

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

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

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Исследование и моделирование эксплуатационных характеристик моторных топлив

УДК 665.75-047.37-047.58

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Радченко Надежда Дмитриевна		

Руководитель ВКР

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

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Пашков Евгений Николаевич	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ивашкина Елена Николаевна	д.т.н.		

**Запланированные результаты обучения
по образовательной программе «Химическая технология топлива и газа»
(направление подготовки 18.04.01 «Химическая технология»)**

Код компетенции СУОС	Наименование компетенции СУОС (самостоятельно устанавливаемого образовательного стандарта)
Общекультурные (универсальные) компетенции	
УК(У)-1	Способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действия
УК(У)-2	Способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способность организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности
ОПК(У)-2	Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОПК(У)-3	Способность к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки
ОПК(У)-4	Готовность к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез
ОПК(У)-5	Готовность к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способность организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей
ПК(У)-2	Готовность к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи
ПК(У)-3	Способность использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
Дополнительные профессиональные компетенции (профессиональные компетенции, установленные университетом)	
ДПК(У)-1	Готовность к решению профессиональных производственных задач – контролю технологического процесса, разработке параметров проведения технологического процесса, разработке технологических расходных коэффициентов сырья и материалов, энергоресурсов, к выбору основного и вспомогательного оборудования
ДПК(У)-2	Способность использовать математические модели и пакеты прикладных программ для описания и прогнозирования различных явлений
ДПК(У)-3	Способность проводить технологические и технические расчеты по проектам, технико-экономический анализ проекта
ДПК(У)-4	Способность разрабатывать учебно-методической документации для реализации образовательных программ

Министерство образования и науки 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
 _____ Ивашкина Е.Н.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ
 на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Магистерской диссертации <small>(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)</small>

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ92	Радченко Надежде Дмитриевне

Тема работы:

Исследование и моделирование эксплуатационных характеристик моторных топлив	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	от 02.02.2021 № 33-24/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <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>Объект исследования: Рецептуры моторного топлива</p>
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <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><i>Введение: актуальность разработки рецептур моторных топлив</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <i>1) ТЭО: современные моторные топлива, добавки и присадки</i> <i>2) Аналитический обзор: теоретические основы расчета свойств моторных топлив, области использования и разработка состава суррогатных композиций</i> <i>3) Объекты и методы, постановка задачи исследования.</i> <i>4) Экспериментальная часть: экспериментальное исследование свойств бензинов, разработка</i>

	<p><i>методики создания суррогатов, экспериментальное исследования влияния оксигенатов на детонационную стойкость, прогнозирование ОЧ бензина с использованием суррогатных композиций.</i></p> <p>5) <i>Анализ результатов.</i></p> <p>6) <i>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.</i></p> <p>7) <i>Социальная ответственность.</i></p> <p>8) <i>Заключение.</i></p> <p><i>Список используемой литературы.</i></p>
<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа 2ДМ92	ФИО Радченко Надежде Дмитриевне
-----------------	------------------------------------

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

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

Исследование и моделирование эксплуатационных характеристик моторных топлив	Работа с научной литературой, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах
---	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

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

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.02.2021
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	Кандидат экономических наук		01.02.2021

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Радченко Надежда Дмитриевна		01.02.2021

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ92	Радченко Надежде Дмитриевне

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Тема ВКР:

Исследование и моделирование эксплуатационных характеристик моторных топлив	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объект исследования - прямогонные бензиновые дистилляты, смеси суррогатных топлив, октаноповышающие добавки. Методика: Исследование эксплуатационных свойств моторных топлив. Рабочая зона -химическая лаборатория по исследованию моторных топлив. Область применения: Промышленные предприятия нефтехимической отрасли.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> – ТК РФ от 30.12.2001 N 197-ФЗ; – ПНДФ 12.13.1-03;
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<ul style="list-style-type: none"> – отклонение показателей микроклимата; – отсутствие или недостаток естественного и искусственного света на рабочем месте; – повышенная температура поверхностей оборудования, материалов; – факторы связанные с электрическим током; – повышенный уровень шума.
3. Экологическая безопасность:	Атмосфера: бензин, серосодержащие соединения, предельные и непредельные углеводороды; Гидросфера: ароматические соединения, анилин; Литосфера: нефтяные отходы.

4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<ul style="list-style-type: none"> – техногенного характера (аварийная ситуация в лаборатории); – социального характера (террористический акт); – наиболее типичная – техногенного характера.
--	--

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.02.2021
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Пашков Евгений Николаевич	К.Т.Н		01.02.2021

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Радченко Надежда Дмитриевна		01.02.2021

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки (специальность) 18.04.01 Химическая технология (Химическая технология топлива и газа)

Уровень образования Магистратура

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

Период выполнения (осенний / весенний семестр 2020/2021 учебного года)

Форма представления работы:

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

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

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:	27.05.2021
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
1.02.2021	Проведение литературного обзора по теме	20
3.03.2021	Утверждение методики проведения исследований и обработки данных	10
4.03.2021	Проведение исследований согласно плану	40
10.04.2021	Анализ полученных экспериментальных данных, промежуточная аттестация выполнения диссертации	10
6.05.2021	Социальная ответственность	10
15.05.2021	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10

Составил преподаватель:

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

СОГЛАСОВАНО:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ивашкина Елена Николаевна	д.т.н		

Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие нормативные документы:

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

2 ГОСТ 2177-99. Нефтепродукты. Методы определения фракционного состава.

3 ГОСТ 3900-85. Нефть и нефтепродукты. Методы определения плотности.

4 ГОСТ 32513-2013. Топлива моторные. Бензин неэтилированный.

5 ГОСТ Р 52714-2018. Бензины автомобильные. Определение индивидуального и группового углеводородного состава методом капиллярной газовой хроматографии.

6 ГОСТ 18995.1-73. Продукты химические жидкие. Методы определения плотности.

7 Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ.

8 ГОСТ 12.0.003-2015. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.

9 СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

10 СНиП 23-05-95*. Естественное и искусственное освещение.

11 ГОСТ Р 51337-99. Температуры касаемых поверхностей. Эргономические данные для установления предельных величин горячих поверхностей.

12 СН 2.2.4/ 2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки. Санитарные нормы.

13 ГОСТ 12.1.030-81. Электробезопасность. защитное заземление. Зануление.

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

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

В настоящей работе применяются следующие сокращения:

КС – камера сгорания

КАДП – кислородсодержащая антидетонационная присадка

МТБЭ – метил-трет-бутиловый эфир

ИБС – изобутиловый спирт

ОЧ – октановое число

ОЧИ – октановое число по исследовательскому методу

ОЧМ – октановое число по моторному методу

ДВС – двигатель внутреннего сгорания

ММА – монометиланилин

ПАУ – полиароматические углеводороды

Реферат

Магистерская диссертация содержит 108 страниц, 37 таблиц, 9 рисунков, 52 источника литературы, 4 приложения.

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

Объектами исследования являются бензиновые фракции различного происхождения с различным групповым составом, суррогатные композиции, в качестве октаноповышающих добавок были выбраны оксигенаты.

Целью работы является получение бензина с заданным ОЧ без трудоемких экспериментов.

Для достижения цели были решены следующие задачи:

- выполнены экспериментальные работы по определению физико-химических свойств бензиновых фракций;
- разработаны рецептуры суррогатных композиций;
- определены целевые свойства для прогнозирования;
- разработан алгоритм оптимизации разработки состава суррогатной смеси соответствующей целевым свойствам бензина;
- проведен сравнительный анализ свойств суррогатов и образцов топлива полученных результатов;
- определено влияние октаноповышающих добавок на суррогатные и моторные топлива;
- сделаны выводы по полученным результатам.

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

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

Оглавление

Введение	15
1 Современные моторные топлива, добавки и присадки.....	17
2 Аналитический обзор.....	21
2.1 Суррогатное топливо	21
2.2 Практические суррогатные топлива.....	22
2.3 Целевые свойства моторного топлива	26
2.3.1 Физические свойства	26
2.3.2 Химические свойства.....	28
2.4 Алгоритмы разработки рецептур суррогатной композиции	32
2.5 Будущие направления исследований	35
3 Постановка задачи исследования	36
4 Экспериментальная часть.....	38
4.1 Характеристика объекта исследования.....	38
4.2 План и результаты эксперимента	38
4.3 Разработка суррогатной композиции.....	
4.3.1 Выбор компонентов суррогатной смеси.....	
4.3.2 Выбор целевых свойств.....	
4.3.3 Алгоритм оптимизации	
4.4 Исследования смесей образцов топлива и суррогатных композиций с октаноповышающими добавками.....	39
4.4.1 Рецептуры и физико-химические свойства добавок	39
4.5 Обсуждение результатов	43
5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение... 45	
5.1 Предпроектный анализ	45
5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	45
5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	46
5.1.3 SWOT – анализ	47
5.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	50

5.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования.....	52
5.2 Инициация проекта.....	52
5.3 Планирование научно – исследовательских работ.....	54
5.3.1 Иерархическая структура работ проекта.....	54
5.3.2 План проекта.....	55
5.3.3 Бюджет научного исследования.....	57
5.3.4 Организационная структура проекта.....	63
5.3.5 План управления коммуникациями проекта.....	63
5.3.6 Реестр рисков проекта.....	64
5.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	64
5.4.1 Оценка абсолютной эффективности исследования.....	64
5.4.2 Оценка сравнительной эффективности исследования.....	69
6 Социальная ответственность.....	73
6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	73
6.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	73
6.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.....	74
6.2 Производственная безопасность.....	76
6.2.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования.....	77
6.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.....	79
6.2.3 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.....	82
6.2.4 Расчет искусственного освещения.....	82
6.3 Экологическая безопасность.....	85

6.3.1 Анализ возможного влияния объекта исследования на окружающую среду	85
6.3.2 Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду	86
6.3.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды	87
6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	87
6.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований	87
6.4.2 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований	88
6.4.3 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС	89
Заключение	92
Список используемых источников.....	93
Приложение А	98
Приложение Б.....	114
Приложение В.....	116
Приложение Г	127

Введение

В настоящее время основной движущей силой развития двигателей внутреннего сгорания является стремление к повышению топливной эффективности и снижению выбросов. Для разработки и оптимизации новых систем сгорания требуется высокая точность моделирования.

Основным топливом двигателей внутреннего сгорания (ДВС) является бензиновое топливо, состоящее из десятков индивидуальных углеводородных компонентов, состав которого может изменяться в зависимости от месторождения сырья и производителя топлива. В нормативных документах на бензиновое топливо нет требований на точное содержание отдельных химических компонентов в бензине, а есть лишь требования к отдельным группам углеводородов и его суммарным физико-химическим свойствам. В связи с этим состав топлива может сильно варьироваться, что делает невозможным его прямое использование для численного моделирования процессов горения в камерах сгорания (КС) двигателей. Для решения данной проблемы используют модельное топливо, называемое суррогатом. Суррогат бензина – смесь известного состава, состоящая из ограниченного количества химических компонентов и воспроизводящая наиболее важные характеристики реального топлива. Компонентный состав суррогата бензина также должен обеспечивать возможность моделирования процессов горения с использованием существующих детальных кинетических механизмов. Суррогаты удобно использовать для моделирования и применять на испытательных стендах для соответствующих экспериментальных исследований.

В процессе разработки суррогатов, их химический состав выбирается таким образом, чтобы имитировать выбранные ключевые свойства соответствующих целевых топлив. Некоторые из этих ключевых свойств, например, характеристики дистилляции, плотности или октанового числа, являются обязательными для определения, в то время как другие, которые имеют большое значение для разработчиков двигателей, не

стандартизированы, в частности теплотворная способность, соотношение Н/С или вязкость. Моделирование самых разнообразных свойств топлива становится все более сложным. Во-первых, не хватает подходящих компонентов для суррогата. Кроме того, включение слишком большого количества компонентов в суррогат может привести к математическим ошибкам, поскольку каждый компонент вносит одну переменную в целевую функцию алгоритма оптимизации.

За последние два десятилетия были приняты различные подходы к генерированию и оптимизации заменителей бензина.

Таким образом, разработка рецептур суррогатных топлив для моделирования и прогноза свойств реальных бензинов остается актуальной задачей, позволяющей предсказывать свойства топлив без трудоемких экспериментальных исследований.

1 Современные моторные топлива, добавки и присадки

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

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

Так, например, авторы [1] предложили кислородсодержащую антидетонационную присадку к автомобильному бензину для двигателей внутреннего сгорания с искровым зажиганием, состоящая из метил-трет-бутилового эфира, отличающаяся тем, что дополнительно содержит изобутиловый спирт при следующем соотношении компонентов:

- изобутиловый спирт – 20-80 мас. %,
- метил-трет-бутиловый эфир – остальное.

КАДП состоит из веществ, не обладающих повышенной канцерогенной активностью. Продуктами полного сгорания КАДП являются углекислый газ и вода, которые не являются токсичными соединениями.

Синергетический эффект взаимодействия МТБЭ и ИБС в качестве КАДП в автомобильных бензиновых двигателях позволяет увеличить октановое число на несколько пунктов больше по сравнению с увеличением, полученным при их раздельном использовании в той же объемной концентрации.

Авторы патента [2] разработали комплексную добавку для автомобильного бензина для двигателей внутреннего сгорания с искровым зажиганием, состоящую из метил-трет-бутилового эфира, изобутилового спирта, отличающуюся тем, что дополнительно содержит азотсодержащее ароматическое соединение ММА и антикоррозионную добавку DCI-11 при следующем соотношении компонентов: ИБС - 20-80 мас. %, ММА - 0,5 мас. %, антикоррозионная добавка DCI-11 - 0,015 мас. %.

Недостатком этой добавки является фазовая нестабильность и коррозионная активность, а также небольшое увеличение октанового числа по сравнению с известными азотсодержащими ароматическими антидетонационными добавками. Однако использование ММА и ароматических соединений в качестве присадок против детонации в настоящее время ограничено, и их содержание в бензине строго регулируется.

Октаноповышающая добавка, предложенная авторами [2] к автомобильному бензину на основе изобутанола, отличается содержанием побочных продуктов получения бутиловых спиртов или их смеси с отходами производства 2-этилгексанола при следующем соотношении компонентов, мас. %:

– побочные продукты производства бутиловых спиртов или их смеси с отходами производства 2-этилгексанола 5-30;

– изобутанол до 100.

Добавка, содержит бензиновую фракцию процесса пиролиза углеводородов, кипящую в интервале температур 32-190 °С в количестве до 20 мас. %, а также антикоррозионную добавку в количестве до 0,05 мас. %.

Предложенная добавка при заявленном соотношении компонентов имеет высокую антидетонационную эффективность, фазовую стабильность при низких температурах, при этом снижение себестоимости за счет квалифицированного использования неостребованных отходов, упрощение компонентного состава и возможность его производства на одном предприятии. Топливная композиция автомобильного бензина, содержащая данную присадку, соответствует требованиям ТР ТС 013/2011.

Изобретение [4] относится к высокооктановому бензину, предназначенному для использования в оборудовании, оснащённом поршневыми двигателями внутреннего сгорания с искровым зажиганием.

Бензин имеет температуру кипения не выше 215°C и октановое число, по исследовательскому методу, не менее 91 ед. В качестве основного компонента содержит низкооктановый бензин газовый стабильный, метил-трет-бутиловый эфир, ароматический компонент и изооктен при следующем соотношении компонентов, мас. %:

- низкооктановый бензин газовый стабильный – 42,0-61,0;
- МТБЭ – 3,0-21,0;
- ароматический компонент – 1,0-41,0;
- изооктен – 0,0-17,0.

Главное отличие предложенного бензина в том, что содержит ароматические углеводороды $\text{C}_7\text{-C}_{10}$ в виде индивидуальных углеводородов или их смеси, жидкие продукты пиролиза, в качестве ароматического.

Авторами патента [5] предложено альтернативное автомобильное топливо с октановым числом по моторному методу не менее 100,0 ед., состоящее из этилового спирта до 100 об. % и эфирной части 5-10 об. %, отличающееся тем, что эфирная часть содержит циклический эфир-пропилен оксид с температурой кипения $+ 34,2^{\circ}\text{C}$ и давлением насыщенных паров порядка 118 кПа, оксид пропилена смешивают с этиловым спиртом при температуре окружающей среды.

Поскольку этиловый спирт обладает повышенной коррозионной активностью в присутствии воды, дополнительно рекомендуется вводить в топливо добавку, обладающую антиокислительными и антикоррозионными свойствами, хотя пропилен оксид как органическое основание и сам способен значительно снизить коррозионную активность спирта.

Все компоненты топливной композиции, используемой в настоящем изобретении, производятся промышленностью.

Основным фактором, предопределяющим использование пропилен оксида, является его относительно низкая точка кипения $+ 34,2^{\circ}\text{C}$. Это

позволяет только 5 % пропилен оксида иметь тот же эффект, что и 15 % товарного бензина с 85% этилового спирта.

Авторы [6] разработали альтернативное автомобильное топливо для двигателей внутреннего сгорания с искровым зажиганием с октановым числом, по исследовательскому методу, не менее 90,0 единиц, которое состоит из этилового спирта и углеводородной фракции, выкипающей до 225°C (100,0 мас. %), дополнительно содержит 2-метилфуран и этиловый спирт (5,0-50,0 мас. %), причем эти компоненты представляют собой продукт переработки растительного целлюлозного сырья, получены в одном производственном цикле и входят в состав альтернативного топлива.

Также добавка дополнительно содержит стабилизирующий агент фенольного или аминного типа в количестве до 500 мг/кг, присадку с антикоррозионными свойствами в количестве 12-350 мг/л и толуол в количестве до 10 мас. %.

Преимущество изобретения заключается в том, что теплота сгорания альтернативного топлива согласно изобретению выше, чем теплота сгорания прототипа, и приближается к теплоте сгорания автомобильного бензина.

Также является преимуществом возможность получения этилового спирта и 2-метилфурана в одном цикле производства.

Анализ современных добавок и присадок к топливам для улучшения их эксплуатационных свойств, а также получение альтернативного высокооктанового топлива, показали наличие множества присадок к моторному топливу разных составов и назначений, что говорит об актуальности их использования и большом ассортименте.

2 Аналитический обзор

2.1 Суррогатное топливо

Состав и свойства топлива могут влиять на эксплуатационные характеристики современных двигателей, выбросы [7] и могут иметь большое значение в новых ДВС использующих свойства топлива в качестве дополнительного контрольного параметра. Однако используемые виды топлива представляют собой смеси сотен углеводородов, и для их представления [8] в вычислительных моделях необходимы упрощенные суррогатные топлива. Суррогатное топливо содержит ограниченное количество чистых компонентов, смешанные в определенных пропорциях для соответствия целевыми свойствами бензина. Невозможно, чтобы один суррогат представлял все аспекты поведения топлива в двигателе, которые представляют интерес, и для моделирования различных явлений потребуются разные суррогаты. Например, суррогатное топливо для моделирования испарения и образования смеси, вероятно, будет сильно отличаться от поведения суррогата для моделирования самовоспламенения. Однако по мере того, как кинетические модели становятся доступными для большего количества компонентов, будущие суррогаты могут воспроизводить все характеристики реального топлива.

Разработка суррогатного топлива для бензина, является неотъемлемой частью моделирования поведения бензина. Двигатели внутреннего сгорания работают на бензиновых топливах, содержащих углеводороды, полученные из ископаемых ресурсов. Химический состав бензина может меняться в зависимости от времен, месторождения сырья и производителя, поэтому необходимы методы прогнозирования важных химических и физических свойств. Соответствующая суррогатная топливная смесь может точно имитировать целевые свойства исследуемого бензинового топлива.

В ранних исследованиях в качестве суррогатов обычно использовались однокомпонентные или бинарные смеси (н-гептан/изооктан). Однако за последнее десятилетие был достигнут быстрый прогресс в составлении и

использовании тройных смесей (н-гептан/изооктан/толуол), а также многокомпонентных смесей, которые охватывают весь диапазон углеродных чисел бензиновых топлив ($C_4 - C_{10}$).

Суррогатное топливо не только обеспечивает лучшее понимание влияния состава на различные свойства, но также имеет ценность как стабильное во времени топливо в экспериментальных исследованиях.

В зависимости от того, для каких задач используется суррогат, к нему предъявляются различные требования. Суррогаты бензина могут быть физическими, если они повторяют физические свойства (плотность, вязкость, давление насыщенных паров, фракционный состав), что важно при моделировании процессов распыливания топлива, образования капель и их испарения. Суррогаты могут быть химическими, если они повторяют химические свойства, что важно для моделирования детонационной стойкости, процессов горения и образования выбросов. Суррогаты, которые повторяют как физические, так и химические свойства реального топлива, называются комплексными.

Суррогатное топливо применяется для моделирования:

- скорости ламинарного горения при повышенных давлениях;
- октановой чувствительности;
- распространения пламени и задержки воспламенения;
- самовоспламенения в двигателях;
- испарения топлива;
- сгорания и образование сажи;
- выбросов загрязняющих веществ.

2.2 Практические суррогатные топлива

Основными классами углеводородов в типичных бензиновых топливах являются н-алканы, изо-алканы, циклоалканы, олефины, ароматические соединения и спирты, однако двухкомпонентные смеси н-гептана и изооктана используются в качестве суррогатов бензина в двигателях в течение многих лет. Недавние исследования показали, что

для воспроизведения интересующих целевых топлив требуется более сложная смесь, поскольку эффективность смесей гептан и изооктана для моделирования горения в двигателе довольно ограничена, так как кинетика их зажигания не воспроизводит реального поведения бензина в широком диапазоне условий, необходимых для применения [9, 10].

Авторы Mehl M et. al [11] сформулировали четырехкомпонентный суррогат (н-гептан, изооктан, толуол и 2-пентен) для бензинового топлива. Важный вклад данного исследования заключается в способности предсказывать антидетонационный индекс (среднее значение между ОЧИ и ОЧМ) и чувствительность ($S = \text{ОЧИ} - \text{ОЧМ}$) суррогатных смесей с использованием химико-кинетического моделирования задержки воспламенения гомогенной газовой фазы. Позже суррогатную смесь сравнивали с бензином в машине быстрого сжатия для измерений задержки воспламенения [12]. Суррогат воспроизводил поведение зажигания реального топлива лучше, чем суррогат TRF.

В данном исследовании [13] авторы составили суррогатные смеси для бензинов А и С FACE (топлива для современных двигателей внутреннего сгорания) в соответствии с составом PIONA (парафины, изопарафины, олефины, нафтены и ароматические соединения) и характеристиками задержки воспламенения с использованием моделирования химической кинетики наряду с экспериментами на машинах быстрого сжатия и ударных трубах. Суррогатные композиции хорошо воспроизводили целевые свойства, указанные в этом исследовании, наряду с особенностями задержки воспламенения.

Кноп и др. [14] предложили TRF, TRF + этанол и 6-компонентную смесь для представления бензинового топлива (ULG 95) путем согласования ОЧИ, ОЧМ, отношения Н/С, отношения О/С и нескольких физических свойств. Октановые числа смешанных суррогатов определяли смешиванием линейных мольных долей. В данном исследовании не использовали коэффициенты оптимизации или весовые коэффициенты для соответствия различным

свойствам. Авторы продемонстрировали, что суррогат TRF соответствует характеристикам горения реального топлива (ULG 95) в одноцилиндровом двигателе.

Dooley S et. al [15, 16] разработали комплексный подход к формулировке суррогатного реактивного топлива, ориентируясь на среднюю молекулярную массу реального топлива, отношение Н/С, производное цетановое число и пороговый индекс сажеобразования.

Авторы [16] продемонстрировали, что их многокомпонентные суррогаты воспроизводят поведение горения реального реактивного топлива (Jet-A POSF 4658) в широком диапазоне фундаментальных экспериментов по горению.

Разработан подход [17] определения целевых свойств, включая Н/С, низшую теплоту сгорания, летучесть и т.д. на модели для целевого реактивного топлива (Jet-A POSF 4658). Целевые свойства, указанные в [17], точно соответствуют свойствам идентифицированного целевого топлива. Летучесть топлива - это целевое свойство, которому в методологиях суррогатных формулировок уделялось ограниченное внимание. При сгорании дизельного топлива летучесть определяет испарение и последующее смешивание топлива с кислородом, что делает его важным целевым свойством.

Авторы [18] продемонстрировали подход к созданию суррогатного топлива с аналогичными характеристиками летучести с использованием методологии усовершенствованной кривой дистилляции, которая позволяет численно прогнозировать дистилляционные свойства топлива с использованием модельной смеси

Мюллер и др. [19] использовали регрессионные модели для определения важных целевых свойств дизельного топлива. В исследовании использовалась «Справочная база данных термодинамических и транспортных свойств жидкостей» (REFPROP) [20] для сопоставления характеристик летучести суррогатного топлива с реальным дизельным топливом. Данная база

использует высокоточные уравнения состояния Гельмгольца [20] для оценки различных свойств жидкости и прогнозирования профиля дистилляции с высокой точностью.

Летучесть топлива и кривая перегонки могут быть важными целевыми показателями для составления заменителей бензинового топлива при применении в ДВС.

Исследование Pitz W. J. и др. [21] разработали детальный химический кинетический механизм окисления изооктана, 1-гексена и толуола в качестве суррогатных компонентов для бензиновых топлив. Они применили его для моделирования процессов зажигания их смесей в машине быстрого сжатия. Определив влияние присутствия различных классов соединений на поведение топлива при зажигании, они проанализировали взаимодействия, происходящие между компонентами.

Пять суррогатных компонентов (изооктан, н-гептан, толуол, ди-изобутилен и этанол), представляющих пять различных химических классов, были использованы [22] для численного исследования химии самовоспламенения суррогатов бензина с точки зрения нелинейного смешивания моторного октанового числа (ОЧМ).

Как попытка выполнить моделирование бензинового топлива более реалистично предложена суррогатная композиция [23] для бензинового топлива (EUCG), которая содержит 22 суррогатных компонента, включая н-алканы (C4-C7), изо-алканы (C5-C8), циклоалкан (C6), алкены (C5, C6) и ароматические соединения (бензол, алкилбензолы, ПАУ). Этот суррогатный состав может близко воспроизводить горение топлива в предварительно смешанном пламени (пламя, образующееся при определенных условиях во время сгорания предварительно смешанного заряда топлива и окислителя) и показывает склонность к образованию сажи рассматриваемых компонентов топлива.

Отличаясь от основных химических классов компонентов топлива в бензине, изо-алканы, алкены и кислородсодержащие вещества менее

распространены в дизельных видах топлива, включая керосин (авиакеросин). Аналогично однокомпонентному бензиновому суррогату, такому как изооктан, н-декан много лет использовался в качестве единственного суррогатного топлива для керосина в кинетических исследованиях

Двухкомпонентный суррогат (23% м-ксилол и 77% н-додекан) был также использован авторами [24] для исследования тенденции сажеобразования обычного реактивного топлива в сосуде высокого давления.

Анализ разрабатываемых суррогатных композиций для воспроизведения целевых свойств топлив показал множество разных подходов и составов суррогатов для различных назначений. Это говорит об актуальности их практического применения в качестве заменителей топлива для исследования эксплуатационных свойств различных топлив.

2.3 Целевые свойства моторного топлива

При формулировании суррогата тщательно выбираются целевые свойства с пониманием того, как они влияют на сгорание в двигателе и рабочие характеристики. Поскольку каждое свойство влияет на процесс горения, необходимо учитывать взаимосвязь между целевым свойством и процессом сгорания.

Важно определить, каким целевым свойствам должен соответствовать суррогат, и следует ли имитировать все или, возможно, только подмножество целевых свойств. В этом разделе приводится краткое описание важных целевых свойств и объясняется их роль в различных процессах горения.

2.3.1 Физические свойства

Физические свойства бензина определяют важные показатели производительности, связанные с двигателем. Для моторного топлива основными нормируемыми показателями является: плотность, давление насыщенных паров, фракционный состав. Другие важные физические свойства включают вязкость и поверхностное натяжение, но они обычно не нормируются, поэтому их следует измерять дополнительно.

Давление насыщенных паров топлива создается паром при термодинамическом равновесии с жидкой фазой при определенной температуре. Давление насыщенных паров рыночного бензина изменяется в зависимости от сезонных температурных условий. Топливо с более низкой летучестью используется при более высоких температурах для минимизации выбросов паров, в то время как более высокая летучесть желательна в более холодных условиях. Давление паров бензина колеблется в диапазоне 35 – 100 кПа.

Измеряют давление насыщенных паров в закрытой камере при 37,8 °С (310,95 К) и давлении окружающей среды равной одной атмосфере (101,325 кПа).

Кривая разгонки (фракционный состав) бензина определяет количество перегоняемого топлива при изменении температуры. В бензине содержатся сотни углеводородных и кислородсодержащих компонентов, имеющих различные молекулярные массы и молекулярные структуры. Точки кипения различных углеводородов в смеси изменяются. Соединения с более низкими точками кипения перегоняют первыми, далее перегоняют соединения с более высокой температурой кипения. Фракционный состав влияет на производительность двигателя.

Пусковая фракция (первые 10 %) определяет начальную летучесть смеси, которая влияет на холодный запуск и потери при испарении. Рабочая и концевая фракции влияют на ускорение, производительность, экономию топлива и выбросы несгоревших углеводородов.

Фракционный состав измеряют по ГОСТу 2177-99, в котором колбу с объемом 100 мл топлива нагревают с регулируемой скоростью; когда топливо испаряется, газ проходит через трубку конденсатора, и извлекается конденсат. Температура измеряется термометром, расположенной над образцом жидкости, так что он измерял температуру газовой фазы. Регистрируют температуру, соответствующую различным объемам топлива, (например, T при 10 об. % , T50, T90 и т.д.).

Плотность и вязкость бензиновых топлив являются важными физическими свойствами, которые могут влиять на работу топлива при различных температурах и теплоту сгорания. Относительная плотность (отношение плотности топлива к плотности воды) - безразмерная величина. Плотность измеряется по ГОСТу 3900-85 с помощью ариометра, который погружают в испытуемый образец и снимают показания по шкале ариометра при температуре окружающей среды. Диапазон плотности для моторного топлива составляет от 0,725 до 0,780. Требования к вязкости для бензиновых топлив не упоминаются в стандартах, и измерение этих значений не требуется.

Выделено несколько важных физических свойств бензина. Необходимо понять, как эти свойства влияют на различные процессы в двигателе, чтобы знать, какие свойства важны для имитации суррогатного топлива.

Было отмечено, что летучесть и кривая разгонки влияют на холодный запуск двигателя и выбросы. Летучесть главным образом влияет на скорость испарения топлива и, таким образом, на соотношение воздух/топливо в камере сгорания. Эти процессы чрезвычайно сложны и включают как испарение капель перед поступлением в камеры сгорания, так и улавливание капель жидкости в объемный поток. Также важно смачивание стенок более крупными каплями, ударяющимися о впускное отверстие или впускной клапан. Динамика и эволюция этих процессов регулируются характеристиками летучести топлива, температурой, конструкцией двигателя и условиями эксплуатации.

2.3.2 Химические свойства

Химические свойства бензина влияют на процесс сгорания, поскольку окисление топлива/воздуха контролируется молекулярной структурой топлива. Как упоминалось ранее, бензин представляет собой сложную смесь сотен углеводородов, а также кислородсодержащих добавок. ГОСТ 32513-2013 для бензина обычно обеспечивает информацию об октановых числах топлива, содержании кислорода, содержании ароматических соединений, содержании олефинов, которые определяются различными стандартными

методами ASTM или EN. В дополнение к этим типичным химическим свойствам более подробная информация о химическом составе бензина может быть получена детальным анализом углеводородов (ДНА), включая распределение PIONA (парафинов, изо-парафинов, олефинов, нафтенов, ароматических соединений) и даже отдельных углеводородных структур.

Химический состав является одним из важных свойств бензина, который определяет все последующие химические свойства (октановые числа, отношение Н/С, теплоту сгорания и т. д.) и физические свойства (кривая перегонки, плотность и т. д.). Бензин перегоняют из сырой нефти, следовательно, прямогонный бензин включает в себя от C₄ до C₁₀ парафины, изо-парафины, нафтены (циклопарафины) и ароматические соединения. Используются различные процессы нефтепереработки для обогащения продуктов перегонки до видов топлива, удовлетворяющих требования к товарному бензину. Основные из них – алкилирование, изомеризация и каталитический риформинг [25], все из которых направлены на создание высокооктановых молекул в диапазоне молекулярных масс бензина.

Парафины имеют самое низкое октановое качество из всех бензиновых углеводородов и обычно не содержатся в больших количествах в рыночных топливах. Изо-парафины обычно встречаются в больших количествах из-за их более высоких октановых чисел. Октановое число увеличивается с увеличением степени метильных заместителей [26], поэтому более высокую концентрацию в бензине обычно имеют парафины (C₇ – C₈) от одной до трех метильных заместителей. Широко используемые первичные суррогаты эталонного топлива, н-гептан и изооктан, присутствуют в небольших количествах (менее 1%) в реальных бензиновых топливах.

Содержание нафтенов в бензине должно быть небольшим поскольку эти соединения имеют низкое октановое число и легко превращаются в ароматические соединения посредством риформинга. Типичные нафтены, обнаруженные в бензине, находятся в диапазоне от C₅ до C₈ и включают такие виды, как циклогентан, циклогексан, метилциклопентан, метилциклогексан и

изомеры диметилциклогексана. Циклопентан имеет наибольшее октановое число среди циклоалканов.

Олефины (алкены) также встречаются в ограниченных количествах из-за их плохой окислительной стабильности, что снижает срок хранения бензиновых топлив. Содержание олефинов в товарном бензине ограничено не более 18 % по объему. Олефины в бензине представлены в диапазоне от C_5 до C_8 и включают линейные и разветвленные изомеры пентена и гексена. Благодаря наличию двойных связей в молекулярной структуре они имеют высокие октановые числа; но они также проявляют высокую октановую чувствительность.

Ароматические соединения являются самыми высокомолекулярными углеводородами в бензиновых топливах, представлены в диапазоне C_6 до C_9 углеродных чисел. Конец кривой разгонки бензина обычно состоит из высокомолекулярных алкилбензолов. Ароматические соединения имеют высокие октановые числа, но они обычно ограничены не более 35 об. % из-за их склонности к увеличению выбросов сажи (твердых частиц). Кроме того, бензол является известным канцерогеном, поэтому его концентрация в бензине ограничена одним объемным %. По этим причинам ароматические углеводороды в бензиновом топливе ограничиваются толуолом, м-ксилолом, о-ксилолом, этилбензолом и различными изомерами триметилбензола. Толуол является наиболее преобладающим ароматическим соединением в бензине, за которым следуют изомеры ксилола.

В дополнение к углеводородным компонентам бензиновые топлива могут также содержать различные кислородсодержащие добавки. Традиционно в бензин добавляют оксигенаты, такие как метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ), этил-трет-бутиловый эфир (ЕТБЭ), трет-амил-метиловый эфир (ТАМЕ), ди-изопропиловый эфир (ДИПЭ), метанол, этанол и трет-бутанол для улучшения его антидетонационных свойств. Этанол, безусловно, является наиболее широко используемой кислородсодержащей добавкой для бензиновых топлив.

Химический состав топлива в конечном счете влияет на связанные с горением целевые свойства, такие как ОЧИ, ОЧМ, теплоту сгорания. Однако в настоящее время сложно включить полный спектр углеводородов в суррогатную смесь бензина, главным образом из-за отсутствия химических кинетических моделей для большинства видов. Тем не менее, вполне вероятно, что по мере того, как кинетические модели будут изучены для сотен углеводородов, будущие суррогатные смеси бензина будут включать большое количество компонентов, которые точно имитируют все свойства целевого бензина.

Точный химический состав бензиновых топлив может быть определен по ГОСТу Р 52714-2018, который использует газовую хроматографию высокого разрешения. Этот метод испытаний определяет отдельные углеводородные компоненты в моторных топливах, включая смеси, содержащие оксигенаты.

Детонационная стойкость, пожалуй, наиболее важное химическое свойство бензинового топлива, которая определяется способностью топливно-воздушной смеси противостоять самовоспламенению при сжатии.

Детонационная стойкость, или октановое число, традиционно измеряется по двум методам: моторному (соответствует работе двигателя при больших нагрузках) и исследовательскому (соответствует работе двигателя при его частичной нагрузке). Испытание моторным методом проводят при 900 об/мин и температуре всасываемой смеси 149 ° С; испытание исследовательским методом проводится при частоте вращения двигателя 600 об/мин и температуре всасывания 52 ° С в одноцилиндровом двигателе УИТ. Все практические виды топлива имеют ОЧИ выше, чем ОЧМ, и разница между ОЧИ и ОЧМ известна как октановая чувствительность (S).

Теплота сгорания бензина является измерителем его энергетического содержания, которое измеряется как тепло, вырабатываемое сжиганием заданного количества топлива в стехиометрических пропорциях с воздухом при определенных начальных условиях (температуре и давлении). По этой

причине теплота сгорания непосредственно связана с химическим составом бензинового топлива.

Химические свойства по своей природе влияют на процессы сгорания в двигателе, поскольку молекулярная структура влияет на реакционную способность.

2.4 Алгоритмы разработки рецептур суррогатной композиции

Суррогатная топливная смесь, содержащая ограниченное количество компонентов, может быть составлена таким образом, чтобы соответствовать различным физическим и химическим целевым свойствам реального бензинового топлива. В этом разделе описываются различные подходы к разработке суррогатных топлив. Методология формулирования суррогатов дизельного и авиационного топлива также имеет отношение к настоящему исследованию, поскольку подход аналогичен. [27, 28].

Целевые свойства, которые должны быть сопоставлены со свойствами бензина, и их связь с процессами сгорания двигателя, которые должны быть воспроизведены суррогатом, являются первой задачей, которую необходимо решить. Наиболее важным свойством для бензиновых топлив является детонационная стойкость; то есть ОЧИ и ОЧМ суррогата должны быть такими же, как у бензина.

Pitz et al. [29] заявили, что суррогаты бензина должны быть сформулированы так, чтобы соответствовать важным целевыми показателям свойств топлива, таким как: соотношение Н/С и теплота сгорания. Реальные бензиновые топлива имеют отношения Н/С между 1,6 и 2,0, поэтому суррогатные топливные смеси должны находиться в этом диапазоне. Отношения Н/С важно, поскольку отношение воздух/топливо зависит от этого значения. Если соотношение Н/С хорошо соответствует реальному топливу, то поток воздуха в двигатель будет одинаковым для реального топлива и его суррогата.

Общая методология приготовления бензинового суррогатного топлива была представлена Puduprakam et al. [30]. Сначала была выбрана палитра

суррогатных компонентов топлива, которая содержала молекулы, представляющие различные химические классы в реальных бензиновых топливах. Затем суррогатные компоненты смешивали в пропорциях, необходимых для соответствия различным целевым свойствам реального топлива. Авторы описали целевые свойства, которые должны быть согласованы, включая молекулярную структуру, кривую разгонки, октановые числа, теплоту сгорания и отношение Н/С. Согласование молекулярного состава помогало соответствовать различным физическим свойствам топлива. Совпадение нескольких точек вдоль кривой дистилляции (например, T10, T50, T90) обеспечило соответствие суррогата характеристикам распыления реального бензина. Как отмечалось ранее, совпадающие октановые числа необходимы для имитации характеристики детонации. Теплота определяет совокупное выделение тепла при сгорании, в то время как отношение Н/С определяет характеристики выбросов, поэтому эти свойства должны быть согласованы в суррогатном топливе. Pudupakkam et al. [30] описал вычислительную методологию, для формирования суррогата, которая соответствует различным целевым свойствам. Методология сводит к минимуму целевую функцию для оптимизации суррогатной композиции. Методология является гибкой так как различные целевые свойства могут быть включены или удалены (например, отношение О/С может быть добавлено для кислородсодержащих топлив).

Su et al. [31] предложил аналогичный подход к разработке суррогатного топлива для транспортных топлив, включая бензин. Целевые свойства, представляющие интерес, включали физические свойства, такие как плотность, теплоту сгорания, летучесть и вязкость, и химические свойства, такие как отношение Н/С и детонационную стойкость (т.е. ОЧИ). Они использовали алгоритм оптимизации для определения суррогатных смесей, которые лучше всего соответствовали целевым свойствам. Каждому целевому свойству был присвоен весовой коэффициент для количественной оценки его важности, а также допуски ошибок для проверки сходимости. Методология

использовалась для формулирования суррогата, который точно воспроизводил поведение сгорания целевого топлива в условиях двигателя.

Уникальный подход к рецептуре суррогата бензина был представлен Mehl et al. в Ливерморской национальной лаборатории им. Лоуренса [32]. Как и предыдущие подходы, выбор палитры суррогатных компонентов был первым этапом вместе с целевыми свойствами, которые должны быть сопоставлены. Целевые свойства включали содержание парафинов в бензине, ароматических соединений и олефинов, соотношение Н/С, ОЧИ и ОЧМ. Авторы представили новую методологию определения ОЧИ и ОЧМ для предлагаемой суррогатной смеси. Методология предполагала химическое кинетическое моделирование в условиях гомогенного периодического реактора для прогнозирования времени задержки зажигания суррогатной смеси. Затем для определения ОЧИ и ОЧМ предлагаемой суррогатной смеси [32] использовали сравнение времени задержки зажигания для различных смесей с известными ОЧИ и ОЧМ.

Pera и Кноп [33, 34] показали, что отношение Н/С, отношение О/С, молекулярная масса, ОЧИ и ОЧМ могут быть рассчитаны с использованием простых правил линейного молярного смешивания. Физические свойства, такие как характеристики летучести (т.е. кривая перегонки), являются более сложными для оценки, поскольку они не являются аддитивными.

Общий план приготовления суррогатной смеси представляет собой определение, физических и химических свойства, которые следует выбирать в качестве целевых свойств, а также их связь с технологией сжигания и интересующими условиями эксплуатации. После выбора целевых свойств бензина суррогатное топливо может быть приготовлено из смеси компонентов, представляющих реальное топливо. Оптимальную смесь компонентов лучше всего определить с помощью вычислительного алгоритма, который решает целевую функцию для минимизации ошибки по отношению ко всем целевым свойствам.

2.5 Будущие направления исследований

Были проведены исследования бензиновых топлив и их суррогатов, однако существует мало фундаментальных исследований влияния различных добавок к бензиновым топливам. Широко известно, что добавление высокооктановых добавок (например, этанола [35]) влияет на изменение октанового числа в зависимости от октанового числа основного топлива и состава. Однако теоретические объяснения и модели, способные предсказывать влияние добавки, могут быть достигнуты только детальными исследованиями на основе суррогатных смесей. Эти исследования могли бы дать возможность предсказывать ОЧ товарного топлива.

Долгосрочной целью для дальнейшего развития может быть включение более ориентированных на применение критериев оптимизации (например, свойств воспламенения) путем объединения алгоритма разработки суррогатного топлива с расчетом кинетики реакции, основанным на комплексных механизмах многокомпонентных реакций. Этот шаг мог бы позволить применять суррогатные композиции для моделирования сжигания и выбросов.

Химико-кинетические свойства для различных суррогатных компонентов бензина значительно улучшились за последнее десятилетие. Однако эти свойства в настоящее время ограничены моделями n-алкана, и требуются улучшения кинетических моделей для других углеводородов. Необходимы улучшенные модели для изоалканов $C_6 - C_8$, циклоалканов $C_6 - C_8$ и ароматических углеводородов $C_7 - C_9$. Кроме того необходимы, кинетические модели, способные моделировать многокомпонентные смеси (например, до десяти компонентов).

3 Постановка задачи исследования

Определение эксплуатационных свойств топлива – задача, которая всегда будет актуальна при производстве моторных топлив. Для экспериментального определения основных свойств требуются специальные установки, приборы и большие денежные затраты. Определение свойств по данным хроматограммы достаточно дорогостоящий, длительный и недостаточно достоверный метод.

Поэтому разработка суррогатных композиций для прогнозирования основных целевых свойств бензина актуальная задача, как для промышленных предприятий, так и для исследователей, разрабатывающих рецептуры смешения и высокооктановые добавки.

Цель данной работы получение бензина с заданным ОЧ без трудоемких экспериментов.

Объекты исследования – бензиновые фракции различного происхождения с различным групповым составом, суррогатные композиции, в качестве октаноповышающих добавок были выбраны оксигенаты.

Методы исследования: групповой состав бензиновых фракций определялся газовой хроматографией, измерение октановых чисел осуществлялось с помощью октанометра ОКТАН-ИМ. Программная реализация разработанной математической модели процесса выполнена в Microsoft Excel.

Для достижения цели необходимо:

- выполнить экспериментальные работы по определению физико-химических свойств бензиновых фракций;
- разработать рецептуры суррогатных композиций;
- определить целевые свойства для прогнозирования;
- разработать алгоритм оптимизации разработки состава суррогатной смеси соответствующей целевым свойствам бензина;
- провести сравнительный анализ свойств суррогатов и образцов топлива полученных результатов;

- определить влияние октаноповышающих добавок на суррогатные и моторные топлива;
- сделать выводы по полученным результатам.

4 Экспериментальная часть

4.1 Характеристика объекта исследования

В данной работе исследовались бензиновые фракции различного происхождения и суррогатные композиции, в качестве компонентов суррогата использовались: толуол, изооктан, гептан, пентан, а также их смеси с октаноповышающими добавками: этанол, метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ) и изопропиловый спирт.

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

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

4.2 План и результаты эксперимента

По результатам проведенных исследований получены данные по физико-химическим свойствам пяти проб исследуемых образцов бензина, которые представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Основные физико-химические свойства исследуемых бензинов

Показатель	Проба				
	1	2	3	4	5
ОЧИ	66,5	70,8	51,9	59,7	52,4

Продолжение таблицы 1

ОЧМ	63,8	67,7	49,8	57,6	50,4
ОЧИ (хроматограмма)	61,9	63,0	59,7	55,2	57,9
ОЧМ (хроматограмма)	57,2	52,9	53,9	47,2	51,4
Плотность относительная	0,732	0,7289	0,725	0,731	0,733
Плотность относительная (хроматограмма)	0,723	0,732	0,703	0,723	0,713
Плотность, кг/м ³ (UniSim)	726,9	742	717,7		
Фракционный состав					
н.к.	48	57	50	58	48
10%	79	93	74	97	80
50%	114	128	110	122	114
90%	165	189	155	163	158
к.к.	180 (93%)	203 (92%)	160 (92%)	174 (94%)	165 (93%)
Фракционный состав (хроматограмма)					
н.к.	40,2	53,7	38,9	53,9	40,2
10%	68,6	73,4	60,0	77,9	65,7
50%	109,4	112,2	99,6	112,9	107,4
90%	142,4	185,3	133,6	143,6	139,8
к.к.	222,6	272,7	236,3	248,9	222,8

4.4 Исследования смесей образцов топлива и суррогатных композиций с октаноповышающими добавками

4.4.1 Рецептуры и физико-химические свойства добавок

Для прогноза рецептур смешения образцов топлива и суррогатных композиций с октаноповышающей добавкой, требуются знание ряда свойств и допустимые концентрации в составе бензинов, согласно ТР ТС 013/2011, которые представлены в таблице 5.

Таблица 5 – Характеристики добавок

Показатель \ Добавка	Этанол	МТБЭ	Изопропиловый спирт
Плотность, кг/м ³	789	740	786
ОЧИ	125	118	122
ОЧМ	101	101	98
Допустимая концентрация, % масс.	15	15	10

Алгоритм расчета объемного содержания компонентов в смеси представлен ниже:

1) Вычисление объема компонентов смеси, м³.

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

$$V_i = \frac{m_i}{\rho_i}, \quad (12)$$

где V_i – объем i -го компонента, м³;

m_i – массовая доля i -го компонента;

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

2) Вычисление объемной доли добавки:

$$v_d = \frac{V_d}{V_d + V_б}, \quad (13)$$

где v_d – объемная доля добавки;

V_d и $V_б$ – объем добавки бензина, соответственно, м³.

Аналогично рассчитывается объемная доля бензина.

3) Расчет содержания компонентов в смеси, в нашем случае в 75 мл:

$$V_i = v_i * 75, \quad (14)$$

где V_i – содержание i -го компонента, мл.

Результаты расчета представлены в Приложении Б.

Для полученных, согласно рассчитанным рецептурам, смесей с октаноповышающими компонентами измерили ОЧИ и ОЧМ, оценили их прирост.

ОЧ суррогатных смесей с октаноповышающими добавками определяли по формуле:

$$ОЧ_{\text{смеси}} = \sum_{i=1}^n x_i * ОЧ_i \quad (15)$$

где $ОЧ_i$ – октановое число i -ого компонента,

x_i – мольная доля i -ого компонента.

Полученные значения представлены в таблице 8.

Таблица 6 – Оценка смесей образцов бензина и суррогатов с различным содержанием октаноповышающих компонентов по октановому числу

Проба № 1						
	ОЧИ _{расч}	ОЧМ _{эксп}	Погрешность (ОЧИ), %	ОЧИ _{расч}	ОЧМ _{эксп}	Погрешность (ОЧМ), %
+ этанол 5 % масс.	72,7	71,4	1,73	67,8	67,1	1,11
+ этанол 7 % масс.	74,2	74,7	0,32	69,3	69,4	0,14
+ этанол 10 % масс.	74,9	75,1	4,12	71,3	69,6	2,55
+ МТБЭ 5 % масс.	69,5	71,3	2,59	66,0	67,1	1,52
+ МТБЭ 8 % масс.	71,3	72,8	2,17	67,3	68,5	1,67
+ МТБЭ 12 % масс.	73,6	74,7	1,53	69,0	69,3	0,38
Проба № 2						
+ этанол 5 % масс.	76,4	75,6	1,12	73,8	71,7	2,97

+ этанол 7 % масс.	78,8	78,9	0,12	72,9	73,8	1,12
+ этанол 10 % масс.	81,9	79,2	3,41	74,8	73,9	1,15
+ МТБЭ 5 % масс.	73,6	75,6	2,59	70,1	71,7	2,24

Продолжение таблицы 6

+ МТБЭ 8 % масс.	75,7	75,8	0,06	72,2	71,6	0,85
+ МТБЭ 12 % масс.	77,4	78,9	1,83	72,7	73,9	1,55
Проба № 3						
+ этанол 5 % масс.	59,3	57,1	3,83	55,4	54,4	1,84
+ этанол 7 % масс.	62,1	60,6	2,35	57,3	56,5	1,42
+ этанол 10 % масс.	66,0	64,4	2,51	60,1	59,1	1,64
+ МТБЭ 5 % масс.	55,6	60,5	8,17	53,1	56,5	6,04
+ МТБЭ 8 % масс.	57,8	63,8	9,49	54,8	58,8	6,87
+ МТБЭ 12 % масс.	60,7	64,2	5,56	57,0	59,0	3,43
+ Изопропиловый спирт 3 % масс.	58,2	56,8	2,39	54,7	54,2	0,79
+ Изопропиловый спирт 6 % масс.	63,7	60,1	5,99	58,3	56,3	3,57
+ Изопропиловый спирт 10 % масс.	67,1	62,7	6,97	62,4	58,1	7,33
Проба № 4						
+ этанол 5 % масс.	66,7	64,0	4,19	62,3	60,7	2,65
+ этанол 7 % масс.	69,3	68,4	1,23	63,9	63,3	1,12
+ этанол 10 % масс.	72,9	71,9	1,46	66,4	65,6	1,33
+ МТБЭ 5 % масс.	63,1	68,4	7,71	60,2	63,3	4,87
+ МТБЭ 8 % масс.	65,2	69,5	6,25	61,7	64,4	4,15

Продолжение таблицы 6

+ МТБЭ 12 % масс.	67,8	71,6	5,27	63,7	66,5	4,19
+ Изопропиловый спирт 3 % масс.	65,6	64,4	1,85	61,5	60,9	0,96
+ Изопропиловый спирт 6 % масс.	70,8	68,3	3,58	64,8	63,2	2,41
+ Изопропиловый спирт 10 % масс.	76,8	71,61456	7,240362	68,7	65,5	4,95
Проба № 5						
+ этанол 5 % масс.	60,0	58,6	2,40	55,8	54,9	1,47
+ этанол 7 % масс.	62,8	62,3	0,82	57,7	57,5	0,45
+ этанол 10 % масс.	66,9	65,1	2,73	60,6	58,7	3,22
+ МТБЭ 5 % масс.	56,2	61,6	8,81	53,4	56,9	6,28
+ МТБЭ 8 % масс.	58,4	63,0	7,28	55,1	58,3	5,41
+ МТБЭ 12 % масс.	61,4	64,2	4,41	57,4	59,2	2,99
+ Изопропиловый спирт 3 % масс.	58,9	58,4	0,77	54,9	54,9	0,15
+ Изопропиловый спирт 6 % масс.	64,5	61,7	4,56	58,8	57,1	2,96
+ Изопропиловый спирт 10 % масс.	71,2	65,3	9,01	63,3	59,4	6,64

Анализируя полученные результаты, можно сделать вывод, что разработанные суррогатные топлива достаточно близко воспроизводят ОЧ образцов бензина в т.ч. с октаноповышающими добавками, средняя погрешность составляет 2,8 %.

4.5 Обсуждение результатов

В результате исследования пришли к следующим заключениям:

1. Смеси, полученные с помощью предложенного алгоритма оптимизации, достаточно близко воспроизводят основные физико-химические свойства исследуемых образцов бензина, кроме фракционного состава, по причине того, что компоненты суррогатного топлива имеют близкие температуры кипения.

2. Погрешность в прогнозировании основных свойств бензина составляет $<1\%$, что объясняется погрешностью в определении целевых свойств чистых компонентов суррогатного топлива и исследуемых образцов бензина.

3. Сравнительный анализ влияния октаноповышающих добавок на суррогатные и моторные топлива, также показали близкие значения, средняя погрешность составляет от 1 до 6 пунктов или $2,8\%$.

4. Полученные результаты, дают возможность, благодаря разработанным суррогатам предсказывать какое количество добавки необходимо для получения топлива с заданным ОЧ без экспериментов.

Дальнейшее исследование будет направлено на:

– сокращение целевых свойств, необходимых для определения состава суррогатной смеси;

– расширение базы данных с потенциальными кандидатами на компоненты суррогатного топлива, для прогнозирования фракционного состава, а также для сокращения погрешности;

– определение влияния различных добавок и присадок на детонационную стойкость топлив, в т.ч. и азотсодержащих.

5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1 Предпроектный анализ

5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

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

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

Продукт – моторное топливо с улучшенными эксплуатационными свойствами.

Большинство нефтехимических предприятия, научно – исследовательские центры и лаборатории нефтяной отрасли заинтересованы в производстве высокооктановых моторных топлив высокого качества, а также соответствии нормативным требованиям и стандартам, предъявляемым им, с минимизацией затрат на подготовку и дальнейшую транспортировку. Таким образом, применение экспресс – методов для определения октанового числа моторных топлив является минимально затратным и быстрым методом определения. Карта сегментирования приведена на рисунке 1.

		Вид продукции		
		Бензин	Дизельное топливо	Присадки
Размер компании	Крупные			
	Средние			
	Мелкие			

Рисунок 1 – Карта сегментирования рынка услуг по разработке высокооктановых компонентов



Предприятия и заводы нефтехимической промышленности



Лаборатории, нефтехимические университеты и научно – исследовательские центры



Аналитические центры

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

5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения.

В данном научном исследовании анализируется влияние влияния добавок к моторным топливам на их детонационные свойства, главным образом на основании суррогатного топлива.

В таблице 7 приведена оценка конкурентов, где Φ – разрабатываемый проект, k_1 – исследование, проведенное инженером-химиком в научно-исследовательском институте, k_2 – исследование, проведенное организацией.

Таблица 7 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		B_{Φ}	B_{k1}	B_{k2}	K_{Φ}	K_{k1}	K_{k2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,18	5	3	4	0,90	0,54	0,72
2. Простота эксплуатации	0,18	5	4	4	0,90	0,72	0,72
3. Надежность	0,15	5	4	3	0,75	0,60	0,45
4. Безопасность	0,13	4	4	4	0,52	0,52	0,52
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,15	5	4	4	0,75	0,60	0,60
2. Цена	0,11	5	3	2	0,55	0,33	0,22
3. Финансирование научной разработки	0,10	4	5	3	0,40	0,50	0,30
Итого	1	33	27	24	4,77	3,81	3,53

Критерии оценки подбираются, исходя из выбранных объектов сравнения с учетом их технических и экономических особенностей разработки, создания и эксплуатации.

Вес показателей в сумме должны составлять 1. Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot \text{Б}_i \quad (16)$$

где: K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

Б_i – балл i -го показателя.

Основываясь на проведенном анализе конкурентов, можно сказать что проект превосходит конкурентные исследования, что связано с удобством в эксплуатации, простотой и надежностью, а также ценой разрабатываемого проекта. Однако уязвимость разрабатываемого проекта в том, что требуется больше финансирования на его выполнение.

5.1.3 SWOT – анализ

SWOT – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта (таблица 8). Применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта. Анализ проводится в 3 этапа.

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.

Таблица 8 – Матрица SWOT-анализа

Сильные стороны	Слабые стороны
С1. Энергоэффективность и экономичность технологии.	Сл1. Недостаточное количество необходимого оборудования для проведения исследования
С2. Экспрессность	Сл2. Отсутствие инжиниринговой компании, для обучения персонал работать в рамках данного проекта
С3. Значимость промышленной технологии	
С4. Достаточно квалифицированный персонал	
С5. Ликвидность рабочего места	

	Сл3. Необходимость в материалах, комплектующих и новой информации для проведения научного исследования
Возможности В1. Использование усовершенствованной инфраструктуры ТПУ В2. Появление дополнительного спроса на новый ассортимент В3. Увеличение стоимости конкурентных разработок	Угрозы У1. Развитие конкуренции производства У2. Введение новых государственных требований к сертификации продукции У3. Истрачивание природных ресурсов У4. Использование альтернативного топлива

Второй этап состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды.

Интерактивная матрица проекта представлена в таблице 9. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-».

Таблица 9 – Интерактивная матрица проекта

		Сильные стороны проекта				
		С1.	С2.	С3.	С4.	С5.
Возможности проекта	В1.	+	+	+	+	+
	В2.	+	+	+	+	+
	В3.	+	+	+	+	0
		Слабые стороны проекта				
		Сл1.	Сл2.	Сл3.		
Возможности проекта	В1.	-	-	+		
	В2.	-	-	+		
	В3.	-	-	0		
		Сильные стороны проекта				
		С1.	С2.	С3.	С4.	С5.
Угрозы	У1.	+	+	+	-	-
	У2.	-	-	-	-	0
	У3.	-	-	+	-	-
	У4.	+	+	+	-	0
		Слабые стороны проекта				
		Сл1.	Сл2.	Сл3.		
Угрозы	У1.	-	-	-		
	У2.	-	0	-		
	У3.	-	-	-		
	У4.	+	-	-		

В рамках *третьего этапа* должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа (таблица 10).

Таблица 10 – Матрица SWOT

	Сильные стороны научно – исследовательского проекта: С1. Энергоэффективность и экономичность технологии. С2. Экспрессность С3. Значимость промышленной технологии С4. Достаточно квалифицированный персонал С5. Ликвидность рабочего места	Слабые стороны научно – исследовательского проекта: Сл1. Недостаточное количество необходимого оборудования для проведения исследования Сл2. Отсутствие инжиниринговой компании, для обучения персонал работать в рамках данного проекта Сл3. Необходимость в материалах, комплектующих и новой информации для проведения научного исследования
Возможности: В1. Использование усовершенствованной инфраструктуры ТПУ В2. Появление дополнительного спроса на новый ассортимент В3. Увеличение стоимости конкурентных разработок	С и В: 1. Контроль качества продукции в данный период времени, что имеет особую значимость в ситуации изменения качества сырья 2. Исследование позволяет дальнейшее направление разработки методов для улучшения эксплуатационных свойств моторного топлива 3. Невысокая затратность даст возможность привлечь значительное количество исполнителей	Сл и В: 1. Преобретение нового оборудования 2. Создание инжиниринговой услуги для обучения персонала работе с готовой продукцией 3. Вовлечение новых интеллектуальных ресурсов
Угрозы: У1. Развитие конкуренции производства У2. Введение новых государственных требований к сертификации продукции У3. Истрачивание природных ресурсов У4. Использование альтернативного топлива	С и У: 1. Создание конкурирующую готовую продукцию 2. Стандартизация и сертификация продукта 3. Усовершенствование программы для увеличения спроса на продукт 4. Применение данных методов к альтернативным топливам	Сл и У: 1. Закупка необходимого оборудования 2. Вовлечение новых интеллектуальных ресурсов 3. Усовершенствование программы для увеличения спроса на продукт 4. Стандартизация и сертификация продукта 5. Создание конкурирующую готовую продукцию

5.1.4 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 заполнена специальная форма, содержащая показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта (таблица 11).

При проведении анализа по таблице, по каждому показателю ставится оценка по пятибалльной шкале. При оценке степени проработанности научного проекта 1 балл означает не проработанность проекта, 2 балла – слабую проработанность, 3 балла – выполнено, но в качестве не уверен, 4 балла – выполнено качественно, 5 баллов – имеется положительное заключение независимого эксперта. Для оценки уровня имеющихся знаний у разработчика система баллов принимает следующий вид: 1 означает не знаком или мало знаю, 2 – в объеме теоретических знаний, 3 – знаю теорию и практические примеры применения, 4 – знаю теорию и самостоятельно выполняю, 5 – знаю теорию, выполняю и могу консультировать.

Таблица 11 – Оценка степени готовности проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	5	5
2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	3	3
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	4
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	3	3
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	5
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	4	4

7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	3	3
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	2
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	4	4
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	5	5
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	2
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	5	4
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	4
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	5
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	5	5
	ИТОГО БАЛЛОВ	59	58

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

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i \quad (17)$$

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. В итоге получилось, что разработка является перспективной, а уровень имеющихся знаний у разработчика выше среднего.

По результатам оценки выделяются слабые стороны исследования, дальнейшего улучшения необходимо провести маркетинговые исследования рынков сбыта, разработать бизнес-план коммерциализации научной разработки проработать вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок.

5.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Для коммерциализации результатов, проведенного исследования будут использоваться следующие методы: инжиниринг и организация совместных предприятий.

Инжиниринг будет предполагать предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной, именуемой консультантом, другой стороне, именуемой заказчиком, комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг, связанных с проектированием, строительством и вводом объекта в эксплуатацию, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика.

Организация совместных предприятий будет производиться по схеме «российское производство –зарубежное распространение».

Данные методы коммерциализации будут наиболее продуктивными в отношении данного проекта.

5.2 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. Данная информация закрепляется в Уставе проекта (таблица 12).

Таблица 12 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ	Выпуск высококвалифицированных специалистов
Промышленные предприятия нефтехимической отрасли	Расчетный экспресс-метод октанового числа бензинов с помощью лабораторных испытаний

В таблице 13 представлена иерархия целей проекта и критерии достижения целей.

Таблица 13 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Исследование, расчет и модификация экспресс-методов определения октанового числа моторных топлив как октаноповышающими добавками, так и без них с помощью суррогатной смеси.
Ожидаемые результаты проекта:	Применение расчетных методов расчета октановых чисел для суррогатной смеси для определения октанового числа смесей с добавками.
Критерии приемки результата проекта:	Соответствие результатов экспресс-расчета октанового числа экспериментальными данными
Требования к результату проекта:	Требование:
	Адекватность экспресс-методов
	Воспроизводимость метода
	Проведение быстрого и точного анализа
	Возможность расчета октанового числа для смесей бензина с добавками

В таблице 14 представлена организационная структура проекта (роль каждого участника, их функции, трудозатраты).

Таблица 14 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, час.
1.	Самборская М.А., НИ ТПУ, Доцент отделения химической инженерии	Руководитель проекта	Координирует деятельность магистранта	100
2.	Радченко Н.Д., магистрант НИ ТПУ ИШПР	Исполнитель по проекту	Анализ литературных источников, отбор проб, пробоподготовка, анализ лабораторных данных, написание работы	2000
ИТОГО:				2100

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» – параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта (таблица 15).

Таблица 15 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
3.1. Бюджет проекта	2238918
3.1.1. Источник финансирования	НИ ТПУ
3.2. Сроки проекта:	04.09.2019-31.05.2021
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	04.09.2019
3.2.2. Дата завершения проекта	31.05.2021

5.3 Планирование научно – исследовательских работ

Группа процессов планирования состоит из процессов, осуществляемых для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательности действий, требуемых для достижения данных целей.

План управления научным проектом должен включать в себя следующие элементы:

- иерархическая структура работ проекта;
- контрольные события проекта;
- план проекта;
- бюджет научного исследования.

5.3.1 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта (рисунок 7).

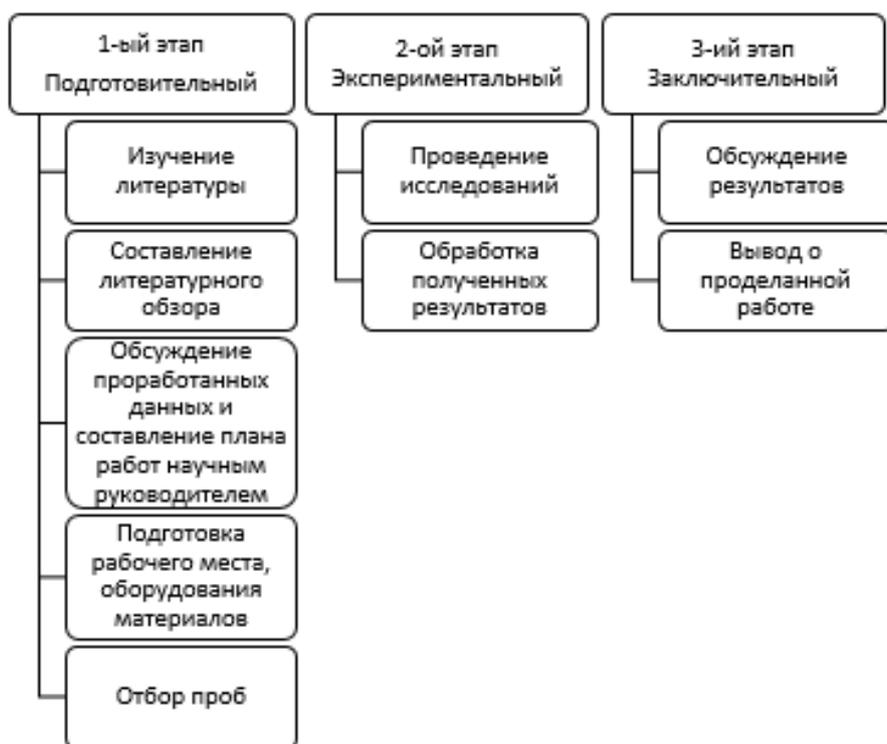


Рисунок 7– Иерархическая структура работ

5.3.2 План проекта

В рамках планирования научного проекта построены календарный график проекта (таблица 16, 17).

Таблица 16 – Календарный план проекта

Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Утверждение темы магистерской диссертации	10	04.09.19	14.09.19	Самборская М.А.
Согласование плана работ	10	16.09.19	26.09.19	Самборская М.А. Радченко Н.Д.
Литературный обзор	125	1.10.2019	3.01.2020	Радченко Н.Д.
Патентный поиск	21	27.01.2020	17.02.2020	Радченко Н.Д.
Календарное планирование работ по теме	5	18.02.2020	22.02.2020	Самборская М.А. Радченко Н.Д.

Выбор и проведение экспериментальных исследований	121	02.03.2020	30.06.2020	Радченко Н.Д.
Анализ и сопоставление результатов, и проведение расчетов	30	07.09.2020	06.10.2020	Радченко Н.Д.
Оценка эффективности проведенных исследований	12	07.10.2020	19.10.2020	Самборская М.А. Радченко Н.Д.
Определение целесообразности проведения НИОКР	21	20.10.2020	11.11.2020	Самборская М.А. Радченко Н.Д.
Обработка полученных данных и обсуждение результатов	45	12.11.2020	26.12.2020	Самборская М.А. Радченко Н.Д.
Написание отчета	91	1.03.2021	30.05.2021	Самборская М.А. Радченко Н.Д.
Итого:	491	04.09.19	30.05.2021	

Таблица 17 – Календарный план – график проведения НИОКР по теме

№ работ	Вид работ	Т. дней	Продолжительность выполнения работ															
			2019				2020								2021			
			Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь	Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Март	Апрель
1	Утверждение темы магистерской диссертации	10	■															
2	Согласование плана работ	10	■															
3	Литературный обзор	125		■	■	■												
4	Патентный поиск	21				■	■	■										
5	Календарное планирование работ по теме	5						■	■									

– Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями;

– Накладные расходы.

Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты (за вычетом отходов). В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме (таблица 18).

Таблица 18 – Расчет затрат по статье «Сырье и материалы»

Наименование	Марка, размер	Количество, шт	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Бензин прямогонный	образец 1	1 (л)	68,0	68,0
	образец 2	1 (л)	57,0	57,0
	образец 3	1 (л)	65,0	65,0
	образец 4	1 (л)	70,0	70,0
	образец 5	1 (л)	72,0	72,0
Химические реагенты	Гептан	1 (л)	650,0	650,0
	Изооктан	1 (л)	500,0	500,0
	Толуол	1 (л)	550,0	550,0
	Пентан	1 (л)	700,0	700,0
Добавки	МТБЭ	1 (л)	275,0	275,0
	Этанол	1 (л)	90,0	90,0
Мерный цилиндр	250 мл	6 шт	835,0	5010
	25 мл	2 шт	515,0	1030
Пипетка градуированная	10 мл	4 шт	36,0	144
	5 мл	4 шт	75,0	300
Груша резиновая	90 мл	1 шт	80,0	80
Мерный стакан	250 мл	6 шт	300,0	1800
	Всего за материалы			11461
	Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)			573,05
	Итого по статье			12034,05

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ. В данную статью включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования, необходимого для проведения работ по теме НИР (таблица 19).

Таблица 19 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

Наименование оборудования	Марка	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
Октанометр	«Октан – ИМ»	1	55700,0	55700
Газовый хроматограф	«Хроматэк-Кристалл 5000»	1	1050000,0	1050000
Персональный компьютер	Samsung	1	35000,0	35000
			Итого, руб.:	1140700

Расчет основной заработной платы.

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы (размер определяется Положением об оплате труда). Расчет основной заработной платы сводится в таблице 14.

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп} \quad (18)$$

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

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата

Основная заработная плата ($Z_{осн}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб} \quad (19)$$

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

$T_{раб}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}} \quad (20)$$

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

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

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

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

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

Расчет заработной платы научно – производственного и прочего персонала проекта проводили с учетом работы 2-х человек – научного руководителя и исполнителя. Баланс рабочего времени исполнителей представлен в таблице 20.

Таблица 20 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистрант
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней	99	99
- выходные дни	14	14
- праздничные дни		
Потери рабочего времени	24	24
- отпуск	14	14
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	212	212

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{б}} * (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) * k_{\text{р}}, \quad (21)$$

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

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

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок;

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

При расчете заработной платы научно-производственного и прочего персонала проекта учитывались месячные должностные оклады работников, которые рассчитывались по формуле:

$$Z_m = Z_b * K_p, \quad (22)$$

где Z_b – базовый оклад, руб.;

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

Согласно информации сайта Томского политехнического университета, должностной оклад (ППС) доцента кандидата наук в 2020 году без учета РК составил 33664 руб. Расчет основной заработной платы приведен в таблице 21.

Таблица 21 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	Z_b , руб.	$k_{пр}$	k_d	k_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	33664	1	0,02	1,3	44638,5	2189,8	212	464240,0
Магистрант	1923	0	0	1,3	2499,9	122,6	212	25998,9

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала. В данную статью включается сумма выплат, предусмотренных законодательством о труде, например, оплата очередных и дополнительных отпусков; оплата времени, связанного с выполнением государственных и общественных обязанностей; выплата вознаграждения за выслугу лет и т.п. (в среднем – 12 % от суммы основной заработной платы).

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10-15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$Z_{доп} = Z_{осн} * k_{доп}, \quad (23)$$

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

$k_{доп}$ – коэффициент дополнительной зарплаты;

$Z_{осн}$ – основная заработная плата, руб.

В таблице 22 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 22 – Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Магистрант
Основная зарплата	464240,0	25998,9
Дополнительная зарплата	46424,0	2599,9
Итого по статье С _{зп}	510664,0	28598,9

Отчисления на социальные нужды. Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} * (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (24)$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчисления на уплату во внебюджетные фонды.

На 2016 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 № 212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст. 58 закона № 212-ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность, в 2016 году водится пониженная ставка – 27,1%. Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице.

Отчисления на социальные нужды составляют:

$$C_{\text{внеб}} = 0,271 * (464240,0 + 46424,0) = 138389,9$$

Накладные расходы. Расчет накладных расходов провели по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = 0,8 \cdot (464240,0 + 46424,0) = 408531,2$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов принят 0,8.

Таблица 23 – Затраты научно-исследовательской работы

Затраты по статьям	Вид исследования	
	Данное исследование	Аналог
1 Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	12034,05	8865
2 Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	1140700	1700000
3 Основная заработная плата	490238,9	930677,4
4 Дополнительная заработная плата	49023,9	93067,7
5 Отчисления на социальные нужды	138390	277434,9
6 Научные и производственные командировки	-	-
7 Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями	-	-
8 Прочие прямые расходы	-	-
9 Накладные расходы	408531,2	297342,8
Итого плановая себестоимость	2238918	3307388

Таким образом, затраты проекта составляет 2238918, которые приведены в таблице 17.

5.3.4 Организационная структура проекта

Данный проект представлен в виде проектной организационной структуры. Проектная организационная структура проекта представлена на рисунке 8.

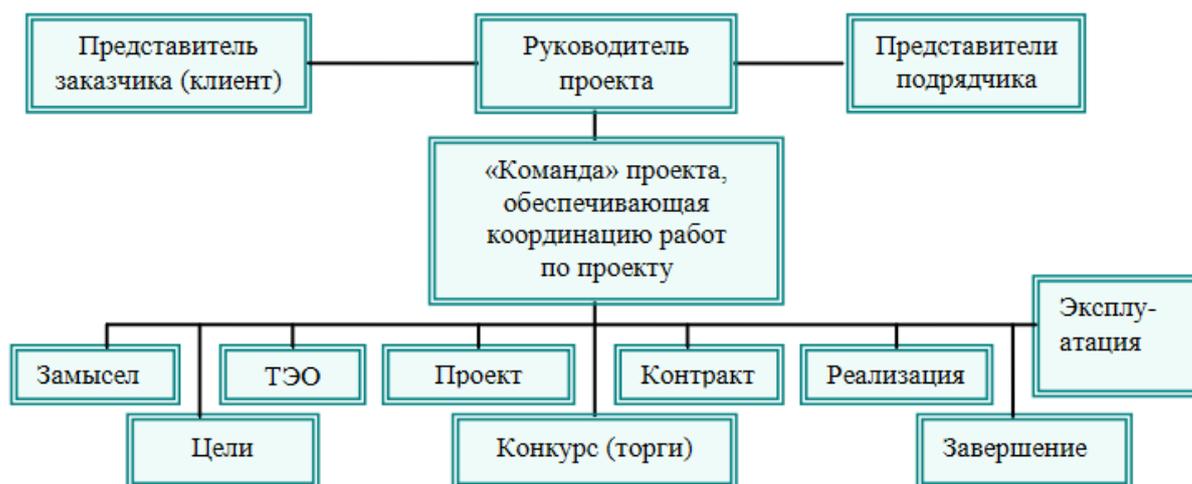


Рисунок 8 – Проектная структура проекта

5.3.5 План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта (таблица 24).

Таблица 24 – План управления коммуникациями

№ п/п	Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
1.	Статус проекта	Исполнитель	Руководителю	Еженедельно (понедельник)
2.	Обмен информацией о текущем состоянии проекта	Исполнитель	Руководителю	Ежемесячно (конец месяца)
3.	Документы и информация по проекту	Исполнитель	Руководителю	Не позже сроков графиков и к. точек
4.	О выполнении контрольной точки	Исполнитель	Руководителю	Не позже, чем за неделю до контрольного события по плану управления

5.3.6 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.

Информация по возможным рискам сведена в таблицу 25.

Таблица 25 – Реестр рисков

№	Риск	Вероятность наступления	Влияние риска	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Неточность метода анализа	2	5	Низкий	Внешний и внутренние анализы	Низкая точность метода анализа
2	Погрешность расчетов	3	5	Средний	Пересчет, проверка	Невнимательность
3	Отсутствие интереса к результатам исследования	2	5	Низкий	Привлечение предприятий, публикация результатов	Отсутствие результатов исследования

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

5.4.1 Оценка абсолютной эффективности исследования

В основе проектного подхода к инвестиционной деятельности предприятия лежит принцип денежных потоков. Особенностью является его прогнозный и долгосрочный характер, поэтому в применяемом подходе к анализу учитываются фактор времени и фактор риска. Для оценки общей экономической эффективности используются следующие основные показатели:

- чистая текущая стоимость (NPV);
- индекс доходности (PI);
- внутренняя ставка доходности (IRR);
- срок окупаемости (DPP).

Чистая текущая стоимость (NPV) – это показатель экономической эффективности инвестиционного проекта, который рассчитывается путём

дисконтирования (приведения к текущей стоимости, т.е. на момент инвестирования) ожидаемых денежных потоков (как доходов, так и расходов).

Расчёт NPV осуществляется по следующей формуле:

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{опt}}{(1+i)^t} - I_0 \quad (25)$$

где: ЧДП_{опt} – чистые денежные поступления от операционной деятельности;

I_0 – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году;

t – номер шага расчета ($t = 0, 1, 2 \dots n$)

n – горизонт расчета;

i – ставка дисконтирования (желаемый уровень доходности инвестируемых средств).

Расчёт NPV позволяет судить о целесообразности инвестирования денежных средств. Если $NPV > 0$, то проект оказывается эффективным.

Расчет чистой текущей стоимости представлен в таблице 26. При расчете рентабельность проекта составляла 20 %, амортизационные отчисления 10 %.

Таблица 26 – Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб.	0	2686701,7	2686701,7	2686701,7	2686701,7
2	Итого приток, руб.	0	2686701,7	2686701,7	2686701,7	2686701,7
3	Инвестиционные издержки, руб.	- 2238918,1	0	0	0	0
4	Операционные затраты, руб.	0	1326358,1	1326358,1	1326358,1	1326358,1
5	Налогооблагаемая прибыль(1-4)	0	1360343,6	1360343,6	1360343,6	1360343,6
6	Налоги 20 %, руб.(5*20%)	0	272068,7	272068,7	272068,7	272068,7
8	Чистая прибыль, руб.(5-6)	0	1088274,9	1088274,9	1088274,9	1088274,9
9	Чистый денежный поток (ЧДП), руб.(чистая прибыль+амортизация)	- 2238918,1	1316414,9	1316414,9	1316414,9	1316414,9

10	Коэффициент дисконтирования (КД)	1	0,833	0,694	0,578	0,482
11	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб.(9*10)	- 2238918,1	1096573,6	913591,9	760887,8	634511,9
12	\sum ЧДД	3405565,34				
12	Итого NPV, руб.	1166647,23				

Коэффициент дисконтирования рассчитан по формуле:

$$КД = \frac{1}{(1+i)^t} \quad (26)$$

где: i – ставка дисконтирования, 20 %;

t – шаг расчета.

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 736216 рублей, что позволяет судить об его эффективности.

Индекс доходности (PI) – показатель эффективности инвестиции, представляющий собой отношение дисконтированных доходов к размеру инвестиционного капитала. Данный показатель позволяет определить инвестиционную эффективность вложений в данный проект. Индекс доходности рассчитывается по формуле:

$$PI = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_t}{(1+i)^t} / I_0 \quad (27)$$

где: ЧДД - чистый денежный поток, руб.;

I_0 – начальный инвестиционный капитал, руб.

Таким образом PI для данного проекта составляет:

$$PI = \frac{3405565,3}{2238918} = 1,52$$

Так как $PI > 1$, то проект является эффективным.

Внутренняя ставка доходности (IRR). Значение ставки, при которой обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или IRR. Формальное определение «внутренней ставки доходности» заключается в том, что это та ставка дисконтирования, при которой суммы дисконтированных

притоков денежных средств равны сумме дисконтированных оттоков или =0. По разности между IRR и ставкой дисконтирования i можно судить о запасе экономической прочности инвестиционного проекта. Чем ближе IRR к ставке дисконтирования i , тем больше риск от инвестирования в данный проект.

Между чистой текущей стоимостью (NPV) и ставкой дисконтирования (i) существует обратная зависимость. Эта зависимость представлена в таблице 27 и на рисунке 9.

Таблица 27 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№	Наименование показателя	0	1	2	3	4	NPV, руб.
1	Чистые денежные потоки, руб.	-2238918	1316415	1316415	1316415	1316415	
2	Коэффициент дисконтирования						
	0,1	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	0,2	1	0,833	0,694	0,578	0,482	
	0,3	1	0,769	0,592	0,455	0,350	
	0,4	1	0,714	0,510	0,364	0,260	
	0,5	1	0,667	0,444	0,295	0,198	
	0,6	1	0,625	0,390	0,244	0,153	
	0,7	1	0,588	0,335	0,203	0,112	
	0,8	1	0,556	0,309	0,171	0,095	
	0,9	1	0,526	0,277	0,146	0,077	
	1	1	0,500	0,250	0,125	0,062	
3	Дисконтированный денежный поток, руб.						
	0,1	-2238918	1196621	1087359	988627,6	899111,4	1932801
	0,2	-2238918	1096574	913591,9	760887,8	634512	1166647
	0,3	-2238918	1012323	779317,6	598968,8	460745,2	612436,6
	0,4	-2238918	939920,2	671371,6	479175	342267,9	193816,6
	0,5	-2238918	878048,7	584488,2	388342,4	260650,1	-127389
	0,6	-2238918	822759,3	513401,8	321205,2	201411,5	-380140
	0,7	-2238918	774052	440999	267232,2	147438,5	-609196
	0,8	-2238918	731926,7	406772,2	225106,9	125059,4	-750053
	0,9	-2238918	692434,2	364646,9	192196,6	101363,9	-888276
	1,0	-2238918	658207,4	329103,7	164551,9	81617,72	-1005437

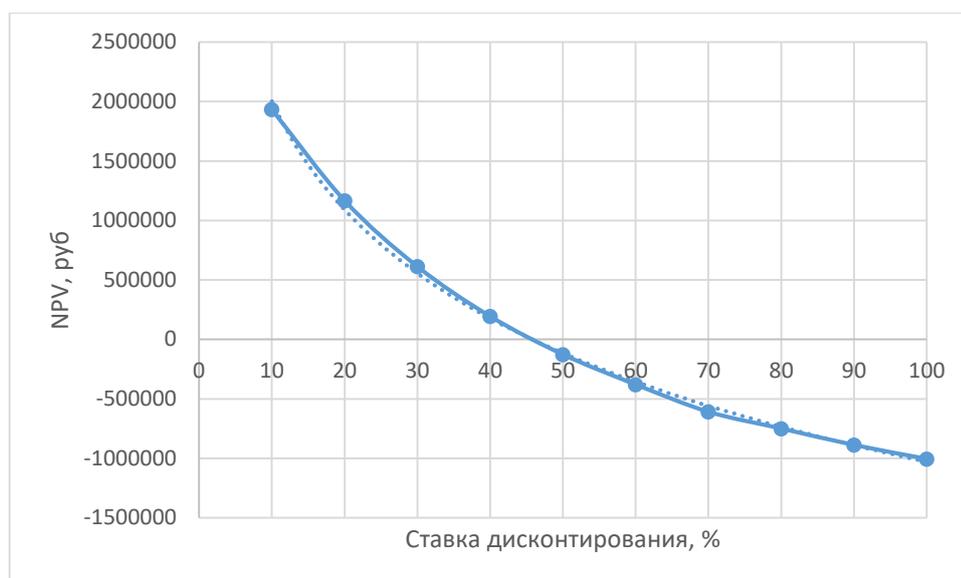


Рисунок 9 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Из таблицы и графика следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Значение ставки, при которой NPV обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или «внутренней нормы прибыли». Из графика получаем, что IRR составляет 0,46.

Запас экономической прочности проекта: $46\% - 20\% = 26\%$

Дисконтированный срок окупаемости. Как отмечалось ранее, одним из недостатков показателя простого срока окупаемости является игнорирование в процессе его расчета разной ценности денег во времени.

Этот недостаток устраняется путем определения дисконтированного срока окупаемости. То есть это время, за которое денежные средства должны совершить оборот.

Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (таблица 28).

Таблица 28 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток ($i=0,20$), руб.	- 2238918, 1	1096574	913591,9	760887,8	634512
2	То же нарастающим итогом, руб.	- 2238918, 1	-1142344	-1325326	-1478030	-1604406
3	Дисконтированный срок окупаемости	PP_{дск} = 2 + (1325326/760887,8) = 2,7 года				

Социальная эффективность научного проекта учитывает социально-экономические последствия осуществления научного проекта для общества в целом или отдельных категорий населения или групп лиц, в том числе как непосредственные результаты проекта, так и «внешние» результаты в смежных секторах экономики: социальные, экологические и иные внеэкономические эффекты (таблица 28).

Таблица 28 – Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Отсутствие информации об компонентном составе моторного топлива	Создание смеси, состоящих из небольшого количества компонентов, с физико-химическими свойствами реального топлива
Нехватка оборудования для определения большого спектра физико-химических свойств моторного топлива	Отсутствие необходимости определения определенных свойств

5.4.2 Оценка сравнительной эффективности исследования

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по формуле:

$$I_{финр}^{испi} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}}, \quad (28)$$

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

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

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

$$I_{финр}^1 = \frac{\Phi_{p1}}{\Phi_{max}} = \frac{2202660,9}{2231735} = 0,99$$

$$I_{финр}^2 = \frac{\Phi_{p2}}{\Phi_{max}} = \frac{2231735}{2231735} = 1,00$$

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (29)$$

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

a_i – весовой коэффициент i-го варианта исполнения разработки;

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

n – число параметров сравнения.

Таблица 29 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

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

$$I_{тп} = 0,4 * 5 + 0,2 * 5 + 0,1 * 5 + 0,2 * 5 + 0,1 * 5 = 5,0$$

$$I_{аналог} = 0,4 * 5 + 0,2 * 5 + 0,1 * 4 + 0,2 * 4 + 0,1 * 3 = 4,5$$

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

$$I_{исп.1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{финр}^{исп.1}}, \quad I_{исп.2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{финр}^{исп.2}} \quad (30)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволяет определить сравнительную эффективность проекта (таблица 13) и выбрать наиболее эффективный вариант их представленных. Сравнительная эффективность проекта (\mathcal{E}_{cp}):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}, \quad (31)$$

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

$$I_{финр}^p = \frac{I_{т}^p}{I_{ф}^p} = \frac{5,0}{0,99} = 5,05$$

$$I_{финр}^{a1} = \frac{I_{т}^{a1}}{I_{ф}^{a1}} = \frac{4,5}{1} = 4,5$$

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

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^{a1}}{I_{финр}^p} = \frac{4,5}{5,05} = 0,891$$

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

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

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

Таблица 30 – Сравнительная эффективность разработки

№	Показатели	Текущий проект	Аналог 1
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,99	1,00
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	5,00	4,5
3	Интегральный показатель эффективности	5,05	4,5
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,11	0,891

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

В ходе выполнения раздела финансового менеджмента определена чистая текущая стоимость, (NPV), равная 1166647,231 руб.; индекс доходности $PI = 1,52$, внутренняя ставка доходности $IRR = 46 \%$, срок окупаемости $PP_{дск} = 2,7$ года.

Таким образом мы имеем ресурсоэффективный проект с высоким запасом финансовой прочности и коротким сроком окупаемости.

6 Социальная ответственность

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

В качестве объекта исследования выбраны моторные топлива.

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

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

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

6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

В данном разделе рассмотрены специальные правовые нормы трудового законодательства и их особенности, применимые к условиям исследовательского проекта по оценке эксплуатационных свойств моторных топлив в зависимости от их физико-химических свойств.

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

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

- предоставление ему работы, обусловленной трудовым договором;

- рабочее место, соответствующее государственным нормативным требованиям охраны труда и условиям, предусмотренным коллективным договором;
- своевременную и в полном объеме выплату заработной платы в соответствии со своей квалификацией, сложностью труда, количеством и качеством выполненной работы;
- отдых, обеспечиваемый установлением нормальной (не более 40 часов в неделю) продолжительности рабочего времени, сокращенного рабочего времени для отдельных профессий и категорий работников, предоставлением еженедельных выходных дней, нерабочих праздничных дней, оплачиваемых ежегодных отпусков (28 календарных дней);
- полную достоверную информацию об условиях труда и требованиях охраны труда на рабочем месте, включая реализацию прав, предоставленных законодательством о специальной оценке условий труда;
- подготовку и дополнительное профессиональное образование в порядке, установленном настоящим Кодексом, иными федеральными законами;
- защиту своих трудовых прав, свобод и законных интересов всеми не запрещенными законом способами;
- возмещение вреда, причиненного ему в связи с исполнением трудовых обязанностей, и компенсацию морального вреда в порядке, установленном настоящим Кодексом, иными федеральными законами;
- обязательное социальное страхование в случаях, предусмотренных федеральными законами.

6.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

Площади помещений лабораторий должны соответствовать техническим нормативным правовым актам. Свободная площадь лаборатории, не занятая стационарным оборудованием, должна быть не менее 2,2 кв. м на

одного человека. Общая площадь химической лаборатории рассчитывается из условия 4,5 кв. м на одного человека и максимального числа одновременно занимающихся человек. Минимально допустимая высота помещения - 3,3 м. Минимальная ширина проходов - 0,7 м. Вспомогательные помещения химических лабораторий - препараторские, кладовые, весовые, моечные, лаборантские, ассистентские, преподавательские - должны располагаться в одном блоке с учебными лабораториями.

Помещения, предназначенные для работ с веществами 1, 2 и 3-го классов опасности, должны быть изолированы от других помещений, иметь системы вентиляции, не связанные с вентиляцией других помещений.

Полы помещений химических лабораторий должны быть из водонепроницаемого и кислотоупорного материала, нескользкими, обладать низкой теплопроводностью, обеспечивать возможность влажной уборки и дезинфекции. Не допускается применение ворсовых покрытий на основе химических волокон.

Средняя высота лабораторных столов - 750-800 мм, ширина - 450-500 мм, длина - 1200 мм. Столы оборудуются с трех сторон бортиками высотой 20 мм и покрытием, устойчивым к слабым растворам кислот и щелочей. Демонстрационный стол преподавателя должен иметь химически стойкое покрытие.

Проведение работ с химическими веществами в лабораториях, не оборудованных общеобменной вентиляцией, запрещается. Помимо общеобменной вентиляции, лаборатории оборудуются отдельными (автономными) вентиляционными устройствами (системами местных отсосов) для удаления воздуха из вытяжных шкафов.

Вытяжные устройства должны обеспечивать скорость всасываемого воздуха в сечении створок шкафа, открытых на 15-20 см, в пределах от 0,3 до 0,7 м/с. При работе с органическими и другими вредно действующими веществами при нахождении в лаборатории расчетная скорость всасываемого воздуха в сечении вытяжного шкафа должна составлять 1,0-1,5 м/с.

Химические лаборатории должны иметь энергоснабжение (переменный, постоянный ток), подводку холодной и горячей воды, природного газа. Электрооборудование должно быть снабжено средствами защиты от короткого замыкания и перегрузок.

При недостаточности общего искусственного освещения оно дополняется местным освещением. Применение только одного местного освещения не допускается. Светильники местного освещения устанавливаются так, чтобы можно было при необходимости менять направление светового потока. Направление светового потока естественного освещения должно быть левосторонним.

6.2 Производственная безопасность

Так как большая часть исследовательской работы проходила в химической лаборатории, проведем анализ вредных факторов для этого рабочего места.

В таблице 31, представленной ниже показаны вредные и опасные факторы, которые могут повлиять на работников при проведении исследования.

Таблица 31 – Вредные и опасные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Нормативные документы	
	Разработка	Эксплуатация
1 Отклонение показателей микроклимата	+	+
2 Отсутствие или недостаток естественного и искусственного света на рабочем месте	+	+
3 Повышенная температура поверхностей оборудования, материалов	+	+
4 Повышенный уровень шума	+	+
5 Наличие электрических приборов	+	+

			территории жилой застройки. Санитарные нормы ГОСТ 12.1.030-81 Электробезопасность. защитное заземление. Зануление
--	--	--	---

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

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

Воздушная среда в помещении лаборатории может загрязняться производственной пылью и различными газообразными выбросами. Для характеристики вредности различного вида загрязнения воздуха используют значения предельно-допустимой концентрации (ПДК). Принята следующая трактовка ПДК: ПДК –это такая концентрация, которая при восьмичасовом рабочем дне не вызывает изменений в организме человека в течение всей жизни. Класс опасности вещества определяется по таблице ПДК по 1.2.3685-21 [38].

Перечень вредных химических веществ, выделяющихся в воздух рабочей зоны, их ПДК и класс опасности приведены в таблице 32.

Таблица 32 – Предельно допустимые концентрации веществ на производстве

№	Название вещества	Величина ПДК, мг/м ³ СанПиН 1.2.3685-21[38]	Класс опасности ГОСТ 12.1.007-76 [40]	Воздействие на человека
1	Анилин	0,05	2	Является высокотоксичным веществом. Отравления им возможны как при вдыхании паров, так и при попадании жидкого анилина на кожу. Поражает центральную нервную систему и вызывает изменения крови [39].

Продолжение таблицы 32

2	Бензин	5	4	Токсичное, раздражает слизистую оболочку и кожу человека, вызывает тяжелое отравление. В случае отравления, вызванном вдыханием небольших концентраций паров бензина, наблюдаются симптомы, похожие на алкогольную интоксикацию: психическое возбуждение, эйфория, головокружение, тошнота, слабость, рвота, покраснение кожных покровов. В тяжелых случаях могут наблюдаться галлюцинации, обморочные состояния, судороги.
3	Гексан	60	4	Токсичен. Вызывает раздражение кожи. Предполагается, что данное вещество может отрицательно повлиять на способность к деторождению. Может вызывать сонливость и головокружение. Может быть смертельным при проглатывании и попадании в дыхательные пути.
4	Бензол	0,3	2	При попадании в организм вызывает хроническую интоксикацию, раздражение нервной системы, глубокие изменения костного мозга и крови.
5	Этиловый спирт	5	4	Этиловый спирт может поступать в организм несколькими путями: при приеме внутрь, при внутривенном введении, а также через легкие в виде паров с вдыхаемым воздухом. Поступивший организм этиловый спирт действует на кору головного мозга. Под влиянием алкоголя проявляется преобладание процессов возбуждения над процессами торможения.
6	Толуол	0,002	2	Оказывает наркотическое воздействие, вызывая сильные галлюцинации и диссоциативное состояние.

Коллективный защитный характер носят работа под вытяжным шкафом, герметизация, вентиляция производственных помещений, отделка помещений

особыми материалами, систематическая уборка помещений, медосмотры. Также применяют средства индивидуальной защиты: халат, перчатки, маски, очки, специальная обувь, респираторы, изолирующие противогазы.

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

Согласно ГОСТу 12.0.003-2015 установлены специальные положения в сфере обеспечения безопасности трудовой и производственной деятельности необходимые для соблюдения.

Вредным фактором химической лаборатории является наличие токсических, раздражающих веществ, проникающих через органы дыхания или через кожу при непосредственном контакте с ними. В результате воздействия этих веществ у человека возникает отравление – болезненное состояние, тяжесть которого зависит от продолжительности воздействия, концентрации и вида вредного вещества.

– Освещение на рабочем месте

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

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

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

Требования к освещению рабочих мест зафиксированы в СанПиН 23-05-95 [41].

Таблица 33 – Требования к освещению рабочих мест

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

– *Уровень шума*

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

Требования по допустимому уровню звукового давления, звука и эквивалентных уровней звука выполняются в соответствии с ГОСТ 12.1.005–88 [42].

Таблица 34 – Требования по допустимому уровню шума

Относительная доза шума, %	Эквивалентный уровень звука дБ А						
	За время действия шума						
	8 ч	4 ч	2 ч	1 ч	30 мин	15 мин	7 мин
3,2	70	73	76	79	82	85	88
6,3	73	76	79	82	85	88	91
12,5	76	79	82	85	88	91	94
25	79	82	85	88	91	94	97
50	82	85	88	91	94	97	100
100	85	88	91	94	97	100	103
200	88	91	94	97	100	103	106
400	91	94	97	100	103	106	109
800	94	97	100	103	106	109	112
1600	97	100	103	106	109	112	115
3200	100	103	106	109	112	115	118

Уровень звука в химической лаборатории топлива не должен превышать 70 децибел. Согласно таблице 34, относительная доля шума в химических лабораториях не должна превышать 3,2% за 8 часов действия шума. Вредное

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

– Микроклимат помещений

Оптимальные параметры микроклимата на рабочих местах должны соответствовать требованиям СанПиН 2.2.4.548-96 "Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений" применительно к выполнению работ различных категорий в холодный и теплый период года.

Химическая лаборатория топлива оборудована системой отопления, кондиционирования воздуха и эффективной приточно-вытяжной вентиляцией. В холодное время года в помещении холодно, температура воздуха меньше 19°C, из-за погодных условий. Для решения такой проблемы необходимо утепление оконных проемов, обеспечить лабораторию масляными обогревателями. Для химической лаборатории топлива предусмотрены нормы производственной санитарии, указанные в таблице 35 [43].

Таблица 35 – Допустимые параметры микроклимата производственных помещений

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

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

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

В соответствии с техническим регламентом каждому работнику лаборатории выдаются средства индивидуальной защиты и смывающие вещества в соответствии с нормами выдачи на 1 работника в месяц. Для исключения возможности несчастных случаев должны проводиться обучение, инструктаж и проверка работников на знание требований безопасности труда. За государственный и ведомственный контроль по охране труда отвечает штаб ГОЧС, отдел по охране труда.

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

6.2.4 Расчет искусственного освещения

Источники света, применяемые для искусственного освещения, делят на две группы - газоразрядные лампы и лампы накаливания. Для общего освещения, как правило, применяются газоразрядные лампы как энергетически более экономичные и обладающие большим сроком службы. Наиболее распространёнными являются люминесцентные лампы. В лабораториях, зрительные работы часто относятся к первой группе работ по освещенности. И это говорит об особой важности качественного освещения в ее стенах, поэтому в качестве искусственного освещения чаще всего, используются лампы дневного света (ЛБ).

Таблица 36 – Основные характеристики люминесцентных ламп [44]

Мощность, Вт	Напряжение сети, В	Световой поток ЛД, лм
15	127	835
20	127	1060
30	220	2020
40	220	2800
65	220	4600
80	220	5200
125	220	-

Интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина $\lambda = L/h$, характеризующая наилучшее относительное расстояние между светильниками. Уменьшение λ удорожает устройство и обслуживание освещения, а чрезмерное увеличение ведёт к резкой неравномерности освещённости. В табл. приведены значения λ для разных светильников.

Таблица 37 – Наилучшее расположение светильников [44]

Наименование светильников	λ
Люминесцентные с защитной решёткой ОДР, ОДОР, ШЛД, ШОД	1,1-1,3
Люминесцентные без защитной решётки типов ОД, ОДО	1,4
ПВЛ	1,5
ГС, ЛЦ	1,6
У, ПУ с отражателем	1,8
ШМ, ПУ без отражателя, плафоны	2,3
СЗ-4-ДРЛ	1,0

Помещение, с размерами: длина $A = 22$ м; ширина $B = 6$ м; $H = 8$ м, Высота рабочей поверхности $h_{рп} = 0,8$ м. Уровень освещенности в аналитических лабораториях должен составлять от 500 лк. Коэффициент отражения стен $R_c = 40$ % потолка $R_n = 50$ %. Коэффициент запаса, $k = 1,5$, коэффициент неравномерности $Z = 1,1$.

Рассчитываем систему общего люминесцентного освещения.

Выбираем светильники типа ОД, $\lambda = 1,4$.

Приняв $h_c = 0,5$ м, определяем расчетную высоту [44]:

$$h = H - h_c - h_{рп} = 8 - 0,5 - 0,8 = 6,7 \text{ м}$$

Расстояние между светильниками L определяется:

$$L = \lambda * h = 1,4 * 6,7 = 9,4 \text{ м}$$

Расстояние от крайнего ряда светильников до стены [44]:

$$\frac{L}{3} = \frac{9,4}{3} = 3,1$$

Количество рядов светильников, с люминесцентными лампами определяется по формуле [44]:

$$n_{\text{ряд}} = \frac{(B - \frac{2}{3} * L)}{L} + 1 = \frac{(6 - \frac{2}{3} * 3,1)}{3,1} + 1 = 2$$

Где, $n_{\text{ряд}}$ - количество рядов; B - ширина помещения; L - расстояние между рядами светильников.

Количество светильников с люминесцентными лампами определяется по формуле [44]:

$$n_{\text{св}} = \frac{(A - \frac{2}{3} * L)}{l_{\text{св}} + 0,5} = \frac{(22 - \frac{2}{3} * 3,1)}{1,23 + 0,5} = 12$$

Где, $n_{\text{св}}$ - количество светильников в ряду; A - длина помещения; $l_{\text{св}}$ - длина светильника, м.

Размещаем светильники в 2 ряда. В каждом ряду можно установить 12 светильников типа ОД мощностью 40 Вт (с длиной 1,23 м), при этом разрывы между светильниками в ряду составят 50 см. Учитывая, что в каждом светильнике установлено 2 лампы, общее число ламп в помещении $N=24$.

Находим индекс помещения [44]:

$$i = S / (h * (A + B)) = 132 / (6,7 * (22 + 6)) = 0,7$$

Коэффициент использования светового потока выбираем равным [44]:

$$\eta = 0,6$$

Определяем потребный световой поток ламп в каждом из рядов [44]:

$$\Phi = \frac{E_{\text{н}} * S * K_3 * Z}{N_{\text{л}} * \eta} = \frac{500 * 132 * 1,5 * 1,1}{40 * 0,6} = 4537,5$$

Из таблицы [44] выбираем ближайшую стандартную лампу - ЛБ 65 Вт с потоком 4600 лм. Делаем проверку выполнения условия [44]:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{\text{л.станд}} - \Phi_{\text{л.расч}}}{\Phi_{\text{л.станд}}} * 100\% \leq +20\%$$

Получаем:

$$-10\% \leq 1,36\% \leq +20\%$$

Определяем электрическую мощность осветительной установки:

$$P = 65 * 40 = 2600 \text{ Вт}$$

6.3 Экологическая безопасность

6.3.1 Анализ возможного влияния объекта исследования на окружающую среду

Автомобильные двигатели с выхлопными газами выделяют большое количество вредных веществ в атмосферу. Токсичные выбросы автомобилей включают: окись углерода (CO), оксиды азота (NO_x), углеводороды (C_xH_y), сажу (C), альдегиды (RCHO), диоксид серы (SO₂) и соединения свинца (Pb). Из всех токсичных веществ соединения свинца, марганца и железа являются наиболее опасными для человека, которые поражают кровеносную, нервную и мочеполовую системы, вызывают цирроз печени, пневмонию и снижение умственных способностей у детей. Свинец откладывается в костях и других тканях человека.

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

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

6.3.2 Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду

На атмосферу могут оказывать вредное воздействие выбросы вредных веществ, появляющиеся при выполнении экспериментальной работы, через вентиляционную систему. Также в атмосферу могут проникать выбросы через фланцевые соединения, неплотности аппаратов, уплотнения и т.д. [45].

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

Вредное воздействие *на гидросферу* может оказывать химическое загрязнение водотоков в результате удаления неорганических и органических отходов в хозяйственно-бытовую канализацию. Объем образующихся сточных вод и степень их загрязненности определяются технологическим процессом. При авариях, ремонте аппаратов, оборудования и трубопроводов категорически запрещается сброс в канализацию нефтяных и химических продуктов, не являющихся сточными водами. Сточные воды, сбрасываемые в сети канализации, не должны содержать вещества, вызывающие коррозию материала труб или их засорение, или обрастание.

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

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

6.3.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды

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

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

6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

6.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований

Возможные чрезвычайные ситуации, которые может инициировать объект исследования:

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

Наиболее типичной и опасной является ЧС техногенного характера. Самый вероятный тип ЧС, который может произойти в лаборатории –разлив и возгорание моторного топлива при соприкосновении с огнем или реагентами для самовоспламенения.

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

– Термические опасности

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

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

– Электробезопасность

Источником опасных факторов в химической лаборатории топлива является повышенное напряжение в электрической цепи электрооборудования, используемое в процессе проведения экспериментов.

Лаборатория относится к категории особо опасных помещений по возможности поражения людей электротоком, т.к. характеризуется наличием химически активной и органической среды, разрушающей изоляцию и токоведущие части электрооборудования.

Один из основных способов борьбы со статическим электричеством является заземление сосудов, трубопроводов, аппаратов, кожухов термоизоляции. При заземлении статический заряд уходит в землю, а не накапливается до возникновения искрового разряда [46].

В лаборатории используются различные электроприборы: печи для подогрева различных химических сред, термостаты, сушильные шкафы, электрообогревательные приборы. Источниками электрической опасности лаборатории могут быть: оголенные части проводов или отсутствие изоляции; отсутствие заземления; статическое напряжение; замыкания.

Согласно ГОСТ 12.1.038–82 ССБТ для контроля предельно допустимых значений напряжений прикосновения и токов измеряют напряжения и токи в местах, где может произойти замыкание электрической цепи через тело человека [47]. Класс точности измерительных приборов должен быть не ниже 2,5.

– Пожаровзрывоопасность

Пожаровзрывоопасность в химической лаборатории топлива обусловлена наличием оборудования, работающего под давлением, а также наличием легковоспламеняющихся жидкостей и работой с нагревательными приборами.

В соответствии с Федеральным законом №123-ФЗ, химическая лаборатория топлива относится к пожаровзрывоопасным производствам группы А [48].

В лаборатории имеются следующие противопожарные средства: огнетушитель, песок, асбестовое одеяло и плотная стеклоткань.

Работники, принимающие участие в ликвидации аварий должны использовать индивидуальные средства защиты: перчатки, резиновую обувь, противогазы. В случае пожара эвакуация людей проводится согласно плану эвакуации.

Пожарная безопасность обеспечивается системой предотвращения пожара и системой пожарной защиты. Во всех служебных помещениях составлен «План эвакуации людей при пожаре», который регламентирует действия персонала в случае возникновения очага возгорания и указывает места расположения пожарной техники.

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

Возможно возникновение пожаров, взрывов, разрушение зданий в результате разрядов атмосферного электричества, ураганов, землетрясений. Здание защищаются от прямых ударов молнии молнеприемниками, воспринимающими разряд на себя, заземлителями, служащими для отвода

тока в землю и токопроводами, соединяющими молнеприемники и заземлители [49]. Для обеспечения безопасности людей рекомендуется ограждать заземлители или во время грозы не допускать людей к заземлителям на расстояние ближе 5-6 метров. Заземлители располагаются вдали от дорог. В случае стихийного бедствия (урагана, землетрясения) необходимо отключить воду, электричество и покинуть помещение согласно плану эвакуации.

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

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

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

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

В данном разделе были подробно разобраны правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности сотрудников для проектирования оптимально комфортной рабочей зоны. Произведен анализ

вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть в результате работы над исследованием эксплуатационных свойств моторных топлив. Также было показано, как предотвратить возникновение опасных факторов и теоретически возможных чрезвычайных ситуаций.

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

Заключение

В ходе работы над технико-экономическим обоснованием выделены современные модификаторы, улучшающие эксплуатационные характеристики моторных топлив, а также разрабатываемые альтернативные виды топлива.

Был проведен литературный поиск существующих суррогатных композиций и методологий их разработки.

Проведено исследование бензиновых фракций различного состава, в ходе которого определены их основные физико-химические свойства, необходимые для разработки их суррогатов.

Проведена оптимизация разработки составов суррогатных композиций, исследуемых образцов бензина, а также расчет их целевых свойств. На основании полученных результатов можно сделать вывод, что предложенные суррогатные композиции достаточно точно воспроизводят исследуемые образцы бензина.

Разработаны рецептуры смешения прямогонных бензинов и их суррогатов с октаноповышающими индивидуальными компонентами, по результатам которых можно сделать вывод, что разработанные суррогатные композиции с оксигенами также достаточно близко воспроизводят свойства бензина.

Предложенная методика разработки и оптимизации состава суррогатных композиций позволяет предсказывать ОЧ бензина с октаноповышающими добавками и присадками, без экспериментальных исследований.

Список используемых источников

1. Кислородсодержащая антидетонационная присадка к автомобильным бензинам: патент Рос. Федерация № 2 641 286; заявл. 08.07.2016; опубл. 17.01.2018, Бюл. № 2 – 9 с.
2. Комплексная присадка к автомобильным бензинам: патент Рос. Федерация № 2 696 774; заявл. 21.05.2019; опубл. 06.08.2019, Бюл. № 22 – 6 с.
3. Октаноповышающая добавка к автомобильным бензинам и топливная композиция ее содержащая: патент Рос. Федерация № 2 603 644; заявл. 21.10.2015; опубл. 27.11.2016, Бюл. № 33 – 9 с.
4. Альтернативное автомобильное топливо и способ его получения: патент Рос. Федерация № 2 723 546; заявл. 08.10.2019; опубл. 16.06.2020, Бюл. № 17 – 9 с.
5. Высокооктановый бензин: патент Рос. Федерация № 2 740 554; заявл. 13.08.2020; опубл. 15.01.2021, Бюл. № 2 – 7 с.
6. Альтернативное автомобильное топливо для бензиновых двигателей, содержащее производное фурфурола: патент Рос. Федерация № 2 734 918; заявл. 30.12.2019; опубл. 26.10.2020, Бюл. № 30 – 8 с.
7. Richards P. Automotive fuels reference book. 3rd ed Warrendale: Pennsylvania: SAE International; 2014.
8. Pitz W.J., Mueller C.J. Recent progress in the development of diesel surrogate fuels. Prog Energy Combust Sci 2011; 37:330 – 50.
9. Edwards T., Maurice L.Q., Propul J. Power 17 (2001) 461–466.;
10. Lenhert D.B., Miller D.L., Cernansky N.P., Owens K.G., Combust. Flame 156 (3) (2009) 549–564.
11. Mehl M, Chen J-Y, Pitz WJ, Sarathy S, Westbrook CK. An approach for formulating surrogates for gasoline with application toward a reduced surrogate mechanism for CFD engine modeling. Energy Fuels 2011; 25:5215–23.

12. Kukkadapu G, Kumar K, Sung C-J, Mehl M, Pitz WJ. Autoignition of gasoline and its surrogates in a rapid compression machine. *Proc Combust Inst* 2013; 34:345–52.
13. Sarathy S.M., Kukkadapu G., Mehl M., Wang W., Javed T., Park S., et al. Ignition of alkane-rich FACE gasoline fuels and their surrogate mixtures. *Proc Combust Inst* 2014.
14. Knop V., Pera C., Duffour F. Validation of a ternary gasoline surrogate in a CAI engine. *Combust Flame* 2013; 160:2067–82.; Pera C, Knop V. Methodology to define gasoline surrogates dedicated to autoignition in engines. *Fuel* 2012; 96:59–69.
15. Dooley S., Won S.H., Heyne J., Farouk T.I., Ju Y., Dryer F.L., et al. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena. *Combust Flame* 2012; 159:1444–66.
16. Dooley S., Won S.H., Jahangirian S., Ju Y., Dryer F.L., Wang H., et al. The combustion kinetics of a synthetic paraffinic jet aviation fuel and a fundamentally formulated, experimentally validated surrogate fuel. *Combust Flame* 2012; 159:3014–20.
17. Kim D., Martz J., Violi A. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel. *Combust Flame* 2014; 161:1489–98.
18. Huber M., Smith B., Ott L., Bruno T. Surrogate mixture model for the thermophysical properties of synthetic aviation fuel S-8: explicit application of the advanced distillation curve. *Energy Fuels* 2008; 22:1104–14.; Smith BL, Bruno TJ. Application of a composition-explicit distillation curve metrology to mixtures of Jet-A and S-8. *J Propulsion Power* 2008; 24:618–23.
19. Mueller C.J., Cannella W.J., Bruno T.J., Bunting B., Dettman H.D., Franz J.A., et al. Methodology for formulating diesel surrogate fuels with accurate compositional, ignition-quality, and volatility characteristics. *Energy Fuels* 2012; 26:3284–303
20. Lemmon E.W., Huber M.L., McLinden M.O. NIST reference fluid thermodynamic and transport properties–REFPROP. Version 9.0; 2010.

21. Mehl, Pitz W. J., Westbrook C. K., Curran H. J., Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions, *Proc. Combust. Inst.* 33(2011)193–200.
22. Andrae J.C.G., *Fuel* 87 (10–11) (2008) 2013–2022.
23. Violi A., Yan S., Eddings E.G., Sarofim A.F, Granata S., Faravelli T., Ranzi E., *Combust. Sci. Technol.* 174 (2002) 399–417.
24. Kook S., Pickett L.M., Combustion and soot processes of conventional and surrogate jet fuels at high-temperature and high-pressure conditions. US National Combustion Meeting. Ann Arbor, 2009.
25. Jones D.S.J, Pujado P.R. *Handbook of petroleum processing*. Springer; 2006.
26. Lapidus A.L., Smolenskii E.A., Bavykin V.M., Myshenkova T.N., Kondrat'ev L.T. Models for the calculation and prediction of the octane and cetane numbers of individual hydrocarbons. *Pet Chem* 2008; 48:277 – 86.
27. Pitz W.J., Mueller C.J. Recent progress in the development of diesel surrogate fuels. *Prog Energy Combust Sci* 2011; 37:330–50.
28. Bruno T.J., Huber M.L. Evaluation of the physicochemical authenticity of aviation kerosene surrogate mixtures. Part 2: analysis and prediction of thermophysical properties. *Energy Fuels* 2010; 24:4277–84.
29. Pitz W.J., Cernansky N.P., Dryer F.L., Egolfopoulos F.N., Farrell J.T., Friend D.G. et al. Development of an experimental database and chemical kinetic models for surrogate gasoline fuels. *SAE Technical Paper* 2007-01-0175 2007.
30. Puduppakkam K., Liang L., Naik C.V., Meeks E., Bunting B.G. Combustion and emissions modeling of a gasoline HCCI engine using model fuels. *SAE Technical Paper* 2009-01-0669 2009.
31. Su X., Ra Y., Reitz R.D. A surrogate fuel formulation approach for real transportation fuels with application to multi-dimensional engine simulations. *SAE Int J Fuels Lubr* 2014; 7:236 – 49.

32. Mehl M., Chen J.Y., PitzW.J., Sarathy S.M., Westbrook C.K. An approach for formulating surrogates for gasoline with application toward a reduced surrogate mechanism for CFD engine modeling. *Energy Fuels* 2011; 25:5215 – 23.

33. Pera C., Knop V. Methodology to define gasoline surrogates dedicated to auto-ignition in engines. *Fuel* 2012; 96:59 – 69.

34. Knop V., Loos M., Pera C., Jeuland N. A linear-by-mole blending rule for octane numbers of n-heptane/iso-octane/toluene mixtures. *Fuel* 2014; 115:666 – 73.

35. AlRamadan A.S., Sarathy S.M., Khurshid M., Badra J. A blending rule for octane numbers of PRFs and TPRFs with ethanol. *Fuel* 2016; 180:175 – 86.

36. Прибор для определения октанового числа бензина [Интернет-ресурс]. URL: <http://www.shatox.ru/octanometr.htm> (дата обращения: 16.02.2021).

37. Himmelblau, D.M. *Applied nonlinear programming* / D.M. Himmelblau. – Austin, Texas: McGraw-Hill Book Company, 1972. – 536 с.

38. СанПиН 1.2.3685-21 Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания.

39. ГОСТ 5819 – 78. Реактивы. Анилин. Технические условия. – введ. 01.01.1980.– М.: ИПК Издательство стандартов, 1998.

40. ГОСТ 12.1.007-76 "Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности". – введ. 01.01.1977.– М.: ИПК Издательство стандартов, 2002.

41. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*

42. ГОСТ 12.1.005–88. Общие санитарно–гигиенические требования к воздуху рабочей зоны. – введ. 01.01.1989. – М.: Стандартинформ, 2008. – 49 с.

43. Шум. Общие требования безопасности. – введ. 01.07.1984.– М.: Стандартинформ, 2008. – 13 с.

44. Методическое указание «Расчет искусственного освещения» [Электронный ресурс]. Дата обращения: 22.04.2021 г

45. ГН 2.2.5.3532-18 "Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны" – введ. 13.02.2018.

46. Правила по охране труда при эксплуатации электроустановок; приказ Минтруда России от 15.12.2020 N 903н, зарегистрировано в Минюсте России 30.12.2020 N 61957.

47. ГОСТ 12.1.038–82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.

48. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности: Федеральный закон от 22 июля 2008 г. №123-ФЗ (ред. от 23.06.2014).

49. ГОСТ Р 22.0.01-2016. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения. – введ. 01.06.2017. - М.: Издательство стандартов, 2016. – 8 с.

50. Nadkarni R. Guide to ASTM test methods for the analysis of petroleum products and lubricants. ASTM International, 2007.

51. Andrae J.C. Development of a detailed kinetic model for gasoline surrogate fuels. Fuel 2008, 87:2013–22.

52. Morgan N, Smallbone A, Bhave A, Kraft M, Cracknell R, Kalghatgi G. Mapping surrogate gasoline compositions into RON/MON space. Combust Flame 2010, 157:1122–31.

Приложение А

Таблица 1 – Детальный углеводородный анализ образца № 1 (масса, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005	0,006
2	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005	0,006
3	0,144	0,000	0,000	0,000	0,000	0,555	0,700
4	1,454	0,452	0,000	0,000	0,013	0,023	1,942
5	3,671	2,463	0,000	0,526	0,114	0,018	6,793
6	4,658	6,504	0,502	5,640	0,090	0,017	17,410
7	5,346	5,879	3,353	9,677	0,134	0,000	24,389
8	6,483	9,214	6,066	8,504	1,547	0,000	31,814
9	1,169	7,361	0,366	1,425	1,351	0,000	11,672
10	1,036	0,463	1,356	0,748	0,039	0,000	3,641
11	0,103	0,273	0,432	0,000	0,000	0,000	0,808
12	0,282	0,033	0,398	0,000	0,000	0,000	0,713
13	0,010	0,049	0,000	0,000	0,000	0,000	0,059
14	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002
15	0,047	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,07
Итого	24,406	32,691	12,473	26,520	3,288	0,623	100,00

Таблица 2 – Детальный углеводородный анализ образца № 1 (объем, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005	0,007
2	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,008
3	0,208	0,000	0,000	0,000	0,000	0,511	0,719
4	1,811	0,583	0,000	0,000	0,015	0,022	2,431
5	4,211	2,871	0,000	0,507	0,126	0,018	7,733
6	5,101	7,176	0,413	5,359	0,094	0,016	18,159
7	5,682	6,219	2,785	9,171	0,136	0,000	23,994
8	6,693	9,468	5,060	8,031	1,546	0,000	30,799
9	1,173	7,309	0,306	1,329	1,300	0,000	11,417
10	1,026	0,457	1,118	0,675	0,036	0,000	3,313
11	0,100	0,258	0,354	0,000	0,000	0,000	0,713

Продолжение таблицы 2

12	0,271	0,028	0,306	0,000	0,000	0,000	0,605
13	0,010	0,048	0,000	0,000	0,000	0,000	0,058
14	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002
15	0,042	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,042
Итого	26,337	34,418	10,342	25,072	3,254	0,576	100,00

Таблица 3 – Детальный углеводородный анализ образца № 1 (моли, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,005	0,000	0,000	0,000	0,000	0,016	0,021
2	0,005	0,000	0,000	0,000	0,000	0,010	0,015
3	0,325	0,000	0,000	0,000	0,000	0,918	1,243
4	2,485	0,772	0,000	0,000	0,024	0,031	3,312
5	5,055	3,391	0,000	0,746	0,163	0,021	9,375
6	5,370	7,498	0,639	6,658	0,108	0,016	20,288
7	5,301	5,829	3,615	9,792	0,135	0,000	24,672
8	5,639	8,014	5,676	7,638	1,371	0,000	28,338
9	0,905	5,714	0,302	1,122	1,079	0,000	9,122
10	0,723	0,323	0,995	0,530	0,029	0,000	2,600
11	0,065	0,175	0,284	0,000	0,000	0,000	0,524
12	0,164	0,022	0,249	0,000	0,000	0,000	0,435
13	0,005	0,026	0,000	0,000	0,000	0,000	0,032
14	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001
15	0,022	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,022
Итого	26,071	31,764	11,761	26,484	2,908	1,011	100,00

Таблица 4 – Физико-химические свойства образца № 1

Группа	Молекулярная масса, г/моль	Относительная плотность	Давление насыщенных паров, кПа
1	27,073	0,556	0,106
2	41,933	0,583	0,055
3	56,810	0,703	2,738
4	58,287	0,577	12,573

Продолжение таблицы 4

5	71,996	0,635	10,959
6	85,299	0,639	7,323
7	98,288	0,735	3,169
8	111,674	0,747	1,264
9	127,178	0,739	0,181
10	139,292	0,794	0,015
11	153,430	0,819	0,002
12	163,079	0,852	0,002
13	184,246	0,743	0,000
14	198,390	0,760	0,000
15	212,340	0,800	0,000
Итого	103,303	0,723	38,388

Таблица 5 – Фракционный состав образца № 1

Отгон, %	Температура, °С
0,5	40,192
5,0	58,004
10,0	68,597
15,0	75,511
20,0	82,367
25,0	88,443
30,0	92,841
35,0	97,321
40,0	101,883
45,0	106,333
50,0	109,405
55,0	112,511
60,0	115,653
65,0	118,830
70,0	122,041
75,0	125,288
80,0	130,224

Продолжение таблицы 5

85,0	136,257
90,0	142,403
95,0	149,385
98,0	182,655
99,5	222,585

Таблица 6 – Детальный углеводородный анализ образца № 2 (масса, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001
2	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,012	0,017
3	0,004	0,000	0,000	0,000	0,004	1,125	1,134
4	0,169	0,015	0,000	0,000	0,022	0,038	0,244
5	3,456	1,076	0,000	0,275	0,311	0,014	5,131
6	6,215	5,080	0,946	2,728	0,114	0,026	15,109
7	8,459	6,822	1,549	5,511	0,330	0,000	22,671
8	6,921	10,322	1,806	4,663	1,086	0,000	24,799
9	0,753	6,059	2,501	2,993	0,812	0,000	13,118
10	0,901	2,910	2,820	0,408	0,429	0,000	7,467
11	0,039	1,551	4,699	0,132	0,000	0,000	6,421
12	0,077	0,736	1,930	0,420	0,000	0,000	3,163
13	0,055	0,273	0,000	0,000	0,000	0,000	0,327
14	0,029	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,029
15	0,369	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,369
Итого	27,453	34,844	16,252	17,129	3,107	1,216	100,00

Таблица 7 – Детальный углеводородный анализ образца № 2 (объем, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002
2	0,009	0,000	0,000	0,000	0,000	0,011	0,021
3	0,006	0,000	0,000	0,000	0,006	1,048	1,061
4	0,213	0,020	0,000	0,000	0,025	0,037	0,295
5	4,015	1,270	0,000	0,268	0,344	0,014	5,911

Продолжение таблицы 7

6	6,892	5,685	0,787	2,614	0,119	0,025	16,122
7	9,104	7,291	1,303	5,278	0,340	0,000	23,317
8	7,236	10,742	1,526	4,450	1,099	0,000	25,052
9	0,766	6,109	2,059	2,800	0,786	0,000	12,519
10	0,903	2,833	2,308	0,395	0,440	0,000	6,878
11	0,039	1,526	3,849	0,121	0,000	0,000	5,535
12	0,075	0,650	1,490	0,384	0,000	0,000	2,599
13	0,053	0,270	0,000	0,000	0,000	0,000	0,322
14	0,028	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,028
15	0,337	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,337
Итого	29,679	36,396	13,396	16,310	3,159	1,135	100,00

Таблица 8 – Детальный углеводородный анализ образца № 2 (моли, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,005	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005
2	0,015	0,000	0,000	0,000	0,000	0,028	0,043
3	0,010	0,000	0,000	0,000	0,011	1,981	2,002
4	0,308	0,028	0,000	0,000	0,041	0,055	0,432
5	5,070	1,578	0,000	0,415	0,474	0,017	7,554
6	7,633	6,239	1,282	3,431	0,144	0,026	18,755
7	8,934	7,205	1,780	5,940	0,356	0,000	24,215
8	6,413	9,564	1,801	4,434	1,026	0,000	23,238
9	0,622	5,005	2,209	2,509	0,692	0,000	11,037
10	0,670	2,175	2,177	0,308	0,323	0,000	5,653
11	0,026	1,051	3,400	0,091	0,000	0,000	4,569
12	0,048	0,499	1,299	0,264	0,000	0,000	2,110
13	0,031	0,157	0,000	0,000	0,000	0,000	0,188
14	0,016	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,016
15	0,184	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,184
Итого	29,985	33,500	13,949	17,391	3,068	2,106	100,00

Таблица 9 – Физико-химические свойства образца № 2

Группа	Молекулярная масса, г/моль	Относительная плотность	Давление насыщенных паров, кПа
1	16,043	0,260	0,027
2	42,065	0,587	0,155
3	59,978	0,782	2,544
4	60,324	0,605	1,379
5	71,919	0,635	8,469
6	85,329	0,686	6,696
7	99,136	0,712	3,112
8	113,016	0,724	1,046
9	125,893	0,767	0,204
10	140,115	0,795	0,036
11	149,015	0,849	0,018
12	159,073	0,891	0,008
13	184,245	0,743	0,001
14	198,390	0,760	0,000
15	212,340	0,800	0,001
Итого	110,940	0,732	23,696

Таблица 10 – Фракционный состав образца № 2

Отгон, %	Температура, °С
0,5	53,720
5,0	64,670
10,0	73,441
15,0	80,135
20,0	86,986
25,0	91,296
30,0	95,687
35,0	100,158
40,0	104,709
45,0	108,580

Продолжение таблицы 10

50,0	112,217
55,0	115,902
60,0	119,635
65,0	123,417
70,0	128,096
75,0	136,567
80,0	145,263
85,0	159,625
90,0	185,287
95,0	217,761
98,0	249,476
99,5	272,736

Таблица 11 – Детальный углеводородный анализ образца № 3 (масса, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,006
2	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,007
3	0,274	0,000	0,000	0,000	0,000	0,073	0,347
4	2,793	0,604	0,000	0,000	0,024	0,017	3,437
5	6,789	4,154	0,000	0,809	0,132	0,003	11,887
6	7,579	6,763	0,449	6,895	0,044	0,010	21,740
7	7,775	6,604	1,674	10,996	0,111	0,000	27,161
8	6,667	7,870	1,312	5,437	1,344	0,000	22,631
9	0,413	5,442	0,455	1,562	0,981	0,000	8,853
10	0,192	0,526	1,302	0,204	0,023	0,000	2,247
11	0,014	0,355	0,467	0,028	0,000	0,000	0,864
12	0,012	0,043	0,667	0,000	0,000	0,000	0,722
13	0,037	0,005	0,000	0,000	0,000	0,000	0,042
14	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001
15	0,055	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,055
Итого	32,606	32,367	6,326	25,932	2,659	0,111	100,00

Таблица 12 – Детальный углеводородный анализ образца № 3 (объем, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,006	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,010
2	0,005	0,000	0,000	0,000	0,000	0,004	0,009
3	0,385	0,000	0,000	0,000	0,000	0,065	0,451
4	3,385	0,785	0,000	0,000	0,027	0,016	4,185
5	7,574	4,712	0,000	0,758	0,142	0,003	13,190
6	8,072	7,266	0,359	6,346	0,044	0,009	22,096
7	8,037	6,782	1,353	10,132	0,110	0,000	26,414
8	6,694	7,859	1,058	5,025	1,308	0,000	21,944
9	0,403	5,274	0,365	1,395	0,925	0,000	8,362
10	0,185	0,500	1,061	0,180	0,021	0,000	1,946
11	0,013	0,338	0,368	0,024	0,000	0,000	0,743
12	0,012	0,038	0,512	0,000	0,000	0,000	0,562
13	0,034	0,005	0,000	0,000	0,000	0,000	0,039
14	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001
15	0,048	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,0048
Итого	34,855	33,531	5,076	23,860	2,578	0,101	100,0

Таблица 13 – Детальный углеводородный анализ образца № 3 (моли, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,013	0,000	0,000	0,000	0,000	0,013	0,025
2	0,008	0,000	0,000	0,000	0,000	0,009	0,017
3	0,587	0,000	0,000	0,000	0,000	0,114	0,701
4	4,536	0,981	0,000	0,000	0,040	0,022	5,578
5	8,883	5,436	0,000	1,089	0,178	0,004	15,589
6	8,302	7,408	0,543	7,734	0,050	0,008	24,046
7	7,325	6,221	1,715	10,572	0,107	0,000	25,940
8	5,509	6,504	1,167	4,657	1,132	0,000	18,969
9	0,304	4,008	0,358	1,168	0,743	0,000	6,580
10	0,127	0,349	0,914	0,138	0,017	0,000	1,545
11	0,008	0,215	0,298	0,017	0,000	0,000	0,538
12	0,007	0,025	0,394	0,000	0,000	0,000	0,425

Продолжение таблицы 13

13	0,019	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,021
14	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001
15	0,025	0,00	0,000	0,000	0,000	0,000	0,025
Итого	35,653	31,149	5,388	25,375	2,266	0,170	100,00

Таблица 14 – Физико-химические свойства образца № 3

Группа	Молекулярная масса, г/моль	Относительная плотность	Давление насыщенных паров, кПа
1	24,431	0,437	0,126
2	40,471	0,533	0,064
3	47,460	0,541	3,051
4	58,181	0,577	20,819
5	71,992	0,633	18,276
6	85,376	0,692	8,381
7	98,886	0,723	3,284
8	112,726	0,725	0,928
9	127,062	0,744	0,124
10	137,465	0,811	0,009
11	151,786	0,817	0,002
12	160,444	0,904	0,002
13	184,352	0,758	0,000
14	198,390	0,760	0,000
15	212,340	0,800	0,000
Итого	98,660	0,703	55,066

Таблица 15 – Фракционный состав образца № 3

Отгон, %	Температура, °С
0,5	38,875
5,0	53,727
10,0	60,024
15,0	66,558

20,0	72,407
25,0	77,781
30,0	83,297
35,0	88,231
40,0	91,972
45,0	95,774
50,0	99,635
55,0	103,556
60,0	107,309
65,0	110,759
70,0	114,252
75,0	117,789
80,0	121,370
85,0	124,994
90,0	133,623
95,0	146,181
98,0	181,393
99,5	236,308

Таблица 16 – Детальный углеводородный анализ образца № 4 (масса, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005	0,006
2	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,016	0,018
3	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,439	0,442
4	0,123	0,026	0,000	0,000	0,016	0,034	0,198
5	2,282	2,555	0,000	0,003	0,212	0,009	5,061
6	3,041	3,280	0,038	2,039	0,122	0,016	8,537
7	8,303	5,691	0,965	12,794	1,645	0,000	29,398
8	9,814	14,453	1,717	8,997	2,307	0,000	37,288
9	0,164	6,616	1,238	2,482	1,804	0,000	12,304
10	0,338	1,492	1,046	0,080	0,217	0,000	3,173
11	0,038	0,282	2,337	0,021	0,000	0,000	2,677

Продолжение таблицы 16

12	0,044	0,228	0,537	0,000	0,000	0,000	0,809
13	0,031	0,017	0,000	0,000	0,000	0,000	0,048
14	0,027	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,027
15	0,015	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,015
Итого	24,225	34,639	7,878	26,417	6,322	0,519	100,0

Таблица 17 – Детальный углеводородный анализ образца № 4 (объем, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005	0,008
2	0,005	0,000	0,000	0,000	0,000	0,014	0,019
3	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,405	0,408
4	0,154	0,033	0,000	0,000	0,018	0,032	0,237
5	2,620	2,981	0,000	0,003	0,237	0,009	5,850
6	3,333	3,626	0,032	1,966	0,123	0,016	9,096
7	8,832	5,971	0,802	12,063	1,659	0,000	29,327
8	10,141	14,850	1,431	8,552	2,302	0,000	37,276
9	0,165	6,596	1,013	2,282	1,807	0,000	11,863
10	0,335	1,417	0,868	0,076	0,228	0,000	2,923
11	0,037	0,275	1,891	0,019	0,000	0,000	2,222
12	0,043	0,220	0,424	0,000	0,000	0,000	0,686
13	0,029	0,017	0,000	0,000	0,000	0,000	0,046
14	0,025	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,025
15	0,013	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,013
Итого	25,738	35,986	6,461	24,960	6,374	0,481	100,00

Таблица 18 – Детальный углеводородный анализ образца № 4 (моли, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,006	0,000	0,000	0,000	0,000	0,018	0,024
2	0,008	0,000	0,000	0,000	0,000	0,036	0,044
3	0,006	0,000	0,000	0,000	0,000	0,768	0,774
4	0,223	0,046	0,000	0,000	0,030	0,048	0,347
5	3,321	3,717	0,000	0,004	0,319	0,011	7,372

Продолжение таблицы 18

6	3,705	3,996	0,052	2,544	0,153	0,016	10,466
7	8,699	5,962	1,100	13,681	1,759	0,000	31,200
8	9,020	13,284	1,698	8,559	2,164	0,000	34,724
9	0,134	5,419	1,083	2,064	1,520	0,000	10,221
10	0,249	1,109	0,783	0,060	0,178	0,000	2,378
11	0,025	0,189	1,655	0,014	0,000	0,000	1,883
12	0,027	0,140	0,351	0,000	0,000	0,000	0,519
13	0,018	0,010	0,000	0,000	0,000	0,000	0,027
14	0,014	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,014
15	0,007	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,007
Итого	25,463	33,872	6,721	26,925	0,895	0,895	100,00

Таблица 19 – Физико-химические свойства образца № 4

Группа	Молекулярная масса, г/моль	Относительная плотность	Давление насыщенных паров, кПа
1	27,035	0,5540	0,117
2	44,005	0,671	0,143
3	60,015	0,783	0,971
4	60,513	0,605	1,123
5	72,080	0,626	9,242
6	85,665	0,679	3,996
7	98,954	0,725	3,930
8	112,837	0,724	1,773
9	126,473	0,750	0,193
10	140,438	0,785	0,016
11	149,407	0,871	0,008
12	163,885	0,852	0,002
13	184,317	0,753	0,000
14	198,390	0,760	0,000
15	212,340	0,800	0,000
Итого	108,036	0,723	21,515

Таблица 20 – Фракционный состав образца № 4

Отгон, %	Температура, °С
0,5	53,892
5,0	65,452
10,0	77,996
15,0	88,270
20,0	92,909
25,0	97,639
30,0	102,426
35,0	106,568
40,0	108,685
45,0	110,819
50,0	112,970
55,0	115,138
60,0	117,322
65,0	119,523
70,0	121,741
75,0	123,975
80,0	126,226
85,0	134,338
90,0	143,559
95,0	164,919
98,0	218,374
99,5	248,903

Таблица 21 – Детальный углеводородный анализ образца № 5 (масса, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002
2	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003	0,007
3	0,135	0,000	0,000	0,000	0,002	0,503	0,640
4	1,612	0,328	0,000	0,000	0,012	0,021	1,974
5	4,543	3,200	0,000	0,555	0,105	0,004	8,408
6	5,672	5,317	0,311	5,557	0,053	0,013	16,923

Продолжение таблицы 21

7	7,469	6,310	1,439	11,495	0,125	0,000	26,838
8	7,439	9,144	2,566	8,185	1,385	0,000	28,720
9	0,012	9,155	0,685	1,399	1,743	0,000	12,994
10	0,009	0,853	0,491	0,334	0,199	0,000	1,886
11	0,053	0,481	0,255	0,000	0,000	0,000	0,790
12	0,002	0,099	0,533	0,000	0,000	0,000	0,635
13	0,009	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,011
14	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003
15	0,171	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,171
Итого	27,136	34,890	6,281	27,525	3,624	0,543	100,0

Таблица 22 – Детальный углеводородный анализ образца № 5 (объем, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,005	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,005
2	0,008	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002	0,011
3	0,192	0,000	0,000	0,000	0,003	0,456	0,651
4	1,981	0,418	0,000	0,000	0,014	0,020	2,433
5	5,139	3,680	0,000	0,527	0,116	0,004	9,467
6	6,125	5,793	0,252	5,182	0,054	0,012	17,418
7	7,828	6,571	1,179	10,733	0,125	0,000	26,436
8	7,574	9,257	2,109	7,619	1,367	0,0000	27,927
9	0,012	8,957	0,564	1,290	1,687	0,000	12,509
10	0,009	0,831	0,395	0,339	0,194	0,000	1,767
11	0,051	0,443	0,205	0,000	0,000	0,000	0,699
12	0,002	0,092	0,416	0,000	0,000	0,000	0,510
13	0,009	0,002	0,000	0,000	0,000	0,000	0,011
14	0,003	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,003
15	0,152	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,152
Итого	29,090	36,045	5,120	25,691	3,560	0,494	100,00

Таблица 23 – Детальный углеводородный анализ образца № 5 (моли, %)

Группа	Парафины	Изопарафины	Ароматика	Нафтены	Олефины	Оксигенаты	Итого
1	0,011	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,011
2	0,013	0,000	0,000	0,000	0,000	0,006	0,019
3	0,301	0,000	0,000	0,000	0,006	0,825	1,132
4	2,737	0,557	0,000	0,000	0,022	0,028	3,344
5	6,212	4,376	0,000	0,780	0,148	0,005	11,521
6	6,493	6,087	0,393	6,514	0,062	0,011	19,560
7	7,353	6,212	1,541	11,549	0,125	0,000	26,779
8	6,424	7,897	2,385	7,291	1,219	0,000	25,216
9	0,009	7,053	0,562	1,093	1,373	0,000	10,091
10	0,006	0,591	0,357	0,235	0,138	0,000	1,327
11	0,034	0,324	0,165	0,000	0,000	0,000	0,523
12	0,001	0,059	0,330	0,000	0,000	0,000	0,390
13	0,005	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,006
14	0,001	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001
15	0,079	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,079
Итого	29,680	33,157	5,733	27,462	3,093	0,875	100,00

Таблица 24 – Физико-химические свойства образца № 5

Группа	Молекулярная масса, г/моль	Относительная плотность	Давление насыщенных паров, кПа
1	16,043	0,260	0,056
2	36,943	0,442	0,080
3	56,671	0,700	2,536
4	58,270	0,578	12,385
5	71,997	0,633	13,661
6	85,378	0,692	6,839
7	98,904	0,724	3,382
8	112,462	0,733	1,175
9	127,077	0,740	0,202
10	140,264	0,760	0,010
11	149,494	0,805	0,002

Продолжение таблицы 24

12	160,751	0,887	0,002
13	184,342	0,756	0,000
14	198,390	0,7600	0,000
15	212,340	0,800	0,000
Итого	102,608	0,713	40,331

Таблица 25 – Фракционный состав образца № 5

<u>Отгон, %</u>	<u>Температура, °С</u>
0,5	40,224
5,0	57,137
10,0	65,747
15,0	73,394
20,0	80,396
25,0	87,293
30,0	97,293
35,0	95,362
40,0	99,499
45,0	103,706
50,0	107,398
55,0	110,474
60,0	113,586
65,0	116,731
70,0	119,912
75,0	123,128
80,0	126,378
85,0	132,921
90,0	139,750
95,0	146,722
98,0	169,782
99,5	222,806

Приложение Б

Таблица 1 – Рецептуры смешения

№ смеси	Состав	Содержание, масс. доля	$V * 10^3, \text{м}^3$	Объемная доля	Содержание в 75 мл. смеси, мл
1	Образец № 1	0,95	1,314	0,954	72
	Этанол	0,05	0,063	0,046	3
2	Образец № 1	0,93	1,286	0,935	70
	Этанол	0,07	0,089	0,065	5
3	Образец № 1	0,9	1,245	0,909	68
	Этанол	0,1	0,125	0,091	7
4	Образец № 1	0,95	1,314	0,951	71
	МТБЭ	0,05	0,068	0,049	4
5	Образец № 1	0,92	1,272	0,922	69
	МТБЭ	0,08	0,108	0,078	6
6	Образец № 1	0,88	1,217	0,882	66
	МТБЭ	0,12	0,162	0,118	9
7	Образец № 2	0,95	1,298	0,953	71,5
	Этанол	0,05	0,063	0,047	3,5
8	Образец № 2	0,93	1,270	0,935	70
	Этанол	0,07	0,089	0,065	5
9	Образец № 2	0,9	1,229	0,907	68
	Этанол	0,1	0,127	0,093	7
10	Образец № 2	0,95	1,298	0,951	71
	МТБЭ	0,05	0,068	0,049	4
11	Образец № 2	0,92	0,673	0,862	65
	МТБЭ	0,08	0,108	0,138	10
12	Образец № 2	0,88	1,202	0,881	66
	МТБЭ	0,12	0,162	0,119	9
13	Образец № 3	0,95	1,351	0,955	72
	Этанол	0,05	0,063	0,045	3
14	Образец № 3	0,93	1,323	0,937	70
	Этанол	0,07	0,089	0,063	5
15	Образец № 3	0,9	1,280	0,910	68
	Этанол	0,1	0,127	0,090	7
16	Образец № 3	0,95	1,351	0,952	71,5
	МТБЭ	0,05	0,068	0,0476	3,5
17	Образец № 3	0,92	1,309	0,924	69
	МТБЭ	0,08	0,108	0,076	6
18	Образец № 3	0,88	1,252	0,885	66
	МТБЭ	0,12	0,162	0,115	9
19	Образец № 3	0,97	1,379	0,973	73
	Изопропиловый спирт	0,03	0,038	0,027	2
20	Образец № 3	0,94	1,337	0,946	71
	Изопропиловый спирт	0,06	0,076	0,054	4

Продолжение таблицы 1

21	Образец № 3	0,9	1,280	0,909	68
	Изопропиловый спирт	0,1	0,127	0,091	7
22	Образец № 4	0,95	1,314	0,971	73
	Этанол	0,05	0,039	0,029	2
23	Образец № 4	0,93	1,286	0,935	70
	Этанол	0,07	0,0888	0,065	5
24	Образец № 4	0,9	1,245	0,908	68
	Этанол	0,1	0,127	0,092	7
25	Образец № 4	0,95	1,314	0,951	71
	МТБЭ	0,05	0,068	0,0489	4
26	Образец № 4	0,92	1,272	0,922	69
	МТБЭ	0,08	0,108	0,078	6
27	Образец № 4	0,88	1,217	0,882	66
	МТБЭ	0,12	0,162	0,118	9
28	Образец № 4	0,97	1,342	0,972	73
	Изопропиловый спирт	0,03	0,038	0,028	2
29	Образец № 4	0,94	1,300	0,944	71
	Изопропиловый спирт	0,06	0,076	0,056	4
30	Образец № 4	0,9	1,245	0,907	68
	Изопропиловый спирт	0,1	0,127	0,093	7
31	Образец № 5	0,95	1,332	0,955	71,5
	Этанол	0,05	0,063	0,045	3,5
32	Образец № 5	0,93	1,304	0,936	70
	Этанол	0,07	0,089	0,064	5
33	Образец № 5	0,9	1,262	0,909	68
	Этанол	0,1	0,127	0,091	7
34	Образец № 5	0,95	1,332	0,952	71,5
	МТБЭ	0,05	0,068	0,048	3,5
35	Образец № 5	0,92	1,290	0,923	69
	МТБЭ	0,08	0,108	0,077	6
36	Образец № 5	0,88	1,234	0,884	66
	МТБЭ	0,12	0,162	0,116	9
37	Образец № 5	0,97	1,360	0,973	73
	Изопропиловый спирт	0,03	0,038	0,027	2
38	Образец № 5	0,94	1,318	0,945	71
	Изопропиловый спирт	0,06	0,076336	0,055	4
39	Образец № 5	0,9	1,262272	0,908	68
	Изопропиловый спирт	0,1	0,127	0,092	7

Приложение В

(справочное)

Procedure for developing surrogate mixture composition

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ92	Радченко Н.Д.		

Руководитель ВКР

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

Консультант-лингвист Отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Терре Д.А.	к.фил.н		

4.3 Procedure for developing surrogate mixture composition

Global problems related to air pollution, climate change, and the limited nature of fuel resources require the automotive industry to significantly improve plant energy efficiency. With respect to the combustion, such improvements can only be achieved by a better understanding of the details of the combustion processes. The introduction of new technologies (downsizing, high dilution levels, etc.) also requires the regulation of combustion in constantly growing areas. In this context, combustion modeling is an increasingly important tool for improving the engine efficiency as well as understanding the observed behavior of the engine. When introducing higher accuracy levels to simulate combustion and contamination, it is necessary to accurately describe the properties of the fuel. Since the actual fuels, both diesel and petrol, are complex mixtures of hundreds of compounds, it is not currently possible to obtain a detailed description of their chemical composition. Therefore, surrogates based on a limited set of compounds are defined as simulating the actual fuel, while allowing a detailed description of their behavior.

In general, the term surrogate gasoline denotes a simpler representation of a fully mixed fuel. The most widely used gasoline fuel surrogates are n-heptane and isooctane binary mixtures, called primary reference fuels (PRF) that are mixed in proportions corresponding to detonation real gasoline behavior using standardized ASTM methodologies for octane analysis (RON) (ASTM D 2699-13b) [50]; motor octane number (MON) (ASTM D 2700-13b) [50]. Ternary mixtures of PRF and toluene (i.e. TRF) have also been proposed as surrogates of gasoline fuels with satisfactory reproduction important target properties [51].

Octane numbers are determined by comparing the behavior of the test fuel with the behavior of mixtures of n-heptane and isooctane determined by their liquid volume fractions. However, a mixing rule based on the linear weighing of liquid volume fractions has long been known to have limited representativeness.

The simplest surrogate, primary reference fuel (PRF), that is, a mixture of isooctane and n-heptane, is used in well-known research studies and motor octane numbers (RON and MON) to quantify gasoline knock resistance by matching knock

intensities in a standard engine [51]. Compared to the RON test, in the MON test, the final gas temperature is higher at the same pressures, and therefore, if gasoline does not exhibit a negative temperature coefficient (NTC) phase at these temperatures, the MON value tends to be lower than RON. The sensitivity S , i.e. the octane difference ($S = \text{RON} - \text{MON}$) is a measure of the fuel response to varying pressures and temperatures. PRFs have zero sensitivity by definition. However, gasoline, due to its complex composition, is likely to exhibit self-igniting behavior other than that of PRF, which corresponds to its RON or MON value when the history of pressure and temperature of the final gas does not meet the standard RON and MON tests. Mixtures of isooctane, n-heptane, and toluene (toluene reference fuels, TRFs) have the advantage of having non-zero sensitivity.

The use of isooctane and n-heptane as surrogate components is difficult to avoid because they are linear and branched alkanes, the main gasoline components. In addition, the chemistry leading to their self-ignition has been relatively well studied. However, gasoline consists not only of alkanes. So, EN228, the European standard for gasoline determines the content of aromas up to 35% by volume, it also allows 5% oxygenates by volume. It, therefore, seems natural to identify surrogates outside of PRF and TRF which contain compounds corresponding to different hydrocarbon families present in gasoline [33].

The optimal composition of the surrogate depends on its use. A large number of physical and chemical properties of the target fuel can be directed to the surrogate, among them - the distillation curve, RON, MON, stoichiometric air-to-fuel ratio, molecular weight, thermal conductivity, and laminar combustion rate. At the same time, the number of components in the gasoline surrogate is limited due to chemical kinetic data and the complexity of mixing rules. Since gasoline components belong to one of the five main classes, it seems natural to detect a surrogate with the same number of components. One mathematical constraint that must always be fulfilled when determining the composition of a surrogate is that the sum of the molar or volume fractions of its components must be equal to one. This means that for an n -component surrogate, the $n - 1$ properties can be used as constraints to optimize the

surrogate composition. The stoichiometric ratio of air to fuel (A/F) and the calorific value of gasoline must also be agreed upon to correctly predict cumulative heat generation. The correct atomic proportions of H/C/O and molar mass M will automatically yield the desired A/Fs.

For the quasi-dimensional combustion modeling in SI engine coupled with chemical kinetic modeling of surrogate self-ignition in the end gas, the H/C and O/C ratios are crucial. Therefore, these limitations are used in determining the surrogate composition:

$$\frac{\sum_{i=1}^n x_i H_i}{\sum_{i=1}^n x_i C_i} = \frac{H}{C}$$

$$\frac{\sum_{i=1}^n x_i O_i}{\sum_{i=1}^n x_i C_i} = \frac{O}{C}$$

$$\sum_{i=1}^n ON_i x_i = ON$$

Actual petrol fuels have a H/C ratio between 1.6 and 2.0, so surrogate fuel mixtures should be in the same range [51]. The H/C orientation is important because the air/fuel ratio depends on this value. If the H/C ratio is well-matched with surrogate fuel, then the airflow to the engine will be the same between the conventional gasoline fuel and its surrogate. The reproduction of spontaneous combustion of gasoline is the biggest problem in the surrogate formulation. The ability of a surrogate to repeat the anti-detonation properties of gasoline only partially depends on the octane model used. The true surrogate will correspond to the delay in ignition of gasoline under any conditions. It will repeat ignition speeds similar to gasoline, and therefore it will have not only the same MON and RON as gasoline but also a similar octane index, regardless of which engine they are compared to.

Equations (1), (2), and (3) and the sum of units of molar fractions provide 5 constraints for defining a so-called surrogate based on properties. An alternative would be a composition-based surrogate composed by presenting the essential components of gasoline to the surrogate of that particular family. It is expected that

the resulting surrogate will have properties other than the properties of the target gasoline since surrogate components do not fully correspond to all substances in this family. However, one of the results of this study is that a component-based surrogate whose composition accurately simulates the fractions of real gasoline can perform excellent functions in reproducing self-igniting behavior compared to a purely property-based surrogate that can contain unrealistic amounts of aromatics and oxygenates.

A more detailed embodiment of this approach would be to define surrogate fuel mixtures of components to achieve the same representative functional group composition as the gasoline of interest. This more detailed methodology was used by the petrochemical industry to characterize the impact of raw materials on the properties of products obtained from chemical treatment.

In this respect one should consider the six major gasoline hydrocarbon groups (H-alkane, isoalkane, olefin, cycloalkane, aromatic and oxygenated groups) and the corresponding gasoline fuel components.

Gasoline is a complex fuel consisting of many components, including various hydrocarbons in the range from C₃ to C₁₂₊. One major group of gasoline components is n-Alkane, which constitutes about 9.5% of the total fuel. Some properties of alkanes up to C₁₂ are shown in Table 1, where H-butane has the lowest boiling point of -1 °C and n-heptane has a boiling point of 98 °C.

Table 1 - n-Alkane Group Component Properties

	Density (kg/m ³)	Boiling point (° C)	RON/MON (-/-)
n-butane	583	-1	94/89.1
n-pentane	626	36	62/63.2
n-hexane	654	69	25/26
n-heptane	683	98	0/0
n-octane	703	126	-10/-10
n-nonane	718	151	-10/-10
n-decane	730	174	-15/-15

Isoalkanes are the largest of the main hydrocarbon groups contained in gasoline 42.3% of the gasoline volume. Historically, 2,2,4-trimethylpentane (also known as isooctane) has been used as a surrogate for the isoalkane group, since a surrogate mixture of 2,2,4-trimethylpentane and n-heptane mimics gasoline

combustion with a high degree of accuracy. Both fuels can be produced in a significant amount and have a very close density, a ratio of hydrogen to carbon (H/C), and a lower calorific value. Gasoline contains about 11% isooctane. Octane has 18 isomers, and only 2,2,4-trimethylpentane and n-octane have been extensively studied.

Isomers of C_7 components in the isoalkane group have a higher volume fraction than isomers of C_8 components. C_9 has 9 isomers including n-heptane. Isomers of C_7 have not been studied in practice.

Hexane isomers are the third major group in gasoline after heptane and octane isomers. Hexane has five isomers.

Olefins, also known as alkenes, make up a large number of transport fuels such as gasoline, diesel, and aviation fuel. For example, gasoline consists of 15-20% olefins by volume. In addition, olefins have been identified as an essential component in determining the octane sensitivity of fuel, which is an important characteristic for spark-ignition engines. In addition, oxidation of alkenes is an important mechanism in the combustion of higher alkanes. Most olefins in gasoline are components of C_5 and C_6 .

W. Leppard studied the self-ignition chemistry of alkenes (1-Butene, cis-2-Butene, iso-Butene, 2-methyl-2-Butene and 1-hexene) and their corresponding alkanes (H-Butane, iso-Butane, 2-methylbutane and H-hexane) using a motor single-cylinder engine by measuring stable intermediate. He provided evidence that alkene self-ignition chemistry is dominated by radicals added to the double bond, especially for compounds with lower carbon numbers.

Cycloalkanes (also known as naphthenes) constitute a significant part of conventional diesel fuel, jet fuel, and gasoline (up to 35%, 20%, and 15% by volume, respectively). Methyl substituted (mono-and di) cycloalkane isomers are abundant in gasoline fuel, with methyl and alkyl substitutions less common. Cycloalkanes S_5 are the most common components of gasoline. A few studies, both experimental and computational, have been carried out on the oxidation of cycloalkanes. Due to their simplicity compared to other cycloalkanes, the kinetic mechanisms of cyclopentane

and cyclohexane were studied most fully. Aromatics are another important component of gasoline. Benzene, a common aromatic product, is limited to 1% of the total gasoline volume.

The study of ethanol oxidation is crucial for predicting gasoline combustion since approximately 5% of ethanol by volume should contain gasoline. At RON/MON 116.3/101.4, ethanol combustion characteristics were widely studied using low-pressure impact pipes, high-pressure impact pipes, burners, turbulent flow reactors.

The choice of one compound, and not another, is primarily based on its properties (abundance of its family in composition, delay of self-ignition, etc.). But the second important factor in choosing a compound is the current knowledge of its chemical kinetics since the ultimate goal is to simulate auto-ignition in engines. This means that the choice of compounds obtained below can be made if knowledge of the kinetics of discarded but suitable species is improved. To direct the selection of representative compounds, gasoline samples with a known composition are used as a carrier. Gasoline generally contains branched paraffins and aromatics that provide high octane numbers. For such families, the most obvious surrogate compounds are isooctane and toluene, respectively, for many reasons.

Thus, the purpose of the present study is, therefore, to address the problem using a model to map the toluene/n-heptane/i-octane space concerning RON and MON (and hence Sensitivity) and then use this fit to allow one to determine the RON and MON for any TRF surrogate [51]. This would allow the research community to refer to surrogate fuels in a manner that would be more beneficial to the industry (i.e. in terms of RON and MON).

On the other hand, isooctane is only the second most common branched paraffin, and the introduction of isopentane into surrogate composition is strongly recommended once fully validated mechanisms are available. This impurity will not only improve the abundance patterns of surrogate kinetic models but will also significantly reduce the molar weight of the surrogate, which is one of the most obvious shortages of surrogates built only on C7-C8 compounds.

Linear paraffins are the third most important chemical family. The compound from this family will balance branched paraffins and aromatics, thus making it possible to develop realistic self-ignition properties. Some branched paraffins and all aromatic compounds are less prone to auto-ignition (in terms associated with the engine, have larger octane numbers) than the intended gasoline, while liquid linear paraffins are very prone to auto-ignition (in terms associated with the engine, have very low octane numbers). Only two linear paraffins should be considered: n-pentane and n-heptane. n-Heptane appears to be the most suitable compound for two important reasons: its low octane numbers and knowledge of its kinetics. The octane numbers of n-heptane are zero (by definition), while the octane numbers of n-pentane are about 62. Therefore, the use of n-pentane as a representative of linear paraffins to balance the high octane numbers of isooctane and toluene implies the content of linear paraffins in the surrogate. In addition, n-heptane is certainly the hydrocarbon the chemical kinetics of which is best known, and the amount of mechanisms well-confirmed in published literature is the greatest. A mixture of n-heptane, isooctane, and toluene as a first step in building a gasoline surrogate is a widespread choice [52]. This choice is primarily dictated by the modern knowledge of chemical kinetics, as well as the belonging of these compounds to the main families of gasoline chemicals and the ability to significantly restore most of the properties of gasoline. To improve the surrogates of gasoline, more chemical families (olefins, oxygen-containing compounds, and/or cyclic paraffins) need to be considered.

With more compounds, it is possible to reproduce more gasoline properties (for example, oxygen content or molar mass). While maintaining n-heptane, isooctane, and toluene as basic compounds, additional species should be selected so that the properties of the surrogate tend to have gasoline properties. More specifically, the additional compounds should be lighter than gasoline because the base compounds are either heavy or lighter than gasoline, preventing the representation of surrogate molar mass. Similarly, the RON or MON value of additional connections should be the same for gasoline, while the sensitivity to

compounds should be higher than that of gasoline. A similar RON or MON is aimed at not distorting the balance between the main members of the family when coordinating RON or MON gasoline. High sensitivity allows both RON and MON to be located simultaneously, which is not possible for most TRF mixtures due to the high content in the insensitive fuel n-heptane and isooctane. Matching both octane numbers is important to restore the long-known difference in self-ignition behavior between actual gasoline and PRF.

Oxygenated compounds are a small chemical family, but with very specific properties and importance, which will grow shortly. Oxygenated compounds are additives introduced during the production of gasoline from crude oil, limiting the choice of the compound to several, mainly ethanol, methyl tert-butyl ether (MTBE), and ethyl tert-butyl ether (ETBE). From a surrogate perspective, ethanol has the advantage of being lighter and having well-known chemical kinetics. Therefore, the addition of ethanol is recommended.

To obtain basic combustion chemistry, a wider range of physicochemical properties of the surrogate must correspond to the target fuel. The present study demonstrates a method of producing surrogate mixtures for gasoline fuels according to significant target properties such as H/C ratio, density, molar mass, RON, and MON. A new contribution of this research is the integration of modeling tools for predicting chemical kinetics and physical properties of surrogate candidate mixtures with regression optimization to determine the optimal surrogate mixture. The current methodology could be further extended to other target properties and surrogates could be developed for different types of refining petrol, jet fuel, and diesel fuel.

To determine the composition of gasoline samples, detailed hydrocarbon analysis (DHA) was performed on a gas chromatograph. A surrogate palette is a set of pure joints that can be mixed in measured proportions to obtain surrogate fuel. The palette of species selected to formulate a surrogate is critical for matching the desired properties of the target fuel.

There are various physicochemical properties of gasoline fuel characterizing its combustion behavior. When formulating a surrogate mixture, the goal is to

emulate gasoline so close if possible. Surrogate blends with properly selected components mixed in the right proportions can accurately capture the target properties.

Worldwide, the most widely used octane number is RON, which is determined by operating the fuel in a variable compression ratio test engine under controlled conditions and comparing the results with the results for PRF mixtures (isooctane and n-heptane). The higher RON fuel maintains a higher compression ratio before detonation, and the RON of the fuel is directly related to the ignition delay time of the homogeneous gas phase.

The octane numbers of the mixed surrogates were determined by linear mixing of the molar fraction, and no optimization or weighting factors were used to suit.

Density is one of the potential target properties of the surrogate composition because it relates to viscosity, sputtering, flow characteristics, and mixing behavior. The density of the fuel and palette compounds was measured using the standard procedure indicated in ASTM D 4052. The density of the surrogate mixture is calculated using linear mixing of volume fractions. Inaccuracy in surrogate density prediction is < 1% due to uncertainties in the density measurement of each pure component.

$$\sum_{i=1}^n v_i \rho_i = \rho$$

v_i – volume fraction of i th species,

ρ_i – density of i th species.

The change in composition can affect several key parameters such as evaporation, heat release, the reactivity of contaminants, ignition delay, etc. Thus, matching the compositional characteristics is crucial for obtaining a suitable surrogate fuel. There are different approaches to formulating a surrogate that corresponds to the compositional features of real fuel. The hydrocarbon class distribution was based on the classification of compounds according to any of the following groups: (P) n-paraffins (alkanes), (I) isoparaffins (iso-alkanes), (O) olefins

(alkenes), (N) naphthenes (cycloalkanes) and (A) aromatic compounds (PIONA) [4]. The deconstruction of fuel for carbon types is aimed at capturing the molecular levels of compounds present inside. It classifies carbon-carbon (C-C) bonds into 11 categories. The amount of each type of carbon is determined by the molar fractions of the individual compounds measured in DHA and their respective molecular structure.

The objective function F is a regression model broadly reflecting the difference between the target properties of the real fuel and the surrogate mixture. The global minimum for F is a surrogate composition with the closest resemblance to the target fuel. In this study, separate objective functions for gasoline were developed.

$$\sum_{i=1}^6 (F_{i,surrogate} - F_{i,fuel})^2 \rightarrow \min$$

When performing an optimization scheme, one must specify the upper and lower limits of the concentration of individual views. In general, it is satisfactory to determine a minimum over the entire range, i.e. from 1% to 100%.

The optimization algorithm evaluated several combinations of molar fractions within given boundaries and constraints. These molar fraction sets were generated on the optimization toolbar after evaluating the gradient of the objective function.

Simplified representations of complex real fuels are necessary for the capabilities of detailed chemical kinetic and computational modeling of flow dynamics.

These tools can be used to improve and accelerate the development of IE engines and other combustion devices. This work is focused on developing an approach to compiling surrogate mixtures for gasoline fuels using a limited number of pure components mixed in appropriate proportions. The composition reflects compositional characteristics, RON, MON, molar mass, H/C ratio, and density of target gasoline. A regression-based optimization scheme has been developed to determine the composition of palette views required to meet target properties. Thus, the target ignition delay property (i.e., RON) has been integrated.

Приложение Г
Список публикаций студента

№	Наименование работы, ее вид	Характер работы	Выходные данные	Объем, стр.	Соавторы
1	Моделирование детонационных свойств моторных топлив	печатный	XXIII Международного симпозиума имени академика М. А. Усова студентов и молодых ученых «Проблемы геологии и освоения недр»	2	Карпова А.М.
2	Исследование влияния присадок и добавок на детонационные свойства моторных топлив	печатный	XXIV Международного симпозиума имени академика М. А. Усова студентов и молодых учёных «Проблемы геологии и освоения недр»	2	Нелубова Д.М.
3	Исследование и моделирование влияния добавок и присадок на эксплуатационные свойства бензинов	печатный	XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л. П. Кулёва и Н. М.	1	Нелубова Д.М.

			Кижнера «Химия и химическая технология в XXI веке»		
4	Исследование и моделирование добавок и присадок на эксплуатационные характеристики моторных топлив	печатный	XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке» имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера	1	Нелюбова Д.М.