76	79	82	85	88	91
12.5	76	79	82	85	88	91	94
25	79	82	85	88	91	94	97
50	82	85	88	91	94	97	100
100	85	88	91	94	97	100	103
200	88	91	94	97	100	103	106
400	91	94	97	100	103	106	109
800	94	97	100	103	106	109	112
1600	97	100	103	106	109	112	115
3200	100	103	106	109	112	115	118

Уровень звука в химической лаборатории топлива не должен превышать 70 децибел. Вредное воздействие шума проявляется в прогрессирующем понижении слуха, что приводит к профессиональной глухоте; появляются головные боли, повышенная утомляемость; также может понижаться иммунитет человека. В связи с повышенным шумовым фоном (более 70 децибел) источником является работа приточно-вытяжной вентиляции, а также некоторого шумного оборудования в химической лаборатории топлива. Необходимо использовать звукоизолирующие ограждения, акустические экраны, звукопоглощающую облицовку поверхностей оборудования резиной, войлоком и т.д. Применение средств индивидуальной защиты: противошумные наушники, шлемы, вкладыши типа «беруши».

Опасным фактором химической лаборатории топлива является наличие электроприборов, поэтому все помещения лаборатории должны соответствовать требованиям электробезопасности при работе с электроустановками по ГОСТ 12.1.019-79. Все электрооборудование с напряжением свыше 36 В, а также оборудование и механизмы, которые могут оказаться под напряжением, должны быть надежно заземлены.

Напряжения прикосновения и токи, протекающие через тело человека при нормальном (неаварийном) режиме электроустановки, не должны превышать значений, указаны в таблице 32 (напряжения прикосновения и токи приведены при продолжительности воздействия не более 10 мин в сутки).

Таблица 32 - Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов

Род тока	U, В	I, мА
	не более	
Переменный, 50 Гц	2,0	0,3
Переменный, 400 Гц	3,0	0,4
Постоянный	8,0	1,0

Опасное и вредное воздействия на людей электрического тока, электрической дуги и электромагнитных полей проявляются в виде электротравм и профессиональных заболеваний.

Всем, кто проводит работы в химико-аналитических лабораториях, необходимо изучить инструкцию по электробезопасности в химической лаборатории.

6.2.3 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов

В целях сохранения и повышения работоспособности, ускорения адаптации к действию неблагоприятных условий труда, профилактики заболеваний, работающим в контакте с химическими веществами следует проводить витаминизацию.

В соответствии с техническим регламентом каждому работнику лаборатории выдаются средства индивидуальной защиты и смывающие вещества в соответствии с нормами выдачи на 1 работника в месяц. Для исключения возможности несчастных случаев должны проводиться

обучение, инструктажи и проверка работников на знание требований безопасности труда. За государственный и ведомственный контроль по охране труда отвечает штаб ГО ЧС, отдел по охране труда.

При выполнении данной работы были использованы следующие виды средства индивидуальной защиты: перчатки из латекса, спецодежда, защитные очки. Также обязательно проводятся технологические перерывы и регулярные проветривания.

6.3 Экологическая безопасность

6.3.1 Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду

Автомобильные двигатели с выхлопными газами выделяют большое количество вредных веществ в атмосферу. Токсичные выбросы автомобилей включают: окись углерода (CO), оксиды азота (NO_x), углеводороды (C_xH_y), сажу (C), альдегиды (RCHO), диоксид серы (SO_2) и соединения свинца (Pb). Из всех токсичных веществ соединения свинца, марганца и железа являются наиболее опасными для человека, которые поражают кровеносную, нервную и мочеполовую системы, вызывают цирроз печени, пневмонию и снижение умственных способностей у детей. Свинец откладывается в костях и других тканях человека.

Токсичные вещества также влияют на растительность. Вредные вещества действуют непосредственно на зеленые части растений, разрушая хлорофилл и структуру клеток, проникая через почву в корневую систему и действуя через нее на все растение. Загрязняющие газообразные вещества в той или иной степени влияют на состояние растительности. Некоторые повреждения листьев и побегов, такие как угарный газ, другие вызывают гибель растений, таких как двуокись серы, которая в первую очередь поражает сосны (сосна, ель, пихта и кедр).

В результате воздействия высокотоксичных загрязнителей на растения отмечается замедление их роста, образование некроза на концах листьев, выход из строя органов ассимиляции. Увеличение поверхности поврежденных листьев может привести к снижению расхода влаги из почвы и общей ее переувлажненности, что скажется на среде обитания живых организмов.

6.3.2 Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду

На атмосферу могут оказывать вредное воздействие выбросы вредных веществ, появляющиеся при выполнении экспериментальной работы, через вентиляционную систему. Также в атмосферу могут проникать выбросы через фланцевые соединения, неплотности аппаратов, уплотнения и т.д.[42]

Для соблюдения ПДК по ГН 2.2.5.1313-03 вредных веществ в атмосферном воздухе устанавливают предельно допустимый выброс (ПДВ), если реальные выбросы превышают ПДВ, то необходимо в системе выброса использовать аппараты для очистки газов: абсорбционные, хемосорбционные и нейтрализаторы. С целью охраны воздушного бассейна все работы должны проводиться в вытяжном шкафу при включенной вентиляции и обеспечении герметичности тары и установки.

Вредное воздействие на гидросферу может оказывать химическое загрязнение водотоков в результате удаления неорганических и органических отходов в хозяйственно-бытовую канализацию. Объем образующихся сточных вод и степень их загрязненности определяются технологическим процессом. При авариях, ремонте аппаратов, оборудования и трубопроводов категорически запрещается сброс в канализацию нефтяных и химических продуктов, не являющихся сточными водами. Сточные воды, сбрасываемые в

сети канализации, не должны содержать вещества, вызывающие коррозию материала труб или их засорение, или обрастание.

Также на литосферу оказывает влияние нефтяное загрязнение почв, оно относится к числу наиболее опасных, поскольку оно принципиально изменяет свойства почв. Нефть обволакивает почвенные частицы, в результате почва не смачивается водой, гибнет микрофлора, растения не получают должного питания. Частицы почвы слипаются, а сама нефть постепенно переходит в иное состояние, ее фракции становятся более окисленными, затвердевают, и при высоких уровнях загрязнения почва напоминает асфальтоподобную массу.

Охрана окружающей среды и рациональное использование природных ресурсов имеет огромное экономическое и социальное значение. Соблюдение всех правил безопасного ведения процесса в лаборатории позволяет избежать несчастных случаев и тяжелых последствий. Твердые отходы собираются в специальные сборники и увозятся для уничтожения.

6.3.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды

Используют методы очистки сточных вод: фильтрование, процеживание, флотация, коагуляция, нейтрализация, ионообменная очистка и т.д.

Для предотвращения негативных воздействий проводится организации раздельного сбора и хранения неорганических и органических отходов, обезвреживание кислых и щелочных стоков согласно утвержденным инструкциям, регенерация растворителей. Отходы подвергаются переработке, утилизации и захоронению. Существуют системы сжигания опасных отходов, создаются полигоны по обезвреживанию и захоронению токсичных отходов. Полигоны должны располагаться вдали от водоохраных зон и иметь санитарно-защитные зоны. В местах

складирования выполняется гидроизоляция для исключения загрязнения грунтовых вод.

6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

6.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований

Возможные чрезвычайные ситуации, которые может инициировать объект исследования:

- Техногенного характера (аварийная ситуации в лаборатории);
- Социального характера (террористический акт);

Наиболее типичной и опасной является ЧС техногенного характера.

Самый вероятный тип ЧС который может произойти в лаборатории – разлив и возгорание моторного топлива при соприкосновении с огнем или реагентами для самовоспламенения.

6.4.2 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований

В ходе эксперимента возможно возникновение пожаров, взрывов, разрушение зданий в результате разрядов атмосферного электричества, ураганов, землетрясений. Здания защищаются от прямых ударов молнии молнеприемниками, воспринимающими разряд на себя, заземлителями, служащими для отвода тока в землю и токопроводами, соединяющими молнеприемники и заземлители. Для обеспечения безопасности людей рекомендуется ограждать заземлители или во время грозы не допускать людей к заземлителям на расстояние ближе 5-6 метров. Заземлители располагаются вдали от дорог. В случае стихийного бедствия (урагана, землетрясения) необходимо отключить воду, электричество и покинуть помещение согласно плану эвакуации.

В связи с нестабильной международной обстановкой, массовыми террористическими актами, нужно предусмотреть возможности начала военных действий и связанных с ними нападений на объекты с использованием средств массового поражения. По сигналу «воздушная тревога» производится отключение воды и электроэнергии в лаборатории, затем организованная эвакуация работающих в лаборатории согласно плану эвакуации.

Для химической лаборатории топлива наиболее вероятная ЧС это техногенная авария в виде пожара. Возникновение пожара считается производственной аварией, так как он наносит значительный материальный ущерб и может вызвать остановку технологического процесса. Любой пожар легче всего ликвидировать в начальной стадии, приняв меры к локализации очага, чтобы не допустить образования площади горения. Успех быстрой локализации очага пожара в начальной стадии зависит:

- от наличия огнетушительных средств и умения применять их;
- от наличия пожарной связи и сигнализации для оповещения о возникновении пожара и вызова пожарной помощи.

При загорании электрических аппаратов или веществ около проводов находящихся под током во время тушения пожаров всегда имеется опасность поражения током. Поэтому в здании или его части, где производится тушение пожара, электрическая сеть должна быть отключена.

6.4.3 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС

С угрозой возникновения ЧС необходима разработка организационных и инженерно-технических мер по уменьшению опасности, устранению и информированию и защите населения при чрезвычайных ситуациях.

Организационные мероприятия:

- планирование защиты населения и территорий от ЧС на уровне предприятия;
- подготовка и поддержание в постоянной готовности сил и средств для ликвидации ЧС;
- создание запасов средств индивидуальной защиты и поддержание их в готовности;
- наличие и поддержание в постоянной готовности системы общего оперативного и локального оповещения и информации о ЧС.

В данном разделе были подробно разобраны правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности сотрудников для проектирования оптимально комфортной рабочей зоны. Произведен анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть в результате работы над исследованием эксплуатационных свойств моторных топлив. Также было показано, как предотвратить возникновение опасных факторов и теоретически возможных чрезвычайных ситуаций.

Практическая значимость полученных данных заключается в исследовании вредных и опасных факторов, с которыми могут столкнуться работники, а также меры по предотвращению чрезвычайных ситуаций, которые могут возникнуть при проведении данного исследования или при его применении на производстве.

Заключение

Из литературных источников выбраны расчетные методы определения октанового и цетанового числа.

Представлены варианты корреляции ОЧ-ЦЧ для различных групп органических соединений. По результатам прослеживается линейная зависимость с высокой степенью точности, что говорит о сильной взаимосвязи исследуемых параметров.

Рассчитаны топологические индексы для различных классов органических соединений и построены корреляционные зависимости их ОЧ(ЦЧ) от рассчитанных топологических индексов. Полученные корреляции имеют практически линейный характер, что говорит о достаточно высокой точности метода. Также исследована возможность определения индексов и октановых чисел для суррогатных смесей, в качестве результатов исследования были приведены корреляционные зависимости рассчитанных ОЧ от экспериментальных ОЧ и рассчитанных ТИ от экспериментальных ОЧ. В обоих случаях величины достоверности линейной аппроксимации близки к единице, что доказывает надежность метода. По методу топологических индексов с целью определения октановых и цетановых чисел для расчета рекомендуются индексы среднего расстояния и центрический индекс Балабана, так как они имеют наименьшие значения погрешностей.

Определены ЦЧ, ОЧИ и ОЧМ на основании групповых вкладов органических соединений и построены полиномиальные корреляции. Определение октанового числа по данному методу подтверждает, что состав и строение компонентов, входящих в топливные композиции, оказывают сильное влияние на их свойства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Способ получения топливной композиции: патент RU 2602076; заявл. 09.11.2015; опубл. 10.11.2016 Бюл. № 31.
2. Способ получения моторных топлив: патент RU 2623088; заявл. 16.06.2016; опубл. 22.06.2017 Бюл. № 18.
3. Способ получения дизельного топлива из растительных масел и установка для его осуществления: патент RU 2346027; заявл. 10.03.2011; опубл. 10.02.2012 Бюл. №4.
4. Сырбаков А.П., Корчуганова М.А. – Топливо и смазочные материалы/Издательство Томского политехнического университета, 2015.
5. Завалинская И.С., Завалинский Д.В., Колесников А.Г. - Экспресс-метод определения октановых чисел автобензинов/ Издательство Кубанского государственного технологического университета, 2016.
6. Скворцов Б.В., Силов Е.А. – Исследование корреляционных зависимостей между октановым числом и электродинамическими параметрами углеводородных продуктов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/issledovanie-korrelyatsionnyh-zavisimostey-mezhdu-oktanovym-chislom-i-elektrodinamicheskimi-parametrami-uglevodorodnyh-produktov/viewer>
7. ГОСТ 3900-85. Нефть и нефтепродукты. Методы определения плотности
8. ГОСТ 2177-99. Нефтепродукты. Метод определения фракционного состава
9. ГОСТ 33-2016 Нефть и нефтепродукты. Прозрачные и непрозрачные жидкости. Определение кинематической и динамической вязкости
10. ГОСТ 31872-2012. Нефтепродукты жидкие. Определение группового углеводородного состава

11. ГОСТ 31872-2012. Нефтепродукты жидкие. Определение группового углеводородного состава
12. Приборы (октанометры) для измерения октанового числа бензинов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.drive2.ru/b/1391423/>
13. Кравцов А.В. Математическое моделирование процесса компаундирования товарных бензинов с учетом реакционной способности компонентов смеси/ А.В. Кравцов, Э.Д. Иванчина, Ю.А. Смышляева. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://earchive.tpu.ru/handle/11683/2596>
14. ГОСТ 2177-99. Нефтепродукты. Метод определения фракционного состава.
15. Ахметов С.А., Ишмияров М.Х., Кауфман А.А./ под ред. С. А. Ахметова. Технология переработки нефти, газа и твердых горючих ископаемых: учебное пособие. – СПб.: «Недра», 2009 - 844 с.
16. Приборы (октанометры) для измерения октанового числа бензинов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.drive2.ru/b/1391423/>
17. ГОСТ Р 52368-2005 (ЕН 590:2009) Топливо дизельное ЕВРО. Технические условия (с Изменениями N 1, 2).
18. ГОСТ 32511-2013 (ЕН 590:2009) Топливо дизельное ЕВРО. Технические условия (Переиздание с Поправкой).
19. ГОСТ 305-2013 Топливо дизельное. Технические условия (Переиздание).
20. ГОСТ 32508-2013 Топлива дизельные. Определение цетанового числа.
21. Международный стандарт нефтепродуктов - расчет цетанового индекса средне-дистиллятных топлив с четырьмя переменными уравнение (ИСО 4264:2018)
22. Жоров Ю.М., Гуреев А.А., Смидович Е.В. Производство высокооктановых бензинов. – М.: Химия, 1981. – 219 с

23. В. Курбатова, Е. А. Колосова, Е. Е. Финкельштейн. Топологические индексы в химических расчетах/– Самара : Издательство «Самарский университет», 2014. – 32 с.
24. Химические приложения топологии и теории графов / под ред. Р. Кинга. М.: Мир, 1987. 560 с.
25. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Р.-Д.: «Феникс». 1997. 556 с.
26. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефилов Н.С. Топологические индексы в органической химии // Успехи химии. 1988. Т. 57. №3. С. 337–366.
27. Randic M. In search of structural invariants // J. Math. Chem. 1992. V. 9. P. 97–146.
28. Федина Ю.А. Количественные модели в корреляциях «структура – свойство» углеводородов и их замещенных/-Тверь, 2017.
29. Balaban A.T. //Chem. Phys. Lett. 1982. Vol. 89, N 5. P. 399-404.
30. Kubic, William Louis, A Group Contribution Method for Estimating Cetane and Octane Numbers - 2016-07-28
31. Jihad A. Badra, Nehal Bokhumseen, Najood Mulla, S. Mani Sarathy , Aamir Farooq, Gautam Kalghatgi, Patrick Gaillard. A methodology to relate octane numbers of binary and ternary n-heptane, iso-octane and toluene mixtures with simulated ignition delay times.
32. J. Yanowitz, M.A. Ratcliff, R.L. McCormick, and J.D. Taylor, M.J. Murphy, Compendium of Experimental Cetane Numbers, NREL/TP-5400-61693, (August 2014).

Приложение А

Таблица А.1 – Рассчитанные значения топологических индексов

Класс соединений	индекс Винера, W	индекс Рандича, χ	индекс среднего расстояния, DADTI	Центрический индекс Балабана, В	Δ Винер- ОЧ, %	Δ Винер- ЦЧ, %	Δ Рандич- ОЧ, %	Δ Рандич- ЦЧ, %	Δ индекс среднего расстояния- ОЧ, %	Δ индекс среднего расстояния- ЦЧ, %	Δ индекс Балабан а-ОЧ,%	Δ индекс Балабан а-ЦЧ,%
Н-АЛКАНЫ												
этан	1		1	4	75,481				76,561		25,163	
пропан	4	1,41	2,67	5	50,298		7,113		16,184		5,996	
бутан	10	1,91	5	8	4,146	91,500	5,529	0,576	14,068	18,972	17,773	3,300
пентан	20	2,41	8	9	19,878	14,710	2,014	4,656	2,450	8,807	0,004	2,044
гексан	35	2,91	11,67	12	10,383	34,408	0,649	2,917	4,268	13,940	4,448	1,143
гептан	56	3,41	16	13	7,868	25,610	0,604	3,711	2,000	12,250	4,977	7,264
октан	84	3,91	21	16		1,830		0,517		0,006		4,364
нонан	120	4,41	26,67	17		13,187		1,971		7,267		0,194
МОНО-ЗАМЕЩЕННЫЕ АЛКАНЫ												
2-метилпропан	10	1,73	4,5	10	44,016		14,957		5,884		11,868	
2-метилбутан	18	2,27	7,2	13	19,267	25,288	2,568	0,419	9,013	8,506	7,242	19,650
3-метилпентан	31	2,81	10,33	14	5,462	1,397	5,162	4,178	1,426	2,032	1,208	15,323
2-метилпентан	32	2,77	10,67	14	5,541	19,298	2,819	3,834	2,544	9,560	0,455	82,108
3-метилгексан	50	3,31	14,29	17	9,563		2,834		2,165		5,962	
2-метилгексан	52	3,27	14,86	17		8,164		1,292		3,761		3,212
3-этилгексан	72	3,85	18		1,310		4,690		1,283			
4-метилгептан	75	3,81	18,75	18	6,158		0,684		4,351		2,279	
3-метилгептан	76	3,81	19	18	4,632		0,619		2,875		2,225	
2-метилгептан	79	3,77	19,75	18	6,996	6,893	5,001	1,063	4,037	3,845	4,940	0,107
2-метилоктан	114	4,27	25,33	21	13,195		1,141		7,490		3,346	

Продолжение таблицы А.1

ДИ-ЗАМЕЩЕННЫЕ АЛКАНЫ												
2,2-диметилбутан	28	2,56	9,33	20		1,060		2,785		2,774	0,431	0,179
2,2-диметилпентан	46	3,06	13,14	21	9,272	3,043	3,120	3,304	4,817	3,782	0,455	1,148
2,3-диметилпентан	46	3,18	13,14	21	4,239		3,158		1,735		4,626	
2,4-диметилпентан	48		13,71	21	14,468		3,599		8,079			
3,4-диметилгексан	68		17		3,979				2,189		3,068	
2,3-диметилгексан	70	3,68	17,5	24	1,448				0,733		3,068	
2,2-диметилгексан	71		17,75	24		5,314		0,679		1,955	0,285	2,529
2,4-диметилгексан	71	3,66	17,75	24	0,019		3,599		0,685		2,253	
2,5-диметилгексан	74	3,63	18,5	24	7,190		3,735		3,142			
2,2-диметилгептан	104	4,06	23,11	25	4,220	1,992	4,067	0,256	2,075	0,451		1,319
ТРИ-ЗАМЕЩЕННЫЕ АЛКАНЫ												
2,2,3-триметилбутан	42	2,94	12	29	6,227	3,069	3,922	25,137	3,401	0,386	0,543	1,048
2,3,3-триметилпентан	62	3,5	15,5	30	7,812	4,492	5,109	33,440	4,759	0,472	1,072	0,114
2,3,4-триметилпентан	65	3,55	16,25	30	1,654		2,404		1,335		0,134	
2,2,4-триметилпентан	66	3,41	16,5	30	5,000	17,071	4,944		3,285		0,610	4,016
2,2,5-триметилгексан	98	9,32	21,78	33		7,340		4,651		0,125		2,625
АЛКЕНЫ												
пропен	3	0,99	2,33	5	42,717		41,725		48,914		38,368	
1-бутен	8,5	1,52	4	8	12,796		1,396		4,630		8,570	
1-пентен	18	2,02	7,2	9	4,375	13,956	8,590	1,114	5,766	2,325	2,742	2,804
1-гексен	32,5	2,52	10,83	12	5,265	13,376	12,169	1,218	12,026	5,598	14,407	3,950
1-гептен	53	3,02	15,14	13	1,215	1,691	3,578	3,520	2,571	3,687	1,246	1,154
1-октен	80,5	3,52	20,13	16	0,085	1,161	6,107	1,338	3,845	0,565	3,548	0,458

Продолжение таблицы А.1

НАФТЕНЫ												
Циклопентан	15	2,5	6		13,314	25,714	3,904	4,280	9,936	3,577		
Циклогексан	27	3	9		10,244	42,858	4,613	10,727	9,129	7,134		
Циклогептан	42	3,5	12		1,856		1,089		1,941	3,580		
Циклооктан	60	4	12			12,856		5,345				
МОНО-ЗАМЕЩЕННЫЕ НАФТЕНЫ												
метилциклопентан	26	2,89	8,67		1,707	19,482	3,331	7,320	0,409	14,003		
метилциклогексан	42	3,39	12		5,466	13,959	3,039	5,180	6,516	11,926		
этилциклогексан	64	3,93	14,22		1,470	1,183	2,885	2,007	10,009	1,502		
пропилциклопентан	67	3,93			13,654	0,103	4,667	0,776				
пропилциклогексан	94	4,43	20,98		6,796	0,109	1,278	1,670	3,262			
СПИРТЫ												
метанол	1	0,45	1,75	4			21,489	13,156	17,109	6,657	2,265	3,327
этанол	3,75	1,02	3,63	5	54,56		4,824		21,689		17,744	
н-пропанол	9,5	1,52	6,25	8	49,785	109,722	3,408	13,368	6,924	32,408	7,531	6,739
н-бутанол	19,25	2,02	9,56	9	8,343	3,499	11,797	14,693	11,477	13,436	4,620	5,121
1-пентанол	34	2,52	13,55	12	14,494	4,512	4,631	1,751	1,717	8,535	1,495	6,077
1-гексанол	54,75	3,02	15,25	13	12,945	11,644	0,992	2,484	2,713	3,482	2,960	3,984

Приложение Б

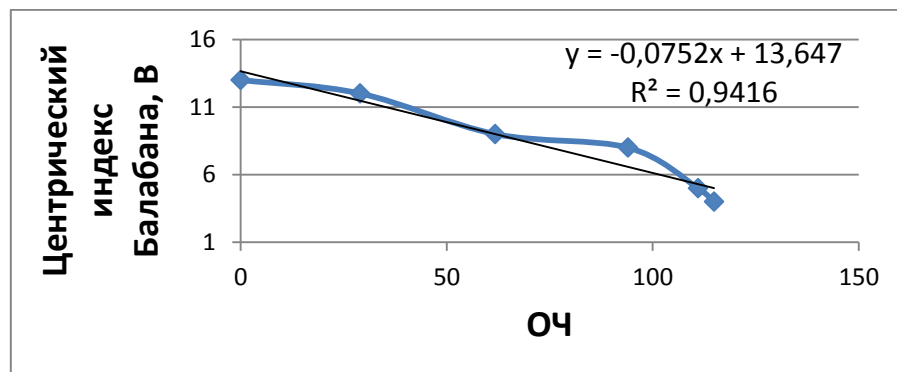


Рисунок Б.1 – Зависимость ОЧ от центрального индекса Балабана для n-алканов

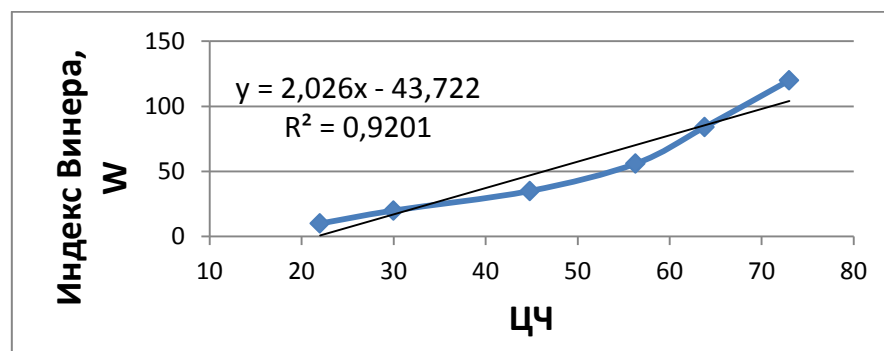


Рисунок Б.2 – Зависимость ЦЧ от индекса Винера для n-алканов

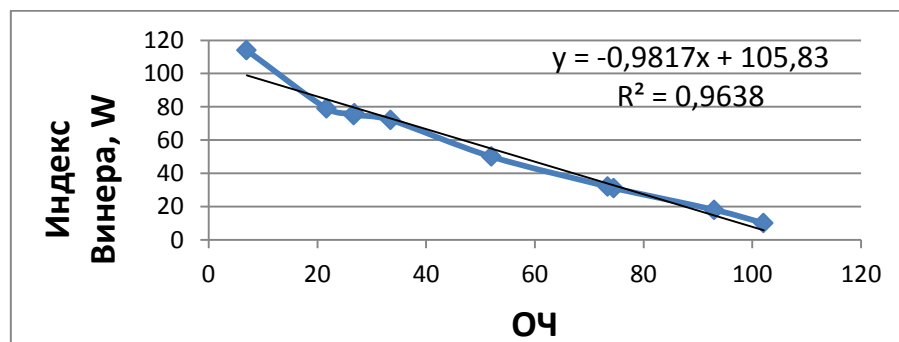


Рисунок Б.3 – Зависимость ОЧ от индекса Винера для монозамещенных алканов

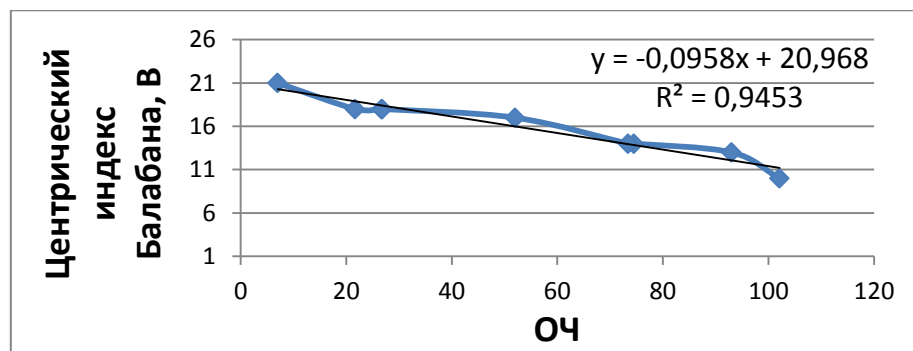


Рисунок Б.4 – Зависимость ОЧ от центрального индекса Балабана для моно-замещенных алканов

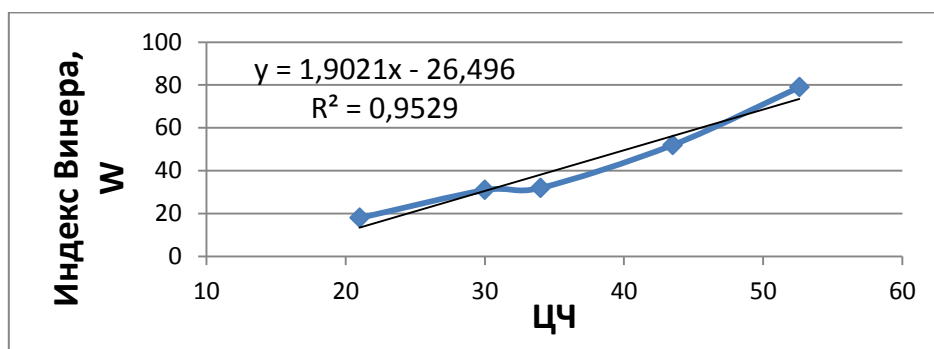


Рисунок Б.5 – Зависимость ЦЧ от индекса Винера для моно-замещенных алканов

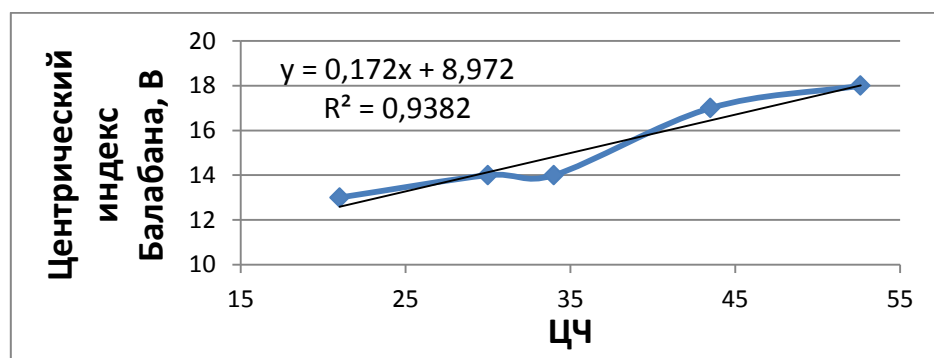


Рисунок Б.6 – Зависимость ЦЧ от центрального индекса Балабана для моно-замещенных алканов

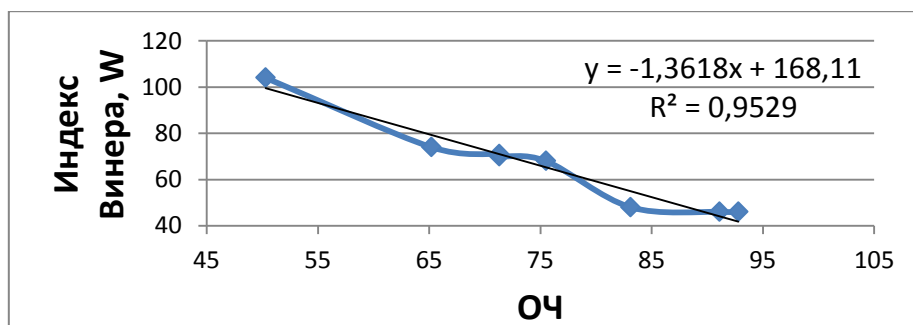


Рисунок Б.7 – Зависимость ОЧ от индекса Винера для ди-замещенных алканов

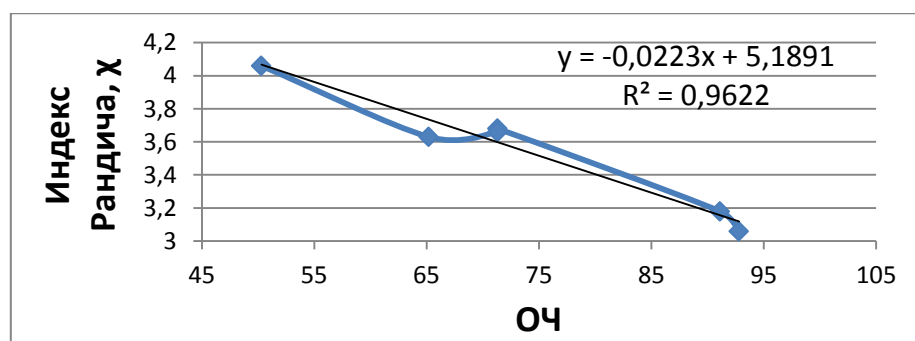


Рисунок Б.8 – Зависимость ОЧ от индекса Рандича для ди-замещенных алканов

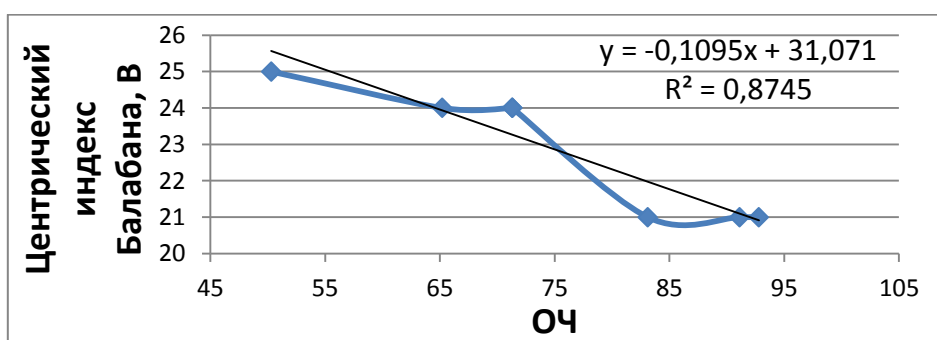


Рисунок Б.9 – Зависимость ОЧ от центрального индекса Балабана для ди-замещенных алканов

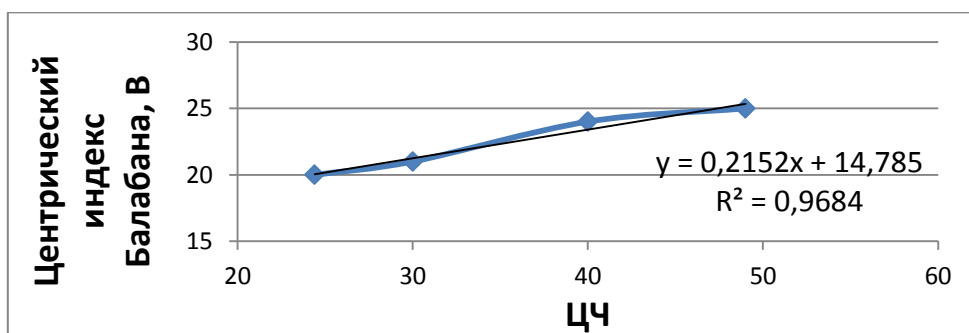


Рисунок Б.10 – Зависимость ЦЧ от центрального индекса Балабана для ди-замещенных алканов

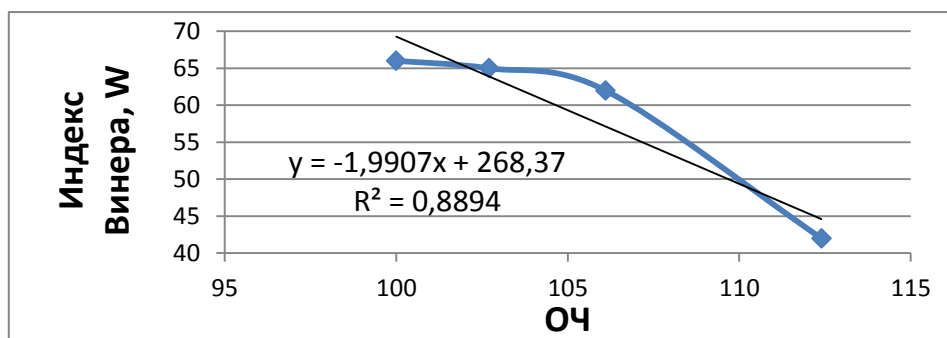


Рисунок Б.11 – Зависимость ОЧ от индекса Винера для три-замещенных алканов

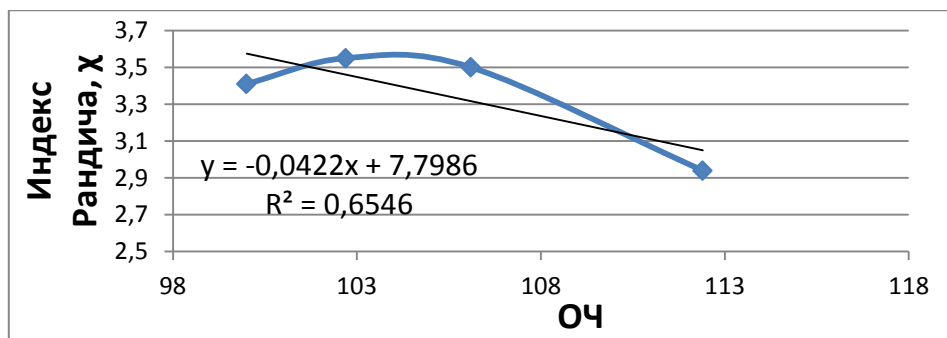


Рисунок Б.12 – Зависимость ОЧ от индекса Винера для три-замещенных алканов

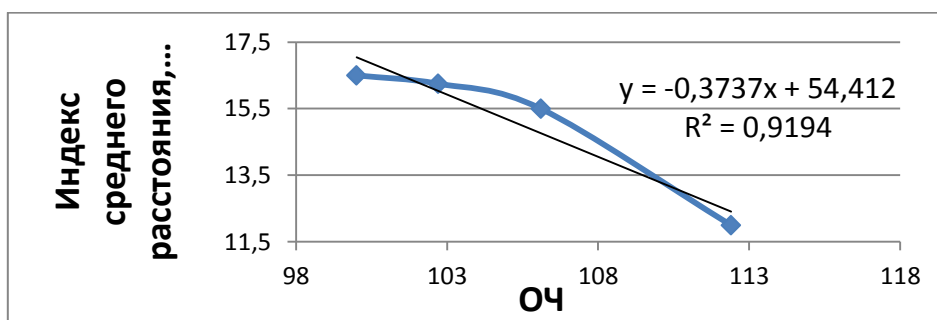


Рисунок Б.13 – Зависимость ОЧ от индекса среднего расстояния для три-замещенных алканов

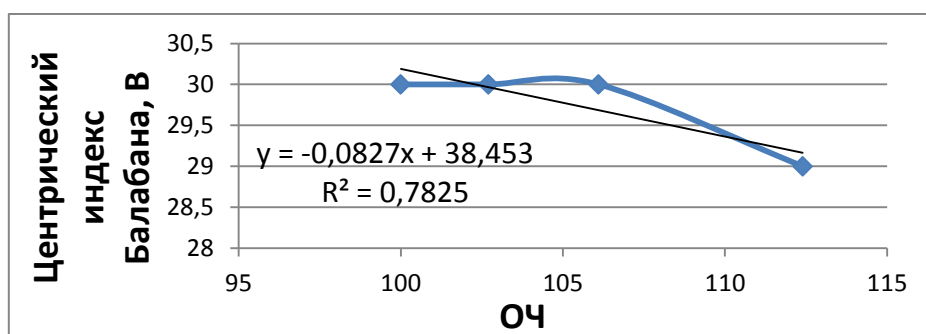


Рисунок Б.14 – Зависимость ОЧ от центрического индекса Балабана для три-замещенных алканов

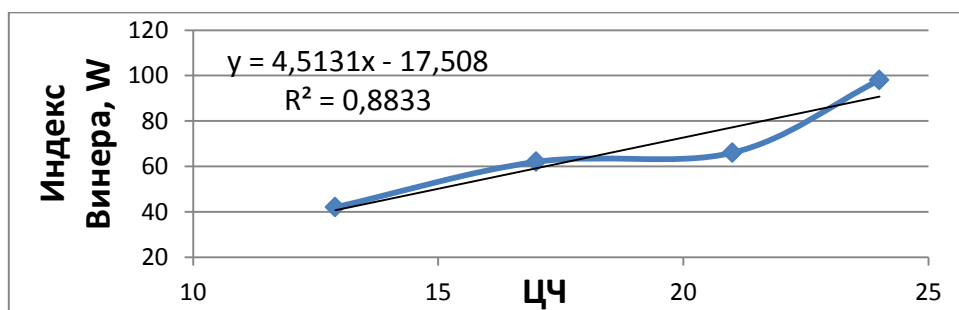


Рисунок Б.15 – Зависимость ЦЧ от индекса Винера для три-замещенных алканов

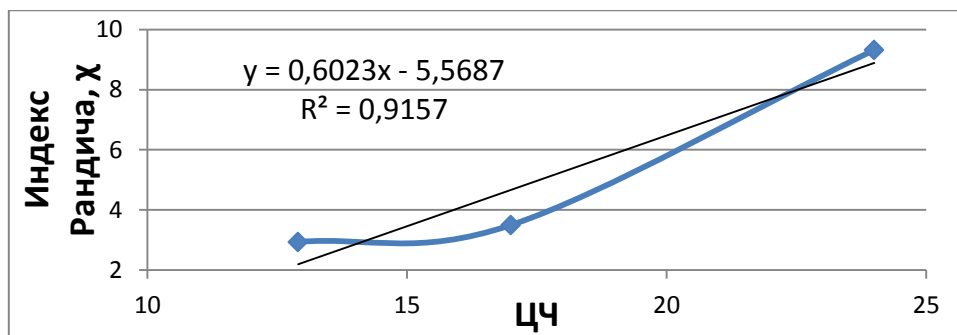


Рисунок Б.16 – Зависимость ЦЧ от индекса Рандича для три-замещенных алканов

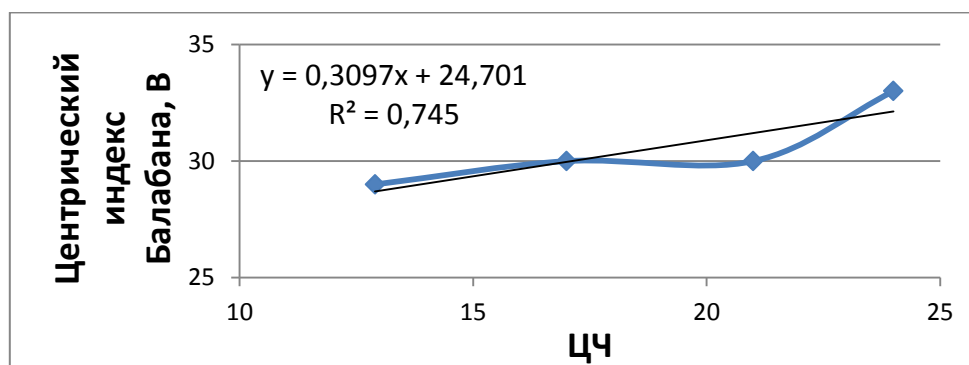


Рисунок Б.17 – Зависимость ЦЧ от центрического индекса Балабана для три-замещенных алканов

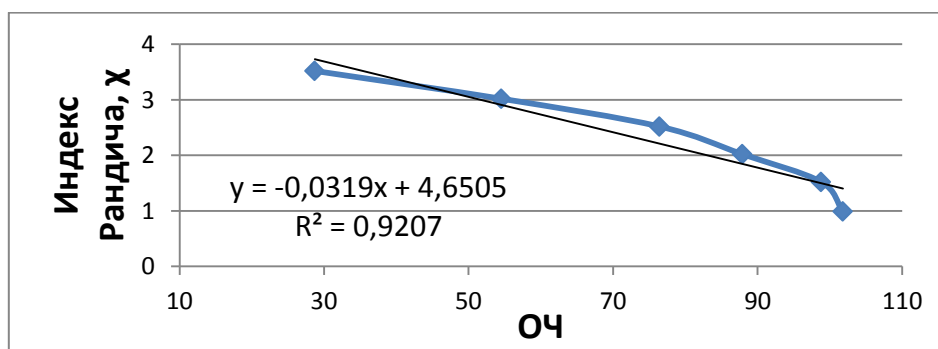


Рисунок Б.18 – Зависимость ОЧ от индекса Рандича для алкенов

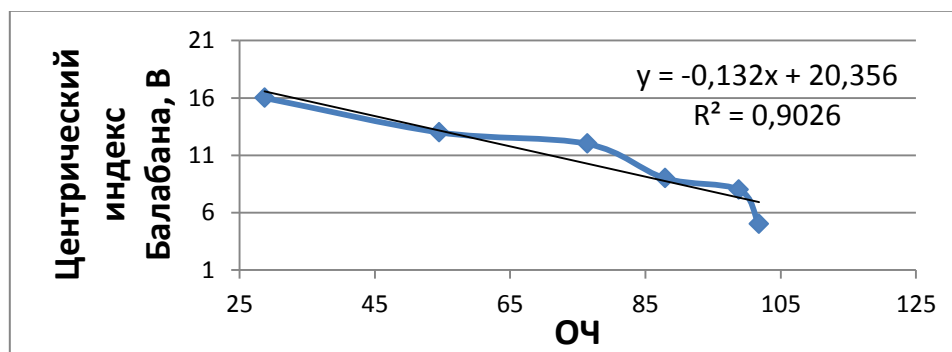


Рисунок Б.19 – Зависимость ОЧ от центрического индекса Балабана для алкенов

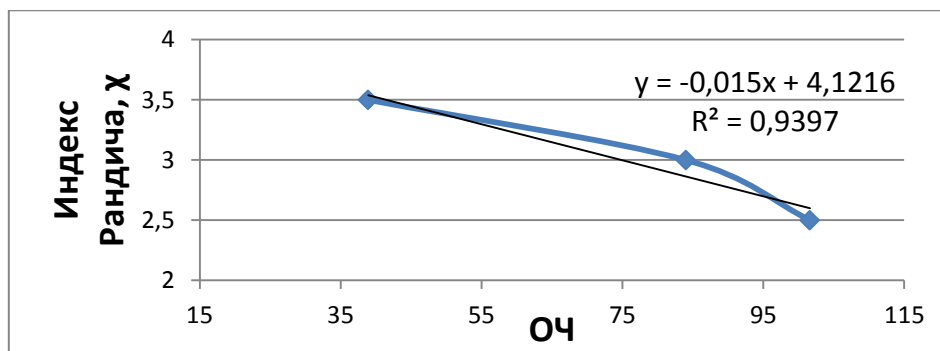


Рисунок Б.20 – Зависимость ОЧ от индекса Рандича для нафтеных

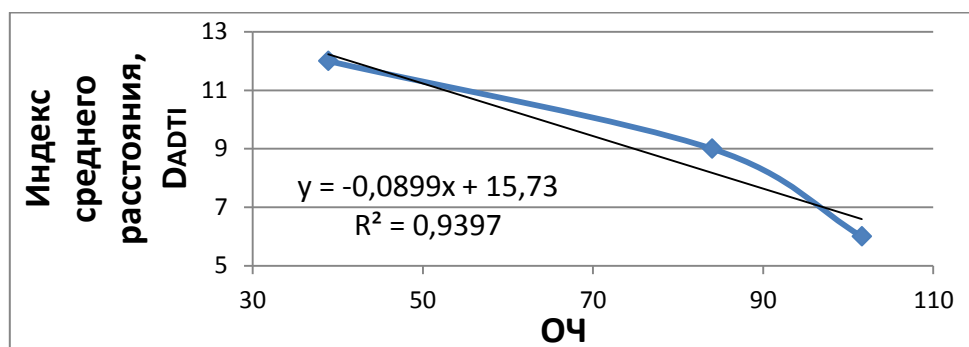


Рисунок Б.21 – Зависимость ОЧ от индекса среднего расстояния для нафтеных

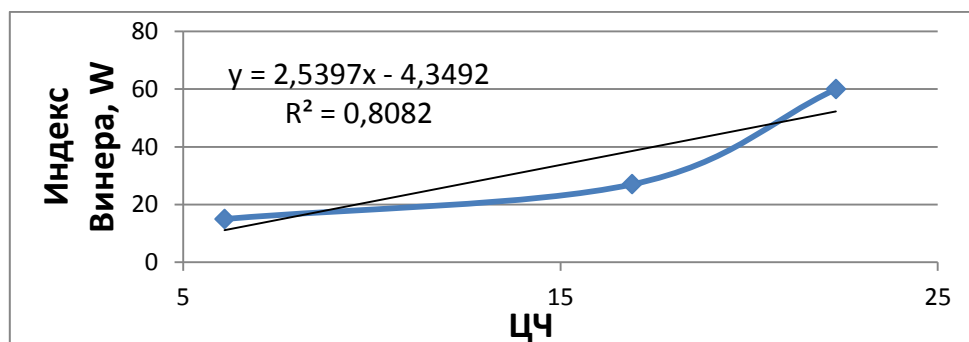


Рисунок Б.22 – Зависимость ЦЧ от индекса Винера для нафтеных

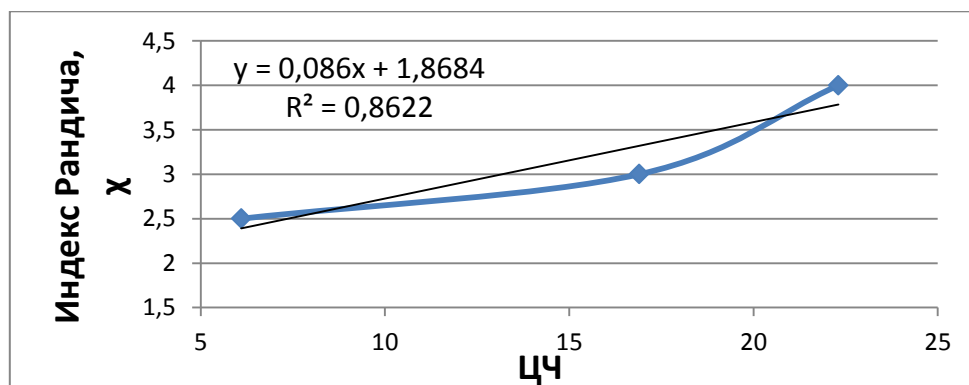


Рисунок Б.23 – Зависимость ЦЧ от индекса Рандича для нафтеных

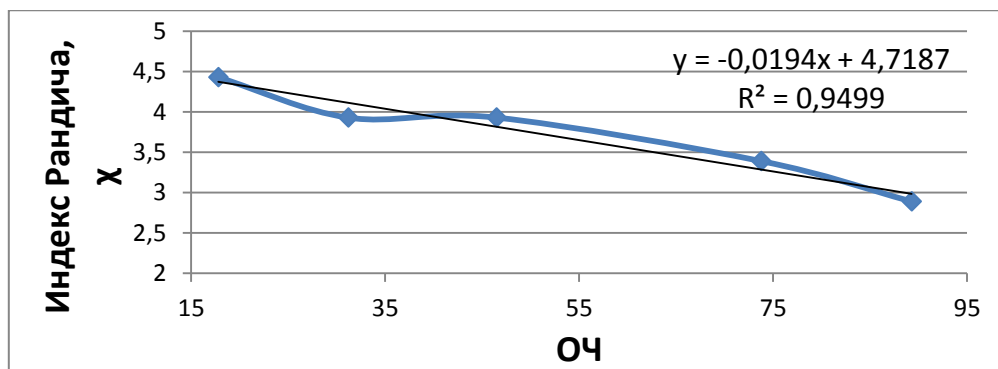


Рисунок Б.24 – Зависимость ОЧ от индекса Рандича для монозамещенных нафтонов

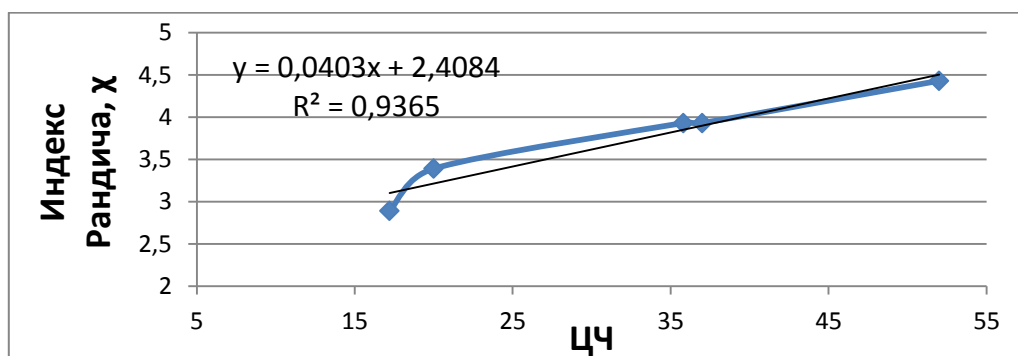


Рисунок Б.25 – Зависимость ЦЧ от индекса Рандича для монозамещенных нафтонов

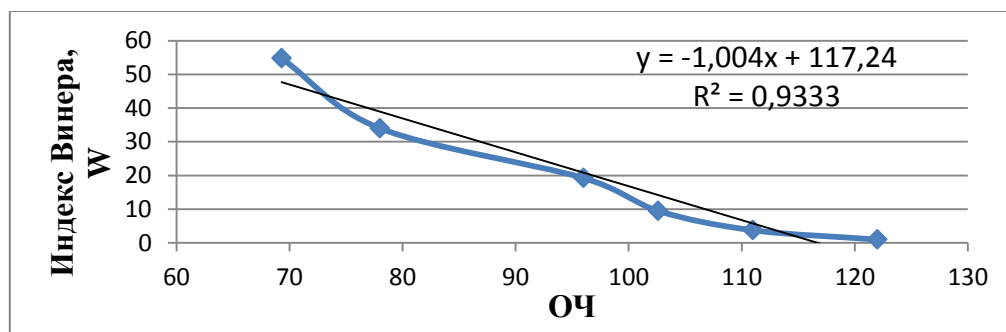


Рисунок Б.26 – Зависимость ОЧ от индекса Винера для спиртов

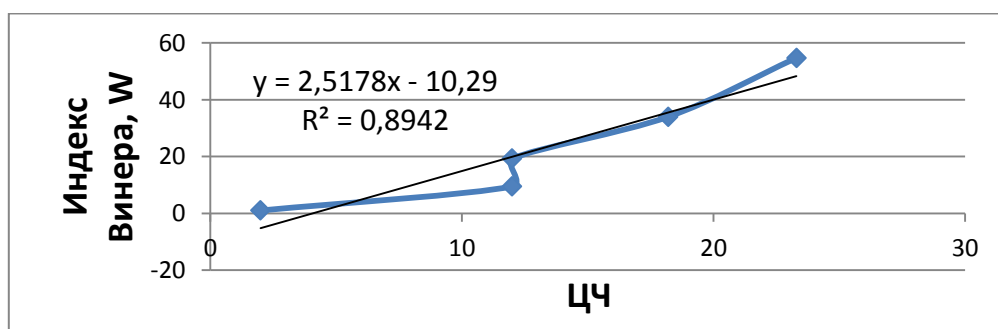


Рисунок Б.27 – Зависимость ЦЧ от индекса Винера для спиртов

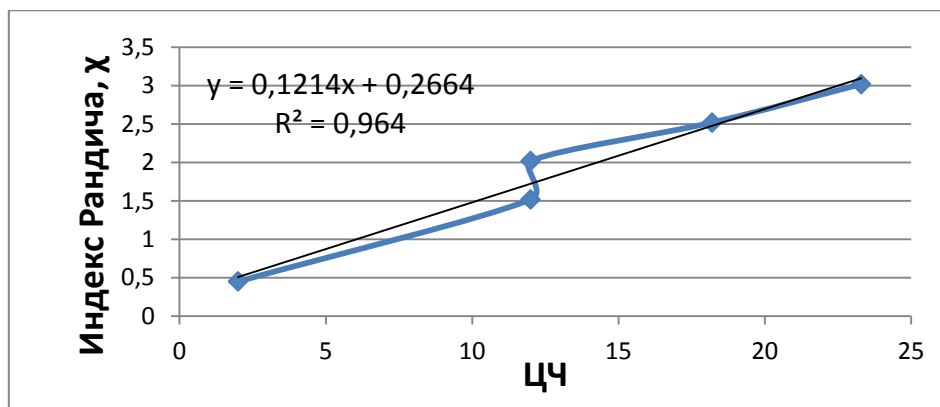


Рисунок Б.28 – Зависимость ЦЧ от индекса Рандича для спиртов

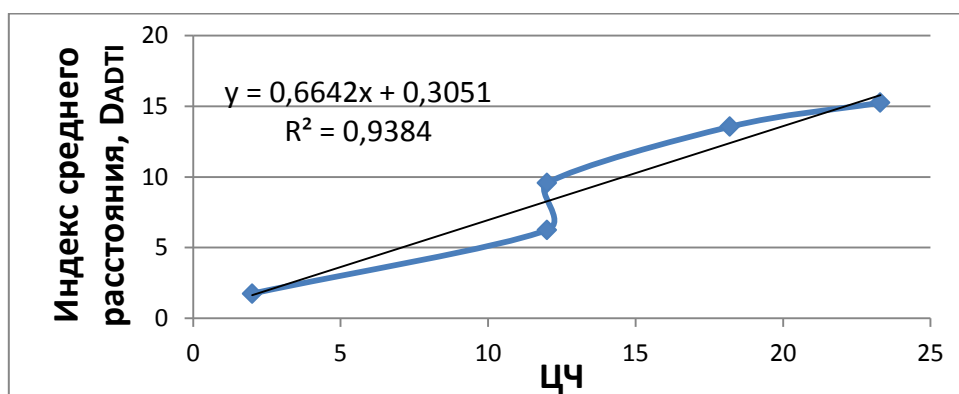


Рисунок Б.29 – Зависимость ЦЧ от индекса среднего расстояния для спиртов

Приложение В

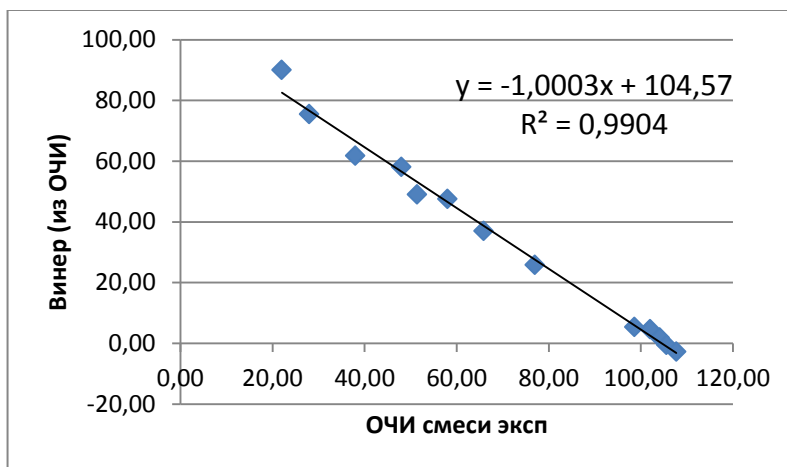


Рисунок В.1 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧИ смеси для моно-замещенных алканов

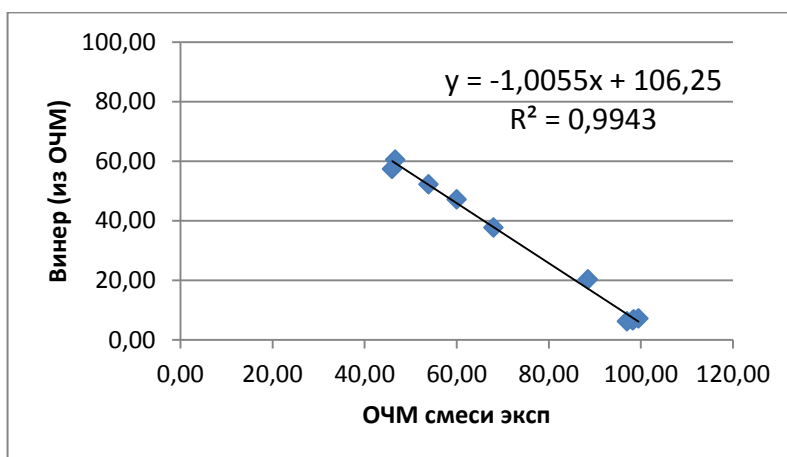


Рисунок В.2 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧМ смеси для моно-замещенных алканов

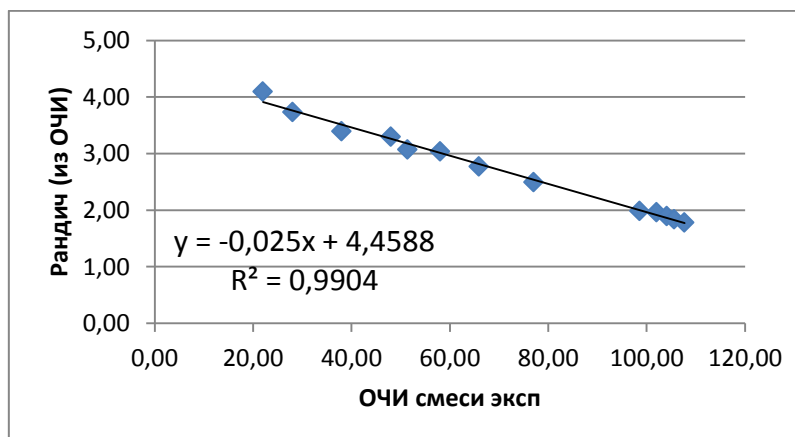


Рисунок В.3 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧИ смеси для моно-замещенных алканов

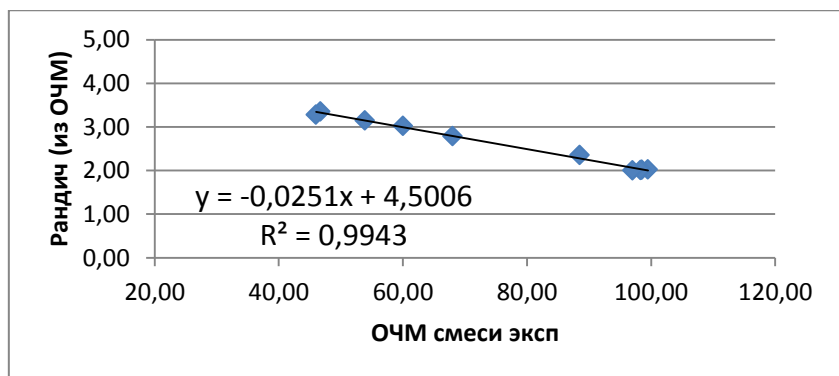


Рисунок В.4 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧМ смеси для моно-замещенных алканов

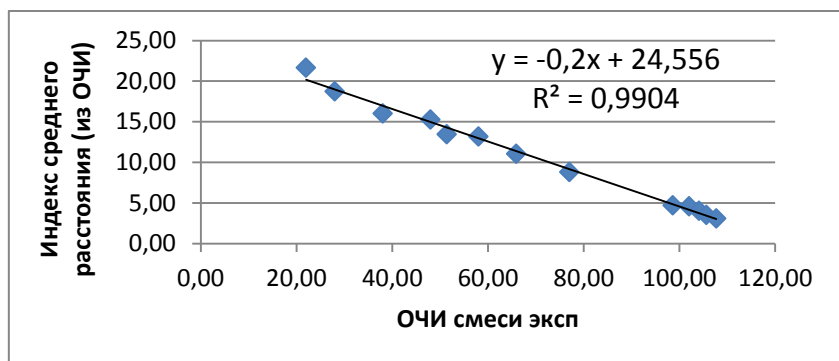


Рисунок В.5 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧИ смеси для моно-замещенных алканов

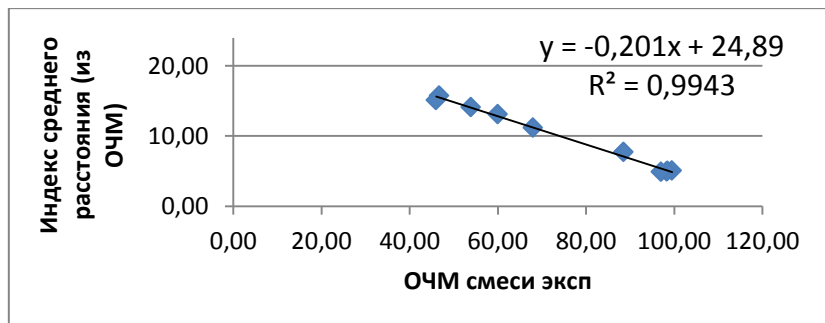


Рисунок В.6 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧМ смеси для моно-замещенных алканов

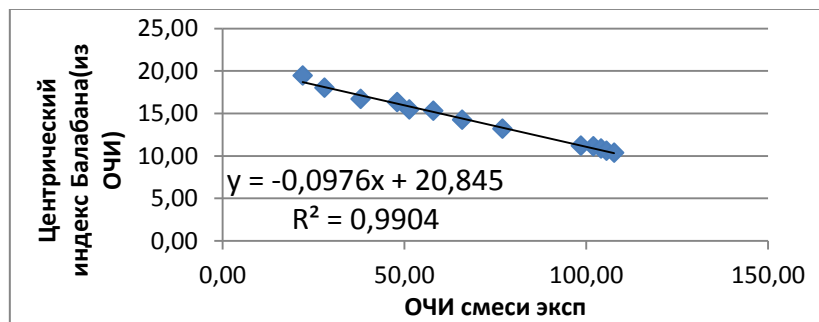


Рисунок В.7 – Зависимость центрального индекса Балабана от экспериментального ОЧИ смеси для моно-замещенных алканов

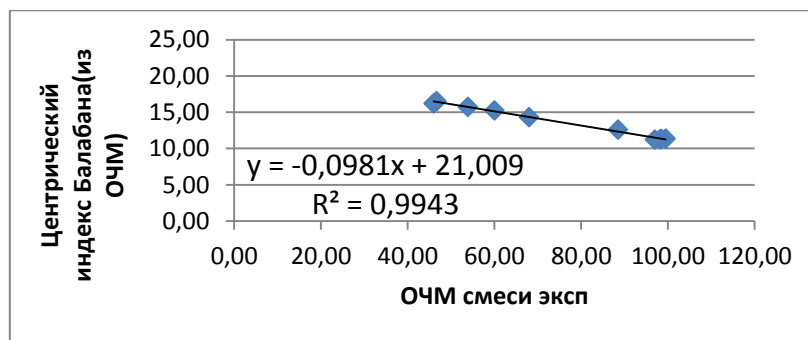


Рисунок В.8 – Зависимость центрального индекса Балабана от экспериментального ОЧМ смеси для моно-замещенных алканов

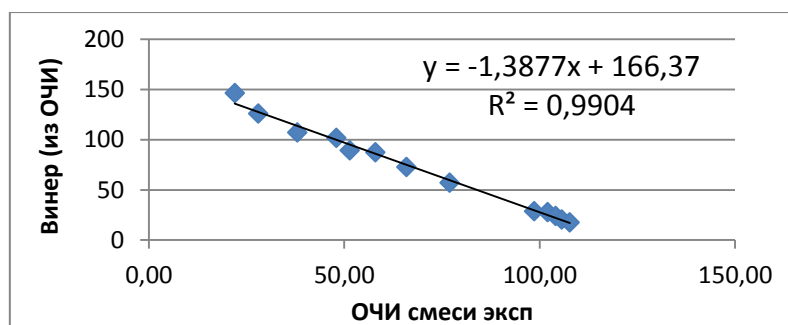


Рисунок В.9 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧИ смеси для ди-замещенных алканов

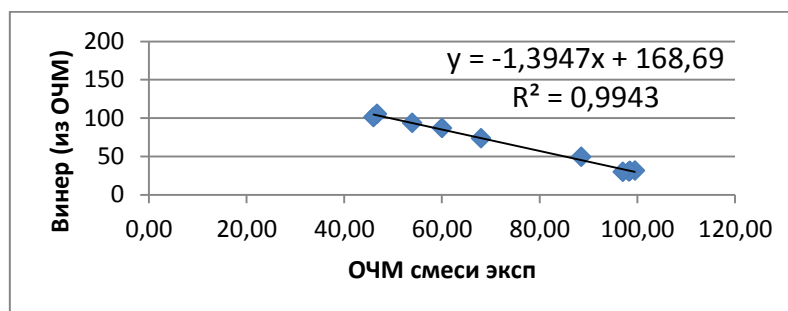


Рисунок В.10 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧМ смеси для ди-замещенных алканов

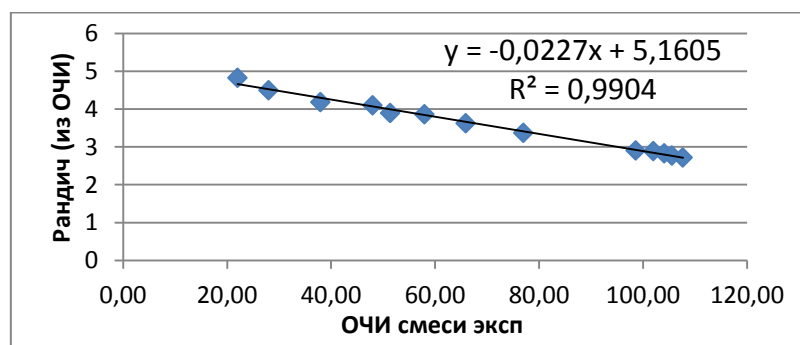


Рисунок В.11 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧИ смеси для ди-замещенных алканов

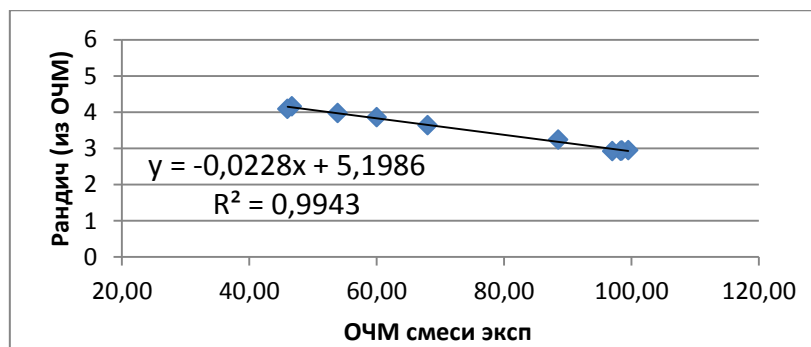


Рисунок В.12 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧМ смеси для ди-замещенных алканов

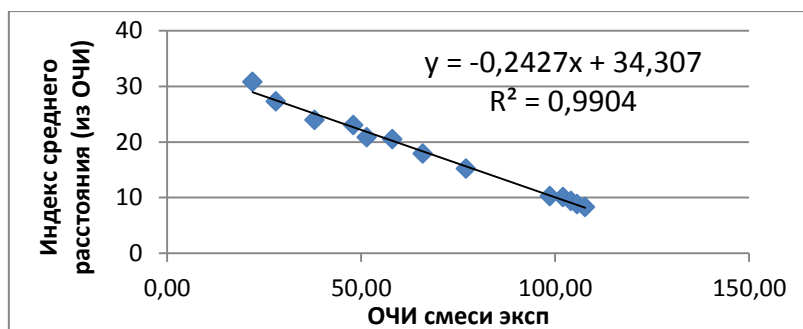


Рисунок В.13 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧИ смеси для ди-замещенных алканов

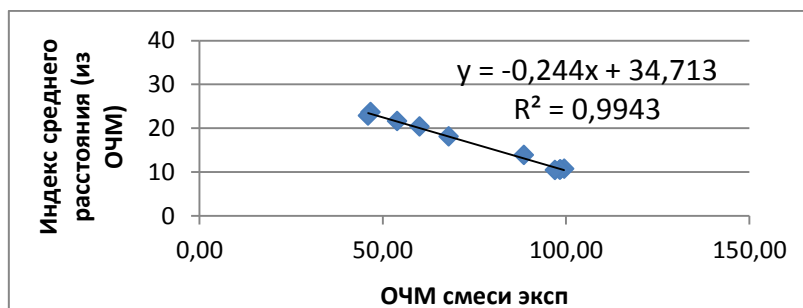


Рисунок В.14 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧМ смеси для ди-замещенных алканов

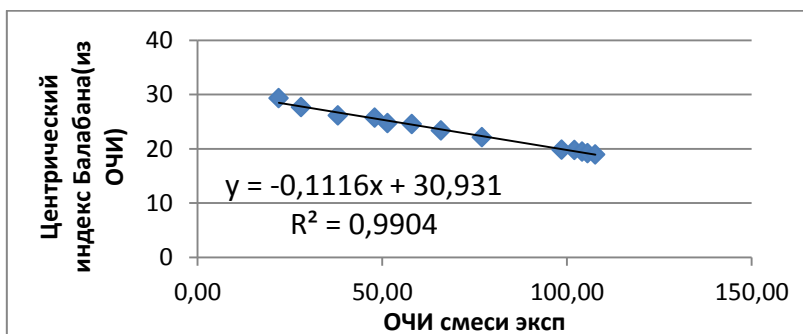


Рисунок В.15 – Зависимость центрального индекса Балабана от экспериментального ОЧИ смеси для ди-замещенных алканов

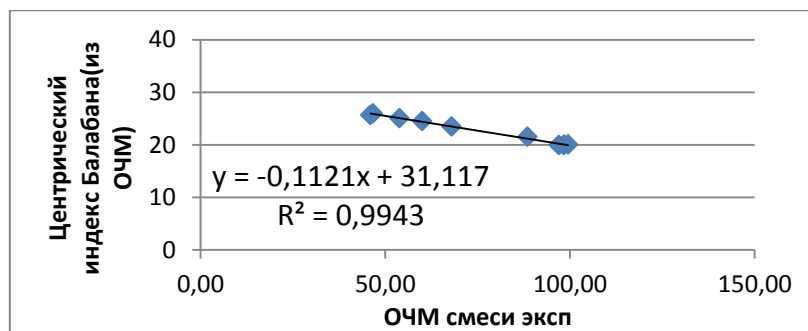


Рисунок В.16 – Зависимость центрического индекса Балабана от экспериментального ОЧМ смеси для ди-замещенных алканов

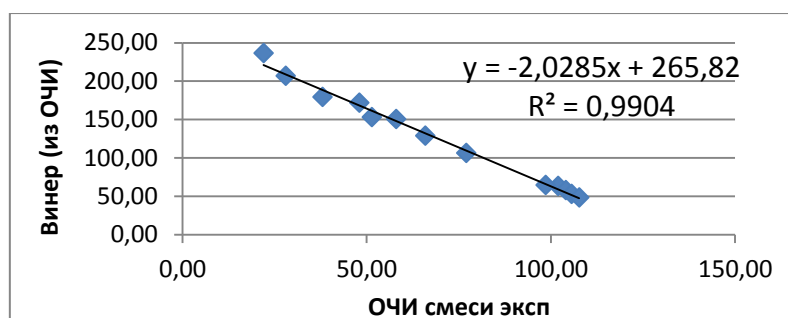


Рисунок В.17 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧИ смеси для три-замещенных алканов

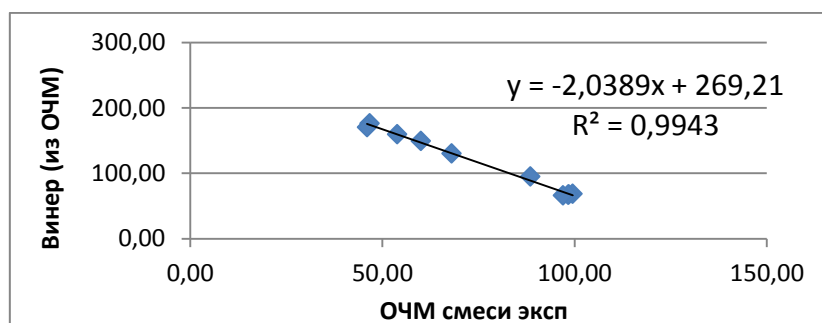


Рисунок В.18 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧМ смеси для три-замещенных алканов

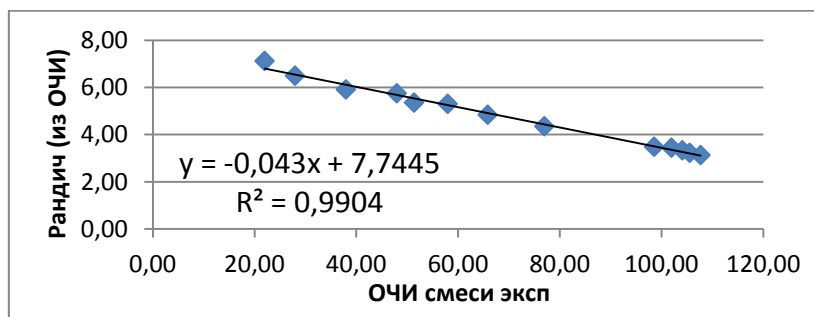


Рисунок В.19 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧИ смеси для три-замещенных алканов

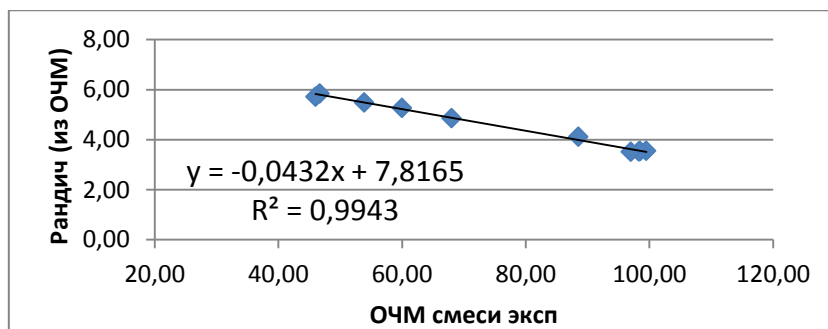


Рисунок В.20 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧМ смеси для три-замещенных алканов

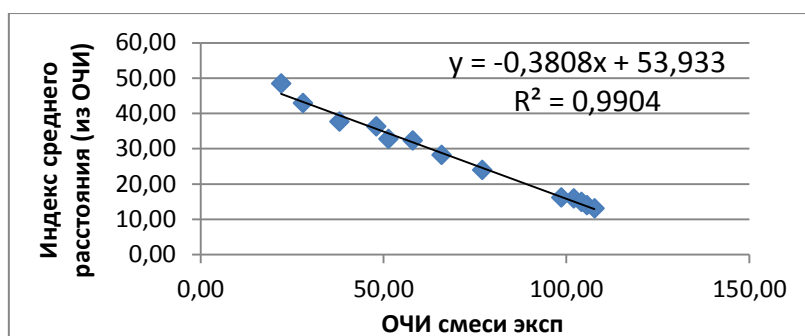


Рисунок В.21 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧИ смеси для три-замещенных алканов

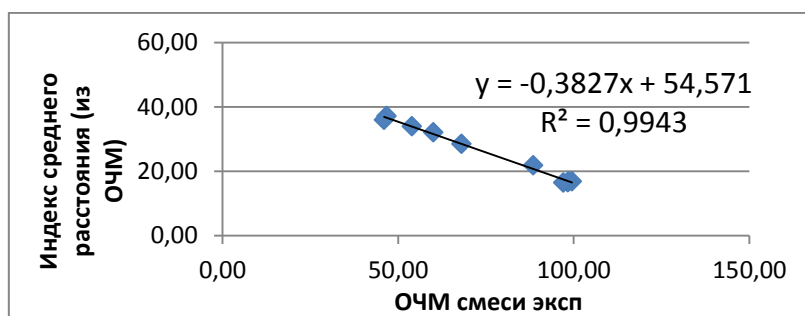


Рисунок В.22 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧМ смеси для три-замещенных алканов

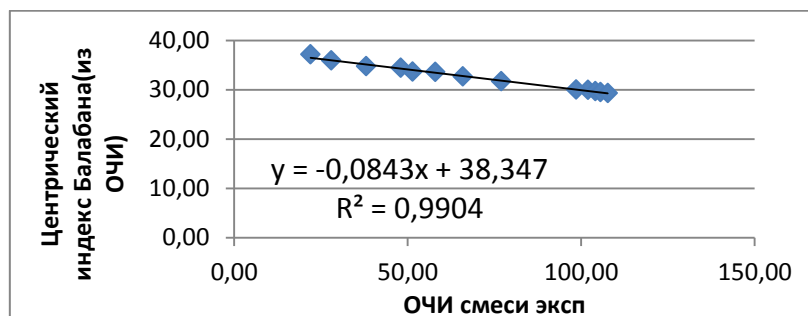


Рисунок В.23– Зависимость центрального индекса Балабана от экспериментального ОЧИ смеси для три-замещенных алканов

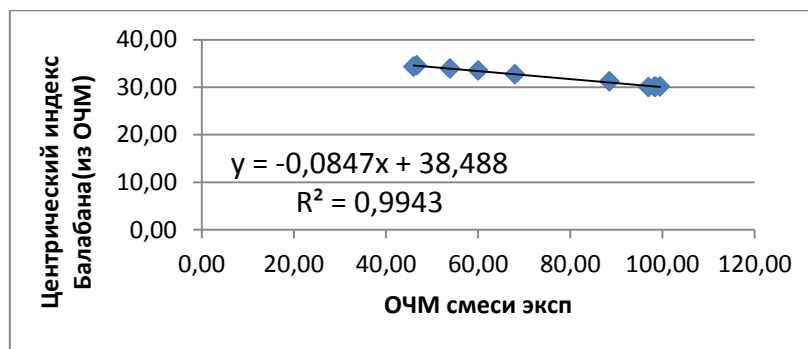


Рисунок В.24 – Зависимость центрального индекса Балабана от экспериментального ОЧМ смеси для три-замещенных алканов

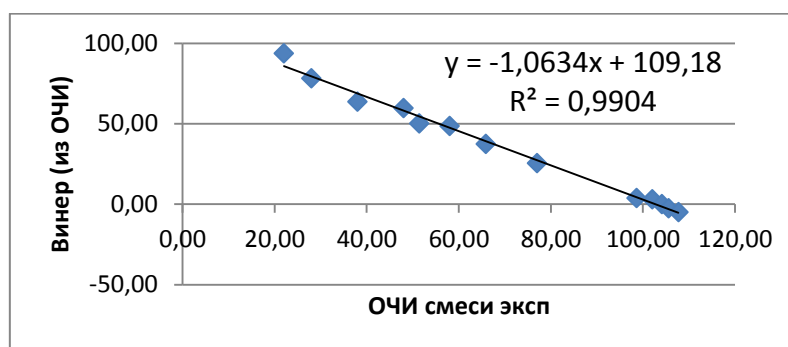


Рисунок В.25 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧИ смеси для алкенов

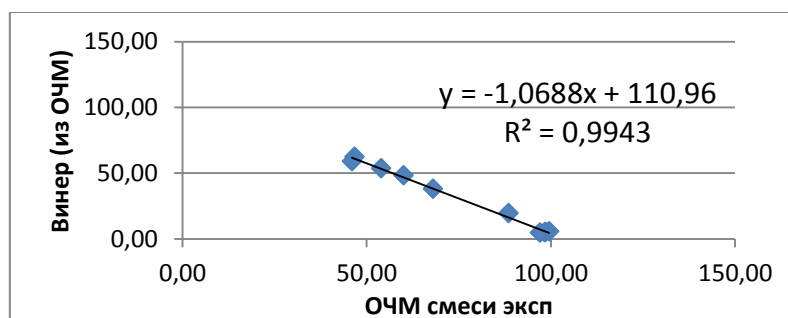


Рисунок В.26 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧМ смеси для алкенов

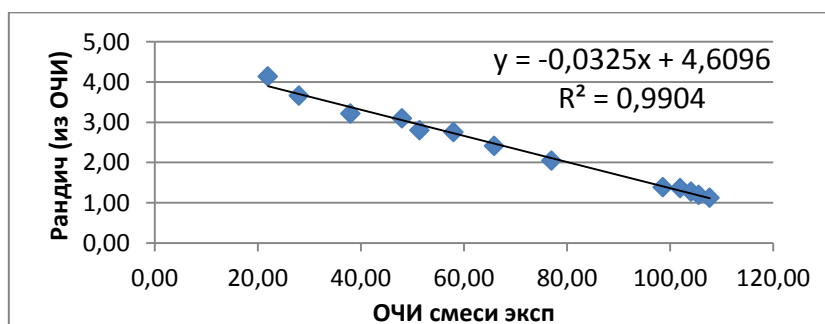


Рисунок В.27 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧИ смеси для алкенов

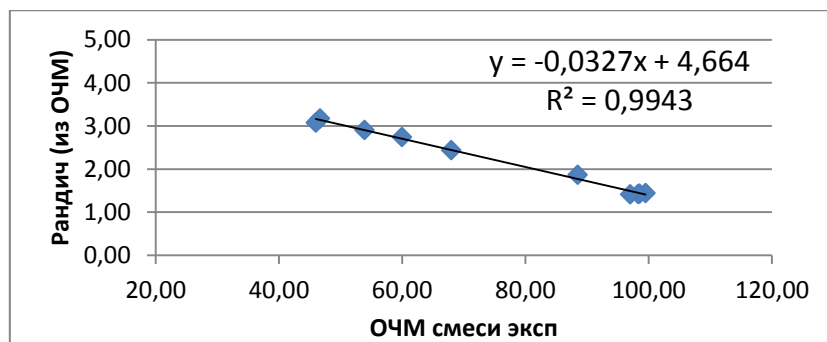


Рисунок В.28 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧМ смеси для алкенов

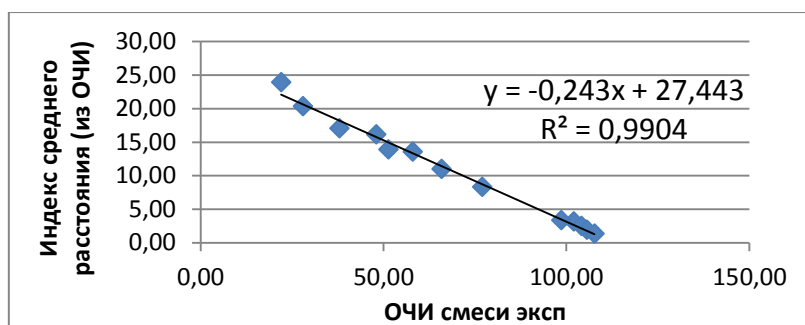


Рисунок В.29 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧИ смеси для алкенов

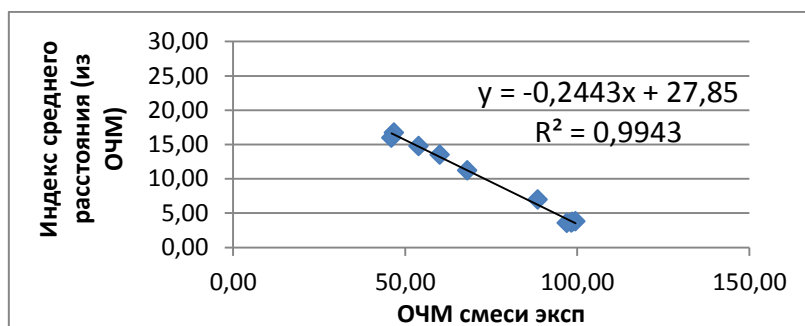


Рисунок В.30 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧМ смеси для алкенов

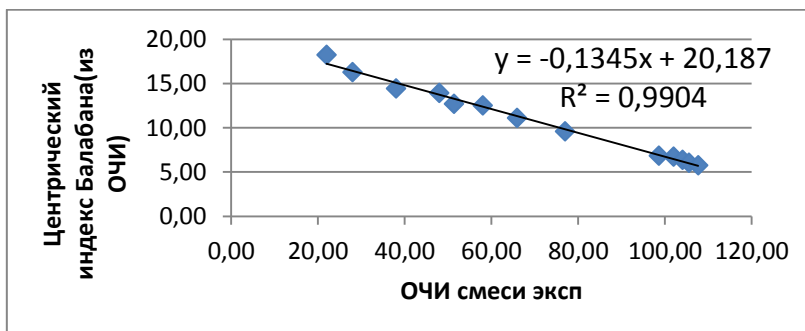


Рисунок В.31 – Зависимость центрального индекса Балабана от экспериментального ОЧИ смеси для алкенов

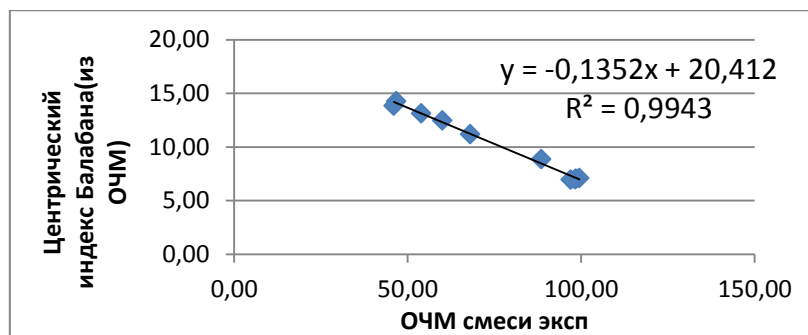


Рисунок В.32 – Зависимость центрического индекса Балабана от экспериментального ОЧМ смеси для алкенов

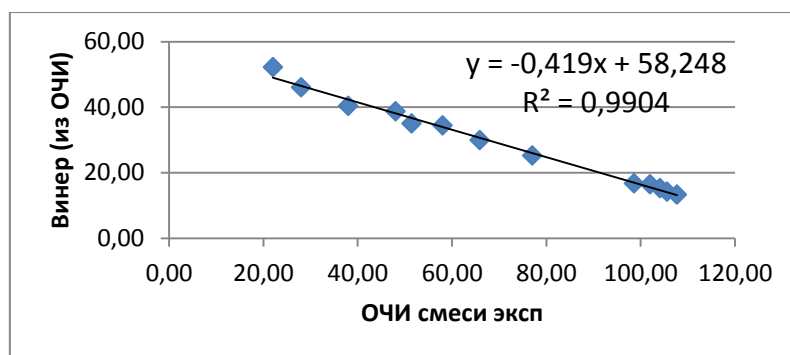


Рисунок В.33 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧИ смеси для нафтендов

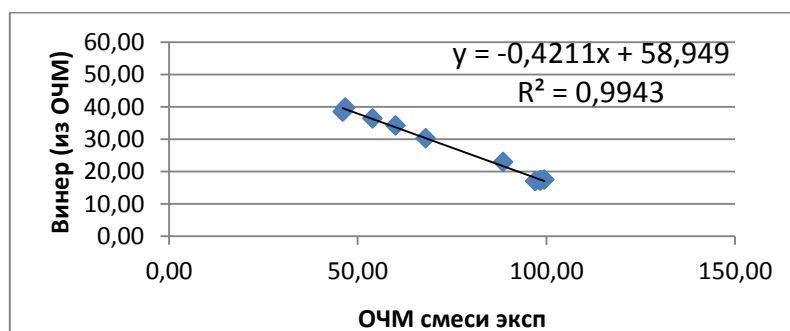


Рисунок В.34 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧМ смеси для нафтендов

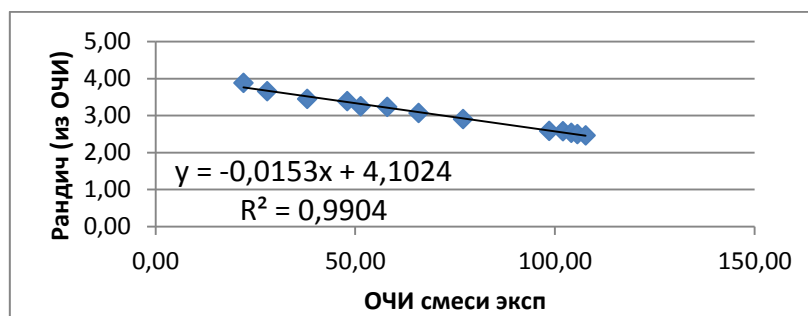


Рисунок В.35 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧИ смеси для нафтендов

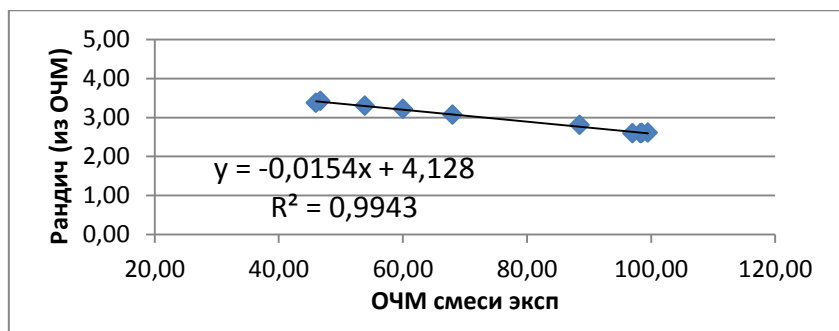


Рисунок В.36 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧМ смеси для нафтен

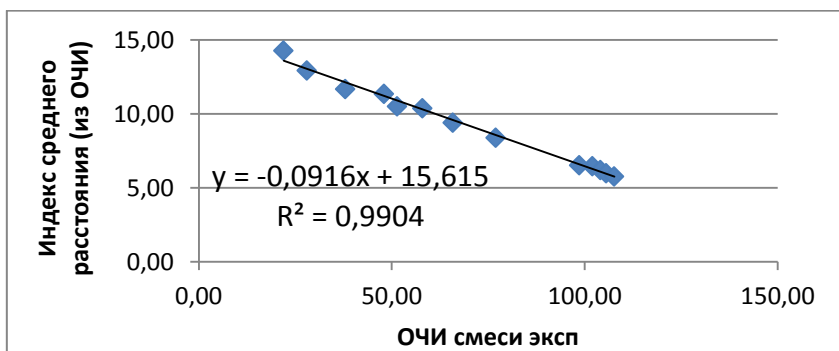


Рисунок В.37 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧИ смеси для нафтен

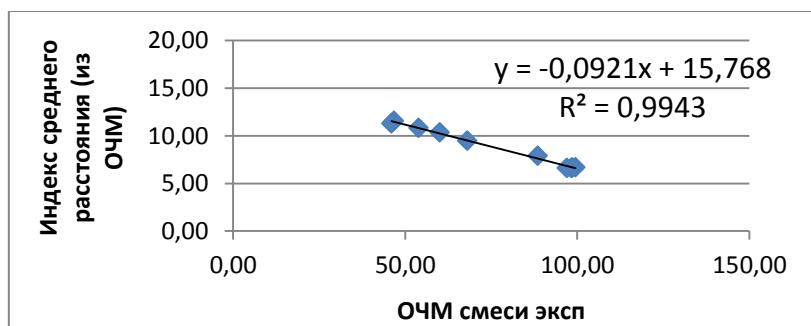


Рисунок В.38 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧМ смеси для нафтен

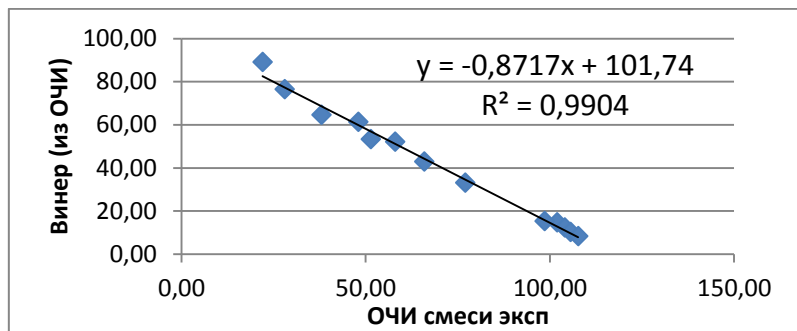


Рисунок В.39 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧИ смеси для моно-замещенных нафтен

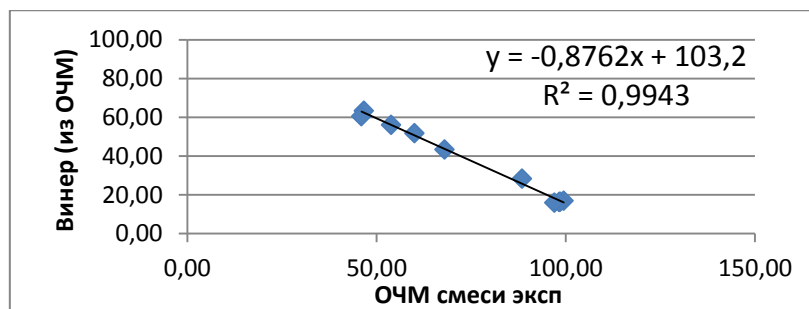


Рисунок В.40 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧМ смеси для моно-замещенных нафтен

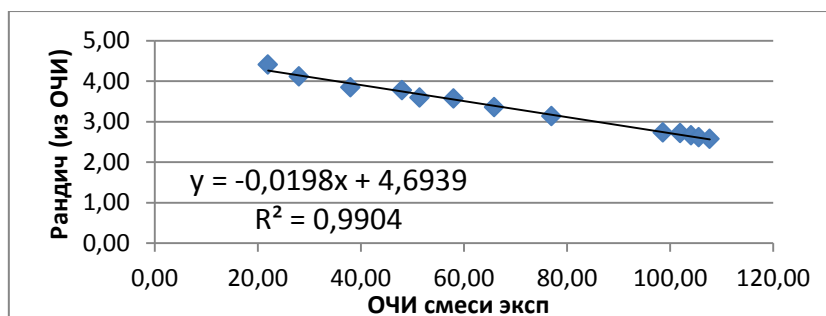


Рисунок В.41 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧИ смеси для моно-замещенных нафтен

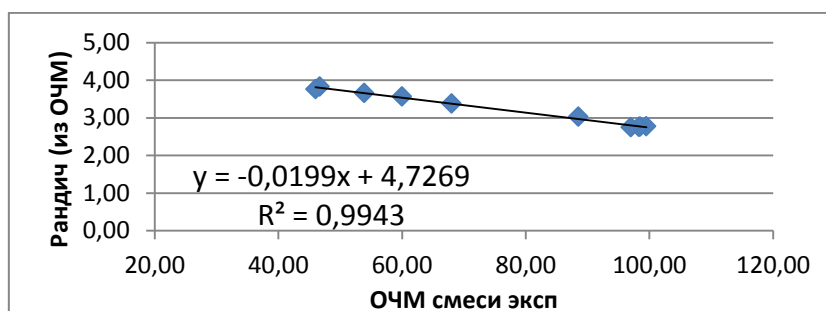


Рисунок В.42 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧМ смеси для моно-замещенных нафтен

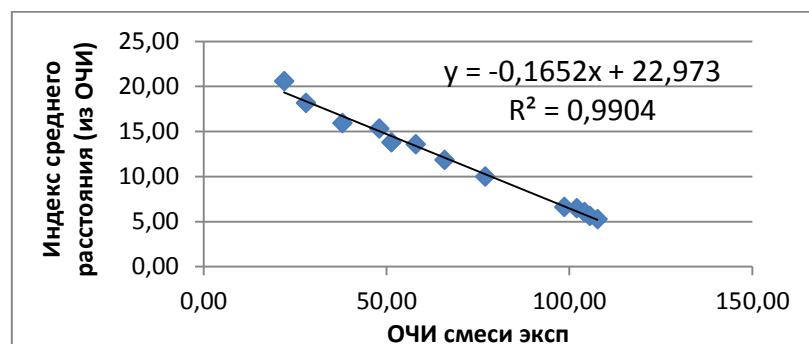


Рисунок В.43 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧИ смеси для моно-замещенных нафтен

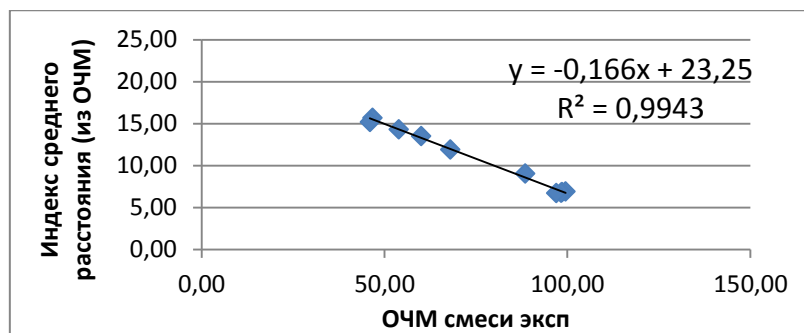


Рисунок В.44 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧМ смеси для моно-замещенных нафтен

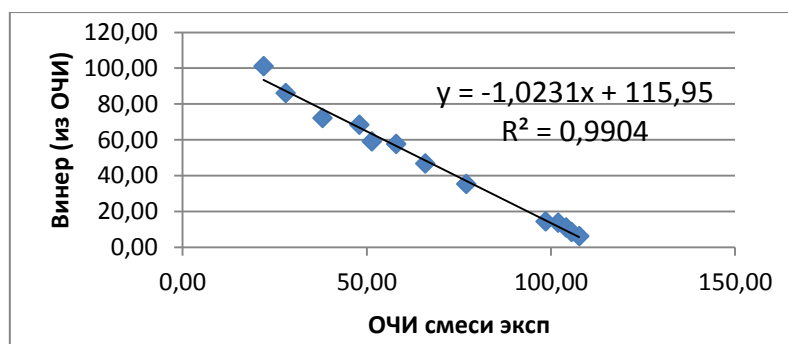


Рисунок В.45 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧИ смеси для спиртов

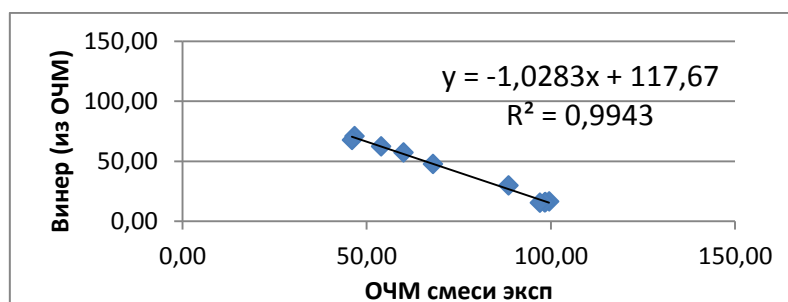


Рисунок В.46 – Зависимость индекса Винера от экспериментального ОЧМ смеси для спиртов

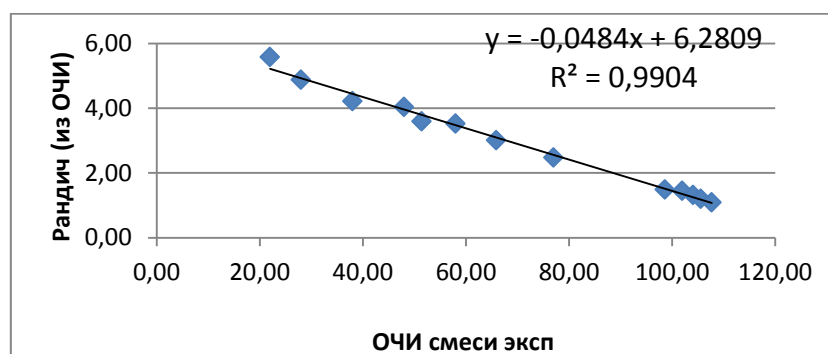


Рисунок В.47 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧИ смеси для спиртов

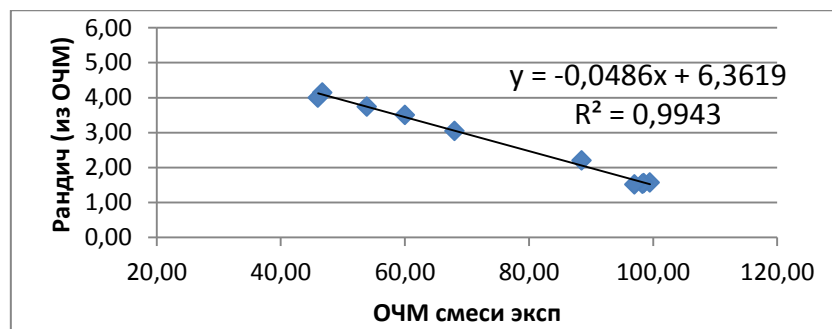


Рисунок В.48 – Зависимость индекса Рандича от экспериментального ОЧМ смеси для спиртов

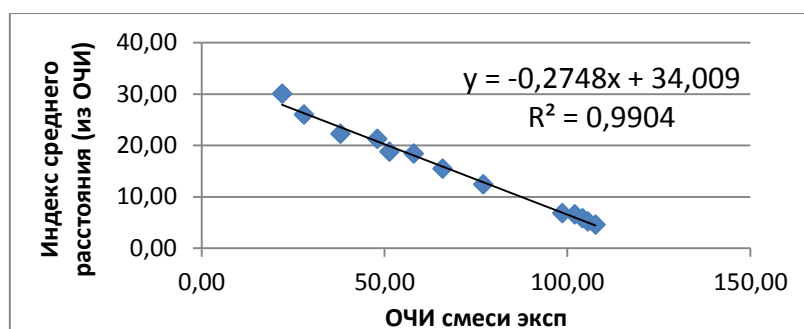


Рисунок В.49 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧИ смеси для спиртов

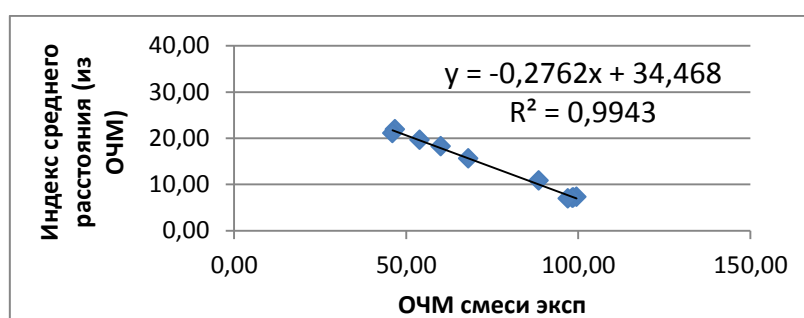


Рисунок В.50 – Зависимость индекса среднего расстояния от экспериментального ОЧМ смеси для спиртов

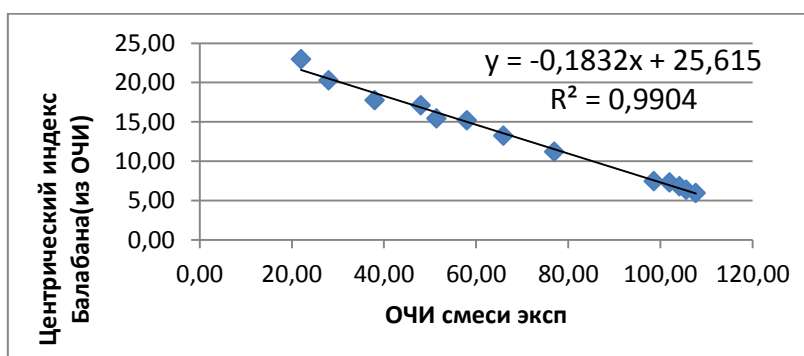


Рисунок В.51 – Зависимость центрального индекса Балабана от экспериментального ОЧИ смеси для спиртов

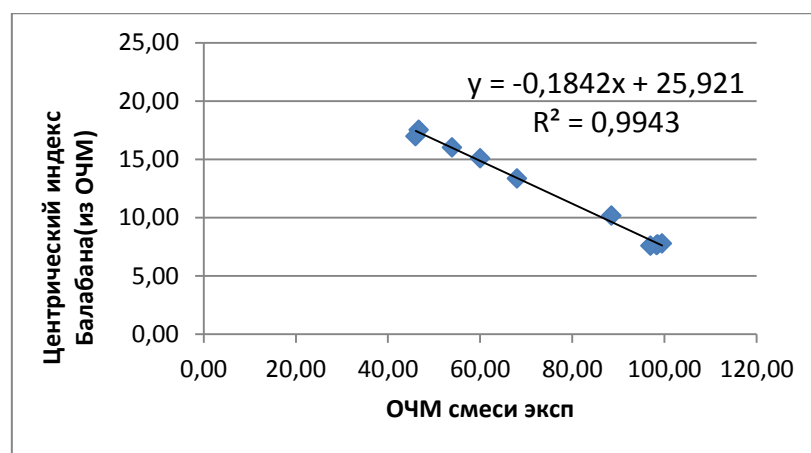


Рисунок В.52 – Зависимость центрального индекса Балабана от экспериментального ОЧМ смеси для спиртов