

**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) 18.04.01. «Химическая технология»  
(Химическая технология топлива и газа)  
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

Тема работы
<b>Изучение влияния депрессорных присадок на низкотемпературные свойства дизельных топлив различного углеводородного состава</b>

УДК 665.753.4.038.64

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
<b>2ДМ82</b>	<b>Машнич Вероника Викторовна</b>		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Кривцова Надежда Игоревна	К.т.н.		

Консультанты

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Научный сотрудник ОХИ ИШПР	Францина Евгения Владимировна	К.т.н.		
Инженер 2 кат. ТопоГО АО «ТомскНИПИнефть»	Майлин Максим Викторович			

**КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Маланина Вероника Анатольевна	к.э.н., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Скачкова Лариса Александровна			

По разделу «Иностранный язык»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОИЯ ШБИП	Матвеевко Ирина Алексеевна	Доктор филологических наук		

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения химической инженерии	Юрьев Егор Михайлович	К.т.н.		

Томск – 2020 г.

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП (18.04.01)

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС ВПО, критериев и/или заинтересованных сторон
<b>Профессиональные компетенции</b>		
<b>Р1</b>	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности	Требования ФГОС (ПК1,2,3,19,20), Критерий 5 АИОР (п.1.1), СДИО(п. 1.1, 4.1, 4.3, 4.8)
<b>Р2</b>	Применять <i>глубокие</i> знания в области современных технологий химического производства для решения междисциплинарных инженерных задач	Требования ФГОС (ПК7,11,17,18, ОК-8), Критерий 5 АИОР (пп.1.1,1.2), СДИО (п. 1.1, 3.2, 4.2, 4.3, 4.5, 4.6)
<b>Р3</b>	Ставить и решать <i>инновационные</i> задачи инженерного анализа, связанные с созданием материалов и изделий, с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии	Требования ФГОС (ПК-1,5,8,9, ОК-2,3), Критерий 5 АИОР (пп.1.2), СДИО (1.2, 2.1, 4.5)
<b>Р4</b>	Разрабатывать <i>новые</i> химико-технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии, <i>проектировать объекты химической технологии в контексте предприятия, общества и окружающей среды</i>	Требования ФГОС (ПК11,26,27,28), Критерий 5 АИОР (п.1.3) СДИО (п.1.3, 4.4, 4.7)
<b>Р5</b>	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий	Требования ФГОС (ПК4,21,22,23,24,25, ОК-4,6), Критерий 5 АИОР (п.1.4), СДИО (п. 2.2)
<b>Р6</b>	Внедрять, <i>эксплуатировать</i> современные высокотехнологичные линии автоматизированного производства, обеспечивать их <i>высокую эффективность</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды	Требования ФГОС (ПК6,10,12,13,14,15, ОК-6,13,15), Критерий 5 АИОР (п.1.5) СДИО (п. 4.1, 4.7, 4.8, 3.1, 4.6)
<b>Универсальные компетенции</b>		
<b>Р7</b>	Демонстрировать <i>глубокие знания</i> социальных, этических и культурных аспектов инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах устойчивого развития	Требования ФГОС (ОК5,9,10,11), Критерий 5 АИОР (пп.2.4,2.5), СДИО (п. 2.5)
<b>Р8</b>	<i>Самостоятельно учиться</i> и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК1,2,7,8,12), Критерий 5 АИОР (2.6), СДИО (п. 2.4)
<b>Р9</b>	<i>Активно</i> владеть <i>иностраннным языком</i> на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности	Требования ФГОС (ОК-14), Критерий 5 АИОР (п.2.2), СДИО (п. 3.2, 3.3)
<b>Р10</b>	Эффективно работать индивидуально, в качестве члена и <i>руководителя группы</i> , состоящей из специалистов различных направлений и квалификаций, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность <i>следовать корпоративной культуре</i> организации	Требования ФГОС (ОК-3,4), Критерий 5 АИОР (пп.1.6, 2.3) СДИО (п. 4.7, 4.8, 3.1)

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов  
Направление подготовки (специальность) 18.04.01. «Химическая технология»  
 (Химическая технология топлива и газа)  
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:  
 Руководитель ООП  
 \_\_\_\_\_ Юрьев Е.М.  
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

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

В форме:

<b>Магистерская диссертация</b>
---------------------------------

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

Студенту:

Группа	ФИО
<b>2ДМ82</b>	<b>Машнич Вероника Викторовна</b>

Тема работы:

<b>Изучение влияния депрессорных присадок на низкотемпературные свойства дизельных топлив различного углеводородного состава</b>
--

Утверждена приказом директора (дата, номер)	28.02.2020, 59-73/с
---	---------------------

Срок сдачи студентом выполненной работы:	25.05.2020
--	------------

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<p><b>Исходные данные к работе</b>  <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объектами исследования являются дизельные фракции различного углеводородного состава, депрессорная присадка. Исходными данными являются низкотемпературные свойства дизельных фракций и некоторых индивидуальных углеводородов. Требования к дизельному топливу регламентируются согласно ГОСТ 305-2013 Топливо дизельное. Технические условия.</p>
<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b>  <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>1 Обзор литературы                      1.1 Дизельные топливные композиции                      1.1.1 Требования, предъявляемые к дизельным топливам                      1.1.2 Производство дизельного топлива                      1.1.3 Физико-химические и эксплуатационные свойства дизельных топлив                      1.2 Низкотемпературные свойства дизельных топлив</p>

	<p>1.2.1 Способы улучшения низкотемпературных свойств дизельных топлив</p> <p>1.2.1.1 Карбамидная и цеолитная депарафинизация</p> <p>1.2.1.2 Гидрокрекинг, каталитическая депарафинизация, гидроизомеризация</p> <p>1.2.1.3 Присадки к дизельному топливу</p> <p>1.2.1.4 Требования, предъявляемые к присадкам и механизм их действия</p> <p>1.3 Влияние углеводородного состава на свойства дизельного топлива</p> <p>1.3.1 Влияние различных классов углеводородов на низкотемпературные свойства</p> <p>1.4 Межмолекулярные взаимодействия углеводородов в дизельном топливе</p> <p>1.4.1 Программный комплекс Gaussian</p> <p>2 Объект и методы исследования</p> <p>2.1 Методы исследования физико-химических и эксплуатационных свойств дизельных фракций</p> <p>2.1.1 Методика хроматографического выделения фракций парафино-нафтеновых, ароматических углеводородов и смол</p> <p>2.1.2 Исследование углеводородного состава дизельных фракций методом хромато-масс-спектрометрии</p> <p>2.1.3 Метод определения низкотемпературных свойств дизельного топлива</p> <p>2.1.3.1 Описание прибора</p> <p>2.1.3.2 Методика определения низкотемпературных свойств</p> <p>3 Экспериментальная часть</p> <p>3.1 Анализ физико-химических свойств исследуемых фракций</p> <p>3.2 Влияние углеводородного состава на низкотемпературные характеристики дизельных топлив</p> <p>3.3 Влияние углеводородного состава на низкотемпературные характеристики дизельных топлив в присутствии депрессорной присадки</p> <p>3.4 Квантово-химическое моделирование</p> <p>3.4.1 Квантово-химическое моделирование межмолекулярных взаимодействий углеводородов, входящих в состав дизельных топлив</p> <p>3.4.2 Разработка математической модели для расчета изменения температуры застывания, в зависимости от концентрации присадки, с учетом углеводородного состава дизельных фракций</p>
<p><b>Перечень графического материала</b> <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	<p>Презентация Раздаточный материал</p>
<p><b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b> <i>(с указанием разделов)</i></p>	

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Маланина Вероника Анатольевна, к.э.н., доцент отделения социально-гуманитарных наук
Социальная ответственность	Скачкова Лариса Александровна, старший преподаватель ООД ШБИП
Иностранный язык	Матвеевко Ирина Алексеевна, доктор филологических наук, доцент ОИЯ ШБИП
<b>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</b>	
1 Обзор литературы	
1.1 Дизельные топливные композиции	
1.1.1 Требования, предъявляемые к дизельным топливам	
1.1.2 Производство дизельного топлива	
1.1.3 Физико-химические и эксплуатационные свойства дизельных топлив	
1.2 Низкотемпературные свойства дизельных топлив	
1.2.1 Способы улучшения низкотемпературных свойств дизельных топлив	
1.3 Влияние углеводородного состава на свойства дизельного топлива	
1.4 Межмолекулярные взаимодействия углеводородов в дизельном топливе	

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	20.01.2020
---	------------

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Кривцова Н.И.	К.т.н.		20.01.2020

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ82	Машнич Вероника Викторовна		20.01.2020

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

Студенту:

<b>Группа</b> 2ДМ82	<b>ФИО</b> Машнич Вероника Викторовна
------------------------	--

<b>Школа</b>	<b>ИШПР</b>	<b>Отделение школы (НОЦ)</b>	<b>Химической инженерии</b>
<b>Уровень образования</b>	Магистратура	<b>Направление/специальность</b>	Химическая технология топлива и газа

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	– Сырье, материалы = 4 662 – Оборудование для научных работ = 56 000 – Основная заработная плата = 246054 – Дополнительная заработная плата = 30 551 – Отчисления на социальные нужды = 79 553,6 – Научные командировки = 35 984 – Итого плановая себестоимость, руб = 529 160
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	Число календарных дней в году – 365; Продолжительность выполнения проекта – 24 месяца; Дополнительная заработная плата – 12 % от основной. Сумма расходов на научные и производственные командировки составляет 10% от суммы основной и дополнительной заработной платы всего персонала.
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Сумма отчислений в Пенсионный Фонд, медицинское и социальное страхование составляет 30,2% от размера заработной платы.

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

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования.
2. <i>Разработка устава научно-технического проекта</i>	Планирование комплекса работ на создание проекта, построение графика выполнения работ
3. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	Создание иерархической структуры работ проекта. Составление календарного плана проекта. Итоговая группировка бюджета НТИ.
4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности

**Перечень графического материала**

1. Сегментирование рынка
2. Диаграмма Исикавы
3. Матрица SWOT
4. Иерархическая структура работ проекта
5. Календарный план-график проведения НИОКР

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	18.03.2020
---	------------

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Доцент ОСГН	Маланина Вероника Анатольевна	к.э.н., доцент		18.03.2020

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
2ДМ82	Машнич Вероника Викторовна		18.03.2020

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
2ДМ82	Машнич Веронике Викторовне

<b>Школа</b>	<b>ИШПР</b>	<b>Отделение (НОЦ)</b>	<b>Химической инженерии</b>
<b>Уровень образования</b>	<b>Магистратура</b>	<b>Направление/специальность</b>	18 04.01 Химическая технология топлива и газа

Тема ВКР: Исследование состава и низкотемпературных свойств дизельных топливных композиций

<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
<p>1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения</p>	<p>Объект исследования – дизельные фракции различного углеводородного состава, депрессорная присадка для улучшения низкотемпературных свойств.</p> <p>Математическая модель может применяться на различных НПЗ, в проектных организациях и образовательных учреждениях в качестве инструмента прогнозирования, исследования и оптимизации процессов.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p><b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	<p>Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 24.04.2020);</p> <p>ПНД Ф 12.13.1-03. Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения).</p>
<p><b>2. Производственная безопасность:</b></p>	<p><b>Анализ выявленных вредных и опасных факторов</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Отклонение показателей микроклимата</li> <li>– Превышение уровня шума</li> <li>– Недостаточная освещенность рабочей зоны</li> <li>– Поражение электрическим током</li> <li>– Возникновение пожара</li> <li>– Воздействие химических веществ</li> </ul>
<p><b>3. Экологическая безопасность:</b></p>	<p>Основными загрязнителями атмосферы являются углеводородные газы, пары дизельного топлива, бензина, моноэтаноламина, сероводород, сернистый ангидрид и окислы азота.</p> <p>Основными средствами защиты природной среды от вредных воздействий является применение строгого соблюдения технологического регламента, герметизации оборудования, технологическая дисциплина, применение эффективных уплотнений для насосов и фланцевых соединений.</p>

<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b>	Наиболее вероятные чрезвычайные ситуации, которые могут возникнуть: – Пожар – Поражение электрическим током
--	---

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	18.03.20
--	----------

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Скачкова Лариса Александровна			18.03.2020

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ82	Машнич Вероника Викторовна		18.03.2020

## Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 136 страниц, 12 рисунков, 31 таблиц, 47 источников, 3 приложения.

Ключевые слова: дизельное топливо, депрессорная присадка, низкотемпературные свойства, межмолекулярные свойства, углеводородный состав, математическое моделирование.

Объектом исследования являются дизельные фракции различного углеводородного состава и депрессорная присадка на основе сополимера этилена с винилацетатом.

Цель работы – разработка математической модели прогнозирования низкотемпературных свойств дизельного топлива в зависимости от углеводородного состава и концентрации введенной присадки.

Методы исследования – физико-химические методы анализа свойств дизельных топлив (температуры помутнения, застывания, предельной фильтруемости), хромато-масс-спектрометрия, квантово-химические расчеты.

В результате работы проведены расчеты низкотемпературных свойств дизельного топлива в присутствии депрессорной присадки, исследовано влияние углеводородного состава на свойства дизельного топлива, разработана математическая модель прогнозирования низкотемпературных свойств и проверка модели на адекватность.

Результатом применения разработанной математической модели будет необходимая концентрация депрессорной присадки для достижения низкотемпературных свойств дизельного топлива.

Область применения: нефтеперерабатывающая и нефтехимическая промышленность, научные и исследовательские институты.

## Обозначения и сокращения

В данной работе применены следующие обозначения и сокращения с соответствующими расшифровками:

ДТ – дизельное топливо;

ДФ – дизельная фракция;

УВ – углеводороды;

НТ – низкотемпературные;

ММВ – межмолекулярные взаимодействия;

ЭВА – этилен с винилацетатом;

АМА – алкилметакрилат;

АМА-ВА – алкилметакрилат с винилацетатом;

ХМС – хромато-масс-спектрометрия;

АГ – атмосферный газойль;

П – парафины;

А – ароматика;

Н – нафтены;

ИСР – иерархическая структура работ;

ПДК – предельно-допустимая концентрация;

ЛВЖ – легковоспламеняющаяся жидкость.

## Оглавление

Введение .....	14
1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ .....	16
1.1 Дизельные топливные композиции.....	16
1.1.1 Требования, предъявляемые к дизельным топливам .....	16
1.1.2 Производство дизельного топлива .....	17
1.1.3 Физико-химические и эксплуатационные свойства дизельных топлив .....	18
1.2 Низкотемпературные свойства дизельных топлив.....	21
1.2.1 Способы улучшения низкотемпературных свойств дизельных топлив .....	22
1.2.1.1 Карбамидная и цеолитная депарафинизация.....	23
1.2.1.2 Гидрокрекинг, каталитическая депарафинизация, гидроизомеризация .....	24
1.2.1.3 Присадки к дизельному топливу .....	26
1.2.1.4 Требования, предъявляемые к присадкам и механизм их действия.....	26
1.3 Влияние углеводородного состава на свойства дизельного топлива .....	29
1.3.1 Влияние различных классов углеводородов на низкотемпературные свойства .....	30
1.4 Межмолекулярные взаимодействия углеводородов в дизельном топливе .....	34
1.4.1 Программный комплекс Gaussian.....	36
2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ .....	39
2.1 Методы исследования физико-химических и эксплуатационных свойств дизельных фракций .....	39
2.1.1 Методика хроматографического выделения фракций парафинонафтеновых, ароматических углеводородов и смол .....	39
2.1.2 Исследование углеводородного состава дизельных фракций .....	41
методом хромато-масс-спектрометрии.....	41
2.1.3 Метод определения низкотемпературных свойств .....	42
дизельного топлива .....	42

2.1.3.1	Описание прибора .....	42
2.1.3.2	Методика определения низкотемпературных свойств.....	43
3	РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ .....	45
3.1	Анализ физико-химических свойств исследуемых фракций.....	45
3.2	Влияние углеводородного состава на низкотемпературные характеристики дизельных топлив.....	47
3.3	Влияние углеводородного состава на низкотемпературные характеристики дизельных топлив в присутствии депрессорной присадки	53
3.4	Квантово-химическое моделирование .....	58
3.4.1	Квантово-химическое моделирование межмолекулярных взаимодействий углеводородов, входящих в состав дизельных топлив ..	58
3.4.2	Разработка математической модели для расчета изменения температуры застывания, в зависимости от концентрации присадки, с учетом углеводородного состава дизельных фракций .....	60
4	ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ .....	67
4.1	Предпроектный анализ .....	67
4.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования.....	67
4.1.2	Диаграмма Исикавы .....	68
4.1.3	SWOT-анализ.....	69
4.1.4	Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	73
4.1.5	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования .....	75
4.2	Инициация проекта .....	76
4.2.1	Организационная структура проекта .....	77
4.2.2	Ограничения и допущения проекта.....	78
4.3	Иерархическая структура работ проекта .....	78
4.3.1	Контрольные события проекта .....	79
4.3.2	План проекта.....	80
4.4	Бюджет научного исследования .....	81
4.5	Организационная структура проекта .....	85
4.7	Реестр рисков проекта.....	86

4.8	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования. Оценка сравнительной эффективности исследования .....	87
5	СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ .....	91
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....	91
5.2	Производственная безопасность .....	93
5.2.1	Анализ опасных и вредных производственных факторов .....	94
5.2.2	Обоснование мероприятий по снижению уровней воздействия опасных и вредных факторов на исследователя .....	101
5.3	Экологическая безопасность .....	104
5.3.1	Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду .....	104
5.3.2	Обоснование мероприятий по защите окружающей среды .....	105
5.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....	107
	Заключение .....	110
	Список публикаций студента .....	111
	Список литературы .....	113
	Приложение А .....	118
	Приложение Б .....	119
	Приложение В .....	120

## Введение

Для современной нефтеперерабатывающей промышленности характерен рост мощностей и объемов переработки. Мировой рынок дизельного топлива формируется под влиянием совокупности различных факторов, среди которых развитие экономики в различных регионах, рост числа дизельных автомобилей, постоянное возрастание требований экологического характера, качественные характеристики исходного сырья – сырой нефти [1].

Рынок дизельного топлива в течение 2020-2024 годов должен вырасти на 92,15 млрд долларов, достигнув показателя совокупного среднегодового темпа роста более 1% в течение прогнозируемого периода [2]. В связи с увеличением спроса на дизельное топливо, происходит ужесточение требований, предъявляемых к качеству, в том числе низкотемпературных свойствам.

Исследование низкотемпературных свойств топлива в первую очередь связано с холодным климатом Российской Федерации (РФ). Для получения топлива с хорошими низкотемпературными свойствами, такими как – температура помутнения, застывания и предельная температура фильтруемости, используют различные методы: карбамидная и цеолитная депарафинизация, гидрокрекинг, каталитическая депарафинизация, гидроизомеризация, введение различных присадок [3].

Целью данной работы является разработка математической модели прогнозирования низкотемпературных свойств дизельного топлива в зависимости от углеводородного состава и концентрации введенной присадки.

В качестве объекта исследования были использованы дизельные фракции различного углеводородного состава и депрессорная присадка на основе сополимера этилена с винилацетатом.

Методы исследования – физико-химические методы анализа свойств дизельных топлив (температуры помутнения, застывания, предельной фильтруемости), хромато-масс-спектрометрия, квантово-химические расчеты.

Актуальность данного исследования заключается в выявлении закономерностей изменения низкотемпературных характеристик от углеводородного состава дизельного топлива с учетом межмолекулярных взаимодействий, возникающих между углеводородами и депрессорной присадкой. Полученные закономерности стали основой математической модели прогнозирования низкотемпературных свойств дизельных топлив в зависимости от углеводородного состава и концентрации присадки.

# 1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

## 1.1 Дизельные топливные композиции

### 1.1.1 Требования, предъявляемые к дизельным топливам

В последние годы происходит интенсивное развитие современных технологий и осуществляются многочисленные научные разработки в области биотоплив, но тем не менее, нефтяное дизельное топливо (ДТ) остаётся наиболее востребованным как на мировом, так и российском рынках нефтепродуктов [4].

В связи с интенсивным ростом спроса на дизельное топливо происходит ужесточение требований, предъявляемых к качеству топлива.

В 2011 году введен технический регламент таможенного союза (ТР ТС 013/2011 "О требованиях к автомобильному и авиационному бензину, дизельному и судовому топливу, топливу для реактивных двигателей и мазуту" от 18.10.2011), в котором представлены требования к качеству выпускаемых топлив. Основные требования к свойствам дизельного топлива представлены в таблице 1.1 [5].

Таблица 1.1 – Требования к качественным показателям дизельного топлива

Характеристика дизельного топлива		Единица измерения	Нормы в отношении экологического класса			
			К2	К3	К4	К5
Массовая доля серы, не более		Мг/кг	500	350	50	10
Массовая доля полициклических ароматических углеводородов, не более		%	-	11	11	8
Цетановое число, не менее	Летнее ДТ		45	51	51	51
	Зимнее и арктическое ДТ		Не опред.	47	47	47
Смазывающая способность, не более		мкм	Не опред.	460	460	460
Предельная температура фильтруемости не выше	Летнее ДТ	°С	Не опред.	Не опред.	Не опред.	Не опред.
	Зимнее ДТ		Минус 20	Минус 20	Минус 20	Минус 20
	Арктическое ДТ		Минус 38	Минус 38	Минус 38	Минус 38
	Межсезонное ДТ		Минус 15	Минус 15	Минус 15	Минус 15

Согласно значениям таблицы видно, что с повышением класса дизельного топлива происходит ужесточение требований к качественным показателям.

### **1.1.2 Производство дизельного топлива**

Технология получения дизельного топлива предусматривает переработку керосиново-газойлевых фракций, получаемых при прямой перегонке нефти. Производство дизельного топлива включает несколько этапов:

1. Очистка включает в себя удаление механических примесей, обезвоживание на электрообессоливающей установке, удаление легких углеводородов.

2. Первичная переработка представляет собой прямую перегонку нефти в ректификационной колонне при атмосферном давлении, в ходе которой происходит разделение на фракции по температуре кипения. Полученные фракции обладают низким качеством, поэтому требуется последующая переработка.

3. В ходе вторичной переработки изменяется химический состав дизельных фракций, а также преобразуется структурность углеводородов. Технология получения топлив включает переработку методом крекинга. Существует три разновидности:

- Каталитический крекинг – расщепление в присутствии катализатора.
- Термический крекинг – расщепление под действием высокой температуры (470 – 550°C).
- Гидрокрекинг протекает в среде водорода.

4. Компаундирование является последней стадией подготовки товарного дизельного топлива. Чтобы дизельное топливо приобрело требуемые качества, выполняют смешение полученных фракций с компонентами

вторичных процессов, прошедшими гидроочистку, с добавлением различных присадок.

### **1.1.3 Физико-химические и эксплуатационные свойства дизельных топлив**

Дизельное топливо – смесь парафиновых (10...40%), нафтеновых (20...60%) и ароматических (14...30%) углеводородов, выкипающих при температурах +170...+380°C [6].

Основными эксплуатационными показателями качества этих топлив являются [7]:

- цетановое число,
- фракционный состав,
- низкотемпературные свойства,
- кинематическая вязкость,
- содержание общей и меркаптановой серы,
- кислотное число и др.

*Цетановое число* является мерой воспламенения дизельного топлива. Цетановое число характеризует задержку между началом впрыска топлива в камеру сгорания и началом воспламенения от сжатия (самовоспламенение). Наиболее высокими цетановыми числами обладают n-алканы, самые низкие цетановые числа имеют ароматические углеводороды [8].

Дизельные двигатели рассчитаны на воспламенение от сжатия (без искры), поэтому топливо должно иметь возможность самовоспламенения. Более высокое цетановое число означает более короткое время задержки зажигания и более полное сгорание заряда топлива в камере сгорания. В свою очередь это приводит к более плавной работе, лучшей производительности и меньшим выбросам в атмосферу.

Углеводороды, входящие в состав дизельного топлива, обладают различной *плотностью*. В связи с этим, по плотности можно судить о том,

какие группы углеводородов преобладают в топливе [9]. Так, парафины имеют меньшую плотность по сравнению с ароматическими углеводородами, а нафтены находятся между ними. Высокая плотность показывает высокое содержание ароматических веществ. Не всегда возможно использовать обычные методы для измерения плотности при 15°C [10]. Таким образом, измерение производится при более высокой температуре, а затем преобразуется и корректируется до контрольной температуры.

*Вязкость* играет роль при впрыске топлива и способствует смазке системы подачи топлива. Слишком высокая вязкость затрудняет перекачку при низкой температуре и снижает степень распыливания, а слишком низкая вязкость может привести к износу топливного насоса [10]. Во время впрыска высокая вязкость приводит к образованию более крупных капель дизельного топлива, поэтому они подаются в зону обжига перед тем, как смешаться с воздухом. Низкая вязкость приводит к более высоким выбросам вредных веществ [10].

*Сероводород* ( $H_2S$ ) является очень токсичным газом, и воздействие высоких концентраций опасно для жизни.

Дизельное топливо должно обладать оптимальной *испаряемостью*. Чрезмерное облегчение фракционного вызывает жесткую работу дизельного двигателя и ухудшение работы топливного насоса высокого давления [9]. Из-за повышенной испаряемости топлива к моменту самовоспламенения рабочей смеси в цилиндре двигателя накапливается большое количество паров, воспламенение которых приводит к резкому возрастанию давления [9]. Температура перегонки 50% характеризует отчасти пусковые качества дизельных топлив, так как первая вспышка рабочей смеси в дизельных двигателях зависит не только от испаряемости топлива, но и от его воспламеняемости [9].

Топливо с высоким *кислотным числом* может привести к повреждению систем впрыска топлива. Большинство топлив имеют низкое кислотное

число, превышение которого выше 2,5 мг КОН/г может вызвать нагарообразование [11].

Высокое содержание *смол и асфальтенов* снижают качество воспламенения и сгорания топлива, увеличивают износ и повреждение двигателя [11]. Асфальтены также влияют на стабильность смешанного топлива и могут накапливаться в фильтрах.

Одной из важнейших характеристик дизельного топлива являются *низкотемпературные свойства*. Имеется ряд испытаний для измерения низкотемпературных свойств топлива для дизельных двигателей и оценки их влияния на работоспособность автомобиля при низких температурах.

*Температура помутнения* – это температура, при которой парафиновые углеводороды, присутствующие в топливе, начинают появляться, при охлаждении топлива с определенной скоростью, и топливо мутнеет [12].

*Предельная температура фильтруемости* – температура, при которой определенный объем топлива при охлаждении в заданных условиях не протекает через стандартное фильтрующее устройство за установленное время [12].

Потерю подвижности нефтепродуктов вследствие образования из кристаллизующихся углеводородов каркаса или структурной сетки принято называть застыванием [13]. *Температурой застывания*, таким образом, называют наивысшую температуру, при которой дизельное топливо в стандартном приборе, наклоненном под углом 45°С, в течение 1 мин остается неподвижным.

Эксплуатационное правило: «температура эксплуатации топлива должна быть на 10–15°С выше его температуры застывания» [13]. Если применять зимой летнее или смешанное топливо, то выпадающие кристаллы углеводородных соединений будут забивать систему питания дизеля, подача топлива нарушится или прекратится [13].

## 1.2 Низкотемпературные свойства дизельных топлив

Существует несколько способов измерения низкотемпературных свойств топлива для дизельных двигателей и оценки их влияния на работоспособность автомобиля при низких температурах [14].

Известно, что в углеводородном составе дизельного топлива содержание парафиновых углеводородов достигает 30–40%. Также известно, что при понижении температуры образуются кристаллы парафина, это вызывает помутнение топлива.

Температура помутнения является пределом работоспособности для топлив, которые не содержат добавок, пригодных для эксплуатации. Температура помутнения определяется как температура, при которой облако парафиновых кристаллов начинает появляться в топливе в условиях испытания. Эти кристаллы могут накапливаться в фильтрах и в конечном итоге привести к закупорке топливной системы. Топливные присадки, используемые при низких температурах, обычно мало влияют на температуру помутнения. Эти добавки используются в дизельном топливе для предотвращения агломерации или модификации этих кристаллов другими способами для ограничения засорения фильтра [15].

Было обнаружено, что топлива, имеющие одинаковые температуры помутнения и температуры застывания, могут различаться по характеристикам потока при низких температурах.

В работе [16] Дин и Джонсон отметили, что быстрое охлаждение дизельного топлива приводит к образованию более мелких кристаллов, в то время как медленное охлаждение приводит к образованию более крупных кристаллов парафина, что препятствует течению потока.

Понижение температуры застывания различных углеводородных фракций происходит в ряду [14]:

1. н-парафиновая фракция;
2. ароматическая фракция;

3. фракция би- и трициклических ароматических углеводородов;
4. фракция трициклических ароматических углеводородов;
5. нафтеновая фракция.

Существуют различные теории механизма застывания нефтепродуктов. В соответствии с одной из них считается, что при застывании либо образуется непрерывная пространственная сетка из кристаллов парафина в результате последовательного выделения из жидкой фазы твердых углеводородов с различной температурой кристаллизации, либо сверхмицеллярная структура [17]. По другим теориям застывание может происходить из-за образования в системе парафин – углеводороды структурного каркаса, который иммобилизуя жидкую фазу, препятствует ее движению, или связано с образованием сольватных оболочек жидкой фазы вокруг кристаллов парафина, которые значительно увеличивают их объем, повышают внутреннее трение всей системы и понижают ее текучесть [17].

### **1.2.1 Способы улучшения низкотемпературных свойств дизельных топлив**

Для улучшения низкотемпературных свойств дизельных топлив существуют несколько способов:

1. Для улучшения низкотемпературных свойств проводят частичную депарафинизацию дизельного топлива, однако это сопряжено с удалением из него ценных высокоцетановых углеводородов, обладающих высокими температурами плавления [6]. Карбамидная, цеолитная и каталитическая депарафинизация позволяет получить топливо с удовлетворительными низкотемпературными свойствами, однако это приведет к снижению выхода фракции на 20-30%.

2. На нефтеперерабатывающем заводе дизельное топливо может быть смешано с топливом, обладающим низким содержанием парафинов. Этот подход может отрицательно повлиять на экономику

нефтеперерабатывающего завода, поскольку сырье с более низкой температурой кипения используется в качестве сырья для топлив с меньшим доходом [8].

3. Более экономичным способом улучшения низкотемпературных характеристик дизельного топлива является каталитическая изомеризация n-парафинов в изопарафины, которые имеют более низкие температуры замерзания. Этот процесс называется изодепарафинизацией.

4. Комбинация способов 2 и 3. Кристаллизация парафинов в условиях медленного охлаждения влияет на вязкость и, таким образом, вызывает изменение реологического поведения топлива [8].

5. Облегчение фракционного состава путем удаления высококипящих (330-415°C) углеводородов из тяжелой части дизельного топлива с потерей 10% потенциала [18].

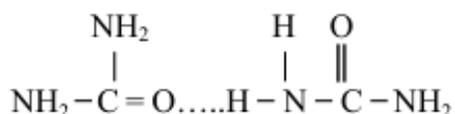
6. Гидрокрекинг

7. Одним из наиболее эффективных способов улучшения низкотемпературных характеристик дизельного топлива и расширения их ресурса является использование химического соединения – депрессора.

### 1.2.1.1 Карбамидная и цеолитная депарафинизация

Одним из способов улучшения низкотемпературных характеристик дизельного топлива является карбамидная депарафинизация.

Карбамидная депарафинизация дизельного топлива позволяет удалять часть высокоплавких n-парафинов, отрицательно влияющих на низкотемпературные свойства. В данном процессе происходит перемешивание топлива со спиртовым насыщенным раствором карбамида. Карбамид представляет собой сильно ассоциированное соединение из-за образования межмолекулярных водородных связей [19]:



В ходе данного взаимодействия образуется комплекс, выделяющийся в виде твердой фазы при снижении температуры до 25-35°C. Образовавшаяся смесь комплекса с раствором карбамида направляется в специальный отстойник, где нагревается до 70-75°C и разделяется на свободные парафины и насыщенный раствор карбамида, который отправляется на рецикл для повторного использования в процессе депарафинизации [19]. Дизельные топлива, прошедшие карбамидную депарафинизацию обладают более низкими температурами помутнения, чем прямогонные зимние топлива облегченного фракционного состава.

Процесс депарафинизации дизельных фракций на цеолитах («Парекс») позволяет проводить более глубокую очистку топлива от высокоплавких n-парафинов [19].

В данном процессе используются синтетические цеолиты с порами диаметром  $5 \cdot 10^{-4}$  мкм. Молекулы n-парафинов проникают в полости цеолита и задерживаются в них, молекулы углеводородов, диаметры которых превышает  $5 \cdot 10^{-4}$  мкм, остаются в рафинате [19].

Параметры процесса адсорбции n-парафинов: температура 400°C и давление 0,5-1,0 Мпа [19]. Исходное сырье подвергается предварительной гидроочистке для удаления гетеросоединений, смешивается с водородом или водородсодержащим газом, направляется в теплообменник и далее в адсорбционный блок, заполненный цеолитом.

При помощи паров аммиака, происходит десорбция парафинов. В данный процесс позволяет получить топливо с низкими температурами помутнения и застывания.

### **1.2.1.2 Гидрокрекинг, каталитическая депарафинизация, гидроизомеризация**

Процессы гидокрекинга, каталитической депарафинизации, гидроизомеризации, позволяют превращать парафиновые углеводороды, в

углеводороды других классов, расщеплять или изомеризовать их [17]. В результате улучшаются температура помутнения, предельная температура фильтруемости, температура застывания.

В работе [20] в процессе гидроизомеризации катализатором является цеолитсодержащий катализатор с никелем. Максимальная активность катализатора и минимальное содержание алканов достигается при температуре 270°C. При проведении процесса наблюдается уменьшение низкотемпературных показателей на 31-36°C. В результате побочной реакции крекинга образуются углеводороды C<sub>5</sub>-C<sub>8</sub>. При увеличении содержания данных углеводородов увеличивается давление сгорания с образованием паровоздушных пробок, что негативно сказывается на пусковых и эксплуатационных свойствах топлива, а также снижается выход топлива за счет превращения части парафиновых углеводородов в газы [20]. Метод гидроизомеризации стоит применять для топлив с высоким содержанием n-алканов.

В процессе каталитической депарафинизации среднестиллятных фракций происходит расщепление n-парафинов. Данный метод можно применять на установках гидроочистки и технологически он является не сложным. К его достоинствам относится то, что он позволяет понизить температуру застывания дизельного топлива до минус 50°C, понизить предельную температуру фильтруемости и повысить температуру вспышки [18]. К недостаткам данного процесса относится понижение цетанового числа и выхода ДТ [21].

Помимо этого, во время глубокой гидроочистки из дизельного топлива вместе с серосодержащими соединениями удаляются природные ингибиторы окисления. Это способствует осадко- и смолообразованию, выводя из строя топливоподающую аппаратуру [4]. В связи с этим, лучше применять гидродепарафинизацию для высококипящих дизельных дистиллятов.

### **1.2.1.3 Присадки к дизельному топливу**

Из литературных источников известно, что введение депрессорной присадки в малых концентрациях снижает температуру застывания, понижает предельную температуру фильтруемости, предотвращает осаждение парафинов при низкой температуре, либо оказывает комплексное воздействие на указанные характеристики.

Виды присадок к дизельному топливу:

- Иницирующие (цетаноповышающие) – снижают период задержки самовоспламенения топлива.
- Противонагарные – снижают содержание токсичных продуктов неполного сгорания топлив и количество отложений на стенках камер сгорания.
- Противодымные – снижают дымность отработавших газов.
- Антиокислители, деактиваторы металлов и биоциды - способствуют сохранению исходных свойств топлив при их хранении, транспортировке и применении.
- Антикоррозионные – снижают коррозионную агрессивность и повышение защитной способности топлив.
- Противоизносные – повышают смазывающие качества дизельного топлива с минимальным содержанием серы.
- Депрессорные – улучшают низкотемпературные свойства дизельного топлива.

### **1.2.1.4 Требования, предъявляемые к присадкам и механизм их действия**

Депрессорные присадки должны обеспечивать требуемые низкотемпературные характеристики дизельного топлива, необходимую вязкость топлива при низких температурах, они должны быть стойкими к

деструкции при воздействии кислорода и высоких температур, не оказывать влияния на эффективность действия других присадок, вводимых в топливо.

Существует две теории механизма действия депрессорных присадок: адсорбционная и сокристаллизационная. Адсорбционная заключается в том, что депрессор, адсорбируясь поверхностью кристаллизующихся н-парафинов, модифицирует ее, предотвращая агрегацию, тем самым, понижая температуру застывания дизельного топлива [22]. Теория сокристаллизации предполагает, что депрессоры влияют одновременно на поверхность и на объем смеси н-парафинов. На поверхности н-парафины сокристаллизуются с депрессорами, в объеме происходит образование смешанных кристаллов [22].

В статье [14] современная концепция механизма их действия исходит из того, что они накапливаются на гранях кристалла парафина и мешают его росту в точке с наименьшей концентрацией. Происходит рост кристаллов в сторону наименьшей концентрации депрессора на углах. Такое изменение формы кристаллического н-парафина является основной причиной снижения температуры формирующегося пространственного каркаса.

Микроскопические наблюдения в поляризованном свете показывают, что кристаллы воска начинают образовываться в системе на несколько градусов выше точки застывания [14].

В работе [14] проводятся глубокие исследования влияния депрессора на низкотемпературные характеристики дизельного топлива, их совместимость, определения наиболее эффективной концентрации вводимой присадки в дизельное топливо, а также влияния углеводородного состава дизельного топлива на эффективность действия депрессорной присадки.

Известно несколько факторов, оказывающих влияние на приемистость дизельного топлива к депрессорным присадкам.

В работе [23] исследователями было установлено, что на приемистость депрессорных присадок влияет фракционный состав. Широкий фракционный состав обеспечивает хорошее восприятие депрессорной присадки в топливе,

узкий фракционный состав снижает эффективность действия депрессора. Пределы выкипания фракции указывают на характер распределения углеводородов по молекулярной массе и по длине цепи.

Также, показано влияния отдельных групп углеводородов в составе дизельного топлива на их приемистость к депрессорным присадкам. Изменяя соотношение между отдельными подгруппами углеводородов, можно добиться лучшей приемистости присадок к дизельному топливу: н-алканы и изоалканы, высокоплавкие н-алканы и низкоплавкие н-алканы [23].

Содержание н-алканов и их молекулярно-массовое распределение является основным фактором, определяющим приемистость депрессорной присадки. Прежде всего, это относится к высокоплавким н-алканам, которые определяют ход процесса кристаллизации в топливе [12].

В диссертационной работе [12] определено, что широкое молекулярно-массовое распределение оказывает положительное воздействие на приемистость топлива к депрессорам. Топливо, в составе которого содержится больше неразветвленных алифатических структур и нафтеновых углеводородов, обладает лучшей приемистостью. Изоалкановые структуры ухудшают приемистость топлив к депрессорным присадкам.

### 1.3 Влияние углеводородного состава на свойства дизельного топлива

Существует четыре основных класса углеводородов: парафины, нафтены, олефины и ароматические соединения. Каждый класс представляет собой семейство отдельных углеводородных молекул, которые имеют общую структурную особенность, но различаются по размеру (числу атомов углерода) или геометрии [24]. Классы также различаются по соотношению атомов водорода и углерода и тому, как атомы углерода связаны друг с другом.

Парафины и нафтены классифицируются как насыщенные углеводороды, поскольку к ним больше нельзя добавлять водород, не разрушая углеродную цепь. Ароматика и олефины классифицируются как ненасыщенные углеводороды. Они содержат углерод-углеродные двойные связи или ароматические связи, которые можно превратить в одинарные связи путем добавления атомов водорода к соседним углеродам. Когда олефины с прямой цепью насыщаются водородом, они превращаются в парафины. Когда ароматические соединения полностью насыщены водородом, они становятся нафтенами; когда они частично насыщены, они становятся циклическими олефинами.

Рассмотрим, как углеводороды различных классов влияют на основные свойства дизельного топлива.

*Температура кипения.* Для соединений, относящихся к одному классу, температура кипения увеличивается с числом атомов углерода. Для соединений с одинаковым углеродным числом порядок повышения температуры кипения по классам – изопарафин, н-парафин, нафтен и ароматика. Соединения, кипящие при температуре около 260°C, в середине диапазона кипения дизельного топлива, могут представлять собой ароматические углеводороды C<sub>12</sub>, нафтены C<sub>13</sub>, н-парафин C<sub>14</sub> и изопарафины C<sub>15</sub> [25].

*Плотность.* Для соединений одного класса плотность увеличивается с числом атомов углерода. Порядок повышения плотности для соединений с одинаковым числом атомов углерода: алканы, нафтены и ароматические углеводороды [25].

*Цетановое число.* Нормальные парафины имеют высокие цетановые числа, которые увеличиваются с молекулярной массой. Изопарафины имеют широкий диапазон цетановых чисел, примерно от 10 до 80. Молекулы с множеством коротких боковых цепей имеют низкие цетановые числа; тогда как молекулы с одной боковой цепью из четырех или более атомов углерода имеют высокие цетановые числа [25].

Нафтены обычно имеют цетановые числа от 40 до 70. Более высокомолекулярные молекулы с одной длинной боковой цепью имеют высокие цетановые числа; молекулы с более низким молекулярным весом и с короткими боковыми цепями имеют низкие цетановые числа.

Ароматические соединения имеют цетановые числа в диапазоне от нуля до 60. Молекула с одним ароматическим кольцом и с длинной боковой цепью будет находиться в верхней части этого диапазона; молекула с одним кольцом и с несколькими короткими боковыми цепями в нижней [24, 25].

*Вязкость* в первую очередь связана с молекулярной массой, а не с углеводородным классом [24]. Для данного числа атомов углерода нафтены обычно имеют немного более высокую вязкость, чем парафины или ароматические соединения.

### **1.3.1 Влияние различных классов углеводородов на низкотемпературные свойства**

Нормальные парафины обладают плохими низкотемпературными свойствами, в отличие от ароматических углеводородов, имеющих низкие значения данных характеристик. Изопарафины и нафтены являются

промежуточными углеводородами, причем значения этих свойств находятся между значениями н-парафинов и ароматических соединений.

Температура застывания также увеличивается с молекулярной массой, но она сильно зависит от молекулярной формы. Молекулы, которые легче вписываются в кристаллическую структуру, имеют более высокие температуры застывания, чем другие молекулы [24,25]. Это объясняет высокую температуру застывания н-парафинов и незамещенных ароматических соединений по сравнению с температурами застывания изопарафинов и нафтенов с одинаковым числом атомов углерода.

Низкотемпературные свойства дистиллятных топлив зависят от концентрации различных н-парафиновых соединений и их распределения в топливе. Эти парафины могут состоять из углеводородов  $C_{10}$ - $C_{22}$ , в зависимости от источника сырой нефти и последующих процессов переработки [24]. Природа и количество н-парафинов в этих фракциях влияют на поведение при низких температурах. Дизельное топливо может содержать 12–40% парафиновых углеводородов ( $C_{10}$  –  $C_{20}$ ) и поэтому имеет ограниченную растворимость в топливе, особенно при более низких температурах [24,25]. Парафины могут блокировать топливную систему и фильтры дизельных транспортных средств, вызывая неустойчивую работу двигателя, потерю мощности и даже полный отказ двигателя. Чтобы избежать этих проблем, низкотемпературные свойства дизельного топлива должны соответствовать климатическим условиям, в которых работают двигатели.

Различные группы н-парафинов по-разному влияют на низкотемпературные свойства дизельных топлив. Необходимо учитывать их количество, распределение по молекулярным массам, соотношение с изопарафинами и низкомолекулярными парафинами. Например [26]:

- $C_{\text{начало}}-C_{11}$  - отвечают за наличие в ДТ керосиновой фракции, сдвигающей кристаллизацию н-парафинов при охлаждении топлива до температуры ниже температуры помутнения;

- $C_{12}$ - $C_{17}$  – отвечают за улучшение ПТФ при введении в ДТ депрессорно-диспергирующей присадки;
- $C_{18}$ - $C_{22}$  и  $C_{18}$ - $C_{\text{конец}}$  цепи являются труднорастворимыми н-парафинами, которые в первую очередь при охлаждении топлива ниже температуры помутнения.

В работе [27] было установлено, что для летних дизельных топлив, полученных из прямогонных дизельных фракций, температура помутнения очень сильно зависит от содержания н-парафинов  $C_{20}$ - $C_{25}$ . В среднем, с введением 1% парафина из этого промежутка, температура помутнения увеличивается на  $72^{\circ}\text{C}$ . Необходимо учитывать соотношение высокоплавких (от  $C_{22}$  и выше) парафинов к низкоплавким (до  $C_{15}$  включительно): чем оно больше, тем хуже низкотемпературные характеристики [20,27].

Имеет место тот факт, что содержание ароматических углеводородов, представленных моноциклическими, бициклическими и полициклическими соединениями, также оказывает влияние на низкотемпературные показатели [20]. Уменьшение анилиновой точки при увеличении содержания ароматических углеводородов способствует понижению температуры застывания дизельных топлив [27]. Данный факт связан с тем, что арены являются растворителями высокоплавких н-парафинов. Однако, не менее важным фактом, является то, что полициклические ароматические углеводороды влияют на ресурс работы двигателя, так как не полностью сгорают и оседают в виде смолистых отложений на стенках камеры сгорания, поршне, форсунках [27].

На коэффициент фильтруемости влияет содержание в топливе воды, механических примесей, микроорганизмов, поверхностно-активных веществ мыл нафтеновых кислот, смолистых соединений [28]. Присутствие в топливе поверхностно-активных веществ мыл нафтеновых кислот, смолистых соединений усиливает воздействие воды на фильтруемость топлив [28].

Таким образом, при производстве дизельного топлива с улучшенными низкотемпературными характеристиками необходимо снижать содержание

высокоплавких n-парафинов и устанавливать оптимальное содержание низкокипящих n-парафинов и моноциклических аренов, а также учитывать содержание нафтенов и аренов, разветвленность углеводородных структур и содержание различных посторонних веществ и примесей [20,27].

## 1.4 Межмолекулярные взаимодействия углеводов в дизельном топливе

В настоящее время общепризнанно, что дизельное топливо является типичным представителем дисперсных систем, поскольку оно характеризуется двумя основными признаками, отличающими классические дисперсные системы от истинных растворов, а именно гетерогенность и дисперсия. Дисперсная фаза состоит из длинноцепочечных углеводов с высокой температурой плавления, гетерогенных соединений, смол, асфальтенов и различных присадок. Дисперсионная среда – это раствор, образованный углеводородами, взаимно растворимыми друг в друге [22].

Различные типы межмолекулярных взаимодействий присутствуют в дисперсной системе, а также взаимодействия между частицами дисперсной фазы и молекулами дисперсионной среды [22].

Межмолекулярные взаимодействия (ММВ) приводят к образованию новых структур, таких как сольваты, ассоциаты, сольватные ассоциаты или комплексы с переносом заряда [22]. ММВ также возникают при добавлении полимерного депрессора в дизельное топливо, которое действует как растворитель для присадки. Поскольку композиция дизельного топлива включает различные классы углеводов, очевидно, что эффективность депрессорных присадок в дизельном топливе будет зависеть как от углеводородного состава дизельного топлива, так и от структуры присадок. Данные показывают, что ММВ между углеводородами дизельного топлива и депрессорной присадкой приводят к образованию новых структур.

В статье [22] установлены и доказаны ММВ с помощью УФ-спектрофотометрии, которая показала новые полосы поглощения в видимой области спектра, отсутствующие в спектрах отдельных компонентов. Это является однозначным доказательством ММВ.

Экспериментальные данные в работе [22] показывают, что ММВ, которые встречаются в дисперсной системе, в том числе с добавками,

ответственны за эффективность этих добавок в топливе. Учитывая, что все добавки проявляют свойства поверхностно-активных веществ, механизм действия добавок рассматривается как механизм стабилизации дисперсных систем поверхностно-активными веществами.

Также, в работе было установлено, что чем больше уменьшение поверхностного натяжения топливной дисперсной системы из-за присадок, тем выше эффективность присадки в топливе.

Межмолекулярные комплексы могут образоваться за счет образования водородных связей, дисперсионных взаимодействий, характерных для углеводородов, а также за счет диполь-дипольного взаимодействия полярных соединений [29]. Энергия взаимодействия молекул в комплексах и ассоциатах зависит от структуры входящих в них соединений и вида функциональных групп [29].

В статье [29] было установлено, что за счет ММВ образуются комплексы парафинов с фрагментами депрессорной присадки на основе сополимера ЭВА (сольваты). Из этого следует, что действие депрессорной присадки зависит от длины углеводородных участков между полярными винилацетатными группами депрессора и длины цепи молекул парафинов, присутствующих в ДТ.

В работе [30] следует обратить внимание на тот факт, что более сильные ММВ возникают в случае топлив, независимо от их марки, с сополимерами алкилметакрилатов с винилацетатом, по сравнению с сополимерами этилена с винилацетатом, что, вероятно, объясняется большей полярностью молекул сополимеров АМА-ВА по сравнению с молекулами сополимеров ЭВА. Однако, если сравнить силу ММВ между молекулами депрессора ЭВА и ДТ различных марок, то эти взаимодействия проявляются сильнее в летнем ДТ, чем в зимнем. Причина, скорее всего, заключается также в большей полярности ДТ летней марки.

Также авторы экспериментально доказали ММВ между молекулами сополимеров-депрессоров и компонентами ДТ с помощью зависимости, из

которой следует, что кинематическая вязкость ДТ не зависит от концентрации содержащегося в нем сополимера депрессора, причем независимо от его химической природы [30].

В работе [24] говорится о том, что сдвиг электронной плотности от атома водорода к атому углерода, обеспечивающий положительные и отрицательные заряды, а также акцепторные и донорные свойства атомов водорода и углерода, приводит к образованию межмолекулярного взаимодействия, в частности, между атомами молекул метана и бензола. Именно благодаря наличию положительного заряда на водороде и отрицательного заряда на кислороде было высказано предположение о существовании водородных связей типа  $\text{C-H}\cdots\text{O}$ , обладающих низкой стабильностью.

Также, атомы водорода с различными положительными зарядами образуют между собой взаимодействия низкой стабильности.

Принимая во внимание, что энтальпия фазового перехода связана с числом и энергией разорванных конкретных взаимодействий, можно оценить энергию взаимодействия по характеристике энтальпии испарения, разделив ее на количество существующих взаимодействий [24].

#### **1.4.1 Программный комплекс Gaussian**

Gaussian – пакет электронных структур общего назначения для использования в вычислительной химии. Данный программный комплекс можно использовать для изучения молекул и реакций в широком диапазоне условий, включая как стабильные частицы, так и соединения, которые трудно или невозможно наблюдать экспериментально, такие как короткоживущие промежуточные соединения и переходные структуры.

GaussView – это графический интерфейс пользователя, разработанный для использования с Gaussian, чтобы сделать вычисления проще, быстрее и эффективнее.

Gaussian способен предсказывать многие свойства атомов, молекул, реакционноспособных систем, например [31]:

- молекулярные энергии
- структуры
- вибрационные частоты
- электронные плотности

Методы расчета можно разделить на 4 основных типа: *ab initio*, функционала плотности, полуэмпирический, молекулярной механики и различных гибридных методов.

#### *Ab initio*

Этот метод расчета не требует экспериментальных данных и основан только на теоретических представлениях. Данный метод является наиболее популярным, не смотря на то, что расчеты занимают достаточно большое количество времени.

Хартри-Фок является базовой моделью *ab initio*. Данный метод представляет собой метод приближения для определения волновой функции и энергии системы многих квантовых тел в стационарном состоянии. Существует два способа вычисления молекулярных орбиталей с использованием Хартри-Фок: неограниченный и ограниченный [31]. Неограниченный использует отдельную орбиту для каждого электрона, даже если они спарены (используется для ионов, возбужденных состояний, радикалов и т. Д.) [31]. Ограниченный способ вычисления использует одну и ту же орбитальную пространственную функцию для электронов в одной и той же паре [31].

Основным недостатком метода Хартри-Фок является исключение электронной корреляции.

#### *Полуэмпирические методы*

Полуэмпирические методы используют определенное количество экспериментальных данных на протяжении всего расчета [31]. Например, длина связи определенного типа будет иметь фиксированное значение

независимо от системы. Это значительно ускоряет время вычисления, но не является достаточно точным. Обычно полуэмпирические методы используются для больших систем, поскольку они могут обрабатывать большие массивы данных.

#### *Функциональная теория плотности*

Данный метод представляет собой вычислительный квантово – механический метод моделирования используется в физике, химии и науке о материалах для изучения электронной структуры в системах многих тел, в частности, атомов, молекул и конденсированных фаз [31]. Используя эту теорию, свойство системы многих электронов можно определить с помощью электронной плотности. Функциональная теория плотности является одним из самых популярных и универсальных методов.

#### *Молекулярная механика*

Методы молекулярной механики используют алгебраическое уравнение для расчета энергии, а не волновую функцию или электронную плотность. Константы в уравнении получены из экспериментальных данных или других расчетов и хранятся в библиотеке данных. Комбинация констант и уравнений называется силовым полем [31]. Эти вычисления настолько просты, что не требуют расчетов в Gaussian09W.

Оптимизация геометрии – процесс нахождения конфигурации минимальной энергии молекулы. Процедура вычисляет волновую функцию и энергию в начальной геометрии, а затем переходит к поиску новой геометрии с более низкой энергией [31]. Это повторяется до тех пор, пока не будет найдена геометрия с самой низкой энергией. Процедура вычисляет силу для каждого атома путем оценки градиента энергии по атомным позициям [31].

Фактически, процесс оптимизации останавливается, когда выявлена стационарная точка, то есть точка, где силы на атомах равны нулю, и это может быть также переходной структурой.

## **2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ**

Целью данной работы является разработка математической модели прогнозирования низкотемпературных свойств дизельного топлива в зависимости от углеводородного состава и концентрации введенной присадки.

В качестве объекта исследования были выбраны шесть образцов дизельных и два образца газойлевых фракций. Различие, наблюдаемое в эксплуатационных свойствах дизельных фракций, связано с различным углеводородным составом, что обуславливает возможность их использования в качестве объектов исследования.

Для исследования углеводородного состава, физико-химических и эксплуатационных свойств дизельных фракций использовались следующие методы: хроматографии и хромато-масс-спектрометрии, методы определения молекулярной массы, фракционного состава, плотности, вязкости и содержания серы, низкотемпературных свойств.

### **2.1 Методы исследования физико-химических и эксплуатационных свойств дизельных фракций**

#### **2.1.1 Методика хроматографического выделения фракций парафино-нафтеновых, ароматических углеводородов и смол**

Разделение дизельного топлива на фракции парафино-нафтеновых, ароматических углеводородов и смол проводится методом жидкостно-адсорбционной хроматографии.

Для этого готовится колонка. Берется бюретка на 50 мл, в кончик бюретки помещается плотно кварцевая вата, около 2-3 см, затем засыпается оксид алюминия  $\approx 1$  см. Под колонку ставится круглодонная колба (слив). Силикагель засыпается в колонку объемом 45-48 см<sup>3</sup> и смачивается гексаном в объеме  $\approx 40$  мл.

После того, как вся проба впитается, проводят вымывание парафино – нафтеновых углеводородов гексаном в объеме, равном примерно объему, который полностью впитывает силикагель в колонке, плюс еще 15 мл. Проводят качественную реакцию на ароматические углеводороды. Для этого в фарфоровую чашу добавляют 6-8 капель концентрированной серной кислоты, затем 3-4 капли формалина и 2-3 капли парафино-нафтеновой фракции. При отсутствии ароматических углеводородов смесь остается бесцветной. Появление яркого красно-бурого окрашивания свидетельствует о наличии ароматических углеводородов в испытуемом продукте.

После обнаружения светло-розового окраса смеси, заменяется колба и проводится десорбция фракции ароматических углеводородов. Используемый растворитель – гексан – толуол в соотношении 3:1. Общий объем смеси составляет 100мл.

Далее проводится десорбция фракции смол смесью спирта с толуолом в соотношении 1:1. После того, как смолы опустятся на 2/3 колонки, заменяется колба. Общий объём смеси составляет 100мл.

После завершения процесса разделения дизельного топлива на фракции проводится отгонка растворителя на роторном испарителе. Для парафиновых фракций температура бани составляет 40-45 градусов, для смесей 50-55. Отгоняется растворитель до остатка в 3-5 мл, который переливается в заранее взвешенный пенициллиновый флакон. Стенки колб промываются тем же растворителем, которым выделяли фракцию. Флаконы помещаются в вытяжной сушильный шкаф до тех пор, пока весь растворитель не испарится. Далее они помещаются в сушильный шкаф для стабилизации при температуре 40 градусов на 2 часа. После того, как флаконы остынут, их взвешивают, и так доводят до постоянной массы, пока разница между двумя последующими взвешиваниями не будет 0,0004 г.

## **2.1.2 Исследование углеводородного состава дизельных фракций методом хромато-масс-спектрометрии**

Хромато-масс-спектрометрия представляет собой метод, включающий газовый хроматограф, соединенный с масс-спектрометром, с помощью которого сложные смеси химических веществ могут быть разделены, идентифицированы и количественно определены. Анализируемое вещество должно быть достаточно летучим и термически стабильным.

Раствор пробы впрыскивается во впускной канал хроматографа, где он испаряется и продувается газом-носителем (обычно гелием) в хроматографическую колонку. Образец протекает через колонку, и соединения, составляющие смесь, разделяются благодаря их взаимодействию с покрытием колонки (стационарная фаза) и газом-носителем (подвижная фаза). Далее соединения проходят через нагретую линию переноса и попадают источник ионов. Для получения спектра, молекулы компонентов пробы ионизируются, специальный датчик считывает изменение ионного тока, на основании чего записывается хроматограмма.

Существуют два потенциальных метода для производства ионов. Наиболее часто используемый метод – электронная ионизация, реже – химическая ионизация. Для электронной ионизации пучок электронов ионизирует молекулы образца, что приводит к потере одного электрона. Молекула с одним отсутствующим электроном называется молекулярным ионом и представляет собой катион радикал. Когда результирующий пик от этого иона виден в масс-спектре, он выдает молекулярную массу соединения. Из-за большого количества энергии, передаваемой молекулярному иону, он обычно фрагментируется, производя дополнительные меньшие ионы с характерным относительным содержанием. Это позволяет идентифицировать соединения и структуру неизвестных компонентов смеси.

Следующим компонентом является масс-анализатор (фильтр), который разделяет положительно заряженные ионы в соответствии с различными

характеристиками, связанными с массой, в зависимости от используемого анализатора. После разделения, ионы поступают в детектор, который усиливает выход сигнала. Детектор отправляет информацию на компьютер, который записывает все полученные данные, преобразует электрические импульсы в визуальные копии.

### **2.1.3 Метод определения низкотемпературных свойств**

#### **дизельного топлива**

##### **2.1.3.1 Описание прибора**

Определение низкотемпературных свойств проводилось на высокочастотном измерителе низкотемпературных показателей нефтепродуктов ИНПН "Кристалл".

ИНПН является аппаратом нового поколения и, в зависимости от модификации, предназначен для контроля качества топлив и моторных масел. Общим для всех модификаций прибора является криостат с охлаждением до температуры минус 60°C (дизтопливо и моторное масло) и до минус 70°C при анализе реактивных топлив. Прибор оснащен ЖК дисплеем, который отображает ход испытания в реальном времени. Корпус прибора эргономичен и не боится попадания любого нефтепродукта или растворителя.

Все модификации прибора ИНПН "Кристалл" комплектуются циркуляционным насосом для охлаждения встроенного криостата. Аппараты серии ИНПН полностью соответствуют стандарту качества – ISO 9001.

Низкотемпературные свойства дизельных топлив определяются лабораторным испытанием известным как «определение температуры кристаллизации». В ходе анализа пробу топлива охлаждают до тех пор, пока кристаллы парафинов не сформируются и не зарегистрируются системой оптического мониторинга.

Технические характеристики ИНПН представлены в таблице 2.1.

Таблица 2.1 – Технические характеристики ИНПН

№	Наименование параметра	Значение
1	Объем пробы, мл	2,5
2	Диапазон воспроизводимых температур в рабочем объеме, °С	от минус 60 до плюс 5
3	Дискретность показаний, °С	0,1
4	Пределы допускаемой основной погрешности, °С	± 3,0
5	Повторяемость (сходимость) результатов определения температуры помутнения (начала кристаллизации) и застывания, не более, °С	1
6	Воспроизводимость результатов определения температуры помутнения (начала кристаллизации) и застывания, не более, °С	3
7	Время паузы между последовательными измерениями, не менее, минут	5
8	Время охлаждения пробы топлива, не более, минут	40
9	Габариты, мм	240x240x140
10	Вес, кг	не более 3
11	Показатели безотказной работы: наработка на отказ, ч	не менее 1000

### 2.1.3.2 Методика определения низкотемпературных свойств

Подготовку пробы осуществляют в следующем порядке:

1. Перед заполнением пробирки веществом необходимо перемешать образец в бутылке встряхиванием;
2. Протереть внешние и внутренние стенки пробирки сухой чистой ветошью или фильтровальной бумагой;
3. Поместить образец в пробирку в объеме 2,5 мл, при этом проба должна иметь температуру в пределах от 18 до 25°С;
4. Добавить к образцу в пробирке депрессорную присадку с помощью дозатора в количестве 3 мкмл, хорошо перемешать;
5. Протереть снаружи фильтровальной бумагой и установить в криостат прибора;

6. Перед включением прибора пробу выдержать в криостате не менее 5 минут.

Принцип действия прибора при измерениях температуры помутнения и начала кристаллизации основан на методе измерений оптической проницаемости топлива при постепенном понижении температуры пробы.

Сущность метода состоит в регистрации амплитуды инфракрасного светового потока, излучаемого одним и принимаемым другим светодиодами, размещенными по разные стороны пробирки с пробой. Температура помутнения (начала кристаллизации) топлива определяется и фиксируется в момент уменьшения светового потока, то есть в момент начала помутнения пробы или в момент начала кристаллообразования в пробе.

В режиме измерений температуры застывания проба охлаждается до температуры ниже предполагаемой температуры застывания на 5-15 °С, далее на поверхность охлажденного образца автоматически опускается груз и прибор переходит в режим нагревания до тех пор, пока два светодиода не зафиксируют начало продвижения груза в пробе, и в этот момент при помощи датчика фиксируется температура застывания образца пробы.

## **4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ**

Активное освоение северных территорий для разработки, шельфовых месторождений, регионов Арктики, северных районов Красноярского края и Дальнего Востока требует увеличения доли производства дизельных топлив с улучшенными низкотемпературными свойствами. Около 80% территории России является холодной климатической зоной.

Актуальным вопросом считается создание присадки, улучшающей низкотемпературные свойства дизельных топлив, одновременно с этим не ухудшая его термическую стабильность. В связи с этим важно изучить оптимальное компаундирование компонентов топлива, рассмотреть присадки различного функционального назначения и возможность их смешения, установить их оптимальные концентрации.

Целью данной магистерской диссертации является разработка математической модели прогнозирования концентрации депрессорной присадки для улучшения низкотемпературных свойств в зависимости от углеводородного состава.

### **4.1 Предпроектный анализ**

#### **4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования**

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

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

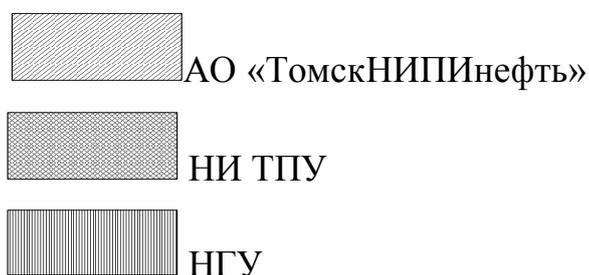
Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар.

Результатом данной работы является разработка математической модели в виде программного продукта, направленная на достижение низкотемпературных свойств топлива, заданных стандартом.

На рисунке 4.1 представлена карта сегментирования целевого рынка.

Потребитель	Вид услуги		
	Продажа программного продукта	Оказание услуг по исследованию и оптимизации	Продажа тренировочной версии
Крупные НПЗ			
Средние НПЗ			
Мелкие НПЗ			
Проектные организации			
Образовательные учреждения			

Рисунок 4.1 – Карта сегментирования целевого рынка



#### 4.1.2 Диаграмма Исикавы

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

Область применения диаграммы:

- Выявление причин возникновения проблемы;
- Анализ и структурирование процессов на предприятии;

– Оценка причинно-следственных связей.

Построение диаграммы начинают с формулировки проблемной области/темы, которая является объектом анализа и наносится на центральную горизонтальную стрелку диаграммы.

Часто, для выявления факторов, влияющих на объект анализа, используется прием 6М:

1. персонал (Manpower);
2. оборудование (Machine);
3. сырье, материалы, комплектующие (Material);
4. технология проведения работ (Method);
5. средства измерения и методы контроля (Measurement);
6. производственная среда (Media).

В приложении А представлена диаграмма Исикавы для математической модели улучшения низкотемпературных свойств дизельных топлив.

### **4.1.3 SWOT-анализ**

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Он проводится в несколько этапов.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде (табл.4.1).

Таблица 4.1 – Матрица SWOT

	<p><b>Сильные стороны проекта:</b></p> <p>С1. Потенциальная экономичность и ресурсоэффективность</p> <p>С2. Потенциальное улучшение качества дизельного топлива</p> <p>С3. Возможность ускорить разработку новых присадок</p> <p>С4. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки</p>	<p><b>Слабые стороны проекта:</b></p> <p>Сл1. Недостаточная точность проведения эксперимента</p> <p>Сл2. Неподтвержденность некоторых теоретических обоснований;</p> <p>Сл3. Приобретение необходимых экспериментальных данных по составу сырья и продукта с промышленной установки.</p>
<p><b>Возможности:</b></p> <p>В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт</p> <p>В3. Использование полученных данных предприятия нефтепереработки для оптимизации процесса производства дизельного топлива</p> <p>В4. Уменьшение значимости или достоинства конкурентных разработок</p>	<p>1. Разработка математической модели улучшения низкотемпературных свойств дизельных топлив с целью перехода к более совершенным технологиям, ресурсосбережению и соответствию требуемым стандартам</p> <p>2. Анализ углеводородного состава, влияния депрессора и межмолекулярных взаимодействий на низкотемпературные свойства</p>	<p>1. Ограниченность экспериментальных образцов с промышленной установки</p> <p>2. Ограниченность оборудования для проведения эксперимента</p>
<p><b>Угрозы:</b></p> <p>У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства</p> <p>У2. Развитая конкуренция</p> <p>У3. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции</p>	<p>1. Продвижение проекта с целью создания спроса</p> <p>2. Развитие конкурентной среды</p> <p>3. Введение в модель чувствительности к составу сырья</p>	<p>1. Необходимо дальнейшее уточнение разработанной модели</p> <p>2. Заключение договорённостей о поставках образцов дизельных фракций для анализа</p> <p>3. Дальнейший поиск теоретических законов и зависимостей, позволяющих повысить обоснованность модели</p>

После того как сформулированы четыре области SWOT переходят к реализации второго этапа, который состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта (табл.4.2). Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Каждый фактор помечается либо знаком «+» – сильное соответствие сильных сторон возможностям, либо знаком «-» – слабое соответствие; «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-».

Таблица 4.2 – Интерактивная матрица проекта

<b>Сильные стороны проекта</b>					
<b>Возможности проекта</b>		C1	C2	C3	C4
	B1	+	+	+	+
	B2	+	+	+	0
	B3	+	+	+	-
	B4	+	+	+	0
<b>Сильные стороны проекта</b>					
<b>Угрозы проекта</b>		C1	C2	C3	C4
	У1	-	-	-	0
	У2	+	+	+	+
	У3	-	+	+	-
<b>Слабые стороны проекта</b>					
<b>Возможности проекта</b>		Сл1	Сл2	Сл3	
	B1	-	-	-	
	B2	-	-	-	0
	B3	0	-	-	+
	B4	+	+	+	-
<b>Слабые стороны проекта</b>					
<b>Угрозы проекта</b>		Сл1	Сл2	Сл3	
	У1	-	+	-	
	У2	+	+	+	0
	У3	+	0	-	

В том случае, если две возможности сильно коррелируют с одними и теми же сильными сторонами, можно говорить об их единой природе.

Далее должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа, которая приводится в табл.4.3.

Таблица 4.3 – SWOT-анализ

	<b>Сильные стороны проекта:</b>	<b>Слабые стороны проекта:</b>
	<p>C1. Возможность проведения необходимых исследований без участия промышленной установки</p> <p>C2. Экономичность и ресурсоэффективность технологии</p> <p>C3. Более свежая информация, которая была использована для разработки проекта.</p> <p>C4. Актуальность промышленной технологии</p>	<p>Сл1. Недостаточная точность проведения эксперимента</p> <p>Сл2. Ограниченность экспериментальных данных с промышленной установки.</p> <p>Сл.3. Отсутствие бюджетного финансирования.</p>
<p><b>Возможности:</b></p> <p>V1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>V2. Появление дополнительного спроса на продукт</p> <p>V3. Уменьшение значимости или достоинства конкурентных разработок</p>	<p>Данные исследования направлены на разработку модели прогнозирования концентрации депрессорной присадки для достижения необходимых низкотемпературных свойств дизельных топлив (V1V3C1C2C3). Простота применения, адекватность разработки, использование более свежей информации в проекте увеличит спрос, конкурентоспособность (V1V2B4C1C2C3). Невысокая затратность исследования может привлечь больше исполнителей (V1C4).</p>	<p>Помощь специалистов и оборудования ТПУ в совершенствовании продукта (V1C1C2C3C4). Необходимо снизить конкурентоспособность подобных разработок и расширить использование данного проекта во многих компаниях (V2B4Cл1Cл2Cл3).</p>

<p><b>Угрозы:</b>                  У1. Отсутствие спроса на новые технологии                  У2. Развитая конкуренция                  У3. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции</p>	<p>Использование более новой информации, простота и адекватность математической модели позволяют повысить спрос и конкуренцию разработки, что уменьшает влияние финансирования (У1У2С1С2С3С4).                  Продвижение новой технологии с целью появления спроса на усовершенствованную модель(У2С1)</p>	<p>Отсутствие сертификации научной разработки, приведет к отсутствию спроса и конкуренции проекта (У1У2Сл1Сл2Сл3), а отсутствие финансирования приведет к невозможности получения сертификации (У3Сл3).</p>
---	---	---

#### 4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На какой бы стадии жизненного цикла не находилась научная разработка полезно оценить степень ее готовности к коммерциализации и выяснить уровень собственных знаний для ее проведения (или завершения). Для этого необходимо заполнить специальную форму, содержащую показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта (табл.4.4)

Таблица 4.4 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	3	3
	Определены отрасли и технологии для предложения на рынке	3	3

Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	2	3
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	4
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	3	3
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	2	3
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	2
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	2	2
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	4
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	2
Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	3	2
Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	2
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	5
Проработан механизм реализации научного проекта	5	5
<b>ИТОГО БАЛЛОВ</b>	49	49

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

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i, \quad (4.1)$$

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

Значение  $B_{\text{сум}}$  позволяет говорить о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации. Так, если значение  $B_{\text{сум}}$  получилось от 75 до 60, то такая разработка считается перспективной, а знания разработчика достаточными для успешной ее коммерциализации. Если от 59 до 45 – то перспективность выше среднего. Если от 44 до 30 – то перспективность средняя. Если от 29 до 15 – то перспективность ниже среднего. Если 14 и ниже – то перспективность крайне низкая.

Значение степени проработанности научного проекта  $B_{\text{сум}}=49$  и уровня имеющихся знаний у разработчика  $B_{\text{сум}}=49$  позволяет говорить о перспективности выше среднего готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации.

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

Для коммерциализации результатов проведенного научно – технического исследования наиболее целесообразно использовать следующие методы:

1. Торговля патентными лицензиями, т.е. передача третьим лицам права использования компьютерной моделирующей системы на лицензионной основе.
2. Инжиниринг, т.е. заключение договора с предприятием, на котором осуществляется улучшение характеристик дизельного топлива добавлением депрессорных присадок. На основании договора производство, как заказчик, предоставляет имеющиеся данные по составу дизельного топлива, видам депрессорных присадок и их концентрации. Научная группа исследователей, как консультант, предоставляет такие услуги, как: моделирование, оптимизация и прогнозирование улучшения низкотемпературных свойств на данной установке. После такого обмена, продукт улучшается, внедряется в предприятие и выходит на рынок. Это является одним из наиболее вероятным вариантом, так как предприятия организуют как свои научные центры, так сотрудничество с университетами, в которых проводятся исследования, способствующие улучшению работы установки.

## 4.2 Инициация проекта

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или новой фазы существующего. В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат научного проекта [23]. Данная информация закрепляется в Уставе проекта.

В таблице 4.5 перечислены заинтересованные стороны проекта.

Таблица 4.5 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Национальный исследовательский Томский политехнический университет	1. Освоение принципиально новой (для научной группы) области исследования и моделирования 2. Коммерческое продвижение проекта 3. Развитие и укрепление связей с отраслью промышленности (производственные компании, заводы) в области совместных научных разработок. 4. Публикации в известных литературных базах, журналах, книгах, известных для всех представителей научного сообщества
Научно-исследовательская группа	Разработка качественного, проработанного ПО и получение средств на его постоянное развитие и совершенствование
Представители промышленности (компании, заводы)	1. Получение проекта, способствующего оптимизации, энерго-и ресурсосбережению действующего производства 2. Развитие и укрепление связей с научным объединением (университет, кафедра) в области совместных научных разработок

Далее в таблице 4.6 представлены цели проекта и ожидаемые результаты.

Таблица 4.6 – Цели и результаты проекта

Цели проекта:	1. Разработка адекватной математической модели прогнозирования низкотемпературных свойств дизельного топлива в зависимости от концентрации присадки и группового состава дизельного топлива
---------------	---

	2.Создание программного продукта для установки производства дизельного топлива
Ожидаемые результаты проекта:	1.Возможность оптимизации и прогнозирования результатов установки производства дизельного топлива 2. Уменьшение количества вовлекаемой присадки
Критерии приемки результата проекта:	Адекватность полученной модели должна составлять не менее 95%
Требования к результату проекта:	1. Оценка адекватности модели должна показать, что абсолютная погрешность расчетов не превышает 5% 2. Моделирующая система должна производить расчеты оптимального количества вовлекаемой присадки, с целью получения продукта с низкотемпературными характеристиками, соответствующим требованиям стандартов 3. Моделирующая система должна оценивать степень влияния депрессорной присадки на низкотемпературные свойства и на износ двигателя, с целью подбора оптимального соотношения цетаноповышающей и депрессорной присадки

#### 4.2.1 Организационная структура проекта

Необходимо определить группу данного проекта, роль каждого участника, их функции и трудозатраты (табл. 4.7).

Таблица 4.7 – Рабочая группа проекта

№	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо- затраты, час (за 1 года)
1	Францина Е.В., НИТПУ, научный сотрудник ОХИ, к.т.н., директор научного центра	Руководитель проекта	Координирует деятельность участников/выполняе т отдельные работы по проекту	100
2	Майлин М.В., аспирант НИТПУ, сотрудник ОАО «ТомскНИПИнефть»	Исполнитель по проекту	Координирует деятельность участников/Выполняе т отдельные работы по проекту	700
3	Машнич В.В., магистрант	Исполнитель по проекту	Выполняет отдельные работы по проекту	600
4	Бердникова А.А., аспирант	Исполнитель по проекту	Выполняет отдельные работы по проекту	300
5	Маланина Вероника Анатольевна	Эксперт проекта	Консультирование	2

6	Скачкова Лариса Александровна	Эксперт проекта	Консультирование	2
7	Матвеевко Ирина Алексеевна	Эксперт проекта	Консультирование	2

#### 4.2.2 Ограничения и допущения проекта

В таблице 4.8 указаны основные действующие ограничения данного проекта по бюджету, срокам и прочим ограничениям.

Таблица 4.8 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/допущения
Бюджет проекта	1500000
Источник финансирования	ТПУ, грант Президента РФ грант РНФ
Сроки проекта:	20.05.2019 – 28.12.2019 13.10.2019 – 1.05.2020
Дата утверждения плана управления проектом	-
Дата завершения проекта	-

#### 4.3 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта. На рисунке представлена ИСР по созданию математической модели.



Рисунок 4.2 – Иерархическая структура работ проекта

### 4.3.1 Контрольные события проекта

В рамках данного раздела необходимо определить ключевые события проекта, определить их даты и результаты, которые должны быть получены по состоянию на эти даты.

Контрольные события проекта представлены в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Контрольные события проекта

№ п/п	Контрольное событие	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Определение направления планируемого исследования	20.09.2019	Задание по научной деятельности
2	Постановка цели и задач исследования	25.09.2019	Раздел «Цели и задачи» магистерской диссертации
3	Литературный обзор	17.10.2019-15.01.2020	Раздел магистерской диссертации
4	Разработка плана экспериментальных работ	20.09.2019	План работ
5	Проведение экспериментальных исследований	1.10.2019-10.04.2020	Экспериментальная часть магистерской диссертации
6	Построение математической модели	20.01.2020-20.04.2020	Экспериментальная часть магистерской диссертации
7	Обсуждение результатов	10.04.2020-25.04.2020	Экспериментальная часть магистерской диссертации
8	Оформление магистерской диссертации	15.04.2020-30.05.2020	Магистерская диссертация

### 4.3.2 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный и сетевой графики проекта.

Линейный график представляется в виде таблицы (табл. 4.10).

Таблица 4.10 – Календарный план проекта

Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Выбор направления исследования	3	20.09.2019	23.09.2019	Францина Е.В.
Изучение литературы, источников со схожей тематикой	150	17.10.2019	15.01.2020	Машнич В.В.
Расчет в программном комплексе Gaussian	30	20.09.2019	20.10.2019	Машнич В.В., Францина Е.В.
Исследование углеводородного состава	60	17.01.2020	17.03.2020	Машнич В.В.
Измерение НТ свойств	50	2.02.2020	20.03.2020	Машнич В.В.
Разработка математической модели	90	20.01.2020	20.04.2020	Майлин М.В., Машнич В.В., Францина Е.В.
Обработка всех результатов	15	10.04.2020	25.04.2020	Машнич В.В., Францина Е.В.

Оформление магистерской диссертации	45	15.04.2020	30.05.2020	Машнич В.В.
-------------------------------------	----	------------	------------	-------------

Диаграмма Ганта – это тип столбчатых диаграмм(гистограмм), который используется для иллюстрации календарного плана проекта, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

На основе табл. 4.10 построен календарный план-график (прил. Б) по длительности исполнения работ в рамках научно-исследовательского проекта с разбивкой по месяцам и декадам за период времени дипломирования.

#### 4.4 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям (табл.4.11-4.13).

Таблица 4.11 – Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Марка	Кол-во	Цена за единицу, руб	Сумма, руб
Блокнот	-	4 шт	40	160
Ручка	Erich Krause	10 шт	20	200
Картридж для принтера (ч/б)	Advantage Black	2 шт	1000	2000
Картридж для принтера (цв)	Advantage TriColour	1 шт	1500	1500
Бумага	SvetoCopy, A4	1 шт	400	400
Всего за материалы				4440
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				222
Итого по статье С <sub>м</sub>				4662

Таблица 4.12 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование  
для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб	Общая стоимость оборудования, тыс. руб
1	ПО Microsoft office	1	6000	6000
2	ПО Gaussian	1	50000	50000

Таблица 4.13 – Расчет основной заработной платы

№ п/п	Исполнитель по категориям	Трудоемкость, чел.-дн.	Зарплата, приходящаяся на один чел.-дн., тыс.руб.	Всего заработная плата по тарифу (окладам), тыс.руб.
1	Руководитель	30	1,5	45
2	Аспирант	100	0,72	72
3	Младший научный сотрудник	276	0,4	110,4
4	Магистрант	175	0,36	57,6
5	Магистрант	100	0,36	36

Статья расчета заработной платы включает в себя основную заработную плату работников и дополнительную.

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп} \quad (4.2)$$

где  $Z_{осн}$  – основная заработная плата, руб.;  $Z_{доп}$  – дополнительная заработная плата, руб.

В свою очередь основная заработная плата определяется как:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб} \quad (4.3)$$

где  $T_{раб}$  – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб.дн.;  $Z_{дн}$  – среднедневная заработная плата работника, руб.

Средняя заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_M \cdot M}{F_d} \quad (4.4)$$

где  $Z_M$  – месячный должностной оклад работника, руб.;  $M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года (при 24 днях  $M=11,2$  мес., при 48

днях  $M=20,4$  мес.);  $F_d$  – действительный годовой фонд рабочего времени персонала, раб.дн. (табл.).

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_M = Z_б \cdot (k_{np} + k_d) \cdot k_p \quad (4.4)$$

где  $Z_б$  – базовый оклад, руб.;  $k_{np}$  – приемлемый коэффициент;  $k_d$  – коэффициент доплат и надбавок;  $k_p$  – районный коэффициент.

Таблица 4.14 – Баланс рабочего времени за два года

Показатели рабочего времени	Руководитель	Аспирант	Магистрант	Младший научный сотрудник
Календарное число дней	730	730	730	730
Количество нерабочих дней				
- выходные дни	101	146	101	101
- праздничные дни	14	14	14	14
Потери рабочего времени				
- отпуск	48	48	48	48
- невыходы по болезни	3	4	5	4
Действительный годовой фонд рабочего времени (за два года)	564	566	562	563

Размер заработной платы научных сотрудников НИ ТПУ определяется в соответствии с Приказом об оплате труда профессорско-преподавательского состава, надбавок и районного коэффициента (табл.4.15).

Таблица 4.15 – Расчет основной заработной платы

Исполнитель	$Z_б$ , руб.	$k_p$	$Z_M$ , руб.	$Z_{дн}$ , руб.	$T_{раб}$ , раб. дн.	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель	36 800	1,3	47 840	885,3	564	499 309
Аспирант	7 921	1,3	10 297	216,8	566	122 709
Магистрант	7 904	1,3	10 275	190,1	562	106 836
Младший научный сотрудник	7 904	1,3	10 275	190,1	563	107 026

Дополнительная заработная плата рассчитывается в размере 12% от основной заработной платы в качестве выплат за отпуска, выслугу лет, общественные работы и т.д.

$$Z_{доп} = Z_{осн} \cdot k_{доп} \quad (4.5)$$

где  $k_{\text{доп}}$  – коэффициент дополнительной зарплаты.

Таблица 4.16 – Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Аспирант	Младший научный сотрудник	Магистрант
Основная зарплата	499 309	122 708	107 026	106 836
Дополнительная зарплата	59 917	14 724	12 843	12 820
Итого по статье $C_{\text{зп}}$	559 226	137 433	119 869	119 656

В соответствии с ст.419 НК РФ сумма отчислений в Пенсионный Фонд, медицинское и социальное страхование составляет 30,2% от размера заработной платы. Сумма данного налога составит 282728 руб.

Сумма расходов на научные и производственные командировки составляет 10% от суммы основной и дополнительной заработной платы всего персонала, занятого на выполнении проекта. Эта сумма составит 93618 руб.

При группировании бюджета в статье «Основная заработная плата» необходимо учесть долю участия каждого работника проекта. Тогда общая заработная плата будет рассчитываться как:

$$Z_{\text{осн}} = \sum_{i=1}^n x_i \cdot Z_{\text{осн}i} \quad (4.6)$$

где  $x_i$  – доля участия в работе каждого человека;  $Z_{\text{осн}i}$  – заработная плата каждого работника.

Степень участия для каждого работника соответствует: для руководителя 1 – 0,4; аспиранта - 0,07; младшего научного сотрудника – 0,07; магистранта 1 – 0,04.

Итоговая группировка бюджета научного исследования представлена в таблице 4.17.

Таблица 4.17 – Группировка затрат проекта по статьям

Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	4 662
Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	56 000

Основная заработная плата	835 879
Дополнительная заработная плата	100 304
Отчисления на социальные нужды	282 728
Научные и производственные командировки	93 618
Итого плановая себестоимость, руб	1373191

Таким образом, бюджет научного исследования с учетом всех приведенных пунктов составит 1 373 191 руб.

#### 4.5 Организационная структура проекта

В практике используется несколько базовых вариантов организационных структур проектов: функциональная, проектная, матричная.

Выполнение данного исследования можно представить в виде проектной организационной структуры. Проектная организационная структура представлена на рисунке 4.3.

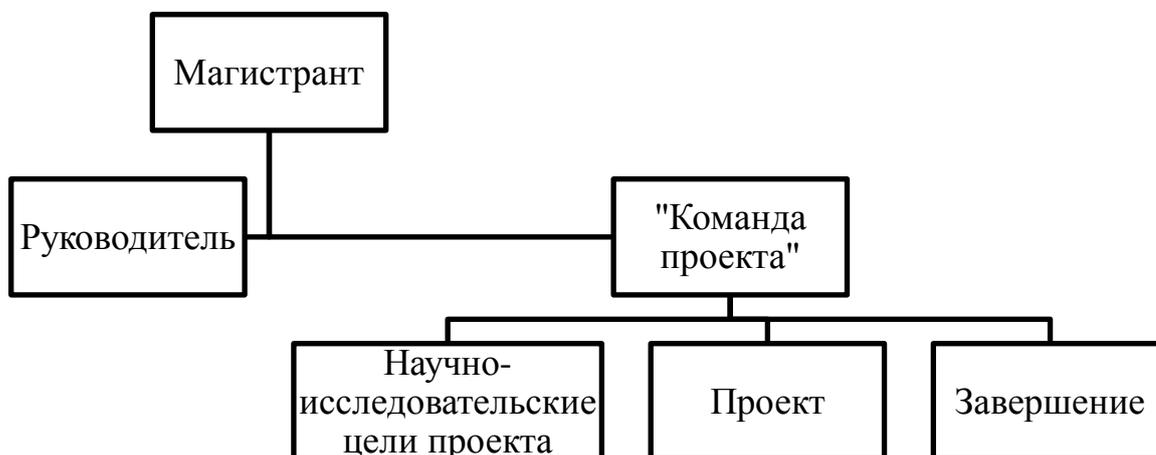


Рисунок 4.3 – Проектная структура проекта

## 4.6 Матрица ответственности

С целью распределения ответственности между участниками проекта сформирована матрица ответственности представленная в таблице 4.18.

Степень участия в проекте может характеризоваться следующим образом:

- Ответственный (О) – лицо, отвечающее за реализацию этапа проекта и контролирующее его ход.
- Исполнитель (И) – лицо (лица), выполняющие работы в рамках этапа проекта.
- Утверждающее лицо (У) – лицо, осуществляющее утверждение результатов этапа проекта (если этап предусматривает утверждение).
- Согласующее лицо (С) – лицо, осуществляющее анализ результатов проекта и участвующее в принятии решения о соответствии результатов этапа требованиям.

Таблица 4.18 – Матрица ответственности

Этапы проекта	Руководитель	Магистрант
Выбор направления исследования	У	О
Согласование плана диссертации	С	О
Литературный обзор	У	И
Расчет в программном комплексе Gaussian	С	И
Исследование углеводородного состава	С	И
Измерение низкотемпературных свойств	С	И
Разработка математической модели	С	О
Обработка всех результатов	С	И
Оформление магистерской диссертации	С	О

## 4.7 Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать

последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты. Риски проекта приведены в Таблице 4.19.

Таблица 4.19 – Риски проекта

№	1	2
Риск	Погрешность измерений	Неточность модели
Потенциальное воздействие	Неточность прибора, человеческий фактор	Погрешность расчетов
Вероятность наступления (1-5)	2-3	3-4
Влияние риска (1-5)	5	5
Уровень риска	Высокий	Высокий
Способы смягчения риска	Проверка работы прибора и хода измерений	Доработка модели, проверка данных
Условия наступления	Выход прибора из строя, невнимательность	Недостаток экспериментальных данных

#### **4.8 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.**

##### **Оценка сравнительной эффективности исследования**

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

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования (см. табл. 22). Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (4.7)$$

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

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

$\Phi_{\text{max}}$  – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Данный научный проект может быть выполнен в нескольких вариантах. Бюджет одного аналога проекта может быть увеличен за счет применения более совершенного программного обеспечения и объектно-ориентированного языка программирования. Тогда бюджет проекта составит 1800000 рублей.

Бюджет второго варианта исполнения проекта можно уменьшить за счет сокращения количества участников проекта, например, одного аспиранта и двух магистрантов. Таким образом, бюджет проекта снизится до 1250000 рублей. Максимальная стоимость проекта с учетом новейшего программного обеспечения и дополнительного экспертного персонала с производства может составить 1500000 рублей.

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (4.8)$$

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

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

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

$n$  – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы (табл. 4.20).

Таблица 4.20 – Сравнительная оценка характеристик вариантов  
исполнения проекта

Критерии / Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
1. Способствует ресурсосбережению	0,2	5	4	3
2. Удобство в эксплуатации	0,1	5	3	4
3. Простота использования	0,15	5	4	3
4. Адекватность получаемых результатов	0,2	4	5	3
5. Чувствительность к УВ составу сырья	0,2	5	4	5
6. Минимальная погрешность	0,15	3	2	3
<b>ИТОГО</b>	<b>1</b>	<b>27</b>	<b>22</b>	<b>21</b>

Исполнение 1 – текущий проект, исполнение 2,3 – аналог 1 и 2 соответственно.

$$I_m^P = 4,5$$

$$I_1^A = 3,80$$

$$I_2^A = 3,50$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ( $I_{исп.i}$ ) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле [25]:

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

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

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}} \quad (4.9)$$

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p} = \frac{4,5}{0,83} = 5,42$$

$$I_{\text{финр}}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_{\phi}^{a1}} = \frac{3,8}{1} = 3,80$$

$$I_{\text{финр}}^{a2} = \frac{I_m^{a2}}{I_{\phi}^{a2}} = \frac{3,50}{0,69} = 5,07$$

Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^{a1}} = \frac{5,42}{5,42} = 1$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^{a2}} = \frac{3,8}{5,42} = 0,7$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^{a2}} = \frac{5,07}{5,42} = 0,94$$

где  $\mathcal{E}_{\text{ср}}$  – сравнительная эффективность проекта;  $I_{\text{мэп}}$  – интегральный показатель разработки;  $I_{\text{мэа}}$  – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 4.21 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,83	1	0,69
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,5	3,80	3,5
3	Интегральный показатель эффективности	5,42	3,80	5,07
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,7	0,94

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило определить, что существующий вариант решения поставленной в данной работе технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является наиболее приемлемым.

## **5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ**

Во всем мире прослеживается устойчивая тенденция к увеличению потребления дизельного топлива, что приводит к ужесточению требований качества, в том числе по низкотемпературным свойствам. В процессе исследований проводились испытания влияния концентрации депрессорной присадки на основные эксплуатационные характеристики различных образцов дизельного топлива, а также разработана математическая модель зависимости низкотемпературных свойств от концентрации присадки с учетом углеводородного состава дизельного топлива.

Часть экспериментальной работы проводилась в лаборатории в 129 аудитории 2-го корпуса ТПУ. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, кондиционирования воздуха. Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного. Рабочее место – стационарное, представляет собой вытяжной шкаф с системой подвода воды, оборудованный штативами и измерителем низкотемпературных свойств, а также зоной хранения взрывоопасных веществ.

### **5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

Согласно статье 212 ТК РФ, обязанности по обеспечению безопасных условий и охраны труда возлагаются на работодателя.

Работодатель обязан обеспечить:

- безопасность работников при эксплуатации зданий, сооружений, оборудования, осуществлении технологических процессов, а также применяемых в производстве инструментов, сырья и материалов;
- создание и функционирование системы управления охраной труда;

- наличие комплекта нормативных правовых актов, содержащих требования охраны труда в соответствии со спецификой своей деятельности;
- применение прошедших обязательную сертификацию или декларирование соответствия в установленном законодательством Российской Федерации о техническом регулировании порядке средств индивидуальной и коллективной защиты работников;
- соответствующие требованиям охраны труда условия труда на каждом рабочем месте;
- режим труда и отдыха работников в соответствии с трудовым законодательством и иными нормативными правовыми актами, содержащими нормы трудового права;
- обучение безопасным методам и приемам выполнения работ и оказанию первой помощи пострадавшим, проведение инструктажа по охране труда, стажировки на рабочем месте и проверки знания требований охраны труда;
- организацию контроля за состоянием условий труда на рабочих местах, а также за правильностью применения работниками средств индивидуальной и коллективной защиты;
- информирование работников об условиях и охране труда на рабочих местах, о риске повреждения здоровья, предоставляемых им гарантиях, полагающихся им компенсациях и средствах индивидуальной защиты;
- принятие мер по предотвращению аварийных ситуаций, сохранению жизни и здоровья работников при возникновении таких ситуаций, в том числе по оказанию пострадавшим первой помощи;
- ознакомление работников с требованиями охраны труда.

При работе в лабораторных условиях необходимо соблюдать правила ПНД Ф 12.13.1-03. В данных методических рекомендациях изложены

основные правила безопасной работы в химической лаборатории, включая правила пожарной и электробезопасности, правила хранения и безопасной работы с химическими реактивами, правила работы в гидробиологическом отделе, а также способы оказания первой помощи при несчастных случаях.

Согласно данным методическим рекомендациям:

1. На работу в химико-аналитические лаборатории принимаются лица не моложе 18 лет, прошедшие медицинское освидетельствование для решения вопроса о возможности работы в лаборатории.
2. Вновь поступающие на работу допускаются к исполнению своих обязанностей только после прохождения вводного инструктажа о соблюдении мер безопасности, инструктажа на рабочем месте и после собеседования по вопросам техники безопасности.
3. Периодический инструктаж должен проводиться на рабочем месте дважды в год.
4. Распоряжением по лаборатории в каждом рабочем помещении назначаются ответственные за соблюдением правил техники безопасности, правильное хранение легковоспламеняющихся, взрывоопасных и ядовитых веществ, санитарное состояние помещений, обеспеченность средствами индивидуальной защиты и аптечками первой помощи с необходимым набором медикаментов.
5. Все работающие в лаборатории должны быть обеспечены необходимой спецодеждой и средствами индивидуальной защиты.

## 5.2 Производственная безопасность

В таблице 5.1 представлены возможные опасные и вредные факторы.

Таблица 5.1 – Опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
1. Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

Продолжение таблицы 5.1

2. Превышение уровня шума	+	+	+	СН 2.2.4/2.1.8.562–96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки.
3. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий.
4. Поражение электрическим током	+	+	+	ГОСТ 12.1.019-2017 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
5. Возникновение пожара	+	+	+	ГОСТ 12.1.010-76 ССБТ. Взрывобезопасность. Общие требования.
6. Воздействие химических веществ	+	+	+	ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.

### 5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

#### *Отклонение показателей микроклимата*

Оптимальные микроклиматические условия установлены по критериям оптимального теплового и функционального состояния человека. Они обеспечивают общее и локальное ощущение теплового комфорта в течение 8-часовой рабочей смены при минимальном напряжении механизмов терморегуляции, не вызывают отклонений в состоянии здоровья, создают предпосылки для высокого уровня работоспособности и являются предпочтительными на рабочих местах.

Оптимальные величины показателей микроклимата на рабочих местах производственных помещений приведены в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Оптимальные показатели микроклимата помещений

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до 139)	22-24	21-25	60-40	0,1
Тёплый	Ia (до 139)	23-25	22-26	60-40	0,1

Для поддержания температуры и относительной влажности в производственной лаборатории используют:

- приточно-вытяжную вентиляцию;
- систему кондиционирования;
- центральное отопление.

Для контроля температуры и относительной влажности в производственной лаборатории используют гигрометр психрометрический или электронный прибор определения температуры и относительной влажности, например, термогигрометр.

### ***Повышенный уровень шума***

На здоровье и самочувствии человека отрицательно оказывает длительное воздействие шума, которое не только снижает остроту слуха, но и расшатывает центральную нервную систему, нарушает деятельность сердечно-сосудистой системы и ухудшает зрение, координацию движений. Аналогичные функциональные расстройства вызывает и вибрация.

В лаборатории выполняются измерительные и аналитические работы, требующие сосредоточенности при которых допустимый уровень шума согласно СН 2.2.4/2.1.8.562–96. «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки.» составляет 60 дБА.

Нормирование уровней вибрации на рабочих местах составляет 13-2 мм/с (108-92 дБ).

### ***Недостаточная освещенность рабочей зоны***

Свет играет важную роль в сохранении здоровья и высокой работоспособности человека. Поэтому одним из главных условий в лаборатории является правильно выполненная система освещения, которая играет существенную роль в уменьшении опасности многих факторов, создает нормальные условия работы, повышает общую работоспособность, производительность, обеспечивает безопасность труда. При недостаточном и

неправильном освещении приходится напрягать зрение, работа замедляется, возникают ошибки в действиях, рост травматизма, наступает быстрое утомление.

В лаборатории применяется естественное и искусственное освещение. Нормируется освещенность на рабочих местах в лаборатории по СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий». Нормативы естественной и искусственной освещенности приведены в таблице 5.3.

Таблица 5.3 – Параметры естественной и искусственной освещенности

Помещение	Естественное освещение, %		Совмещенное освещение		Искусственное освещение, лк		
	При верхнем или комбинированном освещении	При боковом освещении	При верхнем или комбинированном освещении	При боковом освещении	При комбинированном освещении	При общем освещении	Показатель дискомфорта, М, не более
Лаборатории	3,5	1,2	2,1	0,7	500	400	40

В дневное время помещение лаборатории освещается через оконные проемы. Большое значение для естественного освещения имеют чистота и характер окраски стен и потолка помещения. При недостаточном естественном освещении или в темное время суток применяется искусственное освещение, которое осуществляется с помощью электрических источников света.

### ***Электробезопасность***

При эксплуатации и ремонте электрического оборудования и сетей человек может оказаться в зоне действия электромагнитного поля или непосредственно соприкоснуться с находящимися под напряжением проводниками электрического тока. В этом случае ток проходит по телу человека, в результате чего может произойти нарушение жизненных

функций (потеря сознания, остановка дыхания или прекращение работы сердца). Одной из особенностей поражения электрическим током является отсутствие внешних признаков грозящей опасности, которые человек мог бы заблаговременно обнаружить с помощью органов чувств: увидеть, услышать, обонять и т.д.

Электрический ток, проходя через тело человека, оказывает биологическое, тепловое, механическое или химическое воздействие. Биологическое воздействие заключается в способности тока раздражать и возбуждать живые ткани организма, тепловое – в его способности вызывать ожоги, механическое – приводить к разрыву тканей, а химическое – к электролизу крови.

С целью предотвращения поражения людей электрическим током в лаборатории соблюдаются следующие меры безопасности: полная изоляция всех токоведущих элементов, исправность защитных устройств.

В лаборатории предусмотрены инструкции по безопасной эксплуатации электрооборудования. При эксплуатации электроприборов и аппаратов необходимо строго руководствоваться правилами, изложенными в техническом паспорте. Приборы в лаборатории заземлены, если этого требует инструкция по их эксплуатации. Ежемесячно проверяется исправность электроприборов. Особое внимание уделяется круглосуточно работающим электроприборам. При нарушении работы электроприбора (запах, выделение дыма, изменение характера шума и т.д.) прибор отключают от сети и не используют до проверки и проведения необходимого ремонта.

Работы в лабораториях проводятся при наличии исправного и заземленного электрооборудования. Все неисправности электрооборудования и электросети устраняют специально обученные и имеющие специальный допуск персонал.

Согласно ГОСТ 12.1.019-2017 «ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты», для обеспечения защиты от

случайного прикосновения к токоведущим частям необходимо применять следующие способы и средства:

- защитные оболочки;
- защитные ограждения (временные или стационарные);
- безопасное расположение токоведущих частей;
- изоляцию токоведущих частей (рабочую, дополнительную, усиленную, двойную);
- изоляцию рабочего места;
- малое напряжение;
- защитное отключение;
- предупредительную сигнализацию, блокировку, знаки безопасности.

Для обеспечения защиты от поражения электрическим током при прикосновении к металлическим нетоковедущим частям, которые могут оказаться под напряжением в результате повреждения изоляции, применяют следующие способы:

- защитное заземление;
- зануление;
- выравнивание потенциала;
- систему защитных проводов;
- защитное отключение;
- изоляцию нетоковедущих частей;
- электрическое разделение сети;
- малое напряжение;
- контроль изоляции;
- компенсация токов замыкания на землю;
- средства индивидуальной защиты.

Технические способы и средства применяют отдельно или в сочетании друг с другом так, чтобы обеспечивалась оптимальная защита.

## ***Пожаровзрывобезопасность***

Лаборатория должна быть оснащена пожарными кранами (не менее одного на этаж) с пожарными рукавами. В каждом рабочем помещении должны быть в наличии огнетушители и песок, а в помещениях с огнеопасными и легковоспламеняющимися веществами - дополнительные средства пожаротушения.

В помещении на видном месте должен быть вывешен план эвакуации сотрудников в случае возникновения пожара.

Все сотрудники должны быть обучены правилам обращения с огне- и взрывоопасными веществами, газовыми приборами, а также должны уметь обращаться с противогазом, огнетушителем и другими средствами пожаротушения, имеющимися в лаборатории.

В помещениях с компьютерами и в непосредственной близости от них (в коридорах, под лестницами) запрещается хранить горючие материалы и устанавливать предметы, загромождающие проходы и доступ к средствам пожаротушения, использовать нагревательные приборы.

Курить разрешается только в отведенном и оборудованном для этой цели месте.

Каждый сотрудник, заметивший пожар, задымление или другие признаки пожара обязан:

- немедленно вызвать пожарную часть по телефону;
- принять меры по ограничению распространения огня и ликвидации пожара;
- поставить в известность преподавателя, который в свою очередь должен известить сотрудников, принять меры к их эвакуации и ликвидации пожара.

Для ликвидации небольших очагов пожара на территории объекта имеются первичные средства тушения пожара – огнетушители, ящики с песком, асбестовые одеяла (кошмы).

### ***Воздействие химических веществ***

К химическим опасным и вредным факторам относится действие химических веществ: токсическое, раздражающее, канцерогенное, мутагенное. Воздействие на человека может происходить 3 путями: через дыхательные пути, пищеварительную систему и кожный покров.

Для снижения риска химического воздействия в лаборатории разрешается работать только в полагающейся для каждого вида работ спецодежде. Для исключения возможного внесения в организм вредных и ядовитых веществ в лаборатории запрещается хранить и принимать пищу, как и использовать лабораторную посуду в этих целях, а также курить.

При работе с химическими реактивами в воздух поступают пары, газ или пыль, которые могут обладать ядовитыми или раздражающими свойствами. При накоплении в воздухе таких веществ могут возникнуть острые отравления. Для исключения загазованности и возможного отравления опасные химические эксперименты необходимо вести при включенной приточно-вытяжной вентиляции или в вытяжном шкафу.

Согласно ГОСТ 12.1.007-76 «ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности», в рабочих помещениях допускается хранить нелетучие, непожароопасные и малотоксичные твердые вещества и водные растворы, разбавленные кислоты и щелочи, в количествах, необходимых для анализов.

Концентрированные кислоты в объеме не более 2 дм<sup>3</sup> хранятся в стеклянной посуде с притертыми стеклянными крышками или пластмассовыми пробками в эксикаторе или стеклянной емкости с крышкой в вытяжном шкафу. Для лучшей герметичности надевают резиновые колпачки.

Концентрированные растворы щелочей хранят в вытяжном шкафу, отдельно от кислот, в полиэтиленовой таре. Вместе с щелочами хранится аммиак.

Хранение легковоспламеняющихся жидкостей (ЛВЖ) допускается в толстостенных, снабженных герметичными пробками бутылках, вместимостью не более 1 дм<sup>3</sup>, особо опасные ЛВЖ - в объеме не более суточной потребности. Бутылки с ЛВЖ помещают в специальные металлические ящики вдали от источников тепла и окислителей (хлоратов, нитратов, азотной кислоты, перекиси водорода, перманганатов).

### **5.2.2 Обоснование мероприятий по снижению уровней воздействия опасных и вредных факторов на исследователя**

#### ***Отклонение показателей микроклимата***

Для того чтобы создать необходимые микроклиматические условия рабочей зоны и предотвратить различные переохлаждения и перегревания организма в небольших помещениях устанавливают кондиционеры. С помощью кондиционирования воздуха в закрытых помещениях можно поддерживать необходимую температуру, а также скорость движения воздуха. Также, для поддержания необходимых климатических условий необходимо регулярно проветривать помещение.

#### ***Повышенный уровень шума***

Основными мерами борьбы с шумом и вибрацией в лаборатории является их ослабление или ликвидация непосредственно в источнике их образования. Это достигается своевременной смазкой, ремонтом и балансировкой оборудования лабораторий.

#### ***Недостаточная освещенность рабочей зоны***

Мероприятия по обеспечению нормативных уровней освещенности в установках внутреннего освещения в большинстве случаев сводятся к:

- установке более мощных ламп в светильник;
- установке дополнительного количества светильников;

- установке дополнительного светильника для местного освещения рабочей поверхности;
- использования маломощных и более эффективных люминесцентных ламп.

В дневное время помещение лаборатории освещается через оконные проемы, поэтому регулярная чистка окон является необходимым для обеспечения требуемой освещенности.

### ***Электробезопасность***

Для обеспечения защиты от поражения электрическим током необходимо применять следующие способы и средства:

- безопасное расположение токоведущих частей;
- изоляцию токоведущих частей (рабочую, дополнительную, усиленную, двойную);
- малое напряжение;
- предупредительную сигнализацию.

Для обеспечения защиты от поражения электрическим током при прикосновении к металлическим нетоковедущим частям, которые могут оказаться под напряжением в результате повреждения изоляции, применяют следующие способы:

- система защитных проводов;
- электрическое разделение сети;
- контроль изоляции;
- компенсация токов замыкания на землю.

### ***Воздействие химических веществ***

При работе в химической лаборатории необходимо соблюдать требования техники безопасности по ГОСТ 12.1.007-76 «Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности».

1. При работе с химическими реактивами в лаборатории должно находиться не менее двух сотрудников.
2. Приступая к работе, сотрудники обязаны осмотреть и привести в порядок свое рабочее место, освободить его от ненужных для работы предметов.
3. Перед работой необходимо проверить исправность оборудования, рубильников, наличие заземления и пр.
4. Работа с едкими и ядовитыми веществами, а также с органическими растворителями проводится только в вытяжных шкафах.
5. Запрещается набирать реактивы в пипетки ртом, для этой цели следует использовать резиновую грушу или другие устройства.
6. При определении запаха химических веществ следует нюхать осторожно, направляя к себе пары или газы движением руки.
7. Работы, при которых возможно повышение давления, перегрев стеклянного прибора или его поломка с разбрызгиванием горячих или едких продуктов, также выполняются в вытяжных шкафах. Работающий должен надеть защитные очки (маску), перчатки и фартук.
8. При работах в вытяжном шкафу створки шкафа следует поднимать на высоту не более 20 – 30 см так, чтобы в шкафу находились только руки, а наблюдение за ходом процесса вести через стекла шкафа.
9. При работе с химическими реактивами необходимо включать и выключать вытяжную вентиляцию не менее чем за 30 минут до начала, и после окончания работ.
10. Смешивание или разбавление химических веществ, сопровождающееся выделением тепла, следует проводить в термостойкой или фарфоровой посуде.

## **5.3 Экологическая безопасность**

### **5.3.1 Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду**

Объектом исследования в данной работе является дизельное топливо. Рассмотрим, воздействие на компоненты окружающей среды производственных объектов, в частности установки гидроочистки дизельного топлива.

Основными вредными газовыми выделениями на установке являются углеводородные газы, пары дизельного топлива, бензина, моноэтаноламина, сероводород, сернистый ангидрид и окислы азота. Основными источниками выбросов углеводородных газов, сероводорода, паров дизельного топлива, бензина и моноэтаноламина в атмосферу являются: технологические аппараты, компрессор, насос, запорная арматура, предохранительные клапаны. Как правило, такие пары и газы выделяются при нарушении герметичности технологических аппаратов и трубопроводов, пропуска сальниковых уплотнений на вентилях и задвижках, пропусках торцовых уплотнений насосов, выбросах из предохранительных клапанов, отборе проб, случайных пролив и испарений жидких нефтепродуктов.

Для исключения или уменьшения выбросов вредных паров и газов необходимо:

- не допускать пропусков нефтепродуктов и реагентов через фланцевые соединения аппаратов и трубопроводов, торцовые уплотнения насосов, сальниковые уплотнения вентилях и задвижек. Немедленно производить устранение пропусков нефтепродуктов и реагентов при их появлении
- не допускать повышение давления в аппаратах выше допустимого технологической картой
- следить за правильным режимом горения форсунки печи
- своевременно убирать разливы нефтепродуктов и реагентов

– не допускать работы установки с неисправными предохранительными клапанами

– не производить никаких сбросов на факел, кроме, предусмотренных проектом

Основное количество расходуемой на установке воды идет на производственные нужды, из них 90 - 95% на охлаждение насосно-компрессорного оборудования и продуктов в холодильниках водяного охлаждения. На установке применено обратное водоснабжение, то есть нагретая на установке обратная вода поступает на градирни блока обратного водоснабжения, где охлаждается и вновь поступает на установку.

Для поддержания высокого качества обратной воды обслуживающий персонал должен постоянно следить за работой холодильников, не допускать попадание нефтепродуктов в воду через неисправные трубки трубных пучков.

Стоки от промывки полов, площадок установки, от охлаждения насосов, атмосферные осадки сбрасываются в систему производственно-ливневой канализации.

На заводе создан замкнутый цикл водоснабжения и канализации и полностью исключён сброс сточных вод в водоем, поэтому для нормальной работы очистных сооружений, для сокращения потерь нефтепродуктов, уменьшения загрязнения атмосферы парами нефтепродуктов после их испарения на прудах – испарителях, массовая концентрация нефтепродуктов в сточных водах производственно-ливневой канализации на выходе из установки не должна превышать 300 мг/дм<sup>3</sup>.

### **5.3.2 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды**

Основными средствами защиты природной среды от вредных воздействий является применение строгого соблюдения технологического

регламента, герметизации оборудования, технологическая дисциплина, применение эффективных уплотнений для насосов и фланцевых соединений.

Объемы выбросов загрязняющих веществ в атмосферу не должны превышать ПДВ, установленные для предприятия на текущий период.

В таблице 5.4 приведены образующиеся в производстве сточные воды и способы их утилизации.

Таблица 5.4 – Сточные воды и способ их утилизации

Наименование стока	Объем сточных вод (м <sup>3</sup> /час)	Способ утилизации	Периодичность выбросов	Место сброса	Установленная норма содержания загрязнений в стоках (мг/л)
Вода от мытья полов, промывки лотков и охлаждения сальников насосов	5,0	Направляются на очистные сооружения	Постоянно	В систему промливневой канализации	Содержание нефтепродукто в не более 500 мг/л
Вода от промывки и пропарки аппаратов	10,0	Направляются на очистные сооружения	1 раз в 2 года	В систему промливневой канализации	Содержание нефтепродукто в не более 500 мг/л
Подтоварная вода	1,0	Направляются на очистные сооружения	Постоянно	В систему промливневой канализации	Содержание нефтепродукто в не более 500 мг/л

В таблице 5.5 приведены отходы и способы их утилизации и переработки.

Таблица 5.5 – Отходы производства

Наименование отхода	Место складирования	Периодичность образования	Способ утилизации
Отработанный катализатор	Выгружается в металлические бочки и отправляется в цех складирования	Не более 1 раза в 5 лет	Направляется на переработку на лицензированное предприятие

## 5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Наиболее вероятной чрезвычайной ситуацией в лаборатории может быть пожар.

Для организаций, оснащенных вычислительной техникой, наиболее частые причины возникновения пожаров – причины электрического характера:

- короткие замыкания, перегрузки, искрения от нарушения изоляции, что приводит к нагреванию проводников до температуры воспламенения изоляции;
- электрическая дуга, возникающая между контактами коммутационных аппаратов, не предназначенных для отключения больших токов нагрузки;
- неудовлетворительные контакты в местах соединения проводов и их сильный нагрев вследствие большого переходного сопротивления при протекании электрического тока;
- искрение в электрических аппаратах и машинах, а также искрение в результате электростатических разрядов и ударов молнии;
- неисправность (замыкания) в обмотках электрических машин при отсутствии надлежащей защиты.

В связи с большой пожароопасностью необходимо применять профилактические меры. Пожарная профилактика при эксплуатации электронных приборов и устройств заключается в следующих мероприятиях:

- поддержания сопротивления изоляции токоведущих частей не ниже величин, регламентированных правилами техники безопасности;
- защите изоляции от теплового, механического и агрессивного воздействия окружающей среды посредством прокладки проводов в трубах, исключении повреждения изоляции проводов и кабелей от вибрации, тряски и при движении;

- защита открытых токоведущих частей (ограждениями) от попадания на них посторонних предметов;
- устройство механических и электрических блокировок для исключения ошибочных действий при выполнении оперативных переключений.

Для предотвращения пожаров должны строго соблюдаться правила пожарной безопасности представленных в пункте 5.2.1.

На рисунке 5.1 представлен план эвакуации производственного помещения с указанием средств противопожарной защиты.



Рисунок 5.1 – План эвакуации производственного помещения с указанием средств противопожарной защиты

Для ликвидации начинающихся очагов пожара силами персонала помещения должны быть обеспечены по действующим нормам первичными средствами пожаротушения, пожарным ручным инструментом и пожарным инвентарем. Для тушения электроустановок под напряжением до 1 кВ необходимо применять углекислотные (ОУ-2, ОУ-5, ОУ-8), углекислотно-бромэтиловые огнетушители (ОУБ-3, ОУБ-7) или порошковые огнетушители (ОП-3, ОП -5), так как струя не электропроводна.

Необходимо оборудовать помещения охранно-пожарной сигнализацией, извещающей органы пожарной охраны о пожаре и месте его возникновения – обеспечивается автоматической (нажатием кнопки) пожарной сигнализацией, а также при помощи телефонной связи.

## Заключение

В ходе выполнения выпускной квалификационной работы были исследованы низкотемпературные свойства дизельного топлива в присутствии депрессорной присадки с учетом межмолекулярных взаимодействий углеводородов в топливе.

Молекулы депрессора в составе топлива, взаимодействуя с молекулами н-парафинов, снижают энергию взаимодействия их друг с другом, тем самым препятствуя их агрегации и улучшая низкотемпературные свойства дизельного топлива.

Увеличение содержания н-алканов в дизельном топливе обуславливает снижение приемистости депрессора по отношению к топливу. Приемистость депрессорной присадки в области малых концентраций тем больше, чем больше содержание ароматики.

Разработана математическая модель, позволяющая прогнозировать низкотемпературные характеристики дизельного топлива различного углеводородного состава при добавлении присадки в различных концентрациях. Погрешность составляет не более 2°С для образцов дизельных фракций и не более 1,7°С для образцов газойлевых фракций, что подтверждает возможность использования данной модели.

В разделе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» проведен расчет человеческих и материальных ресурсов на выполнение проекта. Рассчитан интегральный показатель эффективности, интегральный показатель ресурсоэффективности, а также интегральный финансовый показатель разработки. Полученные значения позволяют судить о приемлемости текущей разработки с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

В разделе «Социальная ответственность» выявлены вредные факторы и их влияние на человека при разработке проекта.

## Список публикаций студента

1. Машнич В.В., Францина Е.В., Майлин М.В. Квантово-химические расчеты межмолекулярных взаимодействий углеводородов дизельных топлив с депрессорной присадкой // Проблемы геологии и освоения недр: труды XXIV Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых ученых, Томск, 6-10 апреля 2020. – Томск: Изд-во ТПУ, 2020. –
2. В.В. Машнич, А.А. Павлова, Е.В. Францина, М.В. Майлин Экспериментальные исследования влияния концентрации депрессорной присадки на изменение низкотемпературных свойств дизельных фракций // Всероссийская научно-практическая конференция с международным участием «Химия. Экология. Урбанистика.», Пермь, 23-24 апреля 2020. – Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2020. – С.169-173.
3. Павлова А.А., Машнич В.В., Францина Е.В. Экспериментальные исследования влияния концентрации депрессорной присадки на изменение низкотемпературных свойств дизельных фракций // Техника и технология нефтехимического и нефтегазового производства. – 2020. – С.19-20.
4. Бердникова А.А., Машнич В.В., Францина Е.В. Исследование взаимодействия углеводородов, содержащихся в дизельных фракциях, методом квантово-химических расчетов // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XX Международной научно-практической конференции имени профессора Л.П. Кулёва студентов и молодых ученых, Томск, 20-23 Мая 2019. - Томск: ТПУ, 2019 - С. 344-346.
5. Бердникова А.А., Машнич В.В., Майлин М.В. Исследование состава дизельных фракций методами хроматографии и ИК-спектроскопии // Проблемы геологии и освоения недр: труды XXIII Международного

симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых ученых, посвященного 120-летию со дня основания Томского политехнического университета, Томск, 8-12 апреля 2019. – Томск: Изд-во ТПУ, 2019. – Т.2. – с. 322-324.

6. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Кинетическая модель процесса гидроочистки среднестиллятных нефтяных фракций с учетом реакций гидрогенолиза азотистых соединений» № 2019618709. Правообладатель: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет». Авторы: Францина Е.В., Кривцова Н.И., Бабий Т.И., Машнич В.В. Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ: 3 июля 2019 г.
7. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Расчет подачи водорода в процессе гидроочистки среднестиллятных нефтяных фракций» № 2019618633. Правообладатель: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет». Авторы: Кривцова Н.И., Францина Е.В., Иванчина Э.Д., Машнич В.В. Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ: 3 июля 2019 г.

## Список литературы

1. Давыдов И.А. Экологический аспект развития мирового рынка дизельного топлива // Вестник ГУУ. – 2016. – № 9.
2. <https://finance.yahoo.com/news/diesel-fuel>
3. Павлова А.А., Машнич В.В., Францина Е.В. Экспериментальные исследования влияния концентрации депрессорной присадки на изменение низкотемпературных свойств дизельных фракций // Техника и технология нефтехимического и нефтегазового производства. – 2020. – С.19-20.
4. Н.Д. Зинина, А.В. Шеянова, В.И. Фаерман, Д.Ф. Гришин. Исследование влияния углеводородного состава дизельных топлив на их низкотемпературные свойства // Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. – 2015. - №10. - С. 14-19.
5. 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" (с изменениями на 19 декабря 2019 года)
6. Трубилов А., Хитрюк В., Автомобильные эксплуатационные материалы // РИПО. – 2012. – С.224.
7. Тараканов Г.В, Мановян А.К. Основы технологии переработки природного газа и конденсата // Учебное пособие. – Изд. 2-е, перераб. и доп. – Астрахань: Изд-во АГТУ, 2010. – С.192.
8. Srivastava, S. P., Hancsó, Jenő. Fuels and Fuel-Additives. – 2014. – P.376.
9. Носова Е.В., Сапрыгина В.Н. Экспериментальное исследование качества дизельного топлива // Вестник иркутского государственного технического университета. – 2011. – С.69-72.
10. Don Munroe. Diesel Fuel Properties // MDEC, Toronto, Ontario. – 2016.

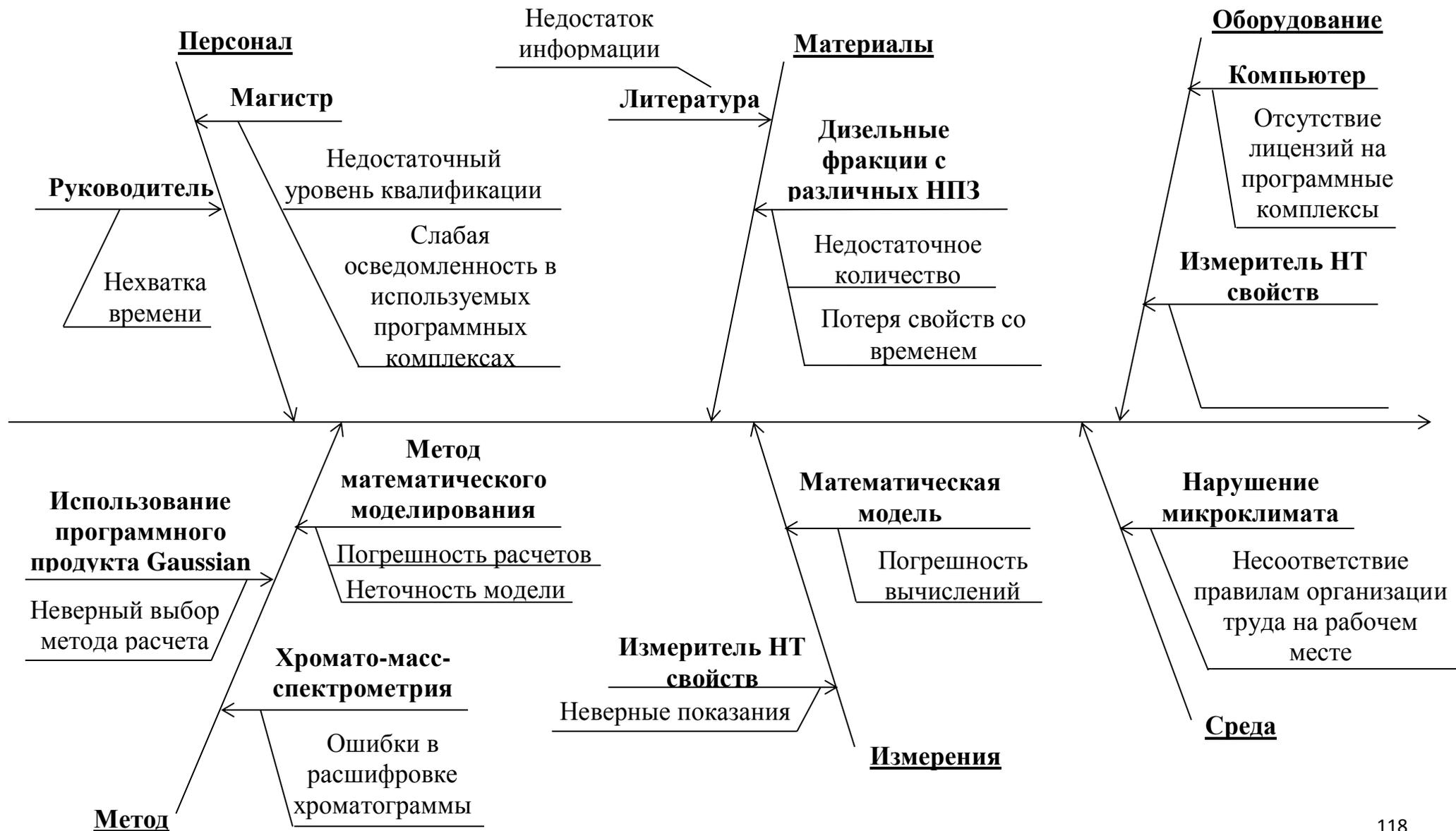
11. Diesel engine fuels // Winterthur Gas & Diesel Ltd. Winterthur, Switzerland. – 2018. – С.1-23.
12. Иовлева Е.Л. Получение низкотемпературных дизельных топлив на примере Талаканской нефти : диссертация кандидата технических наук / Уфим. гос. нефтяной техн. ун-т. – Якутск. – 2016. – С.116.
13. Иртуганова, Э. А. Химия и контроль качества эксплуатационных продуктов : учебник. - М.: ИНФРА-М. – 2019. – С.528.
14. Riskulov A.A., Barhanadzhyan A. L., Hakimov R.M., Karpushkin S.I. The use of diesel fuels with improved low temperature properties in winter condition // «East West» Association for Advanced Studies and Higher Education GmbH, 2017.
15. Hannu Jääskeläinen. Fuel Property Testing: Low Temperature Operability. – 2017.
16. Dean, H. E., Johnson, E. H. Pour depressed fuels are a field success // NPRA meeting, Cleveland.
17. Вафаев О.Ш., Таджиходжаев З.А., Джалилов А.Т. Влияние добавок на низкотемпературные свойства дизельного топлива // Universum: Технические науки : электрон. научн. журн. 2019. № 6(63).
18. Гришин Д.Ф. Депрессорные, противоизносные и антиокислительные присадки к гидроочищенным дизельным топливам с низким и ультранизким содержанием серы // Нефтехимия. – 2017. - №5, том 57. – С.489-502.
19. Аминов Л.А. Об улучшении низкотемпературных свойств дизельного топлива путем подбора физико-химического состава // Актуальные проблемы военно-научных исследований. – 2019. – С.103-109.
20. Шевченко А.П., Сейфетдинов Д.Р. Оценка способов регулирования низкотемпературных свойств дизельных топлив // Технологии нефти и газа. – 2018. – №3. – С.16-23.
21. Ермак А.А., Буряя И.В., Спиридонов А.В., Сябарева Е.В., Ковалёва И.В. Способы регулирования температуры помутнения дизельных

- топлив // Вестник полоцкого государственного университета. – 2018. – Серия В. – С.112-117.
22. Башкатова С.Т., Винокуров В.А., Гришина И.Н., Егоркина Ю.Б. – Межмолекулярные взаимодействия в топливной дисперсной системе и их вклад в механизм действия присадок в дизельных топливах. - Ж. «Нефтехимия». – 2011. – Том 1, №5. – С.369-375.
23. Fozilov S.F., Mavlanov B.A., Pulatova B.F., Fozilov H.S. Production of diesel fuels with improved low-temperature properties with depressor additives synthesized on the basis of heterocyclic ethers of acrylic acids. – International scientific review, 2017. - №5. - P.11-14.
24. А.К. Баев. Specific Intermolecular Interactions of Organic Compounds // Springer-Verlag Berlin Heidelberg. – 2012. – P. 393-430.
25. Diesel Fuels Technical Review. – 2007.
26. Гилева М.В., Кулакова Н.А., Рябов В.Г. Применение депрессорно-диспергирующей присадки при получении дизельного топлива для арктического климата // Вестник пермского национального исследовательского политехнического университета. Химическая технология и биотехнология. – 2015. – С.147-160.
27. Мельчаков Д.А., Прошкин С.Е., Гавголенко Н.В., Бурюкин Ф.А. Влияние длиноцепных алканов на низкотемпературные характеристики дизельных топлив // Молодёжь и наука: Сборник материалов VII Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых учёных, посвященной 50-летию первого полета человека в космос [Электронный ресурс]. — Красноярск: Сибирский федеральный ун-т. – 2011.
28. Синюта, В.Р. Физико-химические свойства зимнего дизельного топлива / В.Р. Синюта, Н.Ф. Орловская, Л.В. Абрамова // Известия Тульского государственного университета. Сер. Технические науки. – 2017. – Вып. 9. Ч. 1. – С. 346–356.

29. В.А. Любименко. Компьютерное моделирование структуры и свойств межмолекулярных комплексов в дизельных топливах в присутствии депрессорно-диспергирующих присадок // Труды РГУ нефти и газа имени И.М. Губкина № 2 (275). – 2014. – С. 43-51.
30. Башкатова С.Т., Винокуров В.А. Межмолекулярные взаимодействия в топливной дисперсной системе и их вклад в механизм действия присадок в дизельных топливах // Труды российского государственного университета нефти и газа им. и.м. губкина. – 2009. – С. 45-56.
31. Tomberg, A. Gaussian 09W Tutorial // an Introduction to Computational Chemistry Using G09W and Avogadro Software. – 2013. – Pp.1-34.
32. Кузьмина Е.А, Кузьмин А.М. Методы поиска новых идей и решений "Методы менеджмента качества" №1 2003 г.
33. Кузьмина Е.А, Кузьмин А.М. Функционально-стоимостный анализ. Экскурс в историю. "Методы менеджмента качества" №7 2002 г.
34. Основы функционально-стоимостного анализа: Учебное пособие / Под ред. М.Г. Карпунина и Б.И. Майданчика. - М.: Энергия, 1980. – С.175.
35. Сущность методики FAST в области ФСА [Электронный ресурс] <http://humeur.ru/page/sushhnost-metodiki-fast-v-oblasti-fsa>.
36. Руководство к своду знаний по управлению проектами (Руководство РМВОК), 4-е издание, 2008 г.
37. Мазур И.И., Шапиро В.Д., Ольдерогге Н.Г. Управление проектами: Учебное пособие. – М.: Омега-Л, 2004. – 664 с.
38. Попова С.Н. Управление проектами. Часть I: учебное пособие / С.Н. Попова; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. – 121 с.
39. Методические рекомендации по оценке эффективности инвестиционных проектов (вторая редакция), утверждено Министерством экономики РФ, Министерством финансов РФ № ВК 477 от 21.06.1999 г. [Электронный ресурс]. - Режим доступа . - <http://www.cfin.ru>.

40. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 24.04.2020);
41. ПНД Ф 12.13.1-03. Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения).
42. СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
43. СН 2.2.4/2.1.8.562–96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки.
44. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий.
45. ГОСТ 12.1.019-2017 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
46. ГОСТ 12.1.010-76 ССБТ. Взрывобезопасность. Общие требования.
47. ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.

## Приложение А



## Приложение Б

Вид работ	Исполнители	Т <sub>к</sub> , кал, дн	Продолжительность выполнения работ																							
			сент			окт			дек			январь			февраль			март			апрель			май		
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
Выбор направления исследования	Руководитель	3																								
Изучение литературы, источников со схожей тематикой	Магистрант	150																								
	Руководитель																									
Расчет в программном комплексе Gaussian	Магистрант	30																								
Исследование углеводородного состава	Магистрант	60																								
Измерение низкотемпературных свойств	Магистрант	50																								
Разработка математической модели	Руководитель	90																								
	Магистрант																									
Обработка всех результатов	Руководитель Магистрант	15																								
Оформление магистерской диссертации	Магистрант	45																								



Руководитель



**Приложение В**  
(справочное)

**LITERATURE REVIEW**

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ82	Машнич Вероника Викторовна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Научный сотрудник ОХИ ИШПР	Францина Евгения Владимировна	К.т.н.		

Консультант-лингвист отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОИЯ ШБИП	Матвеевко Ирина Алексеевна	Доктор филологических наук		

## Introduction

A steady tendency is observed all over the world to increase the consumption of diesel fuel, which leads to toughening quality requirements, including low-temperature properties. In the process of research, tests were carried out on the effect of the concentration of depressant additives on the main operational characteristics of various samples of diesel fuel, and a mathematical model was developed for the dependence of low-temperature properties on the concentration of the additive, taking into account the hydrocarbon composition of diesel fuel.

The diesel fuel market should grow by \$ 92.15 billion over the period 2020-2024, reaching an aggregate average annual growth rate of more than 1% over the forecast period. In connection with an increase in demand for diesel fuel, there is a tightening of the requirements for quality, including low-temperature properties.

Diesel fuel is made from petroleum. All petroleum crude oils are composed primarily of hydrocarbons of the paraffinic, naphthenic, and aromatic classes. Each class contains a very broad range of molecular weights.

Out of the ground, crude oil can be as thin and light-colored as apple cider or as thick and black as melted tar. Thin crude oils have relatively low densities and thus, high API gravities. In the U.S., light crudes are called high-gravity crude oils; conversely, thick and heavy crude oils with relatively high densities are low-gravity crude oils. Outside of the U.S. the terminology “light crude” refers to a low-density crude oil and “heavy crude” to a high-density crude oil.

The technology for producing diesel fuel provides for the processing of kerosene-gas oil fractions obtained by direct distillation of oil. Diesel fuel production includes several stages:

1. Cleaning includes the removal of mechanical impurities, dehydration in an electric desalting plant, removal of light hydrocarbons.
2. The primary processing is a direct distillation of oil in a distillation column at atmospheric pressure, during which there is a separation into fractions

by boiling point. The obtained fractions are of low quality, so subsequent processing is required.

3. During the secondary processing, the chemical composition of diesel fractions changes, and the hydrocarbon structure is also transformed. Fuel technology involves cracking. There are three varieties:

- Catalytic cracking — cleavage in the presence of a catalyst.
- Thermal cracking - splitting under the influence of high temperature (470 - 550°C).
- Hydrocracking occurred in a hydrogen environment.

4. Compounding is the last stage in the preparation of commercial diesel fuel. In order for diesel fuel to acquire the required qualities, they mix the obtained fractions with the components of the secondary processes that have undergone hydrotreating, with the addition of various additives.

### **5.1 Physicochemical and operational properties of diesel fuels**

Cetane number is a measure of ignition of diesel fuel. The cetane number characterizes the delay between the start of fuel injection into the combustion chamber and the start of compression ignition (self-ignition). The highest cetane numbers have n-alkanes, the lowest cetane numbers have aromatic hydrocarbons.

Diesel engines are designed for compression ignition (no spark), so the fuel must be able to self-ignite. A higher cetane number means a shorter ignition delay time and a more complete combustion of the fuel charge in the combustion chamber. This in turn leads to smoother operation, better performance and lower air emissions.

Hydrocarbons that make up diesel fuel have different densities. In this regard, the density can be used to judge which hydrocarbon groups prevail in the fuel. So, paraffins have a lower density compared to aromatic hydrocarbons, and naphthenes are located between them. High density indicates a high aromatic content. It is not always possible to use conventional methods for measuring

density at 15 °C . Thus, the measurement is carried out at a higher temperature, and then converted and adjusted to the control temperature.

Viscosity plays a role in fuel injection and helps lubricate the fuel supply system. Too high viscosity makes it difficult to pump at low temperature and reduces the degree of atomization, and too low viscosity can lead to wear of the fuel pump. During injection, high viscosity leads to the formation of larger droplets of diesel fuel, so they are fed into the firing zone before being mixed with air. Low viscosity leads to higher emissions of harmful substances.

Hydrogen sulfide (H<sub>2</sub>S) is a very toxic gas, and exposure to high concentrations is life threatening.

Diesel must have optimal evaporation. Excessive fractional relief causes hard operation of the diesel engine and deterioration in the operation of the high pressure fuel pump. Due to the increased volatility of the fuel, by the moment of self-ignition of the working mixture in the engine cylinder, a large number of vapors accumulate, the ignition of which leads to a sharp increase in pressure. A distillation temperature of 50% partially characterizes the starting properties of diesel fuels, since the first flash of the working mixture in diesel engines depends not only on the volatility of the fuel, but also on its flammability.

High acid number fuels can damage fuel injection systems. Most fuels have a low acid number, the excess of which is higher than 2.5 mg KOH / g can cause carbon formation.

The high content of resins and asphaltenes reduces the quality of ignition and combustion of fuel, increase wear and damage to the engine. Asphaltenes also affect the stability of mixed fuels and can accumulate in filters.

One of the most important characteristics of diesel fuel is its low temperature properties. There are a number of tests to measure the low-temperature properties of diesel fuel and evaluate their impact on the performance of a vehicle at low temperatures.

The cloud point is the temperature at which the paraffin hydrocarbons present in the fuel begin to appear when the fuel cools at a certain speed, and the fuel becomes cloudy.

Filterability limit temperature is the temperature at which a certain amount of fuel during cooling under specified conditions does not leak through a standard filtering device for a set time.

The loss of mobility of petroleum products due to the formation of a skeleton or structural network from crystallizing hydrocarbons is commonly called solidification [13]. The pour point is thus the highest temperature at which diesel fuel in a standard appliance, tilted at an angle of  $45^\circ$ , remains stationary for 1 min.

Operational rule: “the fuel operating temperature should be  $10\text{--}15^\circ\text{C}$  higher than its pour point”. If summer or mixed fuel is used in winter, then the precipitated crystals of hydrocarbon compounds will clog the diesel power system, the fuel supply will be disrupted or stop.

## **5.2 Low temperature properties of diesel fuels**

There are several ways to measure the low-temperature properties of fuel for diesel engines and evaluate their impact on the performance of the car at low temperatures.

It is known that in the hydrocarbon composition of diesel fuel the content of paraffin hydrocarbons reaches  $30\text{--}40\%$ . It is also known that as the temperature decreases, paraffin crystals form, which causes turbidity of the fuel.

The cloud point is the limit of operability for fuels that do not contain additives suitable for use. The cloud point is defined as the temperature at which a cloud of paraffin crystals begins to appear in the fuel under test conditions. These crystals can accumulate in the filters and ultimately lead to blockage of the fuel system. Fuel additives used at low temperatures usually have little effect on the

cloud point. These additives are used in diesel fuel to prevent agglomeration or modification of these crystals in other ways to limit filter clogging.

It has been found that fuels having the same cloud point and pour point can vary in flow characteristics at low temperatures.

The researchers noted that rapid cooling of diesel fuel leads to the formation of smaller crystals, while slow cooling leads to the formation of larger crystals of paraffin, which impedes the flow.

Lowering the pour point of various hydrocarbon fractions occurs in the series:

1. n-paraffin fraction;
2. aromatic fraction;
3. fraction of bi- and tricyclic aromatic hydrocarbons;
4. fraction of tricyclic aromatic hydrocarbons;
5. naphthenic fraction.

There are various theories of the solidification mechanism of petroleum products. In accordance with one of them, it is believed that during solidification either a continuous spatial network of paraffin crystals is formed as a result of sequential separation of solid hydrocarbons from the liquid phase with different crystallization temperatures, or a super micellar structure. According to other theories, solidification can occur due to the formation in the system of paraffin - hydrocarbons of a structural framework that immobilizes the liquid phase, prevents its movement, or is associated with the formation of solvate shells of the liquid phase around paraffin crystals, which significantly increase their volume, increase the internal friction of the entire system and reduce its fluidity.

### **5.2.1 Determining the cloud point of diesel fuel**

The cloud point of diesel fuel in the Russian Federation is determined in accordance with GOST 5566-91 "Motor fuels. Methods for determining the cloud point, the onset of crystallization and crystallization." According to this technique,

a sample of diesel fuel is placed in a test tube and heated in a water bath to 50 ° C, followed by cooling to 30-40 ° C. Next, the sample is placed in a cooling mixture, with a temperature of 10 ° C below the expected cloud point of the fuel. The test tube with the sample is removed from the mixture at 5 ° C to the target cloud point, wiped with alcohol, and the turbid fuel is observed. The test is carried out twice. For the second measurement, a new sample of the test fuel is taken.

### **5.2.2 Determination of the pour point of diesel fuel**

The determination of the pour point of diesel fuel is regulated by GOST 20287-91 "Petroleum products. Methods for determining the pour point and pour point." According to this technique, a sample of diesel fuel is placed in a test tube and heated in a water bath to 50 ° C, followed by cooling to 30-40 ° C. Next, the sample is placed in a cooling mixture with a temperature of 5 ° C below the expected pour point. After the sample reaches the intended temperature for determining solidification, the tube is held at an angle of 45 ° C for 1 minute without being removed from the cooling mixture. Next, take a test tube and see if the meniscus of the test product has shifted. If the meniscus has shifted, then the test is repeated at a temperature 4 ° C lower than the previous one until the meniscus is in a stationary state.

After the pour point has been determined, the test is repeated, lowering or raising the determination temperature by 2 ° C to the temperature of the meniscus immobility, and at a temperature of 2 ° C higher it shifts. The temperature is fixed. The test is carried out twice. For the second measurement, a new sample of the test fuel is taken.

### **5.2.3 Determination of the limit temperature of filterability of diesel fuel**

The maximum temperature of filterability of diesel fuel is determined in accordance with GOST R 54269-2010 "Fuel. Method for determining the limiting

filterability temperature on a cold filter. Filtration limiting temperature." According to this technique, a diesel fuel sample is cooled at intervals of 1 ° C and drawn into a pipette under a controlled vacuum through a standardized wire mesh filter. The test is carried out at each temperature drop of 1 ° C until the amount of paraffin crystals released from the fuel does not allow the fuel to pass through the filter, or the pipette filling time exceeds 60 seconds. The marked temperature at the beginning of the last filtration is recorded as the limiting temperature of the filterability.

### **5.3 Ways to improve the low temperature properties of diesel fuels**

The problem of low temperature properties can be solved using one of the following methods:

1. In order to improve low-temperature properties, partial dewaxing of diesel fuel is carried out, however, this involves the removal of valuable high-cetane hydrocarbons from it having high melting points. Urea and zeolite dewaxing allows you to get fuel with satisfactory low temperature properties, however, this will lead to a decrease in the yield of the fraction by 20-30%.

2. At a refinery, diesel fuel can be mixed with low paraffin fuel. This approach may adversely affect the economics of the refinery, as feedstocks with a lower boiling point are used as feedstocks for lower-income fuels.

3. A more economical way to improve the low-temperature characteristics of diesel fuel is the catalytic isomerization of n-paraffins into isoparaffins, which have lower freezing temperatures. This process is called isodeparaffinization.

4. The combination of methods 2 and 3. The crystallization of paraffins under conditions of slow cooling affects the viscosity and, thus, causes a change in the rheological behavior of the fuel.

5. Facilitate the fractional composition by removing high-boiling (330-415 ° C) hydrocarbons from the heavy part of diesel fuel with a loss of 10% of the potential.

6. One of the most effective ways to improve the low-temperature characteristics of diesel fuel and expand their resource is to use a chemical compound - a depressant.

The features of various additives for diesel fuels have been studied for more than 80 years; however, up to the present day, there is no actual experimental evidence in favor of one or another mechanism of effect of additives with different functional purposes on the quality of diesel fuels. It should be noted that the mechanism of action of pour point depressants in diesel fuels has been most thoroughly studied. Much more works are concerned with these studies than with the effect of additives with other functional purposes. This is probably due to the fact that it was pour point depressants that were first widely used in countries and regions in which negative environmental temperatures often take place, in particular, in Russia.

Pour point depressants, being added to diesel in concentrations of 0.01 to 0.2 wt %, make it possible to significantly improve the low-temperature properties of fuels and ensure the smooth operation of diesel engines at negative temperatures.

Types of diesel fuel additives:

- Initiating (cetane raising) – reduce the period of delay of the autoignition of fuel.
- Anti-burn – reduce the content of toxic products of incomplete combustion of fuels and the amount of deposits on the walls of combustion chambers.
- Smoke control – reduce exhaust smoke.
- Antioxidants, metal deactivators and biocides – contribute to the preservation of the initial properties of fuels during their storage, transportation and use.
- Anticorrosive – reduce the corrosiveness and increase the protective ability of fuels.
- Anti-wear – increase the lubricity of diesel fuel with a minimum sulfur content.

- Depressor – improve the low-temperature properties of diesel fuel.

### *Low-Temperature Operability Additives*

Depressor additives must provide the required low-temperature characteristics of diesel fuel, the necessary viscosity of the fuel at low temperatures, they must be resistant to degradation when exposed to oxygen and high temperatures, and not affect the effectiveness of other additives introduced into the fuel.

There are two theories of the mechanism of action of depressant additives: adsorption and co-crystallization. Adsorption is that the depressor, adsorbed by the surface of crystallizing n-paraffins, modifies it, preventing aggregation, thereby lowering the pour point of diesel fuel. Co-crystallization theory suggests that depressants affect both the surface and volume of a mixture of n-paraffins. On the surface, n-paraffins crystallize with depressants; mixed crystals form in the bulk.

Most of these additives are polymers that interact with the wax crystals that form in diesel fuel when it is cooled below the cloud point. The polymers mitigate the effect of wax crystals on fuel flow by modifying their size, shape, and/or degree of agglomeration. The polymer-wax interactions are fairly specific; a particular additive generally will not perform equally well in all fuels.

The additives can be broken down into three idealized groups:

- Specialized additives for narrow boiling range fuels
- General purpose additives
- Specialized additives for high final boiling point fuels

To be effective, the additives must be blended into the fuel before any wax has formed, i.e., when the fuel is above its cloud point. The best additive and treat rate for a particular fuel cannot be predicted; it must be determined experimentally. Some cloud point depressant additives also provide lubricity improvements.

By chemical nature, depressant additives are divided into:

- copolymers of ethylene with polar monomers;
- products of the polyolefin type;

- polymethacrylate additives;
- non-polymer type chemicals.

Currently, many polymeric materials are used as depressant additives, such as polymethyl acrylates, ethylene vinyl acetate copolymers, fumarate and vinyl acetate copolymers, alkyl polystyrenes, acylated polystyrenes, polyolefins, aliphatic amine oxides and oxidized paraffins. Low pour point depressors are essentially paraffin crystal modifiers. Upon cooling, the depressor molecules and then the paraffin molecules are released. Thus, the depressor can act as a nucleating agent and contribute to the formation of small paraffin crystals. If the depressant and paraffin are separated from the solution together, they can crystallize together into bulk crystals, which are less prone to gel formation.

If the depressant is released from the solution after paraffin, precipitation on the surface of n-paraffin may interfere with the adhesion of the crystals necessary for gel formation. However, the degree of decrease in the pour point when using additives depends on several factors, such as the type and structure of paraffin, its concentration in the fuel, the nature of the fuel, cooling conditions, as well as the type of depressant and its concentration.

Alkyl aromatics are adsorbed on a nascent paraffin crystal, causing it to grow in new directions and form a compact, multilayer isotropic paraffin crystal. Such crystals cannot form a gel-like structure that causes solidification of the fuel at lower temperatures.

Polyalkyl methacrylate and polyacrylamide modify the growth of paraffin crystals in a similar way, although the mechanism consists in co-crystallization with paraffins, and not in adsorption on the surface of the crystals.

Polyalkylmethacrylates are the most widely used depressant additives, due to the structure and flexibility of their molecules for the construction of base fuels or middle distillates containing various types of paraffins.

Depressor additives must have good fuel solubility and affinity for crystallizing n-paraffins. These properties of alkyl methacrylates are governed by the length of the alkyl radicals and the distance between them. With ethylene vinyl

acetate copolymers, the desired properties are achieved by controlling the molecular weight and vinyl acetate content of the polymer.

Alkyl methacrylates and copolymers of ethylene with vinyl acetate have different mechanisms of action. This implies a difference in the effect on the low-temperature properties of these depressants — alkyl methacrylates lower the cloud point, in contrast to depressants based on ethylene vinyl acetate copolymers. In addition, the maximum effectiveness of polymethacrylates is achieved by adding additives with a concentration much higher than the required concentration of EVA depressants.

#### **5.4 The effect of hydrocarbon composition on the properties of diesel fuel**

Hydrocarbons are organic compounds composed entirely of carbon and hydrogen atoms. There are four major classes of hydrocarbons: paraffins, naphthenes, olefins, and aromatics. Each class is a family of individual hydrocarbon molecules that share a common structural feature, but differ in size (number of carbon atoms) or geometry. The classes also differ in the ratio of hydrogen to carbon atoms and in the way the carbon atoms are bonded to each other.

Normal paraffins have poor low-temperature properties, in contrast to aromatic hydrocarbons having low values of these characteristics. Isoparaffins and naphthenes are intermediate hydrocarbons, and the values of these properties are between the values of n-paraffins and aromatic compounds.

The pour point also increases with the molecular weight, but it is highly dependent on the molecular form. Molecules that fit more readily into the crystalline structure have higher pour points than other molecules. This explains the high pour point of n-paraffins and unsubstituted aromatic compounds in comparison with the pour points of isoparaffins and naphthenes with the same number of carbon atoms.

The low-temperature properties of distillate fuels depend on the concentration of various n-paraffin compounds and their distribution in the fuel. These paraffins may consist of C10-C22 hydrocarbons, depending on the source of the crude oil and subsequent refining processes. The nature and amount of n-paraffins in these fractions affect the behavior at low temperatures. Diesel fuel may contain 12–40% paraffin hydrocarbons (C10 – C20) and therefore has limited solubility in the fuel, especially at lower temperatures. Paraffins can block the fuel system and filters of diesel vehicles, causing unstable engine operation, loss of power and even a complete engine failure. To avoid these problems, the low temperature properties of diesel fuel must be appropriate to the climatic conditions in which the engines are running.

Different groups of n-paraffins have different effects on the low temperature properties of diesel fuels. It is necessary to take into account their number, molecular weight distribution, ratio with isoparaffins and low molecular weight paraffins.

1. Initially, C11 - they are responsible for the presence in the diesel fuel of a kerosene fraction, which shifts the crystallization of n-paraffins when the fuel is cooled to a temperature below the cloud point;
2. C12-C17 - are responsible for improving PTF when a depressant-dispersing additive is introduced into diesel fuel;
3. C18-C22 and C18-End chain are sparingly soluble n-paraffins, which are primarily when the fuel is cooled below the cloud point.

It is a fact that the content of aromatic hydrocarbons represented by monocyclic, bicyclic and polycyclic compounds also affects low temperature indices. A decrease in the aniline point with an increase in the content of aromatic hydrocarbons helps to lower the pour point of diesel fuels. This fact is related to the fact that aromatics are solvents of high-melting n-paraffins. However, an equally important fact is that polycyclic aromatic hydrocarbons affect the life of the engine, since they do not completely burn out and settle in the form of tarry deposits on the walls of the combustion chamber, piston, and nozzles.

The filterability coefficient is influenced by the content of water, mechanical impurities, microorganisms, surface-active substances, naphthenic acid soaps, and resinous compounds in the fuel. The presence in the fuel of surfactants of soaps of naphthenic acids, resinous compounds enhances the effect of water on the filterability of fuels.

Thus, in the production of diesel fuel with improved low-temperature characteristics, it is necessary to reduce the content of high-melting n-paraffins and to establish the optimal content of low-boiling n-paraffins and monocyclic arenes, as well as to take into account the content of naphthenes and arenes, the branching of hydrocarbon structures and the content of various foreign substances and impurities.

### **5.5 Intermolecular interactions of hydrocarbons in diesel fuel**

Intermolecular interactions in petroleum products are responsible for structural transitions, structurization, separation of solid hydrocarbons, and loss of mobility, all of which have considerable influence on the industrial applications of the products. Information on the temperature limits at which structural transitions are observed is necessary in order to predict the behavior of petroleum products under service conditions and in order to calculate processing parameters and equipment.

It is now generally accepted that diesel fuels are typical representatives of disperse systems, since they are characterized by two main features that differentiate classical disperse systems (formerly called colloidal solutions) from the true solutions, namely, heterogeneity and dispersion. In other words, a diesel fuel must be regarded as a disperse fuel system consisting of a disperse phase and a dispersion medium. Particles of the disperse phase of a disperse fuel system consist of normal structure saturated long chain hydrocarbons with a high melting point (n-paraffins), heterorganic compounds that contain sulfur, nitrogen, and oxygen as heteroatoms as well as resins, asphaltenes, and, undoubtedly, additives,

if they are introduced into the diesel fuel. The dispersion medium of a disperse fuel system is a liquid solution formed by hydrocarbons that exhibit good mutual solubility.

Thus, according to the classical concepts, different types of intermolecular interactions (IMIs) probably take place in a disperse fuel system, as well as interactions between disperse phase particles and dispersion medium molecules. If we know the type of these interactions and how they occur in a disperse fuel system, then we can answer multiple questions, including the one about the mechanism of action of additives in the disperse fuel system.

The first hypotheses about the mechanism of action of pour point depressants were expressed in the 1920s. Two theories were proposed: adsorption (modification) and cocrystallization. Proponents of the first theory, including well known scientist T.P. Zhuzhe, assumed that a pour point depressant, being adsorbed by the surface of crystallizing n-paraffins, modifies it, prevents aggregation, and therefore decreases the tp of the diesel fuel. Defenders of the second theory, including N.I. Chernozhukov, L.G. Gurvich, and P.I. Sanin, believed that pour point depressants have simultaneous effects on the surface and volume of the mixture of n-paraffins. On the surface, n-paraffins undergo the cocrystallization with pour point depressants; mixed crystals are formed in the volume. Polymers or copolymers are usually used as pour point depressants; as a rule, the polymers are of two types—either ethylene copolymers, often with vinylacetate (EVA), or copolymers of higher alkyl esters of acrylic or methacrylic acid and vinyl acetate (AMA–VA). It is known that solutions of high molecular compounds can considerably differ in properties, which depend on the conformation of polymer chains in one or another solvent. The solvent in which the polymer is placed or where its synthesis takes place interacts with the polymer; these IMIs lead to the formation of new structures, such as solvates, associates, solvate associates, or charge transfer complexes. IMIs also occur upon the addition of a polymer depressant into a diesel fuel, which, in point of fact, acts as a solvent for the additive. Since the diesel fuel composition comprises different classes of

hydrocarbons, it is evident that the efficacy of pour point depressants in a diesel fuel will depend both on the hydrocarbon composition of the diesel fuel and on the structure of additives. The data show that IMIs between diesel fuel hydrocarbons and a pour point depressant lead to the formation of new structures, such as charge-transfer complexes.

It is noteworthy that stronger nonspecific interactions occur in the case of fuels, regardless of their grade, with AMA–VA copolymers as compared with EVA copolymers, which is probably due to higher polarity of AMA–VA copolymer molecules in comparison with EVA copolymer molecules. However, if compare the force of IMIs between molecules of the EVA pour point depressant and diesel fuel of different grades these interactions are stronger in the summer diesel fuel than in the winter diesel fuels. Another cause of this is most likely also the higher polarity of the L grade in comparison with the winter grades of diesel fuel.

We can assume that the nonspecific IMIs that take place during the preparation of the reaction mixture prior to the copolymerization reaction lead to the appearance of excited molecules. It is the interaction of excited molecules that is responsible for the formation of the ordered structure of the copolymer, which, being synthesized in the diesel fuel medium, assumes a straight rod conformation that is confirmed experimentally by electron microscopy. Thus, based on the classical concepts of chemistry of high molecular compounds, a diesel fuel is a “good” solvent for this copolymer.

Based on the results, it can be concluded that, as the concentration of additives in diesel fuels increases, regardless of their functional purpose and chemical nature, the surface tension of the diesel fuel interface always decreases in the presence of additives. Taking into account that, by definition, the surface tension is the work of formation of a unit of new surface, it is clear that the lower its value is, the higher is the stability of a given heterogeneous system.

The experimental data show that the IMIs that occur in disperse fuel system, including with additives, are responsible for the efficiency of these additives in fuels. The ability of additives with different chemical structures and functional

purposes, including multifunctional ones, to decrease the surface tension of disperse fuel system suggests a common mechanism of their action in diesel fuels, which is associated with the increasing stability of fuels. Taking into account that all additives exhibit the properties of surfactants, the mechanism of action of additives in disperse fuel system is considered in terms of the classical concepts of chemistry of disperse systems and surface phenomena as the mechanism of stabilization of disperse systems by surfactants.

The comparison of data on the efficiency of various additives in diesel fuels with data on their ability to decrease surface tension leads to the conclusion that the greater the decrease in the surface tension of the disperse fuel system due to additives is, the greater is the efficiency of the additives in the fuel.