

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки (профиль) 18.03.02. «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Исследование и моделирование эксплуатационных свойств бензинов

УДК 665.73-047.37

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Радченко Надежда Дмитриевна		

Руководитель

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

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Креницына З.В.	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООД ШБИП	Белоенко Е.В.	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Юрьев Е.М.	к.т.н.		

Томск – 2019 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
P1	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности.
P2	Применять знания в области современных химических технологий для решения производственных задач.
P3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии.
P4	Разрабатывать технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий
P6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.
P9	Активно владеть иностранным языком на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки (специальность) 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии
Форма представления работы:

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

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:	24.05.2019
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
	Современные добавки и присадки к моторным топливам, повышающие эффективность работы двигателей / технико-экономическое обоснование	20
	Экспериментальные и расчетные методы исследования свойств бензинов / литературный обзор	20
	Экспериментальная часть	40
	Социальная ответственность	10
	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10

Составил преподаватель:

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

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Юрьев Е.М.	К.Т.Н.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕДИНЕНИЕ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2К51	Радченко Надежде Дмитриевне

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Энерго – и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Бюджет научного исследования составляет 385431,5 руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды – 27,1%
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT – анализа проекта.
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИИ
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной экономической эффективности	Оценка сравнительной эффективности исследования и расчета эксплуатационных свойств моторных топлив

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Креницына Зоя Васильевна	К.Т.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Радченко Надежда Дмитриевна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2К51	Радченко Надежде Дмитриевне

Школа	ИШПР	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Энерго – и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объект исследования - прямогонные бензиновые дистилляты различных НПЗ, октаноповышающие добавки Методика: Исследование эксплуатационных свойств бензинов. Рабочая зона - химическая лаборатория по исследованию бензинов. Область применения: Промышленные предприятия нефтехимической отрасли.
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
Доцент ООД ШБИП	Белоенко Елена Владимировна	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Радченко Надежда Дмитриевна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2К51	Радченко Надежде Дмитриевне

Школа	ИШПР	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Энерго – и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения</p>	<p>Объект исследования - прямогонные бензиновые дистилляты различных НПЗ, октаноповышающие добавки. Методика: Исследование эксплуатационных свойств бензинов. Рабочая зона - химическая лаборатория по исследованию бензинов. Область применения: Промышленные предприятия нефтехимической отрасли.</p>
---	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <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.
<p>2. Производственная безопасность:</p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<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.
<p>3. Экологическая безопасность:</p>	<ul style="list-style-type: none"> – воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – воздействия объекта на литосферу (отходы).
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<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
Доцент ООД ШБИП	Белоенко Елена Владимировна	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Радченко Надежда Дмитриевна		

Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие нормативные документы:

1. ТР ТС 013/2011 Технический регламент Таможенного союза «О требованиях к автомобильному и авиационному бензину, дизельному и судовому топливу, топливу для реактивных двигателей и мазуту»

2. ГОСТ 511-82. Топливо для двигателей. Моторный метод определения октанового числа

3. ГОСТ 5819 – 78. Реактивы. Анилин. Технические условия.

4. ГН 2.2.5.1313 – 03. Предельно допустимые концентрации вредных веществ в воздухе рабочей зоны.

5. ГОСТ 12.1.007 – 76. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.

6. СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

7. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.

8. ГОСТ 12.1.003– 90. Система стандартов безопасности труда. Шум.

9. ГОСТ 12.1.019 – 79. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

10. ГОСТ 17.2.3.02—78. Охрана природы. Атмосфера. Правила установления допустимых выбросов вредных веществ промышленными предприятиями

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

12. ГОСТ Р 22.0.02 – 94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

В настоящей бакалаврской работе применяются следующие сокращения:

ВОК – высокооктановый компонент

ДВС – двигатель внутреннего сгорания

НПЗ – нефтеперерабатывающий завод

ОЧ – октановое число

ОЧИ – октановое число по исследовательскому методу

ОЧМ – октановое число по моторному методу

ОЧД – дорожное октановое число

ЦЧ – цетановое число

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 119 страниц, 38 таблиц, 28 рисунков, 43 источника литературы, 2 приложения.

Ключевые слова: автомобильный бензин, октановое число, детонационная стойкость, октаноповышающие добавки, эксплуатационные свойства, расчетные методы, цетановое число.

Объектами исследования являются прямогонные бензиновые дистилляты различных НПЗ и октаноповышающие добавки.

Целью работы является разработка методов расчета ОЧ и ЦЧ моторных топлив различного состава, в т.ч. и с добавками, повышающими детонационную стойкость.

Для достижения цели были решены следующие задачи:

- выполнен анализ адекватности существующих методов расчета;
- выполнено экспериментальное исследование свойств с различными типами добавок (спирты, эфиры, индивидуальные углеводороды, азотсодержащие соединения);
- разработаны корреляции ОЧ-ЦЧ для различных групп соединений и бензиновых фракций различного происхождения;
- разработан метод определения ОЧ смешения для топливных композиций с октаноповышающими добавками разных типов.

Для бензиновых фракций выполнено экспериментальное определение плотности, молекулярной массы, анилиновой точки, коэффициента преломления, фракционного, группового и индивидуального составов ОЧ по моторному и исследовательскому методам.

Область применения: промышленные предприятия нефтехимической отрасли, НПЗ и лаборатории по исследованию свойств бензина с добавлением высокооктановых добавок и разработке рецептур их смешения.

Оглавление

Введение.....	15
1 Современные добавки и присадки к моторным топливам, повышающие эффективность работы двигателей.....	17
2 Классификация и механизмы действия добавок и присадок к моторным топливам.....	23
2.1 Классификация присадок к топливам.....	23
2.1.1 Октаноповышающие присадки.....	26
2.2 Механизм действия добавок и присадок.....	29
3 Экспериментальные и расчетные методы исследования свойств бензинов.....	34
3.1 Расчетные методы определения октанового числа бензинов.....	34
3.2 Определение основных физико-химических свойств бензинов.....	40
4 Постановка задачи исследования.....	44
5 Экспериментальная часть.....	45
5.1 Характеристика объекта исследования.....	45
5.2 План и результаты эксперимента.....	45
5.3 Анализ адекватности и разработка расчетных методов.....	46
5.4 Исследования смесей бензиновых дистиллятов с октаноповышающими добавками.....	49
5.4.1 Рецептуры и физико-химические свойства добавок.....	49
5.5 Разработка модели и проектирование потокового смесителя на линии товарного бензина.....	63
5.5.1 Разработка модели смесителя в среде UniSim.....	64
5.5.2 Гидравлический и тепловой расчеты.....	66
5.5.3 Конструктивные и механические расчеты.....	69
5.6 Обсуждение результатов.....	74
6 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение..	76
6.1 Предпроектный анализ.....	76
6.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	76
6.1.2 SWOT – анализ.....	77

6.2 Планирование научно – исследовательских работ	77
6.2.1 Структура работ в рамках научного исследования	77
6.2.3 Определение трудоемкости выполнения работ	78
6.2.4 Разработка графика проведения научного исследования	79
6.3 Бюджет научно – технического исследования (НТИ).....	79
6.3.1 Расчет материальных затрат НТИ	80
6.3.2 Расчет затрат на специальное оборудования для научных (экспериментальных) работ	81
6.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы.....	82
6.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	85
6.3.5 Накладные расходы.....	85
6.3.6 Формирование бюджета затрат научно – исследовательского проекта.	86
6.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	87
7 Социальная ответственность	91
7.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	91
7.1.1 Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства.	92
7.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	93
7.2 Профессиональная социальная безопасность.	93
7.2.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования.....	93
7.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.	94
7.2.3 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.....	97
7.3 Экологическая безопасность.....	97
7.3.1 Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду.	97
7.3.2 Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду.	98
7.3.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.	99
7.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	100

7.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований.	100
7.4.2 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.	100
7.4.3 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.	101
Заключение	103
Список используемых источников.....	104
Приложение А	109
Приложение Б.....	113

Введение

В настоящее время основным потребителем нефтяного топлива является автомобильный транспорт.

На данный момент предполагается, что автомобильные бензины нефтяного происхождения будут заменяться альтернативными видами топлива, такими как: сжиженный нефтяной газ, сжатый и сжиженный природный газ, спирт, водород и т.д. Тем не менее исследование альтернативных видов топлива является трудоемким и экономически затратным процессом, следовательно, вероятность того, что в ближайшие несколько десятилетий топливо нефтяного происхождения будет одним из основных как для двигателей внутреннего сгорания так и дизельных двигателей.

Современные виды топлива, такие как бензин, дизельное и реактивное топливо, представляют собой сложные смеси сотен различных компонентов. Таким образом, химия самовоспламенения используемого топлива очень сложна и ее трудно точно предсказать. Они производятся из нефти и газовых конденсатов. Современный бензин представляет собой смешение компонентов, полученных в результате алкилирования, изомеризации, полимеризации, каталитического крекинга и риформинга, прямой перегонки, и других процессов переработки нефти.

Необходимо чтобы автомобильный и авиационный бензины соответствовали ряду требований, для достижения экономичной и надежной работы двигателя, и эксплуатационных требований: хорошее испарение, позволяет получать оптимальный состав однородной топливно – воздушной смеси при любой температуре; также оптимальный групповой и углеводородный состав, необходимый для стабильного процесса сгорания без детонации при любом режиме работы двигателя; состав и свойства необходимые для длительного хранения и не оказывать неблагоприятного влияния на резинотехнические изделия, резервуары и детали топливной

системы и т.п. Экологические свойства топлива в последние годы выходят на первый план.

В связи с ужесточением экологических требований о выбросах и растущие требования к снижению расхода топлива требуют значительных усилий для повышения эффективности сгорания при одновременном удовлетворении требований по качеству выбросов.

Важным показателем эксплуатационных качеств товарных автомобильных бензинов считается детонационная стойкость, характеризующаяся октановым числом. В ходе данного исследования были выполнены эксперименты по определению эксплуатационных свойств бензиновых дистиллятов и физико – химических характеристик, также проведен анализ экспресс – методов расчета ОЧ, которые позволят разработать и улучшить рецептуры моторных топлив.

1 Современные добавки и присадки к моторным топливам, повышающие эффективность работы двигателей

В настоящее время разрабатываются множество добавок и присадок, направленных на улучшение эксплуатационных характеристик работы ДВС, таких как антидетонаторы, моющие, присадки для удаления влаги, промывочные составы и др.

Большинство из них содержат: спирты, ароматические амины, некоторые металлы, эфиры и т.д.

Так например авторы [1] предложили добавку, которая содержит одно или несколько веществ из группы ацетилацетонатов $3d - M$ – металлов имеющих формулу $M (C_5H_7O_2)_n$, где $n=2-3$, а $M (3d - M)$ соответствует группе V(III), Cr(III), Mn(II-III), Fe(III), Co(II-III), Ni(II), Cu(II), в количестве 10 -12 % масс., также и оксигенаты в виде смеси алифатических спиртов $C_2 - C_8$ - остальное. При добавлении данной добавки в неэтилированное моторное топливо, в первую очередь повышается октановое число, а также увеличивается химическая устойчивость и достигается низкая токсичность применяемых компонентов.

Ацетилацетонаты $3d - M$ являются твердыми, устойчивыми на воздухе мелкокристаллические вещества, основные физико – химические характеристики:

- массовая доля металла, %, в пределах	25-31
- насыпная плотность при 20 °С, г/см, в пределах	0,6-0,8
- температура плавления, °С	> 185

Для данного класса соединений характерным фактором является, высокая летучесть без разложения при температуре больше 70 °С, за счет чего снижается ограничение по нагарообразованию и т.д.

Используется для моторных топлив с интервалом кипения бензина, которые используются для карбюраторных и инжекторных двигателях внутреннего сгорания.

Авторы патента [2] разработали функциональную добавку к бензинам, содержащую антидетонационные и иные составляющие, а еще преобразующую добавку, в качестве которой применяют многослойные нанотрубки (УНТ), в качестве углеродных наноматериалов (УНМ) углеродные наноматериалы (УНМ), в виде многослойных нанотрубок (УНТ). Добавление добавки проводится в количестве от 10^{-6} до 10^{-4} масс. % в пересчете на бензин.

Использование данной добавки возможно для двигателей внутреннего сгорания в качестве топливной композиции на основе бензина, концентрация которой должна быть в пределах 0,3 – 3,0 масс. %.

Добавление многофункциональной добавки к бензинам позволяет повысить ОЧ на 9 – 11 ед. а также эксплуатационные свойства бензина.

Состав данной добавки включает в себя в масс. %:

- метил-трет-бутиловый эфир	20 – 40
- моющую присадку, включающую модификатор трения	до 10
- триэтиленetetрамин и диэтиламин,	
в качестве стабилизатора цвета	0,01 – 0,2
- углеродные наноматериалы «Таунит»,	
в качестве модифицирующей добавки	от 10^{-2} до 10^{-5}
- антидетонационную добавку на основе ароматических аминов, включающую в качестве основного компонента	
N – метиланилин	остальное

Добавление в состав добавки в виде наноматериалов «Таунит» в количестве от 10^{-6} до 10^{-4} % масс., в пересчете на бензин позволяет:

- увеличить ОЧ на 9 – 11 ед;
- устранить смолистых отложений на выпускных клапанах и инжекторах;
- за счет полного окисления продуктов сгорания - улучшить экологическую безопасность использования бензина;
- при низких температурах - обеспечить стабильность топлива;

- за счет их разрыхления - уменьшить нагарообразование.

Изобретение [3] является многофункциональной антидетонационной добавкой (далее – «Окта 2») к моторному топливу, обеспечивает высокий уровень детонационной стойкости, увеличивает экологические и эксплуатационные свойства топлива.

В состав добавки «Окта 2» входят следующие компоненты:

- (I) 2,4-ксилидин, 2,5-ксилидин, 2,6-ксилидин или их смесь;
- (II) пара-анизидин или N-метил-пара-анизидин;
- (III) анилин;
- (IV) агидол-1 или анидол-12,

Оптимальным является содержание данных компонентов в данном количестве (масс. %):

компонент (I)	50-60
компонент (II)	10-15
компонент (III)	5-60
компонент (IV)	0,05-0,45

С технической точки зрения добавка «Окта 2» имеет ряд достоинств:

- повышение ОЧ топлива;
- стабильность при окислении топлива и добавки;
- уменьшение испаряемости топлива с добавкой;
- увеличивается срок хранения добавки, особенно в условиях контакта с водой и ее парами, все перечисленной наблюдается без нарушения технических требований.

Наиболее эффективным является добавление добавки «Окта 2» в количестве до 2,0 масс. %.

Настоящий патент [4] относится к присадке для двигателей с принудительным внутренним зажиганием в области нефтепереработки и нефтехимии.

Добавки состоят из смесей веществ, которые включают ароматические амины, антиоксиданты, скипидар, хлорпарафины и изопарафины, необходимые для придания антидетонационных свойств.

Получают ее путем обработки при температуре кипения присадки и атмосферном давлении в парожидкой фазе, с коэффициентом циркуляции присадки через катализатор 1,0 – 10,0 металлическим марганцем.

Содержание: ароматические амины 2,0-5,0; антиоксиданты 3,0-5,0; скипидар 35,0-50,0; хлорпарафины 1,0-2,0; изопарафины – остальное до 100;

Для получения топлив с приростом ОЧМ на 3 - 6 ед. необходимо добавление присадки в количестве 0,03 – 0,2 масс. %.

Производство данной присадки является безотходным производством.

Ароматический амин содержит один компонент, выбранный из группы, включающей N – метиланилин, N, N-диметиланилин, экстралин. Антиоксидант содержит вещество, включающее в себя Агидол – 1, Агидол – 12 и Агидол – 3. Хлорпарафин – хлороформ, углерод четыреххлористый, дихлорэтан. Скипидар – скипидар живичный и экстракционный. Изопарафин представляет собой 2,2,4-триметилпентан (изооктан).

Изобретение [5] относится к составу высокооктанового компонента для автомобильных бензинов и топливных композиций, содержащих этот компонент.

Компонент содержит в % масс. диметилкарбонат (ДМК) 10,3 - 33,3; изопропиловый спирт (ИПС) и/ или диизопропиловый эфир (ДИПЭ) 58,8 – 82,8; в качестве основного компонента используется N – метиланилин (N – МА), до 11,8, также может быть использован в количестве 7,5-14,5 %.

Данный компонент повышает антидетонационные и низкотемпературные свойства, как самого компонента, так и топливных композиций, содержащих его.

Используемые ингредиенты в составе компонента являются продуктами промышленного производства.

Данный компонент готовят путем смешения всех ингредиентов при температуре 15 – 35 °С с использованием стандартного оборудования до однородного раствора по безотходной технологии.

Прирост ОЧ составляет около 4,0 – 10,7 ед.

Антидетонационная добавка, предложенная авторами патента [6] к топливу для двигателей внутреннего сгорания с искровым зажиганием на основе бензина, также может быть использована и для дизельного топлива, ее содержание:

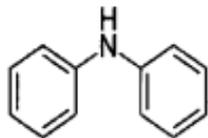
(I) по меньшей мере один 4-метокси-N-метиланилин,

(II) по меньшей мере один N-фенил-анилин при содержании компонентов (масс. %):

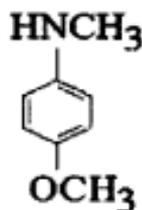
компонент (I) 30-70

компонент (II) 70-30

Дифениламин: кристаллический, с температурой кипения 54 – 55 °С, температура конца кипения 302 °С.



НМПА: кристаллический, с температурой кипения 33 – 36 °С, температура конца кипения 252 °С.



Данная добавка добавляется в количестве от 1 до 3,0 масс. % по отношению к весу углеводородного топлива. С технической точки зрения, изобретение повышает октановое число топлива, увеличивает стабильность при окислении, высокой экологичности, полноте сгорания и низкой склонности к нагарообразованию и отложению смол, также добавление в данных пределах позволяет уменьшить количество вредных выбросов СО,

СН, NO_x, CO₂, бензпиренов. Также можно регулировать фракционный состав бензинов, за счет применяемых оксигенатов.

Патент [7] относится к области нефтепереработки и нефтехимии, а непосредственно к функциональной добавке для автомобильного топлива и топливных композиций, для двигателей внутреннего сгорания.

Добавка включает в себя присадки с моющими и антикоррозионными свойствами – 1,0 – 10,0 % масс., стабилизатор цвета пиперазинэтанамин – 0,005-0,3 % масс., углеводородную фракцию с температурой кипения внутри интервала температур от 30 до 330 °С – 20 – 50 % масс., а также основной компонент до 100 % масс.

Содержание вышеуказанной добавки в топливо должно быть в количестве 0,3 -4,0 % масс. Она обладает моющими, антикоррозионными свойствами со стабилизатором цвета для длительного хранения (не менее 6 месяцев) и самое главное высокими антидетонационными свойствами.

Компоненты, находящиеся в составе добавки, являются продуктами безотходного производства, производство которых осуществляется с использованием стандартного оборудования путем смешения компонентов при температуре 15 -35 °С до получения гомогенного раствора.

Анализ современных добавок и присадок к топливам для улучшения их эксплуатационных свойств, показал наличие множества присадок к моторному топливу разных составов и назначений, что говорит об актуальности их использования и большом ассортименте.

2 Классификация и механизмы действия добавок и присадок к моторным топливам.

2.1 Классификация присадок к топливам

В соответствии с общей классификацией, предложенной профессором А.А. Гуреевым [8] весь набор свойств топлива, определяющих их качество, делятся на три группы: физико – химические, эксплуатационные и технические.

В основную группу входят свойства, определяющие состав топлива и его состояние (элементные, фракционные и групповые углеводородные композиции, давление, плотность, вязкость, поверхностное натяжение, теплоемкость, теплопроводность, диэлектрическая проницаемость и т.д.).

Вторая состоит из свойств топлива, которые обеспечивают надежность и эффективность двигателей внутреннего сгорания (прокачиваемость, испарение, воспламеняемость и горючесть, склонность к образованию отложений, коррозионная агрессивность и совместимость с неметаллическими материалами, противоизносными и охлаждающими свойствами). Эти свойства преимущества использования топлива по прямому назначению и определяют область применения.

Третья группа состоит из свойств, которые связаны не с использованием, а с хранением и транспортировкой топлива. Данная группа делится на две подгруппы: свойства, обеспечивающие сохранность качества при транспортировке и хранении (физическая и химическая стабильность, биологическая стабильность) и свойства, обеспечивающие безопасность при транспортировке, хранении и использовании топлив (токсичность, пожароопасность и склонность к электризации).

В настоящее время существует около 20 видов свойств топлива, которые помогают улучшить, сохранить или придать им новые полезные свойства путем добавления определенных химических веществ в небольших количествах, называемых присадками. Топливные присадки добавляются в небольших концентрациях. Важно, чтобы добавки, улучшающие

определенные свойства, не ухудшали другие свойства топлива и его качество в целом.

Добавка может быть представлена в виде химического соединения или смеси химических соединений, которые в небольших концентрациях (тысячные и сотые, реже - десятые доли процента) значительно влияют на физико-химические и эксплуатационные качества нефтепродукта по определенному механизму [9].

Разработка присадок к топливу последовала за разработкой присадок к маслам, механизм которых был тщательно изучен, но не мог быть применен в абсолютной мере. В отличие от масла, топливо горит, и это добавляет особые требования к его присадкам. Они должны быть эффективными при низких концентрациях; при сгорании токсичные продукты для отработанных катализаторов и особенно для окружающей среды не должны образовываться; они не должны влиять на образование отложений на деталях двигателя, топливной аппаратуре и т. д.

В настоящее время существует более 20 видов присадок, а их смесей более 300.

Основные виды присадок представлены в таблице 1.

Присадка	Состав	Применение
Депрессорная	Сополимеры бутилакрилата, бутилметакрилата и метакриловой кислоты	Они снижают температуру застывания высокопарафиновых нефтепродуктов и могут использоваться в качестве депрессора для судового, моторного, дизельного, военно-морского топлива и мазута.
Противоизносная	Карбоновые кислоты, эфиры карбоновых кислот, полиамины, амиды карбоновых кислот	Восстанавливают нарушенные при эксплуатации зазоры в сопрягаемых деталях; восстанавливают механическую прочность, износостойкость и антикоррозионную стойкость деталей.

Восстанавливаю щая	<p>Реметаллизанты - присадки, в составе которых содержатся ионы мягких металлов, такие, как медь, бронза, кадмий, олово и др.</p> <p>Тефлоносодержащие</p> <p>Кондиционеры металла – содержащие хлоропарафиновые соединения, в основном хлор и сера.</p> <p>Слоистые модификаторы трения – соединения молибдена, вольфрама, тантала, графита и т.п.</p> <p>Геомодификаторы трения - серпентин (Mg_2SiO_4), до 90% силикаты магния, до 2,5% амфибол, до 5% форстерит, до 2,5% плазморасширенный графит.</p>	Восстанавливают изношенных узлов автомобиля
Антидымная	Дисульфид молибдена, частицы микрокерамики, соединения, обладающие моющими свойствами	Сокращение черного дыма (частиц сажи) от выхлопных газов
Моющая	Аминоамиды, полибутенамины, полиэфирамины.	Предотвращения отложения смол кислотной природы.
Антиокислитель ная	Нитрованные масла, зольные и беззольные сульфонаты, эфиры алкенилянтарных кислот, соли нитробензойных кислот, аминопроизводные и другие вещества.	Предотвратить окисление нестабильных соединений бензина при нормальных температурах в условиях хранения.
Диспергирующа я	Полимеры с полярными группами или полиалкиленимидами и сукцинимиды	Повышают коллоидную стабильность системы, обеспечивая удержание в объеме нефтяных примесей органического и неорганического происхождения, которые накапливаются в процессе.
Ингибиторы коррозии	ПАВ различного строения, амиды кислот C24–C26	Уменьшают скорость коррозии без значительного изменения концентрации какого-либо агрессивного реагента.
Промоторы воспламенения	Алкилнитраты, пероксиды.	Иницируют реакцию окисления углеводородных цепей.
Антитурбулентн ые	Олиальфа-олефин (смесь полиальфа-олефинов), дисперсионная среда - антиагломератор	Снижает давление в трубопроводе при сохранении его пропускной способности, что снижает риск аварий.
Антидетонацион ные присадки	Эфиры, спирты, аминные соединения.	Предотвращают детонационное горение бензинов

2.1.1 Октаноповышающие присадки

Наиболее важным показателем моторных топлив является стойкость к детонации, она характеризует надежность, продолжительность работы двигателя и экономичность. Октановое число является показателем, характеризующим детонационную стойкость. Для определения октанового числа используют изооктан и эталонный гептан (н-гептан). Изооктан, будучи разветвленным углеводородом, очень плохо воспламеняется даже при сильном сжатии, температура самовоспламенения + 430 °С, поэтому его ОЧ принято за стандарт и равно 100. Н-гептан легко воспламеняется в случае легкого сжатия, его ОЧ принимается за 0. Улучшение октанового числа может осуществляться двумя способами. Первым путем увеличения является рост содержания высокооктановой фракции, а вторым – использование присадки, снижающей риск детонации. Первый метод подходит для стран с развитой системой глубокой переработки нефти, которые обладают достаточными возможностями для каталитического крекинга, изомеризации и алкилирования.

Низшие спирты (метанол, этанол) и простые эфиры (метил-трет-бутиловый, этил-трет-бутиловый, метил-трет-амиловый) активно используются в составе добавок, как оксигенаты. Благодаря содержанию химически связанного кислорода в топливе около 0,5 – 2,7 % масс. они обладают относительно низкой детонационной активностью и улучшают экологические качества топлив [10]

Октаноповышающие присадки были введены в 1920-х годах, чтобы изменять октановое число, необходимое для того, чтобы позволить разработчикам транспортных средств повысить коэффициенты сжатия двигателя до уровней, которые обеспечивают приемлемую эффективность и производительность [11].

Присадки, повышающие октановое число, улучшают антидетонационные качества (октановое число), позволяют снизить содержание вредных компонентов в отработавших газах, уменьшить

отложения смол в силовой системе двигателя, а также продлить срок службы катализаторов для очистки выхлопных газов.

В настоящее время найдены соединения, октановое число которых выше 100 (бензол, толуол, ксилол, метанол, этанол, эфиры). Данные соединения используют в качестве добавок повышающих октановое число.

Наиболее целесообразным считается использование спиртов в качестве добавок в топливо, так как они общедоступны, легко синтезируются (возобновляемое сырье), малотоксичны и имеют достаточно большие значения октанового числа.

Этиловый спирт (этанол) – одноатомный алифатический спирт с характерным запахом, смешивается с бензолом, водой, ацетоном, метанолом, хлороформом. Используется в качестве «оксигената» и добавляется в топливо, чтобы помочь уменьшить выбросы углеводородов, которые вызывают загрязнение воздуха.

Современные технологии позволяют получать этанол из сырья, богатого целлюлозой, включая кукурузные стебли, зерновую солому, бумагу, целлюлозу, щепу, коммунальные отходы, просо и другие источники. Этанол, используемый в качестве топлива, денатурируют, добавляя небольшое количество бензина, иногда и другие продукты нефтехимии. Октановое число 100 – 105 ед.

Изобутиловый спирт (изобутанол, 2-метил-1-пропанол) бесцветная жидкость с характерным запахом, нашел широкое применение в качестве добавки, которая увеличивает октановое число. Согласно требованию Евро-5, содержание изобутанола в бензине допускается до 10%. Также он используется в качестве растворителя. Главным достоинством данного спирта является его дешевизна.

В промышленности изобутиловый спирт получают из окиси углерода и водорода аналогично синтезу метанола. Октановое число по моторному методу равно 94, по исследовательскому – 113 ед.

Амиловый и изоамиловый спирты – одноатомные спирты. Изоамиловый спирт является стабилизатором для топлива.

Получают разгонкой сивушных масел и синтетически – из газов крекинга нефти. Октановые числа 116 и 93 – по исследовательскому и моторному методам соответственно.

Метилтретбутиловый эфир (МТБЭ) представляет собой химическое соединение, которое образуется в результате химической реакции метанола и изобутилена. МТБЭ производится в очень больших количествах (более 200000 баррелей в день в США в 1999 году) и почти исключительно используется в качестве топливной добавки в автомобильных бензинах.

МТБЭ представляет собой бесцветную легко воспламеняющуюся жидкость с характерным коэффициентом заполнения и средним октановым числом 108. Он используется в качестве присадки к бензину, которая обеспечивает чистое горящее топливо для уменьшения загрязнения выхлопными газами автотранспорта.

МТБЭ использовался переработчиками с конца 1970-х годов. Он получил широкое распространение, когда этилированный бензин был выведен из эксплуатации - обеспечивая повышение октанового числа, аналогичное свинцу, но без загрязнения каталитическими нейтрализаторами, которые использовались для уменьшения автоэмиссии с середины 1970-х годов.

Максимальное содержание МТБЭ в топливе не должно превышать 15 %. Добавление 10 - 15 % МТБЭ приводит к повышению октанового числа на 6 - 12 ед. Недостаток данной добавки в том, что требуется вводить значительное количество добавки для получения требуемого октанового числа.

Кроме кислородсодержащих, в качестве октаноповышающих добавок используют и другие гетероатомные соединения, например: N-метиланилин (монометиланилин, экстралин) присадка к топливу – маслянистая прозрачная жидкость со стойким выраженным запахом ароматических

аминосоединений, относится к классу замещенных ариламинов. Присадка с высоким противоударным действием. ММА соответствует современным европейским стандартам физико-химических и эксплуатационных свойств. ММА в несколько раз экономичнее МТБЭ.

При добавлении ММА в количестве 1,5 -2,5 % происходит значительное увеличение октанового числа около 6 ед. Октановое число ММА 208 – 250 ед.

С химической точки зрения эти добавки увеличивают энергию активации сгорания бензиновой смеси. Энергия активации – это минимальная энергия, приложенная для начала химической реакции (в нашем случае, инициирующая горения). Ввод этих добавок обеспечивает значительный рост энергии активации, которая происходит плавно (без детонации).

В США и ЕС содержание добавок в бензине ограничено и не должно превышать в пересчете на массовую долю кислорода 2% масс. ГОСТ Р 51105-97 и ГОСТ Р 51866-2002 «Бензин неэтилированный» допускают добавление оксигенатов по ограниченному перечню, но с добавлением «другие оксигенаты». Использование «других оксигенатов» определяет важность поиска кислородсодержащих соединений, используемых в качестве антидетонационных добавок к бензину[12].

2.2 Механизм действия добавок и присадок

Детонация – это особый ненормальный режим сгорания топлива в двигателе. После воспламенения топлива от искры с нормальной скоростью горит только часть рабочей смеси бензина. Последняя часть несгоревшей рабочей смеси, расположенная перед фронтом пламени, мгновенно самовоспламеняется, за счет чего скорость распространения пламени увеличивается до 1500 - 2000 м / с, давление растет резкими скачками, в то время как рост его должен быть плавным.

Это резкое падение давления создает детонационную ударную волну, распространяющуюся со сверхзвуковыми скоростями. Появление таких ударных волн на стенках цилиндров двигателя и их многократное отражение в конечном итоге приводит к эффекту вибрации и сопровождается характерным металлическим стуком с высокими и звонкими тонами. При сгорании топлива в режиме детонации двигатель перегревается, что приводит к повышенному износу деталей цилиндро-поршневой группы, повышает непрозрачность выхлопных газов. Негативные последствия могут возникнуть в случае работы двигателя в режиме интенсивно развивающейся детонации, включая предаварийные ситуации и выход из строя рабочих частей и самого двигателя [13].

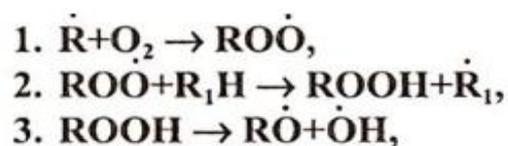
Вероятность детонационного режима напрямую зависит от химического состава используемого топлива. Детонационная стойкость выше у нафтеновых углеводородов, чем у нормальных парафиновых углеводородов, но ниже, чем у ароматических с тем же числом углеродных атомов в молекуле.

Основной причиной детонационного сгорания углеводородов в бензиновых двигателях является механизм их окисления. Общая теория радикальных цепных реакций по Н. Н. Семенову относится и к окислению углеводородов.

Задача антидетонаторов предотвратить взрывное разложение продуктов предпламенного окисления топлива. Окисление происходит до начала нормального сгорания топлива, в момент сжатия топливной смеси, в камере сгорания повышается температура, углеводороды начинают окисляться и образуют большое количество пероксидов.

Поскольку пероксиды химически нестабильны, они разлагаются с сопровождающим процесс взрывом. Пероксиды разрушаются антидетонаторами и поэтому последние не накапливаются.

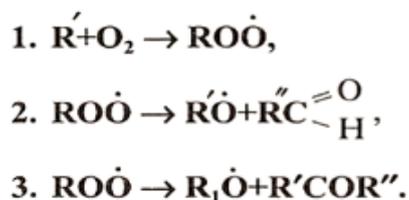
Механизм окисления углеводородов:



когда три $-R_1 \cdot$, $RO \cdot$ и $OH \cdot$ образуются из одного радикала $R \cdot$, что вызывает самопроизвольное ускорение процесса горения. Полученные пероксиды являются очень нестабильными соединениями, которые могут самопроизвольно разлагаться в условиях высокой температуры и давления и вызывать детонацию.

К сожалению, теория Н. Н. Семенова не может объяснить, как структура углеводородов влияет на их детонационную стойкость (ДС), и не может дать ответ: почему ароматические соединения, изоалканы, циклоалканы, спирты и простые эфиры более устойчивы к детонации, чем нормальные алканы.

Р.З. Магарил установил [14], что при работе двигателя внутреннего сгорания при повышенных температурах гидропероксиды практически не образуются. Им была предложена теория детонационного горения с участием альдегидов, которая протекает по механизму:



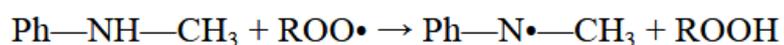
Согласно этой теории, можно сделать вывод, что пероксидные радикалы при работе в условиях повышенной температуры и высокого давления, являются нестойкими и происходит их разложение на ряд следующих соединений:

- альдегиды, которые обладают низкой детонационной стойкостью, если в них структуре присутствуют радикалы со вторичным атомом углерода;

- кетоны – обладают высокой детонационной стойкостью, при наличии в структуре пероксидного радикала с третичным атомом углерода.

Так как пероксиды химически нестабильные соединения, они начинают разлагаться с высокой скоростью, и процесс разложения заканчивается взрывом. Механизм реакций, протекающих в присутствии антидетонационных присадок в бензине, до конца не изучен. Однако современных знаний достаточно, чтобы объяснить практические факты.

Ряд исследователей полагает, что общим механизмом, объясняющим действие антидетонаторов, является взаимодействие этих веществ с пероксидными радикалами и их разрушение. Например, предполагают, что реакция между N-монометиланилином и пероксидом протекает следующим образом:



Увеличение энергии в этой реакции составляет 59 кДж/моль (14 ккал/моль). Эффективность детонатора зависит от того, насколько легко он образует свободные радикалы, которые реагируют с пероксидами.

В настоящее время широко используются комплексные или многофункциональные присадки, которые помимо детонационной стойкости улучшают одновременно несколько свойств топлива.

Еще один подход к описанию механизма разработан авторами Томского Политехнического университета предлагается описать механизм реакции взаимодействия антидетонатора с топливом дифференциальным уравнением первого порядка, которое характеризует скорость изменения ОЧ от содержания добавляемых веществ:

$$a \frac{d\text{ОЧ}}{dC} + b\text{ОЧ} + c = 0 \quad (1)$$

при начальных условиях: $C = 0$;

$$\text{ОЧ} = \text{ОЧ}_0.$$

где ОЧ_0 – октановое число исходного топлива [15].

При этом учитывается, что ОЧ смеси имеет экспоненциальную зависимость от концентрации антидетонатора [16,17].

Дифференциальное уравнение позволяет представить количественное влияние присадки с помощью следующего уравнения:

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

где C – содержание антидетонационной добавки;

$\Delta OЧ$ – увеличение октанового числа;

A и B – коэффициенты, отражающие эффективность добавки по описанному выше механизму (оценены по экспериментальным данным из литературы) [15].

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

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

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

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

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

$C_{\text{пр}}$ - приведенная концентрация добавки, показывает отношение концентрации добавки C_i к максимально допустимой концентрации добавки в топливе C_{\max} [15].

Таким образом, эффективность антидетонаторов прежде всего характеризуется скоростью и полнотой дезактивации продуктов разложения менее термически стабильных парафиновых углеводородов и продуктов распада, приемистость к которым у добавок выше [18]. Приемистость топлива к антидетонаторам в ряду углеводородов следующая: парафины > нафтены > олефиновые углеводороды > ароматика [10].

3 Экспериментальные и расчетные методы исследования свойств бензинов.

Октановое число (ОЧ) является условным показателем, характеризующим способность топлива обеспечивать работу двигателей с принудительным зажиганием без детонации. Октановое число имеет числовой эквивалент процентному содержанию изооктана в эталонной смеси с н-гептаном, который определяет детонационную стойкость на установке со стандартным одноцилиндровым двигателем. Измерения проводятся в жестком режиме (при частоте вращения коленчатого вала 900 об / мин) и мягком (при 600 об / мин), что соответствует октановому числу двигателя и проверке (ОЧИ и ОЧМ) [19].

3.1 Расчетные методы определения октанового числа бензинов

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. Полученные данные не могут быть использованы для оптимизации компаундирования. Процесс предлагается сократить за счет использования быстрых методов оценки детонационной стойкости бензина.

Октановое число является важным показателем качества прямогонного и автомобильного бензина, на который влияет природа нефтепродукта, структура углеводородов, фракционный состав, химическая и физическая стабильность, содержание серы и т. д.

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

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

К первой группе можно отнести следующие методы определения октанового числа:

- с учетом группового состава

Gra и соавторы впервые описали линейную зависимость между ОЧИ и данными по соотношению водородов групповых составляющих бензинов [20]. Они сопоставили ОЧИ с соотношением ароматических и алифатических атомов водорода, следующим образом:

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

где A – коэффициент равный 2,453;

B – коэффициент равный 41,71.

Miihl и Srca также определили соотношение между октановым числом бензина и соотношением атомов водорода групповых компонентов бензина, рассчитав октановое число на основе корреляции между ОЧИ и содержанием ароматического, олефинового и алифатического водорода. Они обнаружили, что наилучшее соотношение наблюдается при рассмотрении содержания ароматического и олефинового водорода[21]:

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

где A – коэффициент равный 83,14;

B – коэффициент равный 0,48;

C – коэффициент равный 1.02.

Однако было известно, что исследуемое октановое число также зависит от содержания парафинов и изопарафинов. Кроме того, это уравнение не относится к расчету ОЧИ менее 83.

Поэтому для того, чтобы устранить этот недостаток и найти простую корреляцию между ОЧИ и данными по соотношению водорода и углерода, Вольф. Г. Хиллер предложил уравнение, включающее содержание алифатических, олефиновых и ароматических частей [22]:

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

где X = H, C (H - водород, C - углерод).

Параметры A_1 , A_2 и A_3 для различных фракций приведены в таблицах 2 и 3 [22].

Таблица 2 – Расчетные параметры для данных по водороду

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

Таблица 3 – Расчетные параметры для данных по углероду

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

- по отношению Н к С

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

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

где Н/С – усреднённое отношение количества атомов водорода и углерода в молекулах смеси [8].

- с учетом фракционного состава

Для бензинов с ОЧМ больше 62 [16]:

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

Определение ОЧИ бензинов также с учетом плотности [28]:

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

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

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

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

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

- с учетом индивидуального состава

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

Наличие связи между структурной формулой молекулы и ее соответствующим молекулярным графом позволяет анализировать структурную формулу, в то время как молекулярный граф (МГ) обрабатывается методами теории графов. Для этого необходимо представить молекулярную структуру в виде графа. Информация, содержащаяся в графе может быть численно представлена различными матрицами, что позволяет работать с компьютерными моделями топливных смесей.

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

Центрический индекс Балабана выражается формулой:

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

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

где δ_i – вершины каждого шага;

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

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

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

где I_j – внутреннее расположение атомов j ;

V_j – это уровень вершины j ;

D_j – расстояние между атомами i и j [24].

Ко второй группе относят методы определения октанового числа:

- по анилиновой точке

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

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

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,

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

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

α – наклон кривой разгонки бензина,

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

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

Если это условие не выполняется, то можно воспользоваться уравнением:

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

где P – анилиновая точка бензина.

- по плотности

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

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

где ρ_4^{20} – относительная плотность.

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 [25] ОЧ с низкокипящими фракциями обычно выше, чем у высококипящих.

Цетановое число дизельного топлива, в свою очередь, обусловлено фракционным и химическим составом. Олефиновые углеводороды и n-алканы имеют самые высокие значения ЦЧ, а ароматические углеводороды - наоборот, самые низкие значения цетановых чисел [25] 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 [26]

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

Кроме того, существует формулы, позволяющие с высокой точностью рассчитать ЦЧ углеводородных смесей, например [18]:

- по анилиновой точке

$$\text{ЦЧ} = T_a - 15,5 \quad (21)$$

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

- по групповому составу

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

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

- по фракционному составу

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

где ρ – плотность бензина при 20°С, г/см³;

T_a – температура анилиновой точки, °С;

$$T_c = T_{10\%} + 0,53*T_{50\%} + 0,17*T_{90\%} \quad (24)$$

- по плотности

По данным разных авторов формулы для расчета цетанового числа для различных фракций приведены в таблице 4 [19].

Таблица 4 – Формулы расчета цетанового числа

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

Таким образом, можно сделать вывод, что разработка приемлемых методов быстрого расчета является экономически эффективным, простым и перспективным направлением для прогнозирования октанового и цетанового числа моторных топлив, соответственно, и качества бензина. Однако необходимо знать основные физико-химические свойства изучаемого топлива, экспериментальные методы определения которых представлены с следующим разделе.

3.2 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 [27] – 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: $\rho_{4}^{20} = (0,99823 - 0,0012)\rho + 0,0012$.

- фракционный состав [28] - при разгонке нормируется температура начала кипения, температура отгонки 10, 50, 90, 97 объемных %

от начальной пробы, также остаток (в %) и температура конца кипения. В основе данного метода лежит перегонка 100 см 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 [29] – 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:

$$\nu = C \cdot \tau \quad (28)$$

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

$$\eta = \nu \cdot \rho \quad (29)$$

- Определение группового состава [30], 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, которые отличаются по показателю преломления не

более чем на 0,0005, выливают вместе, и для них определяют анилиновую точку с использованием метода равного объема.

- максимальная анилиновая точка [31] -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).определение анилиновой точки методом равных объёмов определяется, как температура помутнения одинакового объема образца и анилина.

Массовая долю аренов A , %, определяется по следующей формуле:

$$A = K(T - T_0), \quad (30)$$

Массовая доля циклоалканов H_1 в деароматизированной фракции:

$$H_1 = K_1 (T_1 - T), \quad (31)$$

Массовая доля алканов Π , %:

$$\Pi = 100 - (A + H_2), \quad (33)$$

- 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:

$$M = K \cdot \frac{1}{\Delta T} \cdot \frac{G_1}{G_2} \cdot 1000, \quad (34)$$

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, г. Масса пробы рассчитывается как: $G_1 = m_2 - m_1$; массу бензола как $G_{12} = m_3 - m_2$, где m_1 – масса пустой колбы; m_2 – масса колбы с образцом; m_3 – масса колбы со смесью образца и бензола.

- октановое число определяется с помощью октанометра [32] процесс измерения автоматизирован, функция оператора - заполнить датчик бензином, включить прибор и записать общее значение, отображаемое на индикаторе. Октанометр - это простое в использовании устройство; не требует дополнительной настройки и обслуживания.

4 Постановка задачи исследования

Определение октанового числа (ОЧ) – задача, которая всегда будет актуальна при производстве моторных топлив. По известным значениям ОЧ используемых потоков выполняют процесс компаундирования. Для экспериментального определения октанового числа по исследовательскому или моторному методам требуется стационарные установки и большие денежные затраты. Определение ОЧ по данным хроматограммы достаточно дорогостоящий, длительный и недостаточно достоверный.

Поэтому разработка достоверных экспресс-методов актуальная задача, как для промышленных предприятий, так и для исследователей, разрабатывающих рецептуры смешения и высокооктановые добавки.

Цель данной работы заключается в исследовании и разработке расчетных методов для определения октанового числа бензинов и их смесей с высокооктановыми компонентами.

Объекты исследования - прямогонные бензиновые дистилляты и компоненты, выступающие в роли октаноповышающих добавок.

Для достижения цели необходимо:

- выполнить поиск и анализ адекватности существующих методов расчета;
- выполнить экспериментальное исследование топливных смесей с различными типами добавок;
- разработать метод определения ОЧ смешения для топливных композиций с октаноповышающими добавками разных типов;
- представить варианты корреляции ОЧ-ЦЧ для различных групп соединений и бензиновых фракций различного происхождения;
- сделать выводы по полученным результатам.

5 Экспериментальная часть

5.1 Характеристика объекта исследования

В данной работе исследовались прямогонные бензиновые дистилляты и их смеси с октаноповышающими добавками: этанол, моно-метил-анилин (ММА), метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ), амиловый и изоамиловый спирт.

Прямогонный бензиновый дистиллят является преобладающим (по объему) компонентом базового бензина.

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

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

5.2 План и результаты эксперимента

По результатам ранее проведенных исследований получены данные по физико-химическим свойствам шести проб прямогонных бензинов, которые представлены в таблице 5.

Таблица 5 - Основные физико-химические свойства исследуемых прямогонных бензинов

Показатель	Проба	
	1	2
1) Групповой состав:		
коэффициент преломления	1,398	1,408
максимальная анилиновая точка, °С	57,8	58,4
анилиновая точка (метод равных объемов), °С	59,9	63
2) Содержание углеводородов, % масс.		
Ароматические	3,18	7,27
Нафтеновые	40,66	40,8
Парафиновые	56,16	51,93
3) Плотность относительная	0,6909	0,7256
4) Молекулярная масса (хроматограмма)	87,13	115,74
5) Фракционный состав, °С		
t н.к.	34	72
10 %	59	87
50 %	92	112
90 %	122	149
t к.к.	124	162
6) Октановое число		
ОЧМ	75,9	77,3
ОЧИ	78,0	80,6
7) Октановое число (хроматограмма)		
ОЧМ	61,2	46,4
ОЧИ	58,2	53,8

5.3 Анализ адекватности и разработка расчетных методов

В ходе эксперимента были исследованы различные классы углеводородных соединений, их цетановые и октановые числа. Согласно [33] были построены зависимости, представленные на рисунках 1-4

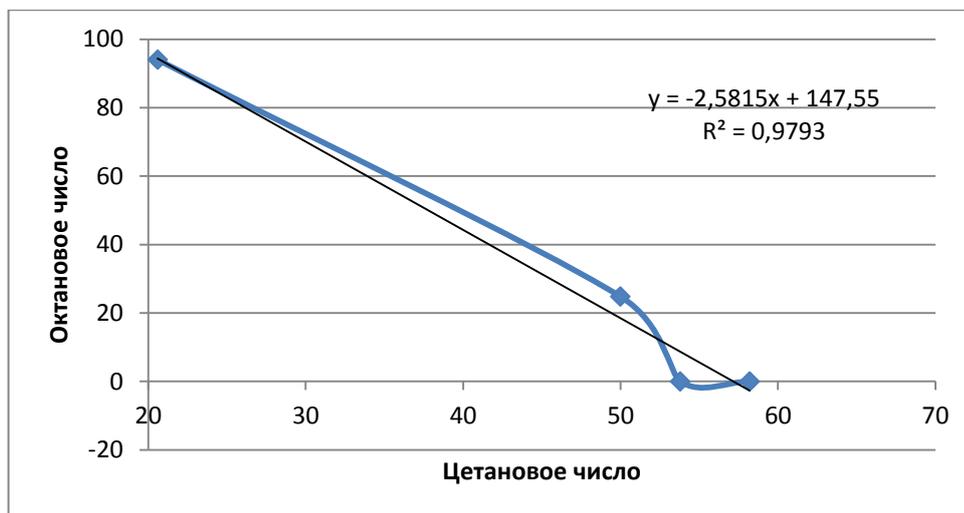


Рисунок 1 – Зависимость цетанового числа от октанового для алканов

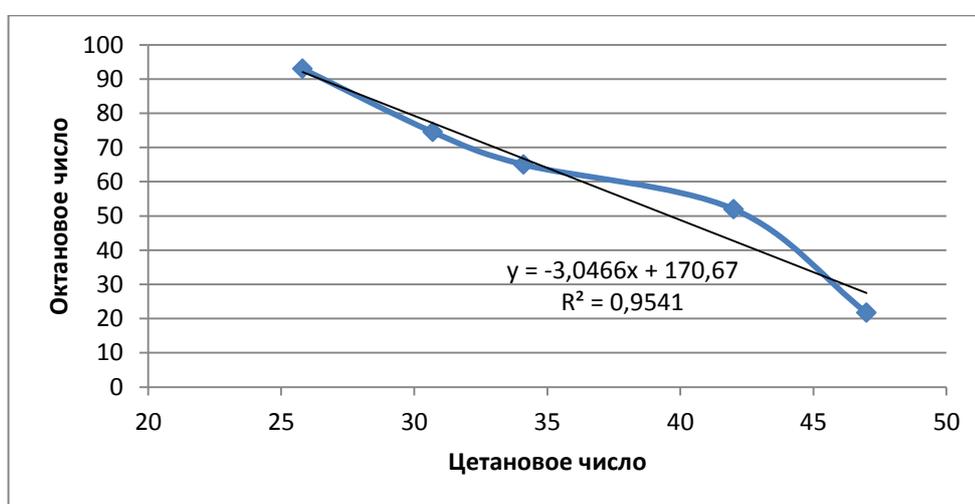


Рисунок 2 – Зависимость цетанового числа от октанового для изоалканов

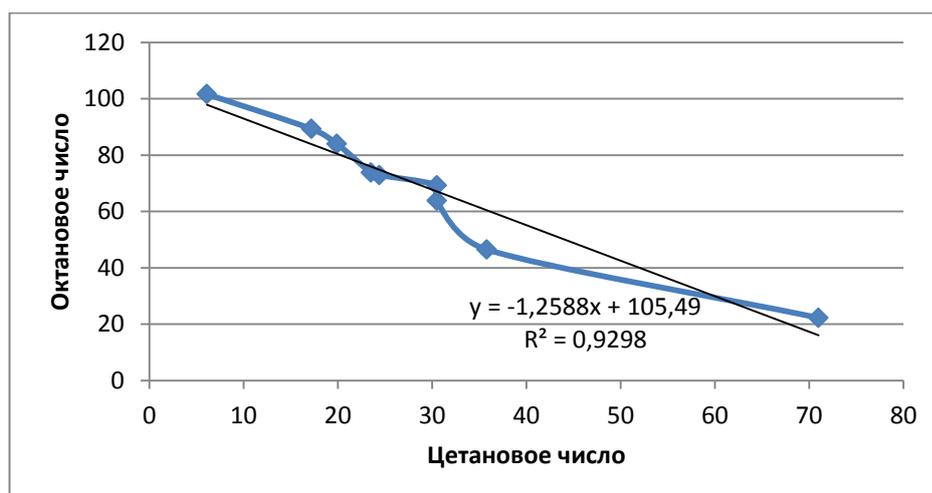


Рисунок 3 – Зависимость цетанового числа от октанового для циклоалканов

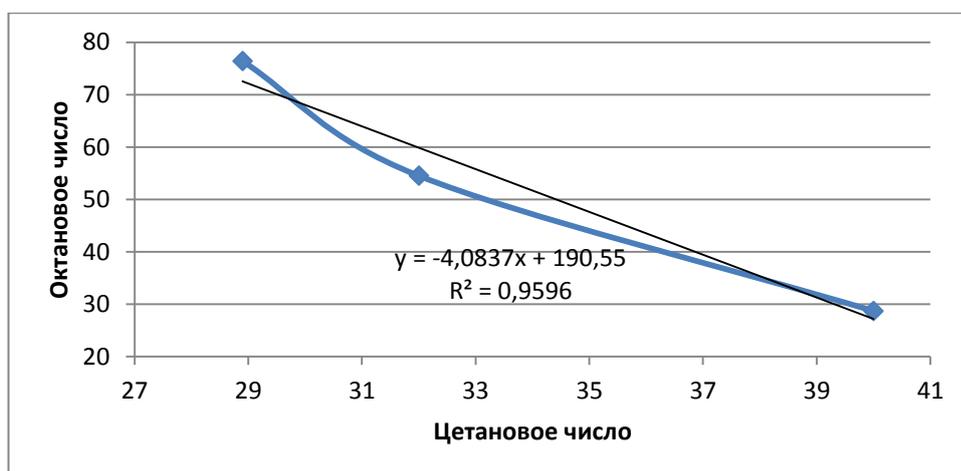


Рисунок 4 – Зависимость цетанового числа от октанового для алкенов

В таблице представлены результаты расчета октановых чисел для шести проб исследуемого прямогонного бензина по формулам основанным на корреляции ОЧ - ЦЧ.

Таблица 6 - Результаты расчета октанового числа.

Формула	$ЦЧ = 0,85 * П + 0,1 * Н - 0,2 * А$	$ОЧМ = (105,9 - ЦЧ) / 0,94$	ОЧМ эксп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	57,11	51,89	61,2	15,19
Проба 2	52,88	49,83	46,4	7,40
Проба 3	54,82	54,34	62,1	10,50
Проба 4	55,54	53,57	59,31	8,67
Проба 5	56,77	52,26	75,8	31,1
Проба 6	50,11	59,35	77	22,9
Формула	$ЦЧ = Та - 15,5$	$ОЧМ = (105,9 - ЦЧ) / 0,94$	ОЧМ эксп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	44,4	65,43	61,2	6,90
Проба 2	47,5	62,13	46,4	33,89
Проба 3	44,1	65,74	62,1	5,17
Проба 4	45,9	63,83	59,31	6,62
Проба 5	39,9	70,21	75,8	7,4
Проба 6	41,7	68,29	77	11,3
Формула	$ЦЧ = 263 - 254 * \rho$	$ОЧМ = (105,9 - ЦЧ) / 0,94$	ОЧМ эксп.	Погрешность, отн. %

Проба 1	87,23	19,86	61,2	65,88
Проба 2	80,63	26,89	46,4	42,06
Проба 3	85,30	21,91	62,1	64,71
Проба 4	81,16	26,31	59,31	55,63
Проба 5	85,30	21,91	75,8	71,1
Проба 6	85,76	21,43	77	72,2
Формула	$\text{ЦЧ} = 52-324*(\rho-0,83)$	$\text{ОЧМ} = (105,9-\text{ЦЧ})/0,94$	ОЧМ эксп.	Погрешность, отн. %
Проба 1	96,71	9,77	61,2	83,21
Проба 2	88,29	18,74	46,4	59,62
Проба 3	94,25	12,39	62,1	80,04
Проба 4	88,97	18,01	59,31	69,63
Проба 5	94,25	12,39	75,8	83,6
Проба 6	94,83	11,77	77	84,7

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

Формулы, основанные на корреляции октанового и цетанового чисел, дали адекватный результат при использовании формулы для расчета ЦЧ по групповому составу, $\Delta_{\text{ср}} = 13,92\%$, также расхождение ОЧ составляет 9 пунктов.

Таким образом, для расчета октанового числа пригодной оказался экспресс-метод основанный на корреляции октанового и цетанового чисел. Рекомендуемая формула расчета цетанового числа – по анилиновой точке.

5.4 Исследования смесей бензиновых дистиллятов с октаноповышающими добавками

5.4.1 Рецептуры и физико-химические свойства добавок

Для прогноза рецептур смешения прямогонного бензина с октаноповышающей добавкой, требуются знание ряда свойств и допустимые концентрации в составе бензинов, согласно ТР ТС - 013 - 2011, которые представлены в таблице 7.

Таблица 7 – Характеристики добавок

Показатель\Добавка	Этанол	ММА	МТБЭ	Амиловый спирт	Изоамиловый спирт
ОЧИ	125	280	118	116	120
ОЧМ	101	250	101	92	96
Плотность, кг/м ³	789,0	975	740	811,0	814,0
Допустимая концентрация, % масс.	5	15	15	10	10

Алгоритм расчета объемного содержания компонентов в смеси представлен ниже:

- 1) Вычисление объема компонентов смеси, м³.

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

$$V_i = \frac{m_i}{\rho_i}, \quad (35)$$

где V_i - объем i -го компонента, м³;

m_i – массовая доля i -го компонента;

ρ_i – плотность i -го компонента, кг/м³.

- 2) Вычисление объемной доли добавки:

$$v_d = \frac{V_d}{V_d + V_b}, \quad (36)$$

где v_d – объемная доля добавки;

V_d и V_b – объем добавки и бензина, соответственно, м³.

Аналогично рассчитывается объемная доля бензина.

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

$$V_i = v_i * 100, \quad (37)$$

где V_i – содержание i - го компонента, мл.

Результаты расчета представлены в приложении А.

Для полученных, согласно рассчитанным рецептурам, смесей с октаноповышающими компонентами измерили ОЧИ и ОЧМ, оценили их прирост. Полученные значения представлены в таблице 8.

Таблица 8 – Оценка смесей с различным содержанием октаноповышающих компонентов по октановому числу

Проба	ОЧИ	ОЧМ	Прирост ОЧИ, абс	Прирост ОЧМ, абс
Прямогонный бензин пробы 1	78,0	75,9		
+ Этанол 2% масс	79,2	76,6	1,2	0,7
+ Этанол 3 % масс	86,6	80,3	8,6	4,4
+ Этанол 5 % масс	88,1	81,7	10,1	5,8
+ Этанол 20 % масс	98,5	85,7	20,5	9,8
+МТБЭ 5%масс	88,7	85,3	10,7	9,4
+МТБЭ 10%масс	93,9	87,4	15,9	11,5
+МТБЭ 15%масс	99,7	92,6	21,7	16,7
+ ММА 0,6 % масс	81,4	77,4	3,4	1,5
+ММА 0,8 % масс	89,6	82,7	11,6	6,8
+ММА 1 % масс	96,3	88,8	18,3	12,9
+Амиловый спирт 4 % масс	82,7	78,9	4,7	3
+Амиловый спирт 8 % масс	88,3	80,7	10,3	4,8
+Амиловый спирт 10 % масс	89,9	81,1	11,9	5,2
+Изоамиловый спирт 4 % масс	83,5	77,7	5,5	1,8
+Изоамиловый спирт 8 % масс	90,1	82,2	12,1	6,3
+ Изоамиловый спирт 10 % масс	91,6	83	13,6	7,1

Для оценки прироста ОЧ построим графики зависимости ОЧ смеси от содержания в смеси октаноповышающей добавки (рисунок 5-14).

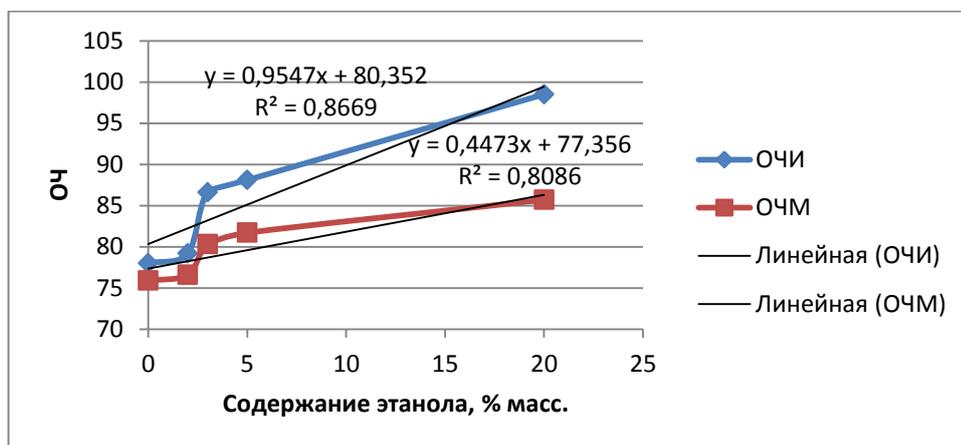


Рисунок 5 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина пробы 1 и этанола

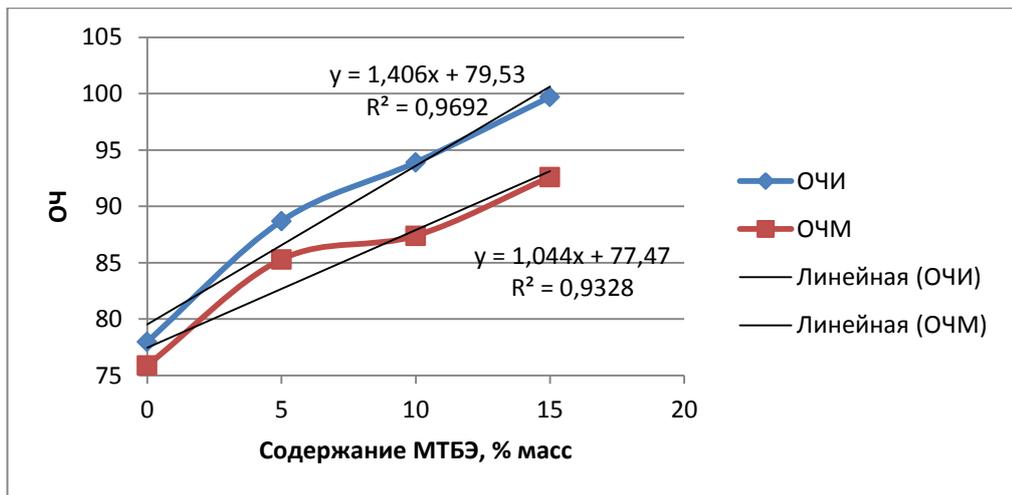


Рисунок 6 - Зависимость ОЧ от содержания в смеси пробы 1 и МТБЭ

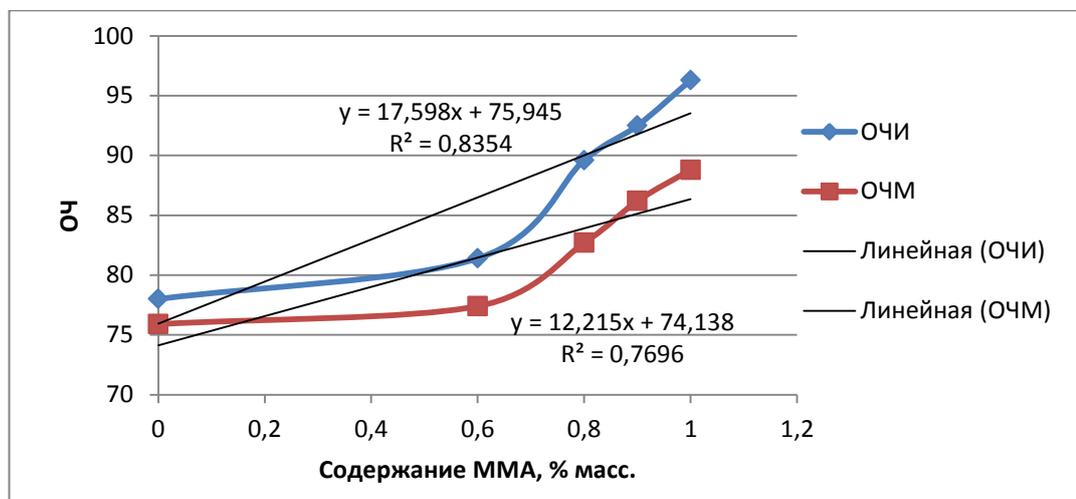


Рисунок 7 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина пробы 1 и ММА

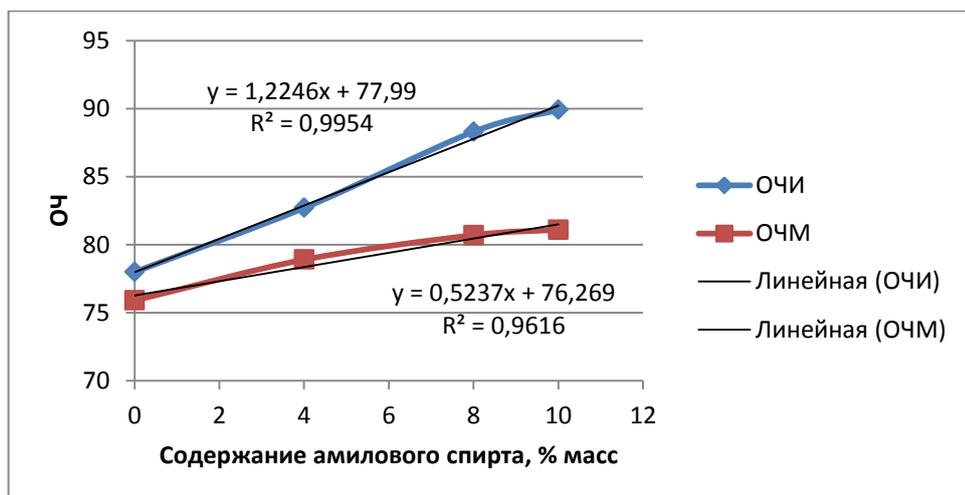


Рисунок 8 - Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина пробы 1 и амилового спирта

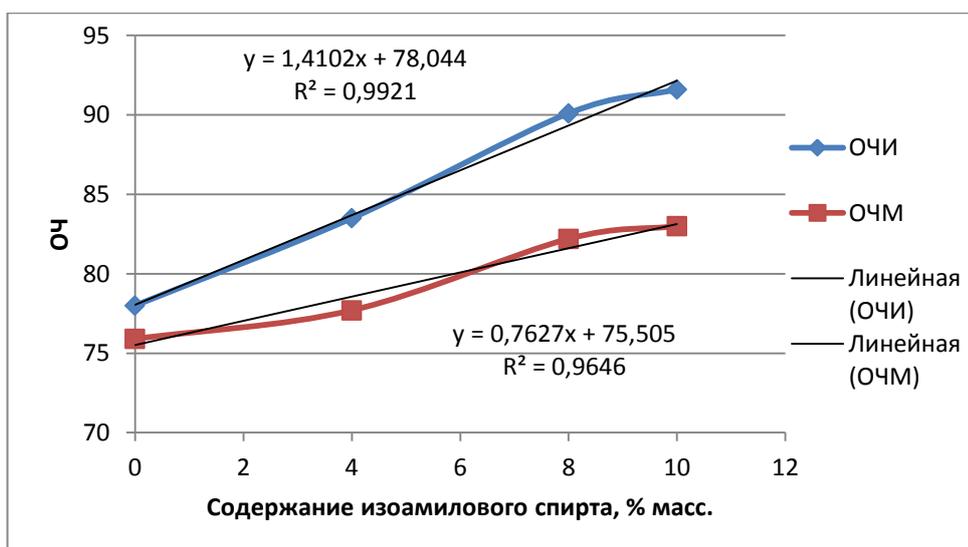


Рисунок 9 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина пробы 1 и изоамилового спирта

Таблица 9 – Оценка смесей с различным содержанием октаноповышающих компонентов по октановому числу

Проба	ОЧИ	ОЧМ	Прирост ОЧИ, абс	Прирост ОЧМ, абс
Прямогонный бензин пробы 2	80,6	77,3		
+ Этанол 2% масс	81,8	77,9	1,2	0,6
+ Этанол 3 % масс	84,7	79,3	4,1	2
+ Этанол 5 % масс	90,9	82,9	10,3	5,6
+ Этанол 20 % масс	99,1	88	18,5	10,7
+МТБЭ 5%масс	92,1	88,3	11,5	11
+МТБЭ 10%масс	99,2	90	18,6	12,7
+МТБЭ 15%масс	101	91,4	20,4	14,1
+ ММА 0,6 % масс	82,3	79,4	1,7	2,1
+ММА 0,8 % масс	86,9	84,8	6,3	7,5
+ММА 1 % масс	94,4	88,5	13,8	11,2
+Амиловый спирт 4 % масс	83,3	78,6	2,7	1,3
+Амиловый спирт 8 % масс	91,9	81,9	11,3	4,6
+Амиловый спирт 10 % масс	92,6	83,7	12	6,4
+Изоамиловый спирт 4 % масс	84,4	79,1	13,8	1,8
+Изоамиловый спирт 8 % масс	93,9	82,8	13,3	5,5
+ Изоамиловый спирт 10 % масс	94,7	83,6	14,1	6,3

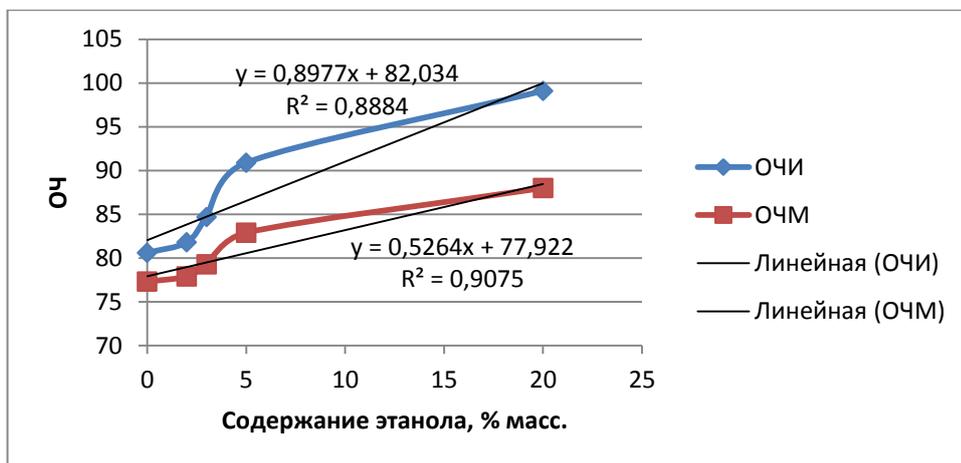


Рисунок 10 - Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина пробы 2 и этанола

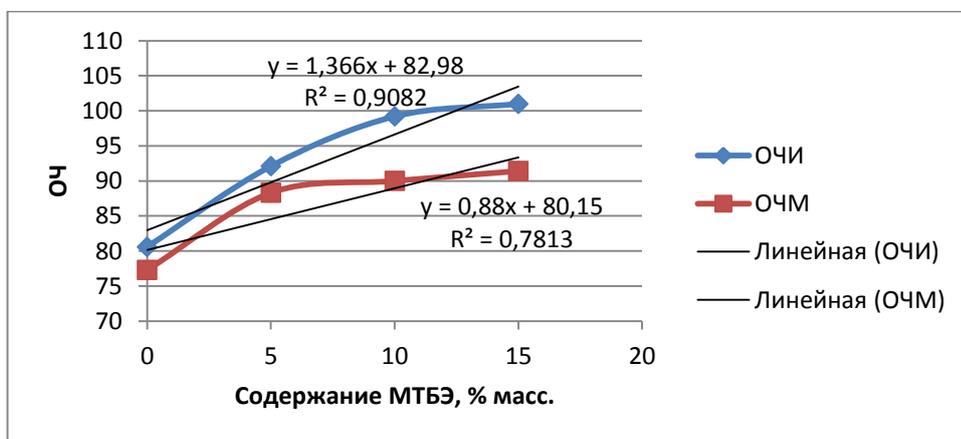


Рисунок 11 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина пробы 2 и МТБЭ

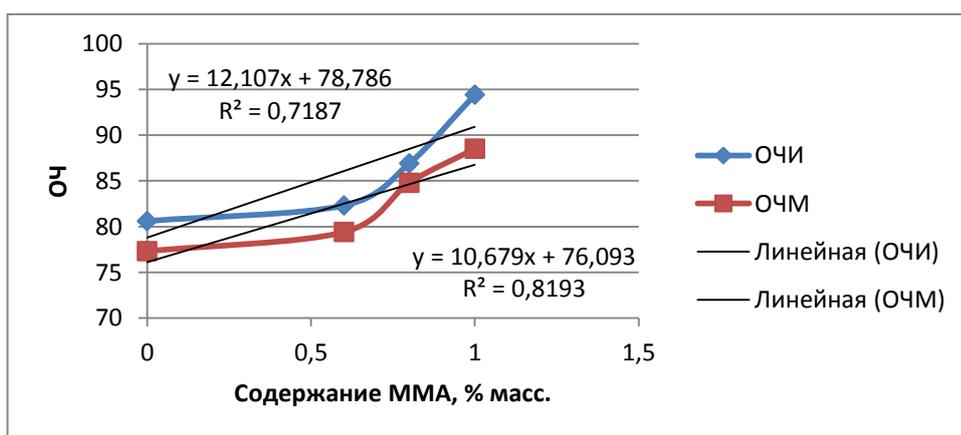


Рисунок 12 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина пробы 2 и ММА

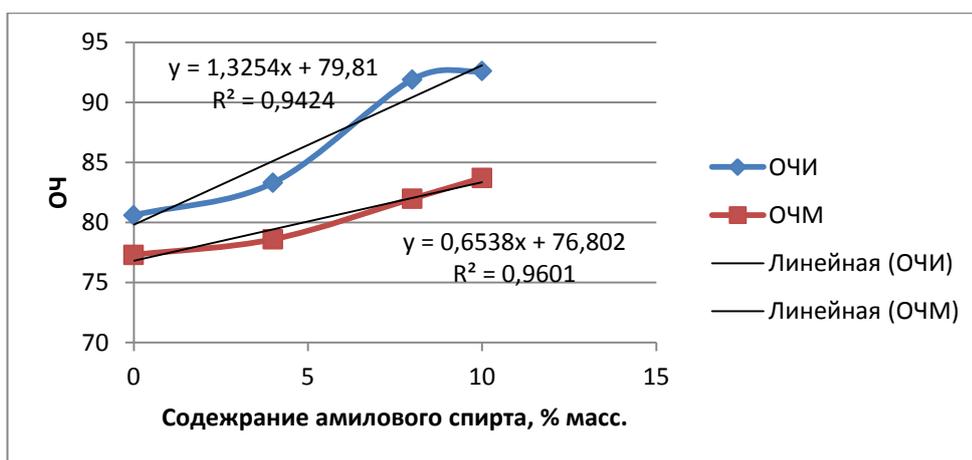


Рисунок 13 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина пробы 2 и амилового спирта

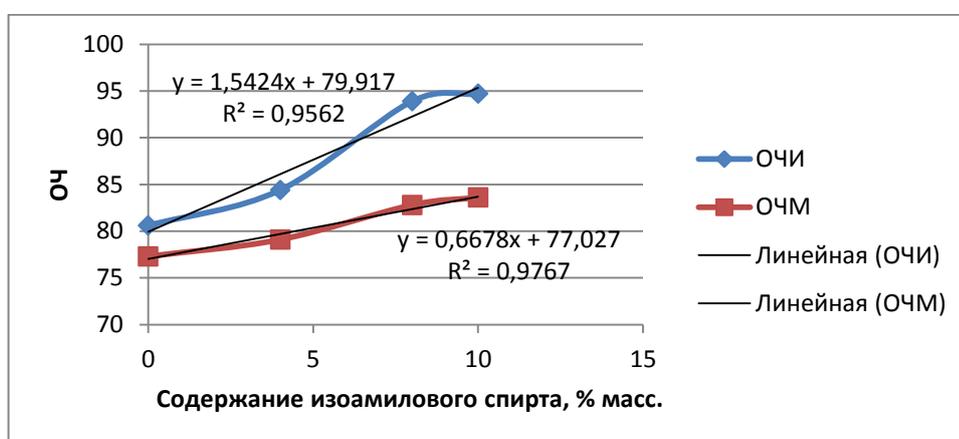


Рисунок 14 – Зависимость ОЧ от содержания в смеси бензина пробы 2 и изоамилового спирта

Наблюдается близкая к линейной зависимость прироста ОЧ от содержания добавки, свободный член по значению близок к ОЧ прямогонного бензина, т.е. если $x=0$, то получаем ОЧ бензина, если $x=100$, то ОЧ добавки не получается, поэтому целесообразно рассчитать ОЧ смешения, которое имеет следующую зависимость:

$$\text{ОЧ смешения} = \frac{\text{ОЧ}_{\text{смеси}} - (\text{ОЧ}_6 \cdot C_6)}{C_d}, \quad (38)$$

где C_6 – массовая доля бензина в смеси;

C_d – массовая доля добавки в смеси.

Воспользуемся данными для расчета ОЧ смешения октаноповышающих добавок с бензином приведенными в таблице 9.

Результаты расчетов приведены в таблице 11.

Таблица 10 – Результаты расчета ОЧ смешения МТБЭ

Проба 1	
ОЧИ смешения	масс. доля этанола
1108,2	0,02
1004,867	0,03
656,2	0,05
259,7	0,2
ОЧМ смешения	масс. доля этанола
831,2	0,02
697,87	0,03
471,2	0,05
183,7	0,2
Проба 2	
ОЧИ смешения	масс. доля этанола
1816,4	0,02
1323,07	0,03
936,4	0,05
309,9	0,2
ОЧМ смешения	масс. доля этанола
1257,085	0,03
902,7	0,03
635,14	0,05
130,8	0,2

По данным таблицы 11 построим графики зависимости ОЧ смешения добавки от массовой доли этой добавки в смеси с пробой 1 и 2 (рисунок 15 - 16).

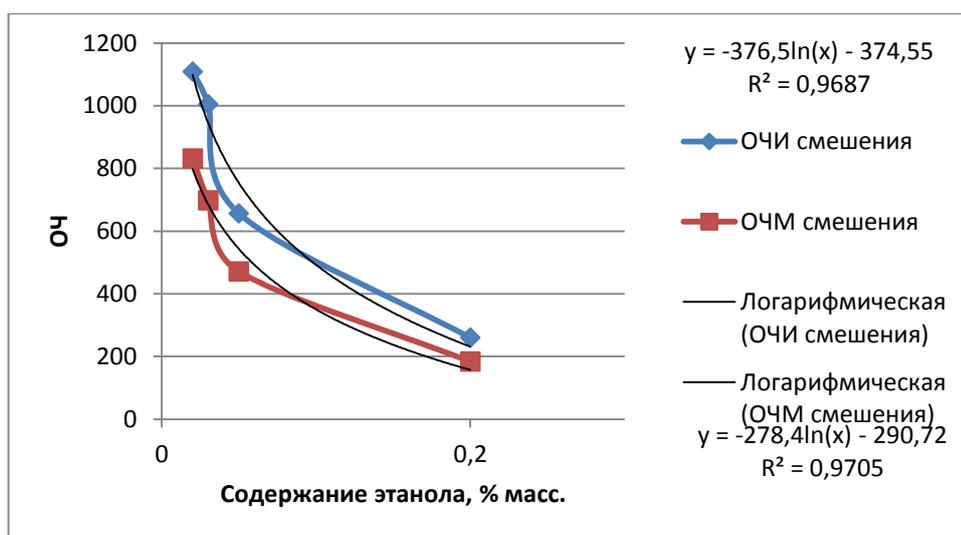


Рисунок 15 – Зависимость ОЧ смешения этанола от его массовой доли (проба 1)

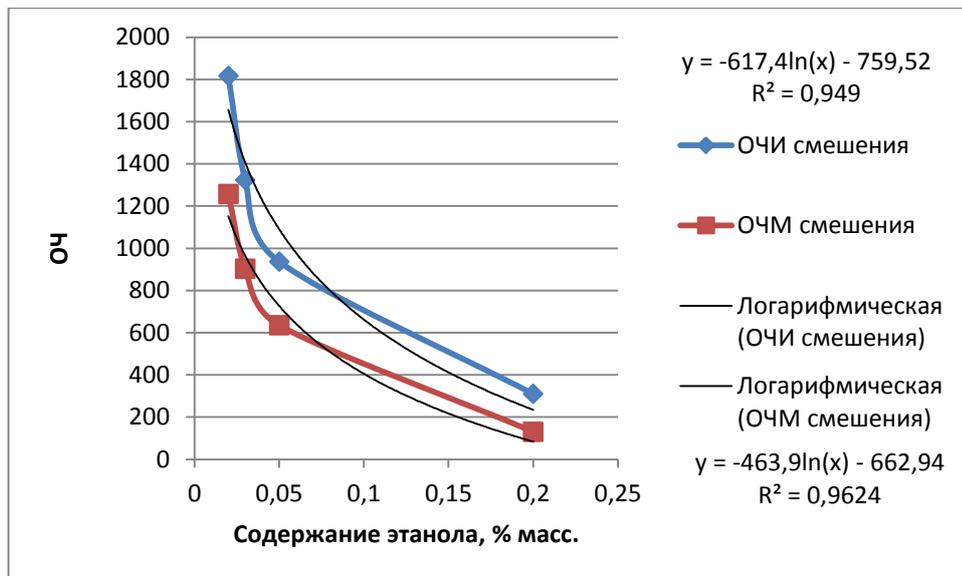


Рисунок 16 – Зависимость ОЧ смешения этанола от его массовой доли (проба 2)

Таблица 11 – Результаты расчета ОЧ смешения МТБЭ

Проба 1	
ОЧИ смешения	объемн. доля МТБЭ
820,7	0,04
504,5	0,08
473,2	0,1
ОЧМ смешения	объемн. доля МТБЭ
663,7	0,04
388,7	0,08
375,2	0,1
Проба 2	
ОЧИ смешения	объемн. доля МТБЭ
1188,9	0,04
706,4	0,08
592,4	0,1
ОЧМ смешения	объемн. доля МТБЭ
915,5	0,04
505,9	0,08
429,5	0,1

По данным таблицы 12 построим графики зависимости ОЧ смешения добавки от объемной доли этой добавки в смеси (рисунок 17-18).

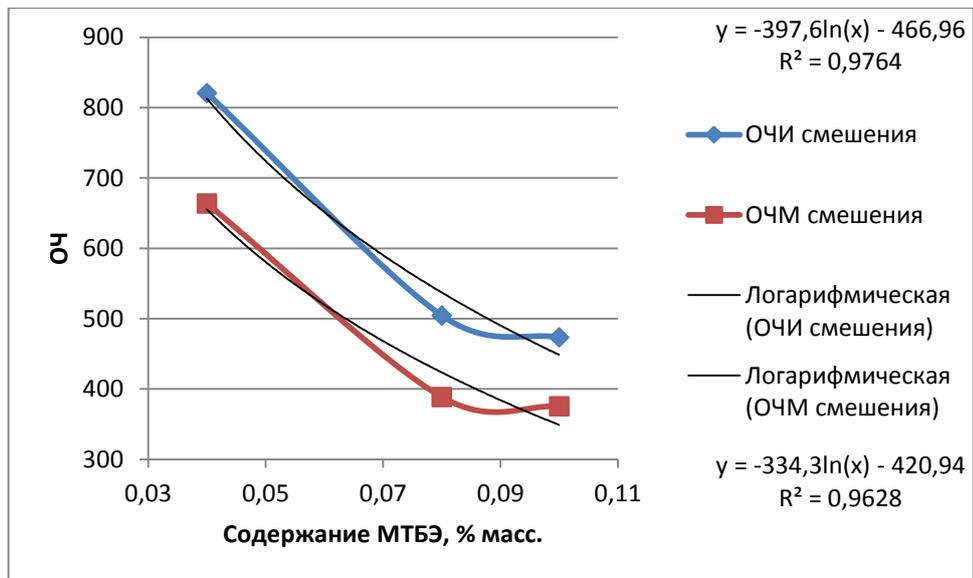


Рисунок 17 – Зависимость ОЧ смешения МТБЭ от его объемной доли (проба 1)

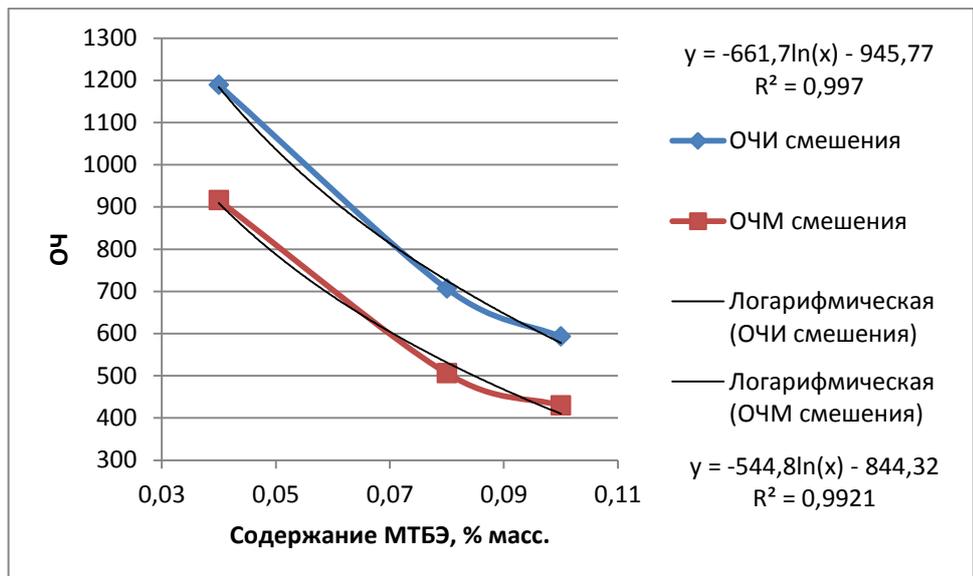


Рисунок 18 – Зависимость ОЧ смешения МТБЭ от его объемной доли (проба 2)

Таблица 12 – Результаты расчета ОЧ смешения ММА

Проба 1	
ОЧИ смешения	масс. доля ММА
3541,5	0,006
3158,2	0,007
2883,2	0,008
2388,2	0,01
ОЧМ смешения	масс. доля ММА
2627,9	0,006
2275,5	0,007

2011,2	0,008
1641,2	0,01
Проба 2	
ОЧИ смешения	масс. доля MMA
5879,7	0,006
6217,8	0,007
5808,9	0,008
5246,4	0,01
ОЧМ смешения	масс. доля MMA
4031,3	0,006
3491,7	0,007
3086,9	0,008
2500,3	0,01

По данным таблицы 12 построим графики зависимости ОЧ смешения добавки от массовой доли этой добавки в смеси.

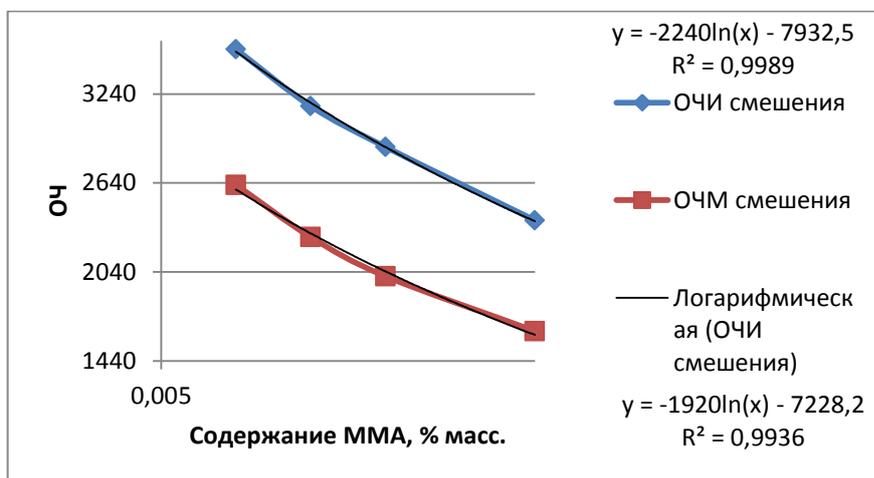


Рисунок 19 – Зависимость ОЧ смешения MMA от его массовой доли (проба 1)

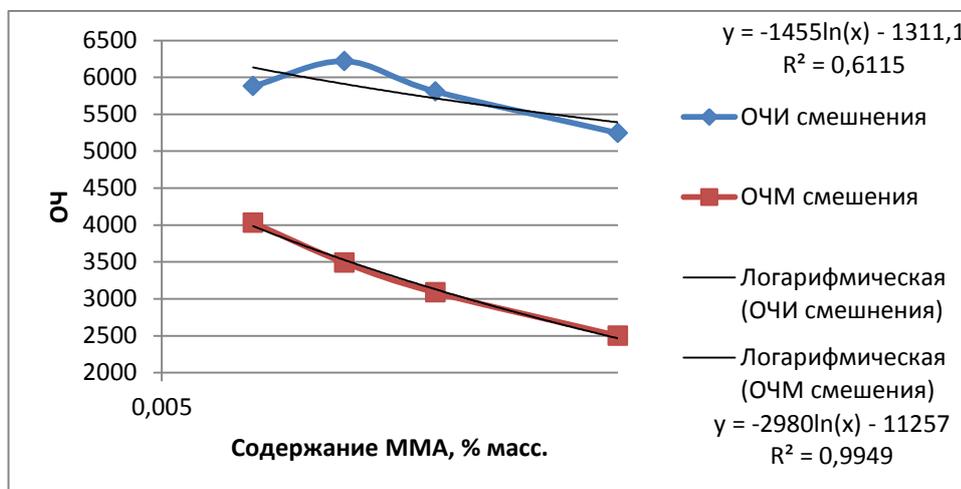


Рисунок 20 – Зависимость ОЧ смешения ММА от его массовой доли
(проба 2)

Таблица 13 – Результаты расчета ОЧ смешения амилового спирта

Проба 1	
ОЧИ смешения	масс. доля амилового спирта
670,7	0,04
434,5	0,08
375,2	0,1
ОЧМ смешения	масс. доля амилового спирта
503,7	0,04
304,9	0,08
260,2	0,1
Проба 2	
ОЧИ смешения	масс. доля амилового спирта
968,9	0,04
615,2	0,08
508,4	0,1
ОЧМ смешения	масс. доля амилового спирта
672,96	0,04
405,8	0,08
352,5	0,1

По данным таблицы 13 построим графики зависимости ОЧ смешения добавки от объемной доли этой добавки в смеси (рисунок 21 – 22).

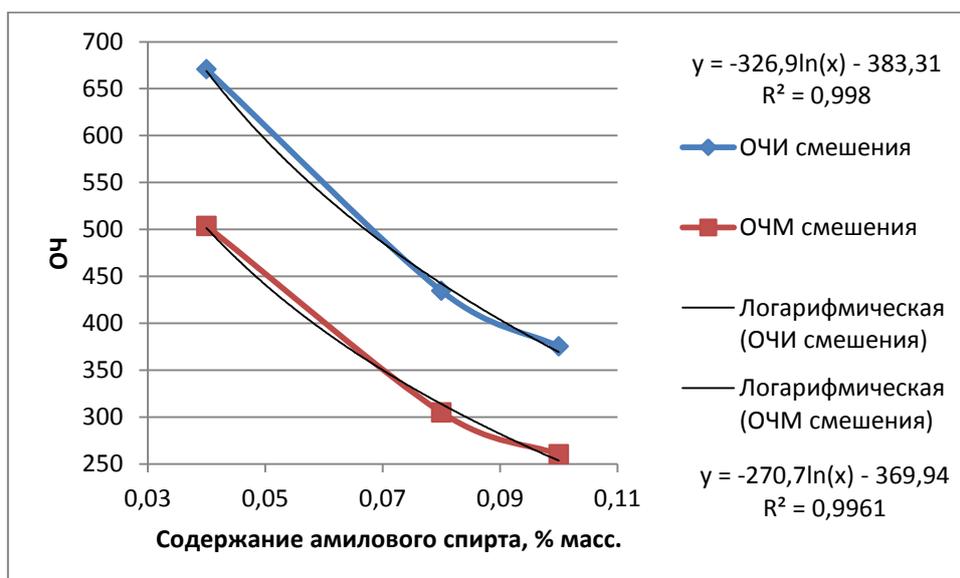


Рисунок 21 – Зависимость ОЧ смешения амилового спирта от его массовой доли (проба 1)

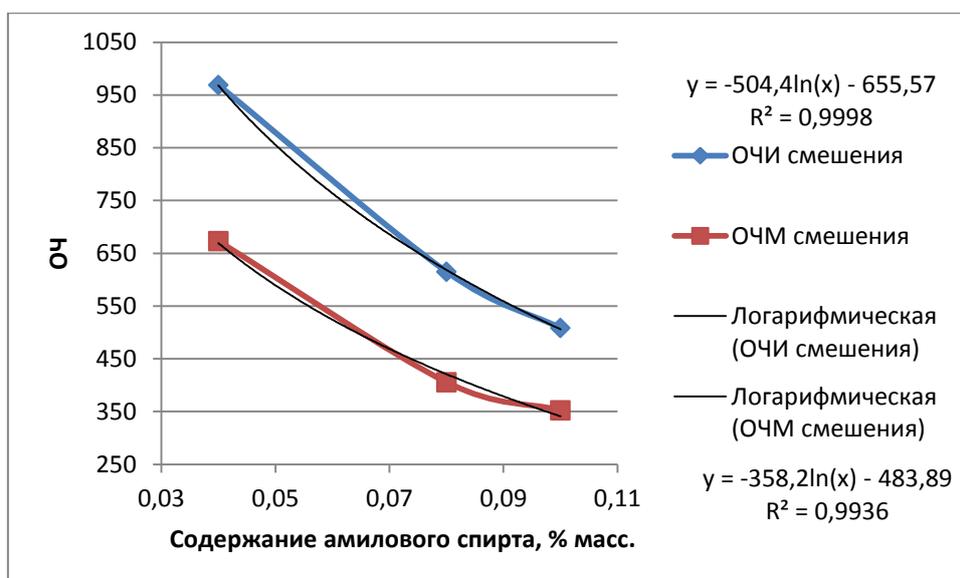


Рисунок 22 – Зависимость ОЧ смешения амилового спирта от его массовой доли (проба 2)

Таблица 14 – Результаты расчета ОЧ смешения изоамилового спирта

Проба 1	
ОЧИ смешения	масс. доля изоамилового спирта
690,7	0,04
456,95	0,08
392,2	0,1
ОЧМ смешения	масс. доля изоамилового спирта
473,7	0,04
323,7	0,08
279,2	0,1
Проба 2	
ОЧИ смешения	масс. доля изоамилового спирта
996,4	0,04
640,15	0,08
529,4	0,1
ОЧМ смешения	масс. доля изоамилового спирта
685,5	0,04
415,9	0,08
351,5	0,1

По данным таблицы 14 построим графики зависимости ОЧ смешения добавки от объемной доли этой добавки в смеси (рисунок 23 – 24).

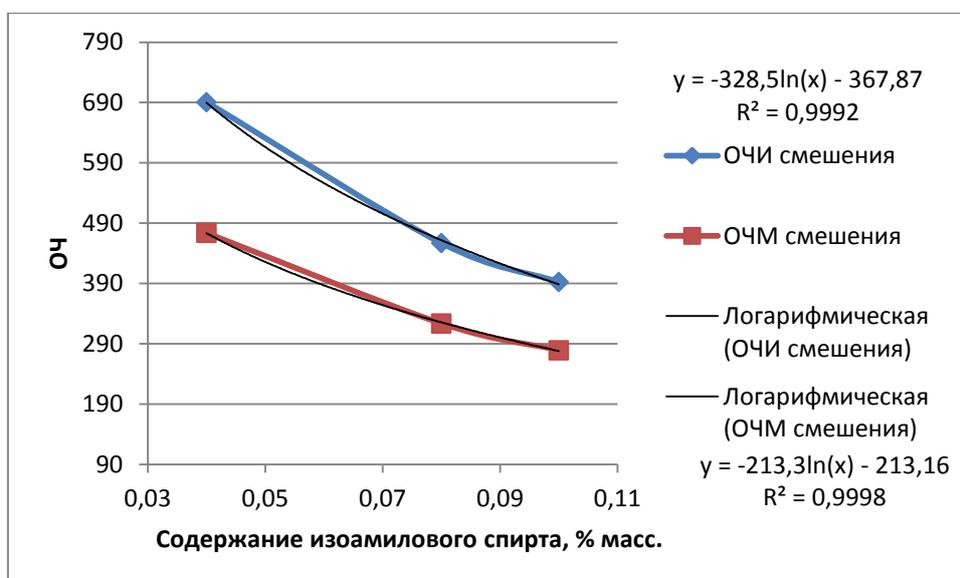


Рисунок 23 – Зависимость ОЧ смешения изоамилового спирта от его массовой доли (проба 1)

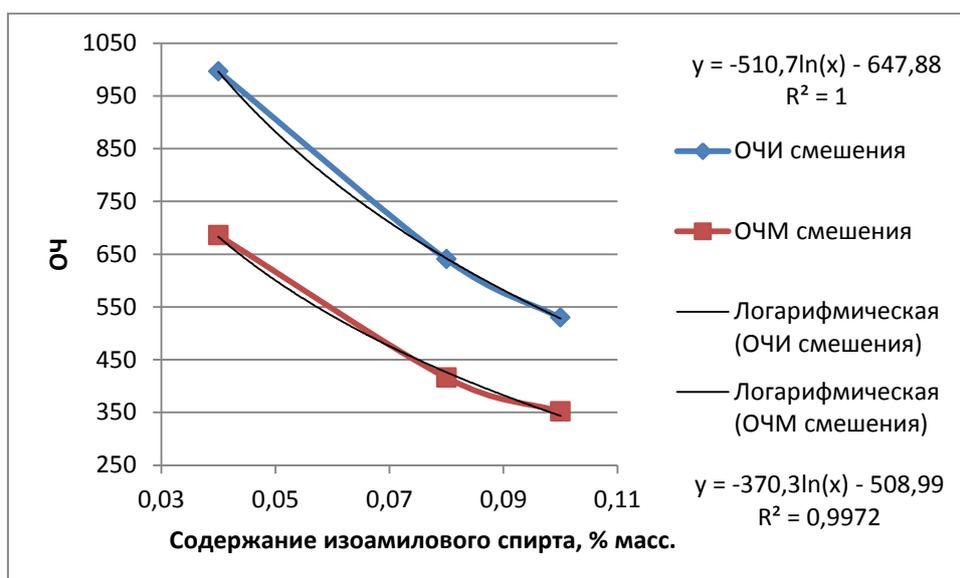


Рисунок 24 – Зависимость ОЧ смешения изоамилового спирта от его массовой доли (проба 2)

Установлено, что ОЧ смешения хорошо описывается логарифмической зависимостью, это можно использовать для прогноза ОЧ топливных смесей при компаундировании.

5.5 Разработка модели и проектирование потокового смесителя на линии товарного бензина

На производстве для приготовления товарных бензинов встает необходимость смешивания нескольких компонентов. Качество бензина будет зависеть не только от качества и соотношения компонентов, но и от того, как организован процесс смешивания. Смеситель должен обеспечивать однородность состава и стабильность получаемой смеси с достаточными характеристиками, а также, по возможности, при минимальных затратах, поскольку это будет непосредственно влиять на цену произведенного топлива. Все смесители делятся на статические и динамические [34, 35].

В динамических смесителях перемешивание обеспечивается с помощью механических вращающих устройств. Механическое перемешивание производится в аппаратах, носящих общее название аппаратов с мешалкой.

Статические смесители подразделяются на:

- барботажные (пневматические), перемешивание в которых осуществляется за счет пропуска газа через слой жидкости.
- насадочные, перемешивание в которых осуществляется за счет энергии потока при совместном движении смешиваемых компонентов в насадочном слое, который может состоять из регулярных и нерегулярных элементов.

Насадочные смесители являются наиболее распространенным, поэтому мы рассчитываем статический смеситель насадочного типа.

Исходные данные для проектирования приведены в таблице 15.

Таблица 15 – Исходные данные по бензину

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

ММА 0,8-1,0 % масс.
ЭТБЭ 5-15 %масс.
Этанол 10-20 % масс.

5.5.1 Разработка модели смесителя в среде UniSim

Схема потоков в смесителе изображена на рисунке 26.

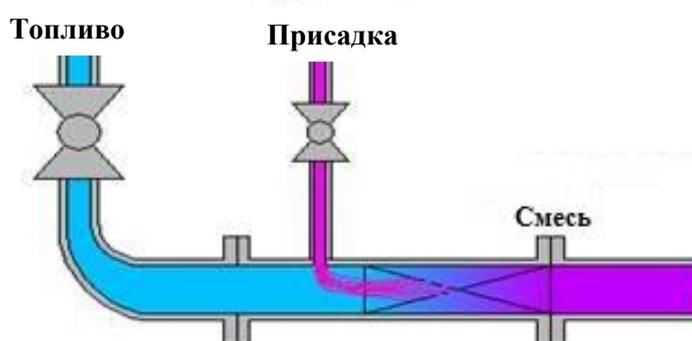


Рисунок 25 – Схема потоков в смесителе

В таблице 16 приведены данные по фракционному составу бензиновой фракции, которая использовалась при расчете смесителя в среде UniSim.

Таблица 16 – Исходные данные для расчета в среде HYSYS

Отгон, %	Т по объему, °С
0,5	25
5	27,8
10	27,84
15	36
20	60,3
25	68,7
30	68,74
35	80,7
40	90
45	91,9
50	98,4
55	100,9
60	100,93
65	116,7
70	119,4
75	125,7
80	139,1
85	150,8

90	167,8
95	203,2
98	235,4
99,5	262

При помощи программы UniSim получили материальный баланс для различных концентраций добавок бензине (таблица 17).

Таблица 17 – Материальный баланс

Название присадки	Концентрация присадки, масс. доля	Массовый расход присадки, кг/ч	Массовый расход бензина, кг/ч	Смесь на выходе, кг/ч
МТБЭ	0,15	1712,33	9703,2	11415,53
Толуол	0,15	1712,33	9703,2	11415,53
ММА	0,01	114,16	11301,37	11415,53
ЭТБЭ	0,15	1712,33	9703,2	11415,53
Этанол	0,2	2283,106	9132,424	11415,53

При составлении теплового баланса использовались данные по материальному балансу и результаты расчета теплоемкости смешиваемых потоков и их плотностей в среде UniSim. Результаты представлены в таблице 18.

Таблица 18 – Тепловой баланс

Бензин			Присадка			Смесь		
t _н , °C	G _н , кг/ч	C _н , Дж/(кг*С)	t _н , °C	G _н , кг/ч	C _н , Дж/(кг*С)	t _к , °C	G _к , кг/ч	C _к , Дж/(кг*С)
30	9132	2025	40	2283,8	2037	32,8	11416	2028
554769000 Дж/ч			205299603,8 Дж/ч			760068603,8 Дж/ч		
760,1 МДж/ч						760,1 МДж/ч		

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

Находим ориентировочный диаметр:

$$d = \frac{2 \cdot G \cdot \rho}{Re \cdot \mu \cdot \pi} \quad (39)$$

$$d = \frac{2 \cdot 16,00 / 3600 \cdot 698,8}{27000 \cdot 0,0003798 \cdot 3,14} = 0,193 [\text{м}]$$

По данным расчета подбираем трубный статический смеситель [3].

Таблица 19 - Параметры трубного статического смесителя

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

5.5.2 Гидравлический и тепловой расчеты

Исходя из технологических соображений, принимаем диаметр для смесителя на линиях бензинового и дизельного топлив равным 195 мм.

Тогда для бензинового топлива, критерий Рейнольдса будет равным:

$$Re = \frac{2 \cdot 0,195 \cdot 698,8}{0,0003798} = 717567$$

Для дизельного топлива:

$$Re = \frac{2 \cdot 0,195 \cdot 810,9}{0,002252} = 1404312$$

Для потоков бензинового и дизельного топлива при диаметре смесителя 195 мм обеспечивается турбулентный режим ($Re > 10000$).

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

$$e = \frac{\Delta}{D} = \frac{0,1 \cdot 10^{-3}}{0,195} = 0,000513$$

Определяем коэффициент трения по следующей формуле:

$$\lambda = 0,11 \cdot \left(e + \frac{68}{Re} \right)^{0,25} = 0,11 \cdot \left(0,000513 + \frac{68}{1404312} \right)^{0,25} = 0,0195$$

Рассчитаем гидравлическое сопротивление аппарата:

$$\Delta P = \lambda \cdot \frac{L \cdot \omega^2 \cdot \rho}{D \cdot 2} = 0,0195 \cdot \frac{0,96 \cdot 2^2 \cdot 810,9}{0,195 \cdot 2} = 155,7 [\text{Па}]$$

где L – длина аппарата, м;

D – диаметр аппарата, м.

Для того, чтобы найти величину перепада давления, при движении потока смеси через неподвижный слой насадки, воспользуемся уравнением Эргуна [36]:

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{1,75 \cdot \rho \cdot (1 - \varepsilon_{св})}{d_3 \cdot \varepsilon_{св}^3} \cdot \omega^2 + \frac{150 \cdot \mu \cdot (1 - \varepsilon_{св})^2}{d_3^2 \cdot \varepsilon_{св}^3} \cdot \omega \quad (40)$$

где μ и ρ – динамическая вязкость и плотность жидкости, Па·с и кг/м³;

$\varepsilon_{св}$ – порозность среды, м³/м³;

d_3 – эквивалентный диаметр, м.

$$\begin{aligned} \frac{\Delta P}{L} &= \frac{1,75 \cdot 810,9 \cdot (1 - 0,974)}{36,3 \cdot 10^{-3} \cdot 0,974^3} \cdot 2^2 + \frac{150 \cdot 0,002252 \cdot (1 - 0,974)^2}{(36,3 \cdot 10^{-3})^2 \cdot 0,974^3} \cdot 2 = \\ &= 4286,065 \left[\frac{\text{Па}}{\text{м}} \right] \end{aligned}$$

Помножим на длину аппарата:

$$\Delta P = 4286,065 \cdot 0,96 = 4210,6 \text{ [Па]}$$

- **Тепловой расчет**

Толщина теплоизоляции рассчитывается по формуле (41) [36].

$$\delta_{из} = \frac{\lambda_{из}}{\alpha_n} \cdot \frac{(t_{ст} - t_{из})}{(t_{из} - t_{окр})}, \quad (41)$$

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

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

α_n – коэффициент теплоотдачи в окружающую среду (воздух);

$t_{ст}$, $t_{окр}$, $t_{из}$ – температура наружной стенки аппарата, окружающей среды и наружной поверхности теплоизоляционного слоя (принимаем 40, 20 и 25⁰ С, соответственно)[36].

Коэффициент теплоотдачи рассчитывается по приближенному уравнению [36]:

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

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

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

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

Примем толщину изоляции 30 мм.

5.5.3 Конструктивные и механические расчеты

- **Подбор смесителя**

По расчетным данным выбираем статический трубный смеситель с конструктивными размерами из таблицы 23.

Смеситель устанавливается непосредственно на трубопровод исходной смеси. Реагент подается в смеситель через патрубок перпендикулярно основному потоку исходной смеси.

Эффект смешения достигается за счет многократного деления и направленного закручивания потока на турбулизирующих элементах при движении потока внутри аппарата.

Время смешения – 0,8 – 1,2 сек.

Потери напора – 2,5 – 3,5 м (0,25 – 0,35 бар) [6].

Объем смесителя равен:

$$V = L \cdot F = L \cdot \frac{\pi \cdot D^2}{4} = 0,96 \cdot \frac{3,14 \cdot 0,195^2}{4} = 0,029 \text{ [м}^3\text{]}$$

Выбор насадки:



Рисунок 26 – Элемент насадки «Инжехим-2000»

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

Насадка «Инжехим-2000» (рисунок 27) позволяет повысить эффективность распределения газовой и жидкой фаз по сечению аппарата. Это современная альтернатива кольцам Паля, Рашига и другим подобным насадкам. При равной толщине слоя она обеспечивает более высокую производительность и более низкое удельное гидравлическое сопротивление. Насадка изготовлена из листа или ленты из нержавеющей или углеродистой

стали толщиной от 0,3 до 1 мм, может работать с загрязненными средами. Поверхность листа подвергается специальной обработке, которая улучшает растекание жидкости по насадке [37].

Таблица 20 – Основные технические характеристики

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

Масса насадки:

$$m_n = (1 - \varepsilon_{св}) \cdot L \cdot 0,785 \cdot D_{вн}^2 \cdot \rho_{ст} \quad (42)$$

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

L – длина слоя насадки в смесителе, м;

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

$$m_n = (1 - 0,974) \cdot 0,96 \cdot 0,785 \cdot 0,195^2 \cdot 7900 = 5,89 \text{ [кг]}.$$

Гидравлическое сопротивление насадки:

Предварительно определяем сопротивление сухой насадки:

$$\Delta P_{сyx} = \lambda \cdot \frac{L}{d} \cdot \frac{\rho \cdot \mu^2}{2}, \quad (43)$$

где λ – коэффициент сопротивления сухой насадки, зависящий от режима движения жидкости в насадке.

При $Re > 40$ (турбулентный режим) $\lambda = \frac{16}{Re^{0,2}}.$ (44)

$$\lambda = \frac{16}{1404312^{0,2}} = 1,495$$

$$\Delta P = 1,495 \cdot \frac{0,96}{0,195} \cdot \frac{810,9 \cdot 0,00225^2}{2} = 23,7 \text{ [кПа]}.$$

- **Расчет толщины обечайки**

Для материала обечайки и днищ выберем сталь 12х18н10т (ГОСТ 5632-72). Данная сталь используется в нефтяной и химической отраслях.

При работе элементов химического оборудования в условиях любых отрицательных температур за расчетную температуру берут 20 °С.

Исполнительная толщина тонкостенной гладкой цилиндрической обечайки, нагруженной внутренним избыточным давлением, рассчитывается по формуле:

$$s \geq \frac{P \cdot D}{2 \cdot [\sigma] \cdot \varphi - P} + c \quad (45)$$

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

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

Суммарную прибавку к номинальной расчетной толщине стенки определяем по формуле:

$$c = c_1 + c_2 + c_3 \quad (46)$$

где c_1 - прибавка на коррозию (1мм);

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

c_3 – технологическая прибавка, примем 0,5 мм.

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

Допускаемое напряжение для выбранного материала сталь марки 09Г2С рассчитывает по следующей формуле [36]:

$$[\sigma] = \eta \cdot \sigma^* \quad (47)$$

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

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

$$[\sigma] = 0,9 \cdot 1883 = 164,7 \text{ [МПа]}$$

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

Толщину стенки обечайки рассчитываем по формуле (45), согласно которой P_y – условное давление регламентированное в ГОСТ 356—68, так как рабочее давление равно 0,5 МПа, примем условное давление 0,6 МПа:

$$S \geq \frac{P \cdot D}{2 \cdot [\sigma] \cdot \varphi - P} + c = \frac{0,6 \cdot 0,195}{2 \cdot 164,7 \cdot 0,9 - 0,6} + 0,0022 = 0,0026 [\text{м}]$$

Примем толщину стенки обечайки равной 4 мм.

$$\text{Проверка условия: } \frac{4 - 2,2}{195} = 0,009 \leq 0,1$$

Допускаемое давление в обечайке определяем по формуле [34]:

$$P_{\partial} = \frac{2 \cdot \sigma_{\partial} \cdot \varphi \cdot (s - C_k)}{D_e + (s - C_k)} = \frac{2 \cdot 164,7 \cdot 0,9 \cdot (4 - 1)}{195 + (4 - 1)} = 4,492 [\text{МПа}]$$

- **Входная камера**

Исходя из конструкторских соображений, примем диаметр входной камеры равным диаметру смесителя: 195 мм; длину 400 мм. Подберем фланец по ГОСТ 1255-67.

Таблица 21 – Конструктивные размеры фланца [36]

D _y	d _н	D _ф	D _б	D ₁	Болты		Тип фланцев – 1	
					d _б	z	ГОСТ 1255-67	
мм							h, мм	Масса, кг
200	219	315	280	258	M16	8	19	5,89

- **Расчет и подбор штуцеров**

Для расчета условного прохода штуцера для ввода потока присадки во входную камеру смесителя, примем, что скорость потока в штуцере равна 2 м/с.

Известна плотность присадки при 20°C:

$$\rho_4^{20} = 770,8 [\text{кг/м}^3]$$

Температура присадки t = 40°C.

$$\rho_4^{40} = \rho_4^{20} - \alpha \cdot (40 - 20) \quad (48)$$

где α – температурная поправка на 1°C равная 0,000962.

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

Или

$$\rho_4^{40} = 751,6 [\text{кг/м}^3]$$

Тогда:

$$d_n = \sqrt{\frac{4 \cdot G_n}{\pi \cdot \omega_n \cdot \rho_n}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 114,2 / 3600}{3,14 \cdot 2,0 \cdot 751,6}} = 0,012 = 12 \text{ [мм]}$$

Рассчитанный диаметр округляем до ближайшего большего значения:

$$d = 15 \text{ мм.}$$

Размеры фланца приведены в таблице 25. Подберем фланцы по ГОСТ 1255-67. На рисунке 28 представлен тип штуцера для P_y 1 – 10 кгс/см² [36].

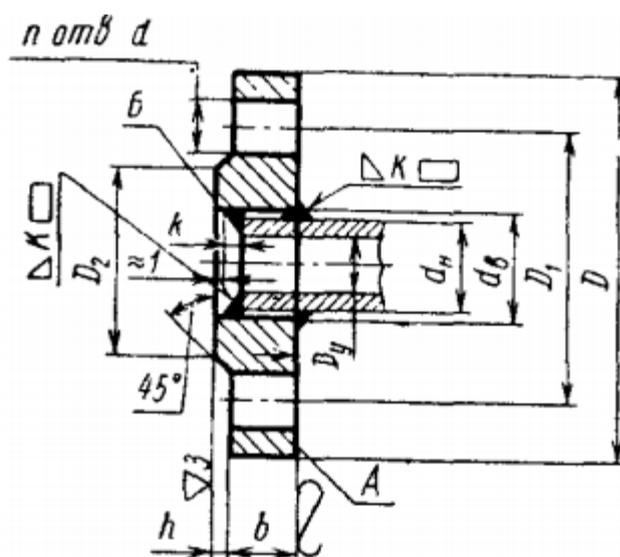


Рисунок 28 - Штуцер

Таблица 27 – Конструктивные размеры штуцеров [36]

D_y	d_n	D_ϕ	D_δ	D_1	Болты		Тип фланцев – 1	
					d_δ	z	ГОСТ 1255-67	
мм						h , мм	Масса, кг	
15	18	80	55	40	M12	4	8	0,29

- **Расчет опор аппарата**

Объем смесителя:

$$V = L \cdot F = L \cdot \frac{\pi \cdot D^2}{4} = 0,86 \cdot \frac{3,14 \cdot 0,195^2}{4} = 0,029 \text{ [м}^3\text{]}$$

Масса смеси в смесителе будет равна:

$$M_{см} = \rho_{см} \cdot V = 810,9 \cdot 0,029 = 23,52 \text{ [кг]}$$

Масса обечайки:

$$M_{об} = L \cdot \pi \cdot D \cdot s \cdot \rho_{стали} = 0,96 \cdot 3,14 \cdot 0,195 \cdot 0,004 \cdot 7860 = 18,5 \text{ [кг]}$$

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

$$M = 1,3 \cdot (M_{\phi} + M_{см} + M_{об} + M_{н})$$

$$M = 1,3 \cdot (2 \cdot 5,89 + 23,52 + 18,5 + 5,89) = 77,6 \text{ [кг]}$$

Тогда вес аппарата составляет 760,48 Н, мы принимаем количество опор равным 2, следовательно, нагрузка на каждую опору равна 380,24 Н или 0,0003824 МН.

Согласно [табл. 29,10, с. 680, 36] определяются основные требования к опорам цилиндрического аппарата горизонтального расположения с учетом наличия теплоизоляционных материалов. Опора (лапа) подбирается исходя из допускаемой нагрузки на одну лапу.

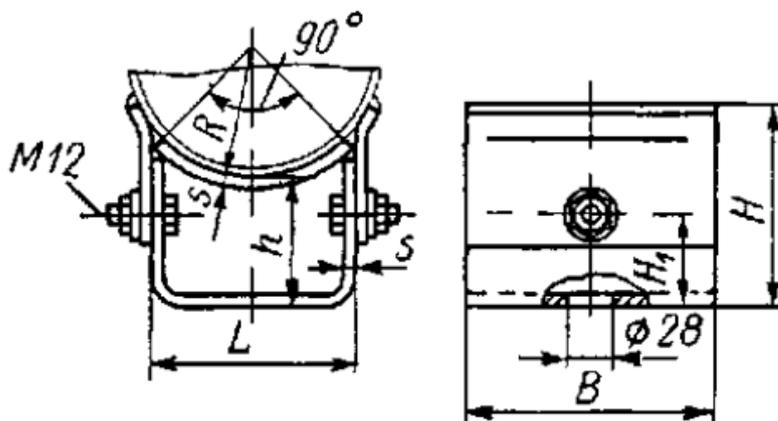


Рисунок 28 – Опора

Таблица 23 – Параметры и размеры опор

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

5.6 Обсуждение результатов

В результате исследования пришли к следующим заключениям:

1. Анализ зависимости ОЧ и ЦЧ для индивидуальных углеводов, показывает что связь между данными показателями существует и является линейной.

2. Формулы, основанные на корреляции октанового и цетанового чисел, показали адекватные результаты относительно экспериментального

определения. Средняя погрешность для формулы определения ЦЧ по групповому составу составила $\delta_{\text{ср.}} = 20,95 \%$ и анилиновой точке $\delta_{\text{ср.}} = 23,6 \%$.

3. Полученные результаты позволяют прогнозировать ОЧ топливных смесей, основываясь на корреляции ЦЧ-ОЧ. Это дает возможность целенаправленно вести поиск новых компонентов и добавок, получать оптимальные рецептуры на ограниченном наборе экспериментальных данных.

4. Анализ результатов эксперимента позволил выявить логарифмическую зависимость ОЧ смешения от содержания в смеси добавки и прямогонного бензина.

5. Предложенная логарифмическая зависимость дает адекватный результат расчета ОЧИ и ОЧМ с погрешностью в 1-2 пункта.

6 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

6.1 Предпроектный анализ

6.1.1 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 нефтехимической отрасли.

Продукт – моторное топливо с улучшенными эксплуатационными свойствами.

Большинство нефтехимических предприятия, 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 экспресс – методов для расчета октанового числа моторных топлив является минимально затратным и быстрым методом определения. Карта сегментирования приведена в таблице 24.

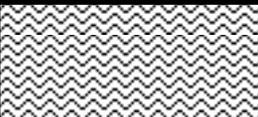
		Вид продукции		
		Бензин	Дизельное топливо	Присадки
Размер компании	Крупные			
	Средние			
	Мелкие			

Таблица 24 – Карта сегментирования рынка услуг по разработке высокооктановых компонентов



- 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.

6.1.2 SWOT – анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно – исследовательского проекта. Результаты SWOT – анализа представлены в приложении Б

6.2 Планирование научно – исследовательских работ

6.2.1 Структура работ в рамках научного исследования

В данном разделе приведен перечень этапов проведения работ в рамках научно – исследовательской работы, также приведено распределение исполнителей по видам работ. В таблице 25 приведен порядок этапов и работ, распределение исполнителей по видам данной работы.

Таблица 25 – 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	Инженер

		исследованиями	
Обобщение полученных результатов, вывод по выполненной работе	8	Оценка эффективности полученных результатов	Инженер
	9	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель
<i>Проведение ОКР</i>			
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
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

6.2.3 Определение трудоемкости выполнения работ

Ожидаемая трудоемкость выполнения работы рассчитывается по формуле:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}, \quad (49)$$

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.

Продолжительность отдельной работы в рабочих днях:

$$T_{Pi} = \frac{t_{ожі}}{Ч_i} \quad (50)$$

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.

6.2.4 Разработка графика проведения научного исследования

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

$$T_{ки} = T_{pi} \cdot k_{кал} \quad (51)$$

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

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

$k_{кал}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности находится по формуле:

$$k_{кал} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вых} - T_{пр}} \quad (52)$$

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

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

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

$$k_{кал} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вых} - T_{пр}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22$$

Все полученные значения приведены в приложении Б.

Исходя из данных таблицы, приведенной в приложении Б построен график календарный план – график (Приложение Б) по продолжительности исполнения работ в рамках научно – исследовательского проекта с разбивкой по месяцам и декадам за период времени дипломирования.

6.3 Бюджет научно – технического исследования (НТИ)

В процессе исследования бюджета используется следующая классификация затрат:

- материальные затраты НТИ;
- 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.

6.3.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат проводится по формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхi} \quad (53)$$

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 26.

Таблица 26 – Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Расход	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Бензиновый дистиллят	л	1,5	5,3	8

прямогонный				
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

6.3.2 Расчет затрат на специальное оборудования для научных (экспериментальных) работ

Все затраты по приобретению спецоборудования и оборудования, имеющегося в лаборатории и необходимого для выполнения экспериментальной работы для каждого исполнителя приводится в таблице 27.

Таблица 27 – 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
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 градуированна	3	145	435	-

	я 1 мл				
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:				8236	9000

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

$$H_a = \frac{100\%}{T_{\text{дн}}} = \frac{100\%}{5} = 20\% \quad (54)$$

$$A_{\text{год}} = \frac{C_{\text{перв}} \cdot H_a / 100}{12} \cdot T = \frac{15000 \cdot \frac{20}{100}}{12} \cdot 12 = 3000 \quad (55)$$

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).

6.3.3 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:

$$Z_{зн} = Z_{осн} + Z_{доп} \quad (56)$$

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

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

Основная заработная плата ($Z_{осн}$) рассчитывается по формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p, \quad (57)$$

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

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (58)$$

где Z_m – 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_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно – технического персонала, раб.дн.

Таблица 28 – 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	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	275

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{TC} \cdot (1 + k_{np} + k_d) \cdot k_p, \quad (59)$$

где Z_{TC} – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

k_{np} – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30 % от Z_{TC});

k_d – 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 29.

Таблица 29 – Расчет основной заработной платы

Категория	Z_b , руб.	k_d	k_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб.дн	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель							
ППСЗ	33664	0,35	1,3	72209,28	2991,9	9	26927,1
Инженер							
ППС1	21760	0,35	1,3	46675,2	1765,2	97	171224,4
Итого:							198151,5

Дополнительная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн}, \quad (60)$$

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

Общая заработная плата исполнителей работы представлена в таблице 30.

Таблица 30 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнитель	$Z_{осн}$, руб.	$Z_{доп}$, руб.	$Z_{зп}$, руб.
Руководитель	26927,1	3231,252	30158,352

Инженер	171224,4	20546,93	191771,33
---------	----------	----------	-----------

6.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}), \quad (61)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды, принимается равным 0,271.

На 2019 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30 %. На основании 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2019 году вводится пониженная ставка – 27,1 %.

Таблица 31 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	26927,1	3231,252
Инженер	171224,4	20546,93
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,271	
Итого:	60142,94	

6.3.5 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:

$$Z_{накл} = k_{нр} \cdot (\text{сумма статей } 1 \div 5), \quad (62)$$

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

Величину коэффициента накладных расходов можно принят равным 16%.

Величину коэффициента накладных расходов на НИИ приведены в таблице 11.

6.3.6 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 32.

Таблица 32 – Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание	Аналог 1	Аналог 2
1 Материальные затраты НИИ	921	Таблица 5	1760	3645
2 Затраты на специальное оборудование для экспериментальных работ	9000	Таблица 6	7000	15000
3 Затраты по основной заработной плате исполнителей работы	198151,5	Таблица 8	47154	84569,2
4 Затрат по дополнительной заработной плате исполнителей темы	23778,128	Таблица 9	10145,6	9215,2
5 Отчисления во внебюджетные фонды	60142,94	Таблица 10	15897	17264
6 Накладные расходы	93437,9	16 % от суммы	131130,6	20750,94

		ст. 1-5		
7 Бюджет затрат НТИ	385431,5	Сумма ст. 1-6	95069,7	150444,34

Исходя из данных таблицы 32 можно сделать вывод, что основные затраты НТИ приходятся на специальное оборудование для проведения эксперимента.

6.4 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 [38].

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по формуле:

$$I_{финр}^{испi} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}}, \quad (63)$$

Где $I_{финр}^{испi}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

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

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

$$I_{финр}^{исп1} = \frac{\Phi_{p1}}{\Phi_{max}} = \frac{385431,5}{385431,5} = 1$$

$$I_{финр}^{исп2} = \frac{\Phi_{p2}}{\Phi_{max}} = \frac{95069,7}{385431,5} = 0,25$$

$$I_{финр}^{исп3} = \frac{\Phi_{p3}}{\Phi_{max}} = \frac{150444,34}{385431,5} = 0,39$$

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (64)$$

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

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

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

n – число параметров сравнения. [38]

Таблица 33 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерий	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 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

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

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

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

В качества аналога были выбраны:

Аналог 1 – Процесс компаундирования.

Аналог 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:

$$I_{исп.1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{финр.1}}, \quad I_{исп.2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{финр.2}} \quad (65)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволяет определить сравнительную эффективность проекта (таблица 34) и выбрать наиболее эффективный вариант их представленных. Сравнительная эффективность проекта (\mathcal{E}_{cp}):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}, \quad (66)$$

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

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

$$I_{финр}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_\phi^{a1}} = \frac{4,6}{0,25} = 18,4$$

$$I_{финр}^{a2} = \frac{I_m^{a2}}{I_\phi^{a2}} = \frac{4,2}{0,39} = 10,8$$

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

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^{a1}}{I_{финр}^p} = \frac{18,4}{4,8} = 0,38$$

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^{a2}}{I_{финр}^p} = \frac{10,8}{4,8} = 0,69$$

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 34 – Сравнительная эффективность разработки

№	Показатели	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,19	1,00	0,23
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,8	4,5	4,2
3	Интегральный показатель эффективности	26,67	4,5	18,3
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения		0,38	0,69

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

7 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 добавок повышающих ОЧ, также анализ по прогнозированию свойств бензина.

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

Материалы исследования:

- бензины прямогонные различных НПЗ
- этиловый, изобутиловый, амиловый, изоамиловый спирты, метилметиланили (ММА) метилтретбутиловый эфир (МТБЭ).

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 хроматографический анализ, который также достоверно помогает определить физико – химические свойства моторных топлив.

На НПЗ данная исследовательская работа также поможет наиболее точно, без специально обученного персонала и дорогого оборудование производить моторное топливо с необходимым ОЧ более высокого качества и с меньшими затратами.

7.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

В данном разделе рассмотрены специальные правовые нормы трудового законодательства и их особенности, применимые к условиям научно – исследовательского проекта по подбору наиболее приемистой присадки и ее оптимального количества для повышения ОЧ моторных топлив.

7.1.1 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.

7.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.

Исследования проводились в аудитории 129, расположенной на первом этаже 2-го учебного корпуса Томского политехнического университета. Экспериментальная часть работы осуществлялась в научно-исследовательской лаборатории кафедры химической технологии топлива и химической кибернетики. В лаборатории 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.

7.2 Профессиональная социальная безопасность.

7.2.1 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 детонационных свойств моторного топлива, с целью подбора наиболее эффективной добавки и ее оптимального количества 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 35 Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)			Нормативные Документы
	Разработ ка	Эксплуат ация	
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
2.Отсутствие или недостаток естественного и искусственного света на рабочем месте	+	+	
3.Повышенная температура поверхностей оборудования, материалов	+	+	
4. Повышенный уровень шума	+	+	

Используя данные таблицы 35 можно учесть опасные и вредные факторы, которые теоретически могут возникнуть при работе с объектом.

7.2.2 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 36 [39].

Таблица 36 – Допустимые параметры микроклимата производственных помещений

Температура воздуха в холодный период года, °С	19,0-24
Температура воздуха в теплый период года, °С	20,0-28,0
Температура поверхностей, °С	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 [40].

Таблица 37 – 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 при боковом освещении	3,5 1,2
• Совмещенное освещение, КЕО, %: при верхнем или комбинированном освещении при боковом освещении	2,1 0,7
• Искусственное освещение Всего, лк от общего, лк Освещенность при общем освещении, лк	500 300 400

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 [41].

Таблица 38 – Требования по допустимому уровню шума

Относительная доза шума, %	Эквивалентный уровень звука, дБ А						
	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: противозумные наушники, шлемы, вкладыши типа «беруши».

7.2.3 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.

7.3 Экологическая безопасность.

7.3.1 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 (SO₂) 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.

7.3.2 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.

7.3.3 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.

7.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

7.4.1 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.

7.4.2 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 [43].

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.

7.4.3 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.

Заключение

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 нами 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 экспресс-методы определения октанового и цетанового числа расчетным путем и составлена их классификация.

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

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

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

Разработаны рецептуры смешения прямогонных бензинов с октаноповышающими индивидуальными компонентами, по результатам которых определили невозможность их применения для определения ОЧ смеси. Поэтому выполнена модификация методов определения, в результате которой получена адекватная логарифмическая зависимость для прогнозирования ОЧ смешения кислородсодержащих октаноповышающих добавок.

Список используемых источников

1. Способ повышения антидетонационных величин моторных топлив для карбюраторных и инжекторных двигателей из прямогонного бензина: патент Рос. Федерация № 2486231; заявл. 29.06.12; опубл. 27.06.13, Бюл. № 18 – 6 с.
2. Многофункциональная добавка к автомобильному бензину и содержащая ее топливная композиция: патент Рос. Федерация № 2494139; заявл. 10.10.11; опубл. 27.09.13, Бюл. № 27 – 7 с.
3. Антидетонационная добавка «Окта 2» и топливо с указанной добавкой: патент Рос. Федерация № 2586688; заявл. 28.01.15; опубл. 10.06.16, Бюл. № 16 – 15 с.
4. Антидетонационная присадка и способ ее получения: патент Рос. Федерация № 2354682; заявл. 20.11.08; опубл. 10.05.09, Бюл. № 13 – 9 с.
5. Высокооктановый компонент к автомобильному бензину и топливная композиция, его содержащая: патент Рос. Федерация № 2574407; заявл. 17.12.14; опубл. 10.02.16, Бюл. № 4 – 6 с.
6. Антидетонационная добавка и топливо с указанной добавкой: патент Рос. Федерация № 2576327; заявл. 31.03.15; опубл. 27.02.16, Бюл. № 6 – 13 с.
7. Многофункциональная добавка к автомобильному бензину и топливная композиция, ее содержащая: патент Рос. Федерация № 2510415; заявл. 08.11.12; опубл. 27.03.14, Бюл. № 9 – 8 с.
8. Гуреев А.А. Применение автомобильных бензинов. - М.: «Химия», 1972 - 368 с.
9. Данилов А. М. Применение присадок в топливах: 3-е изд., доп. -СПб.: Химиздат, 2010. –368 с.
10. А.М. Данилов. Применение присадок в топливах для автомобилей. Справ. изд. - М.: Химия, 2000 - 232 с.

11. A. Groysman, Corrosion in Systems for Storage and Transportation of Petroleum Products and Biofuels, DOI 10.1007/978-94-007-7884-9_2, Springer Science+Business Media Dordrecht , 2014
12. Васильева Л. С. Автомобильные эксплуатационные материалы: Учебник для вузов. –М.: Наука-Пресс, 2003. –421с.
13. Механизм горения топливо-воздушных смесей / И.М. Колесников [и др.]//Химия и технология топлив и масел. –2001. -№5-С.23–25, Васильева Л. С. Автомобильные эксплуатационные материалы: Учебник для вузов. –М.: Наука-Пресс, 2003. –421с.
14. Магарил Р.З. Теоретические основы химических процессов переработки нефти. -М.: Химия, 1985. -226 с.
15. Смышляева Ю.А. Моделирование процесса приготовления высокооктановых бензинов на основе углеводородного сырья в аппаратах циркуляционного типа. [Электронный ресурс]. URL: <http://earchive.tpu.ru/handle/11683/6676>, свободный. Дата обращения: 03.05.2019
16. 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]. URL: <http://earchive.tpu.ru/handle/11683/2596>, свободный. Дата обращения: 05.05.2019
17. Смышляева Ю.А. Разработка базы данных по октановым числам для математической модели процесса компаундирования товарных бензинов/Ю.А. Смышляева, Э.Д. Иванчина, А.В. Кравцов, Ч.Т. Зыонг, Ф. Фан. [Электронный ресурс]. URL: <http://earchive.tpu.ru/handle/11683/3659>, свободный. Дата обращения: 05.05.2019
18. Данилов А.М. Присадки и добавки. - М.: «Химия», 1996 - 232 с.

19. Гуреев А.А. Производство высокооктановых бензинов/ Гуреев А.А., Жоров Ю.М., Смидович Е.В. - М.: «Химия», 1981 - 224 с.
20. R. Gra, O. Galup, M. Antuch//Rev. Cienc. Quimic. – 1985
21. Determination of reformed gasoline octane number by n.m.r. spectrometry/ J. Muhl, V. Srica // Fuel. – 1987
22. Determination of Gasoline Octane Numbers by ¹H- and W-NMR Spectroscopy/ Wolf. G. Hiller//J. prakt. Chem. – 1992
23. J. Muhl, V. Srica, Determination of reformed gasoline octane number by n.m.r. spectrometry. Fuel – 1987
24. The Matrix Expression, Topological Index and Atomic Attribute of Molecular Topological Structure/ Qian-Nan Hu, Yi-Zeng Liang, and Kai-Tai. Fang// Journal of Data Science. – 2009. - P. 361-389
25. 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.
26. W. Morris, “Method Relates Diesel Cetane, Octane Ratings,” Oil & Gas Journal, 105 (45): 58 – 60 (December 3, 2007)
27. ГОСТ 3900-85. Нефть и нефтепродукты. Методы определения плотности
28. ГОСТ 2177-99. Нефтепродукты. Метод определения фракционного состава
29. ГОСТ 33-2016 Нефть и нефтепродукты. Прозрачные и непрозрачные жидкости. Определение кинематической и динамической вязкости
30. ГОСТ 31872-2012. Нефтепродукты жидкие. Определение группового углеводородного состава
31. ГОСТ 31872-2012. Нефтепродукты жидкие. Определение группового углеводородного состава
32. Прибор для определения октанового числа бензина [Интернет-ресурс]. URL: <http://www.shatox.ru/octanometr.htm> (дата обращения: 16.03.2018)

33. 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)
34. Касаткин, А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии / А.Г. Касаткин. – М: Альянс, 2005. – 750 с.
35. Процессы и аппараты нефтегазопереработки и нефтехимии / А.И. Скобко, Ю.К. Молоканов, А.И. Владимиров, В.А. Щелкунов. – М.: ООО Недра – Бизнесцентр, 2000. – 677 с.
36. Лашинский А.А, Толчинский А.Р. Основы конструирования и расчета химической аппаратуры. Справочник. – Л.:Машиностроение, 1970. – 752 с.
37. И.А. Иоффе «Проектирование процессов и аппаратов химической технологии» Л. Химия 1991. – 352 с.
38. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / Н.А. Гаврикова, Л.Р. Тухватулина, И.Г. Видяев, Г.Н. Серикова, Н.В. Шаповалова / Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 73 с.
39. ГОСТ 12.1.007-76 "Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности". – введ. 01.01.1977.– М.: ИПК Издательство стандартов, 2002.
40. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий [Электронный ресурс]. URL:<http://www.complexdoc.ru/ntdtext/579059>, свободный. Дата обращения: 03.05.2018г
41. Шум. Общие требования безопасности. – введ. 01.07.1984.– М.: Стандартиформ, 2008. – 13 с.

42. ГОСТ 12.1.005–88. Общие санитарно–гигиенические требования к воздуху рабочей зоны. – введ. 01.01.1989.– М.: Стандартиформ, 2008. – 49 с.
43. Технический регламент от 24 декабря 2009 г. О безопасности средств индивидуальной защиты [Электронный ресурс]. – Режим доступа [www.URL: http://www.rg.ru/2010/03/30/tehreg-site-dok.html](http://www.rg.ru/2010/03/30/tehreg-site-dok.html), свободный. Дата обращения: 03.05.2018 г.

Приложение А

Таблица – Рецептуры смешения пробы 1

№ смеси	Состав	Содержание, масс. доля	V, · 10 ³ м ³	Объемная доля	Содержание в 100 мл. смеси, мл
1	Бензин	0,98	1,418	0,983	98
	Этанол	0,02	0,025	0,017	0,2
2	Бензин	0,97	1,404	0,974	97
	Этанол	0,03	0,038	0,026	0,3
3	Бензин	0,95	1,375	0,956	95
	Этанол	0,05	0,063	0,044	0,5
4	Бензин	0,80	1,158	0,821	82
	Этанол	0,20	0,253	0,179	18
5	Бензин	0,95	1,375	0,953	95
	МТБЭ	0,05	0,0676	0,047	5
6	Бензин	0,90	1,303	0,906	91
	МТБЭ	0,10	0,135	0,094	9
7	Бензин	0,85	1,230	0,858	86
	МТБЭ	0,15	0,203	0,142	14
8	Бензин	0,994	1,439	0,996	99
	ММА	0,006	0,0061	0,004	0,1
9	Бензин	0,992	1,436	0,994	99,4
	ММА	0,008	0,0082	0,0057	0,6
10	Бензин	0,90	1,303	0,992	99,2
	ММА	0,01	0,010	0,008	0,8
11	Бензин	0,96	1,389	0,966	97
	Амиловый спирт	0,04	0,049	0,034	3
12	Бензин	0,92	1,332	0,931	93

Продолжение таблицы

	Амиловый спирт	0,08	0,099	0,069	7
13	Бензин	0,90	1,303	0,914	91
	Амиловый спирт	0,1	0,123	0,086	9
14	Бензин	0,96	1,389	0,966	97
	Изоамиловый спирт	0,04	0,049	0,034	3
15	Бензин	0,92	1,332	0,931	93
	Изоамиловый спирт	0,08	0,0983	0,069	7
16	Бензин	0,90	1,303	0,914	91
	Изоамиловый спирт	0,10	0,123	0,086	9

Таблица – Рецептуры смешения пробы 2

№ смеси	Состав	Содержание, масс. доля	V, · 10 ³ м ³	Объемная доля	Содержание в 100 мл. смеси, мл
1	Бензин	0,98	1,351	0,982	98
	Этанол	0,02	0,025	0,018	2
2	Бензин	0,97	1,337	0,972	97
	Этанол	0,03	0,038	0,028	3
3	Бензин	0,95	1,309	0,954	95
	Этанол	0,05	0,063	0,046	5
4	Бензин	0,80	1,103	0,813	81
	Этанол	0,20	0,253	0,187	19
5	Бензин	0,95	1,309	0,951	95
	МТБЭ	0,05	0,0676	0,049	5
6	Бензин	0,85	1,171	0,852	85
	МТБЭ	0,10	0,203	0,148	15
7	Бензин	0,85	1,171	0,852	85
	МТБЭ	0,15	0,203	0,148	15
8	Бензин	0,994	1,3699	0,9955	99,5
	ММА	0,006	0,0062	0,0045	0,5
9	Бензин	0,992	1,3671	0,994	99,4
	ММА	0,008	0,0082	0,00596	0,06
10	Бензин	0,90	1,2404	0,992	99,2
	ММА	0,01	0,010	0,00799	0,8
11	Бензин	0,96	1,323	0,964	96
	Амиловый спирт	0,04	0,049	0,036	4
12	Бензин	0,92	1,268	0,927	93

Продолжение таблицы

	Амиловый спирт	0,08	0,099	0,072	7
13	Бензин	0,90	1,240	0,909	91
	Амиловый спирт	0,1	0,123	0,090	9
14	Бензин	0,96	1,323	0,964	96
	Изоамиловый спирт	0,04	0,049	0,036	4
15	Бензин	0,92	1,268	0,928	93
	Изоамиловый спирт	0,08	0,0983	0,072	7
16	Бензин	0,90	1,240	0,91	91
	Изоамиловый спирт	0,10	0,122	0,089	9

Приложение Б

Таблица – Матрица SWOT

	<p>Сильные стороны научно – исследовательского проекта:</p> <p>С1. Энергоэффективность и экономичность технологии.</p> <p>С2. Экспрессность</p> <p>С3. Значимость промышленной технологии</p> <p>С4. Достаточно квалифицированный персонал</p> <p>С5. Ликвидность рабочего места</p>	<p>Слабые стороны научно – исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Недостаточное количество необходимого оборудования для проведения исследования</p> <p>Сл2. Отсутствие инжиниринговой компании, для обучения персонал работать в рамках данного проекта</p> <p>Сл3. Необходимость в материалах, комплектующих и новой информации для проведения научного исследования</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Использование усовершенствованной инфраструктуры ТПУ</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса на новый ассортимент</p> <p>В3. Увеличение стоимости конкурентных разработок</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</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>

	исполнителей	
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Развитие конкуренции производства</p> <p>У2. Введение новых государственных требований к сертификации продукции</p> <p>У3. Истращивание природных ресурсов</p> <p>У4. Использование альтенативного топлива</p>	<p>С и У:</p> <p>1.Создание конкурирующую готовую продукцию</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 конкурирующую готовую продукцию</p>

Таблица – Временные показатели проведения научного исследования

№ работы	Название работы	Трудоёмкость работ			Исполнители	Длительность работ в рабочих днях T_{pi}	Длительность работ в календарных днях T_{ki}
		t_{min} , чел-дни	t_{max} , чел-дни	$t_{ожг}$, чел-дни			
1	Составления 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
7	Сравнение экспериментальных данных с теоретическими данными	3	9	5	И	5	6
8	Проведение целесообразности ОКР	1	3	2	И	2	3
9	Оценка результативности 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 работ	1	1	1	И	1	2

Р – Руководитель, И – Инженер.

Таблица – Календарный план – график проведения НИОКР по теме

№ работ	Вид работ	Исполнители	T_{ki} · кал. дн.	Продолжительность выполнения работ													
				февр		март			апрель			май			июнь		
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	
1	Составления и утверждение технического задания	Руководитель	2	█													
2	Выбор направления работы	Инженер	2	█													
3	Сбор и обработка материалов по теме	Инженер	50		▨	▨	▨	▨									
4	Календарное планирование работ	Руководитель, Инженер	2						█								
5	Теоретическое объяснение и подбор экспериментальных методов исследования	Руководитель, Инженер	5						█								
6	Проведение экспериментов	Инженер	40							▨							
7	Сравнение экспериментальных данных с теоретическими данными	Инженер	8														
8	Проведение целесообразности ОКР	Инженер	3														
9	Оценка результативности проведенных экспериментов	Руководитель	5														
10	Подбор информации	Инженер	6														

