

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

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

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

### МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
<b>Моделирование свойств моторных топлив</b>

УДК 665.733-047.58

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Нелюбова Дарья Михайловна		

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	Сечин Андрей Александрович	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)
<b>Общекультурные (универсальные) компетенции</b>	
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
<b>Общепрофессиональные компетенции</b>	
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
<b>Профессиональные компетенции</b>	
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
<b>Дополнительные профессиональные компетенции (профессиональные компетенции, установленные университетом)</b>	
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-методическую документацию для реализации образовательных программ

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 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

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ02	Нелюбовой Дарье Михайловне

Тема работы:

Моделирование свойств моторных топлив

Утверждена приказом директора (дата, номер)

от 28.01.2022 г. №28-93/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:

#### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p><b>Исходные данные к работе</b>  <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Рецептуры моторных топлив, компоненты суррогатов.</p>
<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b>  <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p><i>Введение: актуальность разработки рецептур моторных топлив</i></p> <p>1) ТЭО: композиции моторных топлив, модифицирующие добавки и присадки</p> <p>2) Аналитический обзор: методы определения свойств моторных топлив, методики разработки и области использования суррогатных композиций.</p>

	<p>3) Объекты и методы, постановка задачи исследования.</p> <p>4) Экспериментальная часть: экспериментальное топлив, совершенствование методики создания суррогатов, совершенствование алгоритма оптимизации состава, экспериментальное исследования свойств суррогатов и моторных топлив, оценка возможности прогнозирования свойств с использованием суррогатных композиций.</p> <p>5) Анализ результатов.</p> <p>6) Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.</p> <p>7) Социальная ответственность.</p> <p>8) Заключение.</p> <p>Список используемой литературы.</p>
--	--

<b>Перечень графического материала</b> <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	
<b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b> <i>(с указанием разделов)</i>	
<b>Раздел</b>	<b>Консультант</b>
«Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	Рыжакина Татьяна Гавриловна, к.э.н., доцент ОСГН ШБИП
«Социальная ответственность»	Сечин Андрей Александрович, к.т.н., доцент ООД
«Иностранный язык»	Надеина Луиза Васильевна, к.филол.н, доцент ОИЯ ШБИП
<b>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</b>	
Литературный обзор	

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	01.02.2022 г.
---	---------------

**Задание выдал руководитель:**

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

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
2ДМ02	Д.М. Нелюбова		

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов  
 Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология  
 Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии  
 Период выполнения весенний семестр 2021/2022 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: 25.05.2022 г.

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.02.2022	Анализ актуальности темы исследования.	10
03.03.2022	Анализ основных эксплуатационных свойств моторных топлив и методов их определения. Анализ современных технологий производства моторных топлив. Анализ методов формирования суррогатных композиций моторных топлив.	20
04.03.2022	Выбор объектов и методов исследования. Постановка цели и определения задач исследования. Выполнение расчетов.	40
10.04.2022	Анализ результатов. Выводы и рекомендации	10
06.05.2022	Подготовка раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». Подготовка раздела «Социальная ответственность». Подготовка раздела «Иностранный язык».	20

**Составил руководитель ВКР:**

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

**СОГЛАСОВАНО:**

**Руководитель ООП**

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

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ02	Нелюбовой Дарье Михайловне

Школа	ИШПР	Отделение	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление/ специальность	18.04.01 Химическая технология

<b>Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:</b>	
Моделирование свойств моторных топлив	Работа с научной литературой, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах
<b>Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:</b>	
1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив разработки проекта с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта
2. Планирование и формирование бюджета разработки	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение бюджета научного исследования
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности разработки	Проведение оценки экономической эффективности, ресурсоэффективности и сравнительной эффективности различных вариантов исполнения
<b>Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):</b>	
1. Оценка конкурентоспособности технических решений 2. Матрица SWOT 3. График проведения и бюджет проекта 4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности разработки	

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.02.2022
--	------------

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	к.э.н.		01.02.2022

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Нелюбова Дарья Михайловна		01.02.2022

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ02	Нелубовой Дарье Михайловне

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

Тема ВКР:

<b>Моделирование свойств моторных топлив</b>	
<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объект исследования – прямогонные бензиновые дистилляты, смеси суррогатных топлив. Методика: моделирование свойств топлив. Рабочая зона – химическая лаборатория по исследованию моторных топлив. Область применения: Промышленные предприятия нефтехимической отрасли.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– ТК РФ от 30.12.2001 N 197-ФЗ;</li> <li>– ПНД Ф 12.13.1-03;</li> <li>– СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03.</li> </ul>
<b>2. Производственная безопасность:</b> 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<ul style="list-style-type: none"> <li>– отклонение показателей микроклимата;</li> <li>– отсутствие или недостаток естественного и искусственного света на рабочем месте;</li> <li>– повышенная температура поверхностей оборудования, материалов;</li> <li>– факторы, связанные с электрическим током;</li> <li>– повышенный уровень шума.</li> </ul>
<b>3. Экологическая безопасность:</b>	Атмосфера: бензин, серосодержащие соединения, предельные и непредельные углеводороды; Гидросфера: ароматические соединения, анилин; Литосфера: нефтяные отходы, химические растворители.

<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b>	Вероятные чрезвычайные ситуации при проведении исследований на рабочем месте: – пожар – взрыв – разлив реагентов и нефтепродуктов. Наиболее типичными ЧС: разлив реагентов и моторных топлив.
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.02.2022

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		01.02.2022

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Нелюбова Дарья Михайловна		01.02.2022

## **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 131 страницу, 46 таблиц, 8 рисунков, 48 источника литературы, 2 приложения.

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

Объектами исследования являются бензиновые и дизельные фракции различного происхождения с различным групповым составом, суррогатные композиции.

Целью работы является разработка методик формирования суррогатных композиций, моделирующих целевые характеристики моторных топлив без проведения трудоемких экспериментов.

Для достижения цели были решены следующие задачи:

- выполнены экспериментальные работы по определению физико-химических свойств бензиновых и дизельных фракций;
- разработаны рецептуры суррогатных композиций;
- определены целевые свойства топлив для их прогнозирования;
- разработан алгоритм оптимизации разработки состава суррогатной смеси соответствующей целевым свойствам бензина и дизеля;
- проведен сравнительный анализ свойств суррогатов и образцов топлива полученных результатов;
- 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.

Для дизельных фракций выполнено экспериментальное определение плотности, молекулярной массы, кинематической вязкости, цетанового числа.

Область применения: промышленные предприятия нефтехимической отрасли, НПЗ и лаборатории по исследованию свойств бензинов и дизелей с добавлением различных присадок.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	15
1 ТЕХНИКО – ЭКОНОМИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ .....	17
1.1 Композиции моторных топлив, модифицирующие добавки и присадки .	17
2 АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОБЗОР.....	21
2.1 Методы определения свойств моторных топлив.....	21
2.2 Физико-химические свойства бензиновых топлив.....	21
2.3 Эксплуатационные свойства бензиновых топлив .....	23
2.4 Физико-химические свойства дизельных топлив.....	25
2.5 Эксплуатационные свойства дизельных топлив.....	26
2.6 Суррогатные топливные композиции .....	28
2.7 Методики разработки и области использования суррогатных композиций .....	29
2.7.1 Методики разработки бензиновых суррогатов .....	29
2.7.2 Методики разработки дизельных суррогатов .....	32
2.8 Дальнейшие направления исследований .....	34
3 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	35
4 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ.....	37
4.1 Характеристика объекта исследования.....	37
4.2 Разработка методики формирования бензиновых суррогатов.....	37
4.2.1 Разработка методики моделирования фракционного состава бензина с использованием суррогатных композиций .....	41
4.3 Разработка методики формирования дизельных суррогатов .....	47
4.4 Выводы по работе .....	50
5 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.....	51

5.1	Предпроектный анализ .....	51
5.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования .....	51
5.1.2	Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	52
5.1.3	SWOT-анализ.....	53
5.1.4	Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	55
5.1.5	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования.....	58
5.2	Инициация проекта .....	58
5.3	Планирование управления научно-техническим проектом.....	60
5.3.1	Иерархическая структура работ проекта .....	60
5.3.2	План проект .....	61
5.4	Бюджет научного исследования .....	62
5.4.1	Организационная структура проекта .....	68
5.4.2	План управления коммуникациями проекта.....	68
5.4.3	Реестр рисков проекта .....	68
5.5	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности .....	69
5.5.1	Оценка абсолютной эффективности исследования.....	69
5.5.2	Оценка сравнительной эффективности исследования .....	74
6	СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....	77
6.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....	77
6.1.1	Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства .....	77
6.1.2	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны .....	78

6.2 Производственная безопасность .....	79
6.2.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования.....	80
6.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований .....	82
6.2.3 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.....	85
6.2.4 Расчет искусственного освещения .....	86
6.3 Экологическая безопасность.....	89
6.3.1 Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду .....	89
6.3.2 Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду .....	90
6.3.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды .....	91
6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	91
6.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований .....	91
6.4.2 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.....	92
6.4.3 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС .....	93
Заключение .....	96
СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	97
Приложение А .....	102
Приложение Б.....	115

## **ВВЕДЕНИЕ**

По мере роста мирового спроса на топливную энергию, растет и спрос на автомобильные двигатели с более высокой производительностью и с более низкими значениями вредных выбросов.

Реальные топлива, такие как бензин, дизельное и реактивное топливо, представляют собой сложные смеси, состоящие из сотен различных компонентов. Таким образом, химия горения топлив очень сложна и ее трудно точно предсказать.

Для того чтобы исследовать физико-химические и эксплуатационные свойства топливных смесей и их компонентов, потребуется много времени, так как данное исследование – процесс трудоемкий и экономически затратный. Разработка достоверных методов прогноза свойств топлив с использованием традиционных и альтернативных источников поспособствует снижению времени и затрат на создание топлив. Разработка и оптимизация методик, позволяющих определить ключевые характеристики топлив, является актуальной задачей для решения.

Чаще всего документация, нормирующая показатели топлив, не содержит требования относительно их точного химического состава, а лишь регламентирует общие физико-химические свойства отдельных групп углеводородов. По причине того, что состав топлива неоднозначен, и у разных по происхождению образцов компонентный состав может значительно изменяться, прямое его применение для численного воспроизведения процессов горения в камерах сгорания двигателей не является возможным. С целью решения этой проблемы представляет интерес создание суррогатного топлива, т. е. более простой смеси, которая с достаточной точностью отражает основные характеристики эффективности реального топлива.

Поскольку состав топлива однозначно определяет его свойства и эксплуатационные характеристики при заданном режиме работы двигателя, подход состоит в том, чтобы охарактеризовать состав коммерческого “целевого топлива” с использованием наилучших доступных аналитических методов, а

затем выбрать и использовать суррогатные композиционные соединения, чтобы точно соответствовать композиционным характеристикам и ключевым свойствам целевого топлива.

Некоторые такие ключевые свойства, 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, к их числу относят теплотворную способность, соотношение Н/С или вязкость. Тем не менее, моделирование свойств топлива становится все более затруднительным. Первой причиной является нехватка подходящих компонентов для составления суррогата. Кроме того, использование слишком большого количества компонентов в составе суррогата может привести к математическим ошибкам, поскольку каждый компонент вносит одну переменную в целевую функцию алгоритма оптимизации.

Разработка рецептур суррогатов для моделирования и прогнозирования свойств реальных моторных топлив, таким образом, остается актуальной задачей, дающей возможность предсказывать свойства топлив без применения трудоемких экспериментальных исследований.

# 1 ТЕХНИКО – ЭКОНОМИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ

## 1.1 Композиции моторных топлив, модифицирующие добавки и присадки

Приоритетное направление в развитии экономики, главным образом, основано на декарбонизации, подразумевающей отказ от традиционного топлива в пользу альтернативных ресурсов из возобновляемых сырьевых источников.

Для осуществления данного перехода необходима модернизация методики и технологии производства моторных топлив. Например, обширное применение оксигенатов как в качестве присадок, так и в виде компонентов автомобильных бензинов может является одним из доступных методов при решении поставленных вопросов. Также проводятся разработки множества добавок и присадок, действие которых направленно на улучшение показателей эксплуатационных параметров работы двигателей внутреннего сгорания. В число таких присадок входят антидетонаторы, моющие присадки, промывочные составы, присадки для удаления влаги и др. Химический состав присадок, в основном, представлен такими классами как спирты, ароматические амины, некоторые металлы, эфиры и т.д.

Так, например, авторы [1] предложили способ получения высокооктанового бензина с температурой кипения не выше 215°C и октановым числом с минимальным показателем в 91 ед. по исследовательскому методу, предназначенного для использования в техническом оборудовании с поршневыми двигателями внутреннего сгорания с искровым зажиганием. В качестве основных компонентов применяются низкооктановый бензин газовый стабильный, ароматический компонент, метил-третбутиловый эфир и изооктен при следующем соотношении, % мас.:

- |  |           |
|--|-----------|
| • ароматический компонент                  | 1,0-41,0  |
| • метил-третбутиловый эфир                 | 3,0-21,0  |
| • изооктен                                 | 0,0-17,0  |
| • низкооктановый бензин газовый стабильный | 42,0-61,0 |

Главной особенностью разработанного бензина является содержание ароматических углеводородов  $C_7 - C_{10}$  в виде индивидуальных углеводородов или их смесей, жидких продуктов пиролиза, в качестве ароматического компонента.

Изобретение [2] относится к компоненту автомобильных бензинов, получаемому путем растворения легкокипящего побочного продукта производства бутиловых спиртов в растворителе с последующим отделением дисперсной воды при помощи сепаратора гравитационного осаждения или центрифуги. Растворение легкокипящего побочного продукта в растворителе производится путем их смешения друг с другом в массовом соотношении не более 0,26:0,74 (легкокипящий побочный продукт: растворитель). Дополнительно в компонент автомобильных бензинов после отделения дисперсной воды может быть добавлена антикоррозионная присадка в количестве до 0,05% масс.

Входящие в состав легкокипящего побочного продукта оксигенаты улучшают детонационных характеристик конечных продуктов и снижают их себестоимости за счет уменьшения объемов вовлекаемых октаноповышающих присадок и использования побочных продуктов производства бутиловых спиртов.

Авторы патента [3] изобрели депрессорно-диспергирующую присадку к дизельным топливам, которая обладает противоизносными свойствами и позволяет улучшить низкотемпературные характеристики и смазывающую способность ДТ, а также обеспечивает седиментационную устойчивость ДТ при холодном хранении. Согласно изобретению, в качестве депрессорного компонента применяется полимерное соединение, полученное реакцией радикальной сополимеризацией малеинового ангидрида и фракции 1-олефинов  $C_8 - C_{24}$ , выделяемой из продуктов термokatалитической олигомеризации этилена, инициируемое дибензоилпероксидом, с соотношением исходных реагентов 1:1 при температуре 65 - 75°C в соответствующем углеводородном растворителе, а в качестве диспергирующего компонента - полимерное

соединение, полученное реакцией метатезисной сополимеризацией функционализованного норборнена - н-бутил бицикло[2.2.1]гепт5-ен-2-карбоксилата, синтетического дивинилового каучука и 1-октена в присутствии металлокомплексного диметильного рутениевого катализатора. Депрессорно-диспергирующая присадка заявленного состава вводится в концентрации 0,01-0,1 масс % в базовые дизельные топлива - гидроочищенные дизельные фракции с массовой долей серы, не превышающей 10 мг/кг.

Изобретение [4] относится к альтернативному моторному топливу с ОЧИ не менее 90,0 единиц, ДНП не менее 35,0 кПа и не более 100,0 кПа. Топливо содержит углеводородную фракцию и алифатические спирты. Особенностью изобретения является то, что углеводородная фракция выкипает до 225°C и имеет ДНП от 30,0 - 105,0 кПа, а алифатические спирты представлены спиртами ряда C<sub>3</sub> – н-пропиловый и/или изопропиловый. Изобретение имеет следующее соотношение компонентов, % мас.:

- алифатические спирты C<sub>3</sub> 20-50
- углеводородная фракция до 100

Еще одним отличием является содержание спиртов C<sub>1</sub> и/или C<sub>2</sub> в концентрации до 15% мас., а также антикоррозионной присадки в количестве 12-350 мг/л.

Теплота сгорания предлагаемого альтернативного моторного топлива выше, чем у прототипа, и приближается к теплоте сгорания автомобильного бензина, что является преимуществом. К преимуществу также можно отнести и простоту состава топлива и возможность применения нескольких различных фракций нефтепереработки.

Авторы патента [5] разработали композицию автомобильного бензина, включающую в свой состав МТБЭ, толуол, алкилат, бензиновую фракцию каткрекинга и антиокислительную присадку Агидол. Отличительной особенностью композиции является дополнительное содержание бензина катриформинга, а бензиновая фракция каткрекинга представлена фракцией легкого бензина при следующем соотношении, мас. %:

- катализат 10- 48
- толуол 5,5- 28
- алкилат 10-43
- легкий бензин каткрекинга 17-26
- МТБЭ 6,0-14,5
- Агидол-12 0,01

Получаемая композиция соответствует требованиям ГОСТ Р 51866-2002 (ЕН 228-2004) и применима к схеме производства ООО «ЛУКОЙЛ-Нижегороднефтеоргсинтез».

## **2 АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОБЗОР**

### **2.1 Методы определения свойств моторных топлив**

На производительность двигателя влияют многие факторы, особенно важным из которых является качество применяемого в нем топлива. Следовательно, топливо должно соответствовать определенным требованиям, предъявляемым к его свойствам. [6].

Условно, свойства моторных топлив разделяются на две группы: физико-химические и эксплуатационные.

Физико-химические свойства характеризуют состав и состояние топлива. К основным нормированным физико-химическим показателям топлив относятся плотность, фракционный и химический состав. К другим важным физическим свойствам относятся поверхностное натяжение и вязкость, но к ним обычно не применяются требования по нормированию, поэтому их следует измерять дополнительно.

Эксплуатационные свойства являются показателем необходимых энергетических, экономических и экологических характеристик двигателей внутреннего сгорания и надежности их работы.

### **2.2 Физико-химические свойства бензиновых топлив**

Плотность относится к числу обязательных показателей, требующих экспериментального определения и указываемых в паспорте на топлива для двигателей. Зная значение плотности, можно определить массовые единицы нефтепродуктов путем их пересчета из объемных и наоборот. Измерение плотности производится в соответствии ГОСТ 33364-2015, применяя для этих целей ареометр, погружаемый в испытуемый образец. Показания снимают по шкале ареометра. Диапазон плотности для бензинового топлива составляет 725,0-780,0 кг/м<sup>3</sup> при 15°С.

Фракционный состав бензина является важнейшим показателем его испаряемости, одна из самых главных характеристик качества топлива, который определяет количество перегоняемого топлива при изменении

температуры. Фракционный состав влияет на простоту запуска мотора двигателя и на его производительность в целом.

К основным фракциям автомобильного бензина относят пусковую, рабочую и концевую. Пусковая фракция (первые 10% всего дистиллята) состоит из низкокипящих углеводородов и определяет начальную летучесть смеси, которая влияет на холодный запуск двигателя и потери при испарении. Рабочая фракция (дистилляты от 10 до 90% объёма) и концевая фракция (от 90% до конца выкипания) влияют на ускорение работы двигателя, производительность, экономию топлива и выбросы несгоревших углеводородов.

Фракционный состав измеряют по ГОСТу 2177-99, в котором колбу с объёмом 100 мл топлива нагревают с регулируемой скоростью; когда топливо испаряется, газ проходит через трубку холодильника, и, охлаждаясь, конденсат попадает в мерный цилиндр-приемник. Изменение значений температуры фиксируется термометром, расположенным над образцом жидкости, так, чтобы он измерял температуру газовой фазы. Согласно ГОСТу, нормы фракционного состава бензина определяются пятью температурными характеристиками: температурой начала кипения, перегонкой 10%, 50%, 90% объёма и концом кипения.

Химический состав бензина является одним из важных его свойств, определяющим все последующие химические свойства (отношение Н/С, теплоту сгорания и т. д.) и физические свойства (фракционный состав, плотность и т. д.). Также химический состав определяет соответствие бензина экологическим требованиям, т.к. существуют ограничения по содержанию некоторых отдельных веществ в составе бензина, например, к содержанию бензола, оксигенатов и др. Узнать точный химический состав бензина можно методом капиллярной газовой хроматографии по ГОСТ Р 52714-2018.

## 2.3 Эксплуатационные свойства бензиновых топлив

1. Детонация в двигателе происходит вследствие быстрого завершения процесса самовозгорания части рабочей смеси с последующим образованием ударных волн, распространяющихся со сверхзвуковыми скоростями (1500-2000 м/с). Если смесь сгорает нормально, то средняя скорость распространения пламени находится в пределах 10-40 м/с. Детонация связана с повышенным образованием гидропероксидов в бензиновых парах из-за окисления кислородом, содержащемся в воздухе, после чего совершается резкий энерговыброс. В зависимости от углеводородного состава, детонационная стойкость бензина может варьироваться между различными значениями. Показателем детонационной стойкости бензинов является октановое число (ОЧ) по исследовательскому методу (работа двигателя при его частичной нагрузке) и по моторному (работа двигателя при больших нагрузках) в соответствии с ГОСТ 32339-2013 на установке УИТ-85М.

Самым низким октановым числом из всех бензиновых углеводородов обладают парафины и обычно не содержатся в больших количествах в товарных топливах. Более высокие октановые числа имеют изо-парафины и в составе бензинов обычно встречаются в больших количествах. По мере увеличения числа метильных заместителей увеличивается и октановый показатель [7], по этой причине в бензине более высокой концентрацией чаще всего обладают парафины (C<sub>7</sub> – C<sub>8</sub>) с количеством метильных заместителей от одного до трех. Совсем небольшое количество (менее 1%) приходится на содержание первичных суррогатов (н-гептан и изооктан) в реальных бензинах, используемых в качестве эталонного топлива.

Содержание нафтенов в бензине должно быть небольшим, так как данные соединения обладают низким октановым числом и в процессе риформинга легко превращаются в ароматические соединения. Основными представителями нафтенов, обнаруженных в бензине, являются углеводороды C<sub>5</sub> – C<sub>8</sub> и включают циклогептан, циклогексан, метилциклопентан, метилциклогексан и изомеры

диметилциклогексана. Наибольшим октановым числом среди циклоалканов обладает циклопентан.

На содержание олефинов (алкенов) в бензине также наложены ограничения. Олефины обладают плохой окислительной стабильностью, что, в свою очередь, сокращает срок хранения бензинов. В товарном бензине на долю олефинов должно приходиться не более 18 % по объему. Диапазон алкенов, присутствующих в бензине, находится в интервале от C<sub>5</sub> до C<sub>8</sub> в виде линейных и разветвленных изомеров пентена и гексена. Обеспечение высоких значений октановых чисел происходит за счет наличия двойных связей в молекулярной структуре олефинов.

Ароматические углеводороды от C<sub>6</sub> до C<sub>9</sub> самые высокомолекулярные в бензиновых топливах. Углеводородный состав конца кипения при разгонке бензина обычно представлен высокомолекулярными алкилбензолами. Несмотря на то, что ароматические соединения обладают высокими октановыми числами, их содержание в бензине ограничено до 35 об. % так как повышенное их присутствие приводит к увеличению выбросов твердых частиц сажи. Также бензол является канцерогенным веществом, поэтому по экологическим требованиям его концентрация в бензине должна быть не более одного процента по объему. Вследствие этого состав ароматических углеводородов в бензине ограничивается толуолом, этилбензолом, м-ксилолом, о-ксилолом и различными изомерами триметилбензола.

Для улучшения антидетонационных свойств бензины могут также содержать различные кислородсодержащие добавки. В их число входят оксигенаты, например, такие как метил-третбутиловый эфир (МТБЭ), этил-трет-бутиловый эфир (ЭТБЭ), трет-амилметиловый эфир (ТАМЭ), ди-изопропиловый эфир (ДИПЭ), метанол, этанол и трет-бутанол. Наиболее широко применяемой кислородсодержащей добавкой для бензиновых топлив является этанол.

2. Давление насыщенных паров бензина – это давление пара, которое возникает в условиях термодинамического равновесия с жидкостью при

определенной температуре. Давление насыщенных паров рыночного бензина изменяется в зависимости от сезонных температурных условий. Топливо с более низкой летучестью предпочтительно при более высоких температурах окружающей среды для минимизации выбросов паров, в то время как более высокая летучесть желательна в более холодных условиях. Давление насыщенных паров бензина изменяется в интервале 35 – 100 кПа.

Проведение измерения значения давления насыщенных паров происходит в соответствии с ГОСТ EN 13016-1 в закрытой камере при температурном режиме 37,8 °С и давлении окружающей среды, равному одной атмосфере (101,325 кПа).

#### **2.4 Физико-химические свойства дизельных топлив**

1. Вязкость и плотность дизельного топлива влияют на процессы испарения и образования смеси. Уменьшение или увеличение кинематической вязкости (для различных марок топлива оптимальное значение находится в диапазоне 1,5-6,0 мм<sup>2</sup>/с) приводит к перебоям процесса подачи топлива оборудованием, процесса образования смеси и сгорания рабочей смеси. Измерение вязкости проводят вискозиметром по ГОСТ 33-2016. Плотность дизельного топлива измеряется ареометром при температуре 15°С (ГОСТ 33364-2015): летнее топливо не превышает 863,4 кг/м<sup>3</sup>, зимнее топливо не превышает 843,4 кг м<sup>3</sup>, а арктическое - не более 833,5 кг/м<sup>3</sup>.

2. Фракционный состав и испаряемость дизельного топлива также зависят от его физико-химических свойств. Если вязкость топлива оказывает решающее влияние на первую ступень образования смеси (распыливание), то на вторую стадию (испарение) влияние оказывает испаряемость. Согласно ГОСТ 305-2013 испаряемость дизельного топлива, характеризуемая фракционным составом, определяется температурами выкипания 50% и 95% топлива ( $t_{50\%}$  и  $t_{95\%}$  соответственно). Температура  $t_{95\%}$  указывает на содержание высококипящих углеводородов в топливе (трудно испаряющихся фракций). Увеличение доли этой фракции ухудшает образование смеси и приводит к неполному сгоранию топлива, затрудняя запуск дизельного двигателя, снижая

эффективность дизельного двигателя и увеличивая количество выхлопных газов.

3. Химический состав дизельного топлива определяет начало самовоспламенения топлива. Чем легче углеводороды, входящие в состав тяжелого дизельного топлива и чем быстрее они окисляются, тем больше образование неустойчивых кислородсодержащих веществ и ниже температура самовоспламенения топлива. Самыми склонными к окислению являются парафиновые углеводороды (н-алканы). Нафтеновые углеводороды (циклоалканы) и изоалканы окисляются сложнее. Самыми стойкими к окислению являются ароматические углеводороды (арены). Из этого следует, что присутствие тех углеводородных компонентов, которые вызывают детонацию и не предпочтительны в составе бензинов, являются ценными составляющими топлив для быстроходных дизелей. По мере увеличения числа углеродных атомов растет и общая молекулярная масса химических компонентов топлив, это приводит к возрастающей неустойчивости их окисления. Таким образом, неразветвленные парафиновые углеводороды  $C_{14}$  –  $C_{18}$  являются наиболее желательными компонентами дизельного горючего в силу их способности быстрого самовоспламенения.

## **2.5 Эксплуатационные свойства дизельных топлив**

### **1. Самовоспламеняемость дизельного топлива (цетановое число).**

Самовоспламеняемость дизельного топлива обычно оценивается по ГОСТ 32508 путем сравнения его с самовоспламеняемостью эталонных топлив. Используемыми эталонными топливами являются гексадекан (цетан,  $C_{16}H_{34}$ ), который имеет малый период задержки самовоспламенения (обычно самовоспламеняемость цетана условно составляет 100), и ароматический углеводород  $\alpha$ -метилнафталин ( $C_{10}H_7CH_3$ ), который имеет большой период задержки самовоспламенения (его самовоспламеняемость условно составляет 0). Оптимальное значение цетанового числа дизельного топлива находится в диапазоне 40-55 единиц.

Олефиновые углеводороды и алканы нормального строения имеют самые высокие значения цетановых чисел, причём с повышением их молекулярной массы значения повышаются, а по мере разветвления – снижаются. Ароматические углеводороды, наоборот - имеют самые низкие значения.

2. Низкотемпературные свойства дизеля оцениваются путем установления предельно низкой температуры окружающей среды (воздуха), при которой его подача из топливного бака к двигателю происходит бесперебойно.

*Температура помутнения* - это температура, при которой топливо теряет прозрачность из-за осаждения кристаллов n-алканов или микрокристаллов льда, при этом не теряя текучести.

*Температура начала кристаллизации* определяется, так же как и температура помутнения, по ГОСТ 5066-91. За температуру начала кристаллизации принимают максимальную температуру, при которой в топливе невооруженным глазом обнаруживаются кристаллы ароматических углеводородов, прежде всего бензола, который затвердевает при 5,5°C.

Определение *предельной температуры фильтруемости* (ПТФ) проводят в соответствии с ГОСТ 22254-92. Образец испытуемого топлива при постепенном охлаждении и фиксации температуры через 1°C просасывают под вакуумом (остаточное давление 1,96 кПа) через стандартный фильтр. За ПТФ принимают ту температуру, при которой прохождение топлива через фильтр прекращается.

*Температура застывания* - это температура, при которой при охлаждении дизель не проявляет текучести при наклоне испытуемой пробирки с образцом под углом 45 ° в течение 1 минуты, определяется по ГОСТ 20287-91. Бесперебойная подача дизельного топлива обеспечивается при температуре помутнения топлива на 5-10 °C ниже температуры окружающего воздуха, при которой эксплуатируется автомобиль.

## 2.6 Суррогатные топливные композиции

Из-за того, что состав реального топлива слишком сложен для его точного моделирования, одним из способов решения данной проблемы является создание суррогатного топлива, т. е. более простой смеси, которая с достаточной точностью отражает основные характеристики эффективности моторного топлива [8]. Суррогатные композиции содержат ограниченный набор чистых компонентов, смешанных друг с другом в определенных пропорциях для соответствия целевыми свойствами бензина [9]. Создание одной суррогатной композиции позволяет смоделировать несколько характеристик исследуемого топлива, однако для имитации широкого спектра свойств чаще всего требуются несколько различных суррогатных смесей. Суррогат для моделирования процессов смесеобразования и испарения будет в значительной степени отличаться составом от суррогата, отражающего самовоспламенение топлива.

Разработка суррогатной модели моторного топлива, химический состав которого может меняться в зависимости от времени, происхождения сырья и товаропроизводителя, является необходимым методом прогнозирования важных химических и физических свойств. Соответствующая суррогатная композиция может точно имитировать целевые свойства, выбранные для оценки реального топлива. Немаловажным достоинством такой композиции также является и ее стабильность во времени, что влечет за собой требуемую экспериментальную точность моделирования.

В зависимости от целей использования суррогата, воспроизводящего свойства реальной топливной смеси, к нему будут предъявляться различные требования. При моделировании процессов распыла, каплеобразования и испарения реальных топлив важной необходимостью является соответствие суррогатов таким характеристикам, как вязкость, плотность, давление насыщенных паров и фракционный состав топлив. В этом случае суррогаты называют физическими. Если суррогаты воспроизводят химические показатели, отвечающие за значения детонационной стойкости либо противоположной им

характеристики самовоспламенения, а также повторяют процессы горения и образования выбросов, такие суррогаты именуют химическими. Существуют также комплексные суррогаты, свойства которых воспроизводят как химические, так и физические характеристики соответствующих им реальных топлив.

Суррогатное топливо применяется для моделирования:

- скорости ламинарного горения при повышенных давлениях;
- октановых и цетановых чисел;
- скорости распространения пламени и задержки воспламенения;
- процессов самовоспламенения в двигателях;
- испарения топлива;
- сгорания и сажеобразования.

## **2.7 Методики разработки и области использования суррогатных композиций**

Общий план приготовления суррогатной смеси представляет собой определение физических и химических свойств, которые следует выбирать в качестве целевых свойств, а также их связь с технологией сжигания и интересующими условиями эксплуатации. После выбора целевых свойств топлива суррогатная композиция может быть приготовлена из смеси компонентов, представляющих реальное топливо. Оптимальный состав смеси компонентов лучше всего определять с помощью вычислительного алгоритма, который решает целевую функцию, сводящую к минимуму ошибку вычисления значений искомых параметров.

### **2.7.1 Методики разработки бензиновых суррогатов**

В ранних исследованиях свойств бензиновых топлив в качестве суррогатов чаще всего применялись однокомпонентные или бинарные смеси н-гептана и изооктана. Однако за последнее десятилетие широкое распространение получили тройные смеси, представленные нормальным гептаном, 2,2,4-триметилпентаном и толуолом, а также многокомпонентные смеси, охватывающих весь диапазон компонентов бензиновых топлив (C<sub>4</sub> –

C<sub>10</sub>). В качестве элементарного бинарного суррогата дизельного топлива используется смеси гексадекана и  $\alpha$ -метилнафталина.

Уникальный подход к составлению рецептуры суррогата бензина был представлен авторами Mehl M., Chen J.Y. и др. [10]. На первом этапе проводился выбор компонентов суррогата и целевых свойств моделируемого бензина. В качестве целевых свойств выбрали содержание в бензине парафинов, ароматических соединений и олефинов, соотношение Н/С, ОЧИ и ОЧМ. Авторы разработали четырехкомпонентный суррогат (н-гептан, изооктан, толуол и 2-пентен). 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 [10] использовали сравнение времени задержки зажигания для различных смесей с известными ОЧИ и ОЧМ.

Pudupprakam и др. [11] в своей работе предложил общую методику создания суррогатного бензина. На первом этапе определился набор компонентов суррогата, содержащих молекулы, которые присутствуют в различных химических классах реальных бензиновых топлив. Далее выбранные компоненты подверглись смешению в пропорциях, необходимых для соответствия различным целевым свойствам реального топлива. В качестве целевых свойств определили: молекулярную структуру, кривую разгонки, октановые числа, теплоту сгорания и отношение Н/С. Соответствие молекулярного состава суррогата реальному бензину способствовало соответствию и различным физическим свойствам топлива. А соответствие нескольких точек кривой дистилляции ( $T_{10}$ ,  $T_{50}$ ,  $T_{90}$ ) обеспечило соответствие суррогата характеристикам распыления реального бензина. Совпадение октановых чисел необходимо для имитации характеристики детонации. Для оптимизации методологии целевую функцию составления суррогатной композиции свели к минимуму. Методология является гибкой, так как

возможно включение или удаление различных целевых свойств бензина (например, для кислородсодержащих топлив может быть добавлено отношение О/С).

Su X. и др. [12] предложил похожий подход методики разработки суррогатного топлива для моторных топлив, в том числе и для бензина. Целевые свойства, выбранные для моделирования, включали физические свойства, такие как плотность, теплота сгорания, летучесть и вязкость, а также химические свойства, такие как отношение Н/С и детонационная стойкость. Использовался алгоритм оптимизации для определения суррогатных смесей, лучше всего соответствовавших целевым свойствам. Для количественной оценки целевого свойства каждому был присвоен весовой коэффициент его важности. Применение данной методики привело к формированию суррогата, точно воспроизводящего процесс сгорания реального топлива в условиях двигателя.

Pera и Knop [13, 14] 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 разгонки), являются более сложными для оценки, поскольку они не являются аддитивными.

Pitz W. J. и другие исследователи [15] предложили детальный химический кинетический механизм окисления изооктана, 1-гексена и толуола, входящих в состав компонентов бензинов. Данный механизм был применен в целях моделирования процессов зажигания смесей в машине быстрого сжатия. После установления влияния различных классов углеводородных соединений на поведение топлива при зажигании, были также проанализированы взаимодействия, происходящие между самими компонентами.

Knop, Pera и др. [16] предложили трехкомпонентную смесь (н-гептан, изооктан, толуол) и четырехкомпонентную смесь, включающую этанол, для моделирования характеристик бензинового топлива марки ULG-95 путем соответствия показателей суррогата ОЧИ, ОЧМ, отношения Н/С, отношения

О/С и нескольких других физических свойств бензину. Октановые числа полученных суррогатов определялись по правилу смешения мольных долей. В данном исследовании для соответствия свойств бензина и суррогата коэффициенты оптимизации или весовые коэффициенты не были использованы. Авторы продемонстрировали, что суррогат с содержанием толуола соответствует характеристикам горения реального топлива ULG-95 в одноцилиндровом двигателе.

Violi A., Yan S. и др. предложили суррогатную композицию [17] для европейского неэтилированного сертифицированного бензина, содержащую 22 компонента, включая н-алканы ( $C_4-C_7$ ), изо-алканы и алкены ( $C_5-C_8$ ), циклоалкан ( $C_6$ ) и ароматические соединения (бензол, алкилбензолы, ПАУ). Данный суррогатный состав может с достаточной точностью воспроизводить горение реального бензина в пламени предварительно смешанного топлива и воздуха и показывать склонность к образованию сажи рассматриваемых компонентов топлива.

### **2.7.2 Методики разработки дизельных суррогатов**

Авторы Charles J. Mueller [18] и др. использовали в своем подходе формирования дизельных композиций современные методы спектроскопии ядерного магнитного резонанса на ядрах углерода и водорода и усовершенствованную кривую дистилляции для характеристики состава и летучести топлива соответственно. Качество воспламенения определялось количественно по полученному цетановому числу. В качестве целевых топлив были использованы два хорошо охарактеризованных эталонных дизельных топлив с ультранизким содержанием серы, полученных с нефтеперерабатывающих заводов. Для исследования были выбраны следующие целевые свойства: состав топлива, характеристика воспламенения, летучесть и плотность. Существует и много других потенциальных свойств, таких как стоимость суррогата, средняя молекулярная масса, соотношение С/Н, низшая теплота сгорания.

Авторы Mueller C.J., Cannella W.J. и др. [19] в своем исследовании для определения важных целевых свойств дизельного топлива применили регрессионные модели. В работе использовался справочник термодинамических и транспортных свойств жидкостей [20] для сопоставления характеристик летучести суррогатного топлива с реальным дизельным топливом. Использование высокоточных уравнений состояния Гельмгольца [20] в данном справочнике позволяет проводить оценку различных свойств жидкости и прогнозировать профиль дистилляции с высокой точностью.

Значительный прогресс в методологию моделирования реальных видов топлив был внесен авторами Anand и др. [21-22], которые представили физические и химические свойства топлива с помощью двух различных наборов суррогатов. Эта методология была применена для изучения девяти видов топлива FАСЕ (топливо для современных двигателей внутреннего сгорания), которые были разработаны в рамках совместного проекта Министерства энергетики США и Научно-координационного совета для изучения концепций современных дизельных двигателей с низким уровнем выбросов и высокой эффективностью. В их исследованиях первый набор из 20 компонентов, обозначаемых как физико-суррогатные компоненты, был признан адекватным для описания физических свойств топлива FАСЕ благодаря соответствию дистилляционной перегонки, удельного веса, низшей теплотворной способности, отношения водорода к углероду (H/C) и цетанового индекса с данными измерений. Второй набор из 5 суррогатов, обозначенных как химические суррогатные компоненты, для которых были доступны как подробные, так и сокращенные химические кинетические механизмы, был введен для представления химии компонентов топлива с помощью новой модели группового химического представления [23]. В этой модели физико-суррогатные компоненты и компоненты химических свойств топлива связаны через классификацию химических структур компонентов, т.е. физико-суррогатные компоненты группируются на основе их химических классов, а химический состав каждой группы рассчитывается с помощью механизма

химической кинетики (MultiChem), который представляет характеристики горения своего химического класса. Простота и эффективность модели были хорошо продемонстрированы с помощью проверки производительности между предсказанными результатами и экспериментальными измерениями в работе двигателя воспламенения однородной смеси от сжатия.

## **2.8 Дальнейшие направления исследований**

Многие из проблем, связанных с соответствием целевых свойств суррогатов и реальных топлив, могут быть в некоторой степени решены путем добавления новых соединений в составы суррогатов и изменения их рецептур формирования. В частности, имеет интерес моделирование суррогатов при использовании изоалкановых, ароматических и нафтеновых соединений, которые репрезентативны для составляющих этих классов углеводородов в реальных видах топлива. Также одним из вариантов дальнейших исследований является планирование экспериментов на одноцилиндровых двигателях с использованием суррогатных и реальных топлив для оценки способности суррогатных топлив адекватно имитировать характеристики смесеобразования, сгорания и выбросов моторных топлив.

С расширением базы данных относительно кинетических параметров химических соединений и по мере увеличения их доступности для использования с целью моделирования реальных топлив, будущие суррогатные композиции смогут воспроизводить большее количество характеристик реального топлива с высокой точностью.

Объединение алгоритма формирования суррогатного топлива с расчетом кинетики реакции, основанного на исследовании комплексных механизмов многокомпонентных реакций, могло бы позволить использовать суррогаты для моделирования процессов горения и характеристик выбросов топлив.

### 3 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ

Определение эксплуатационных свойств моторных топлив – актуальная задача при производстве моторных топлив. Для экспериментального определения топливных характеристик требуется специальное оборудование, установки и значительные экономические расходы. Хроматографическое определение физико-химических свойств топлива - метод достаточно длительный и дорогостоящий, вследствие чего не может быть достаточно доступным.

Поэтому с целью прогнозирования основных эксплуатационных свойств моторных топлив наибольший интерес представляет разработка суррогатных композиций как для промышленных предприятий, так и для исследователей, разрабатывающих методики формирования топлив и различного рода добавки к ним.

Целью работы является разработка методик формирования суррогатных композиций, моделирующих целевые характеристики моторных топлив без проведения трудоемких экспериментов.

Объекты исследования: бензиновые и дизельные фракции различного происхождения с различным групповым и фракционным составом, а также суррогатные композиции.

Методы исследования: данные о групповом и фракционном составе, плотности и молекулярной массе бензиновых фракций были получены на основании газовой хроматографии, измерение октановых чисел осуществлялось с помощью октанометра ОКТАН-ИМ. Определение молекулярной массы дизельных образцов в соответствии с [24], определение плотности дизельных образцов в соответствии с [25], определение кинематической вязкости дизельных образцов в соответствии с [26], измерение цетановых чисел образцов дизельных топлив осуществлялось с помощью анализатора SHATOX SX-300. Реализация разработанной математической модели процесса выполнена с использованием программ Microsoft Excel и UniSim Design.

Для достижения цели поставлены следующие задачи:

- провести экспериментальное определение физико-химических свойств бензиновых и дизельных фракций;
- определить основные целевые свойства топлив, для прогнозирования которых будет происходить формирование суррогатов;
- составить методику разработки рецептур суррогатных композиций в зависимости от требуемых прогнозируемых свойств топлив;
- разработать алгоритм оптимизации разработки состава суррогатной смеси, соответствующей целевым свойствам топлива;
- провести сравнительный анализ свойств полученных суррогатов и образцов реальных топлив;
- сделать выводы по полученным результатам.

## **4 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ**

### **4.1 Характеристика объекта исследования**

В данной работе проводилось исследование бензиновых и дизельных прямогонных дистиллятов различного происхождения, а также исследование суррогатных композиций.

Прямогонные бензины являются одной из фракций нефти с пределами выкипания до 180 °С. Они состоят преимущественно из парафинов нормального строения ряда С<sub>5</sub>-С<sub>9</sub>. Получают прямогонный бензин методом атмосферной перегонки нефти, после чего полученную широкую бензиновую фракцию разделяют посредством вторичной перегонки до более узких фракций. При вторичной перегонке прямогонного бензина выходит «головная» фракция (н.к.-62°С или н.к.-85°С), применяющаяся как компонент товарного бензина либо в качестве компонента сырья процесса каталитической изомеризации. Фракция бензина 140-180°С применяется как один из компонентов реактивного топлива. Тяжелая фракция (85 - 180°С, 105 -180°С) используется при получении высокооктанового компонента бензина на установке каталитического риформинга.

Прямогонные дизельные дистилляты выкипают в пределах температур 180 - 360 °С. Как правило, их используют в качестве основы для производства дизельных топлив различных сортов, применяемых в дизельных двигателях. Согласно требованиям ГОСТ 305-2013 к содержанию серы в товарных дизельных топливах значительную часть прямогонных дизельных фракций подвергают гидрооблагораживающим процессам на установках ЛГ-24/7 и ЛГ-24/9. Затем товарные дизельные топлива получают при компаундировании части прямогонных и гидроочищенных фракций.

### **4.2 Разработка методики формирования бензиновых суррогатов**

В ходе проведения исследований пяти проб исследуемых образцов бензинов получены данные об их физико-химических свойствах, которые представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Физико-химические свойства исследуемых бензинов

Показатель	Образец				
	1	2	3	4	5
ОЧИ	66,5	70,8	51,9	59,7	52,4
ОЧМ	63,8	67,7	49,8	57,6	50,4
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	723	732	703	723	713
Молекулярная масса, г/моль	103,30	110,94	98,66	108,04	102,61
Н/С	2,06	2,06	2,15	2,10	2,13
Теплота сгорания, МДж/кг	44,09	44,07	44,47	44,26	44,37
Фракционный состав					
5%	58,00	64,67	53,73	65,45	57,14
10%	68,60	73,44	60,02	78,00	65,75
50%	109,40	112,22	99,64	112,97	107,40
90%	142,40	185,29	133,62	143,56	139,75
95%	149,40	217,76	146,18	164,92	146,72
98%	182,70	249,48	181,39	218,37	169,78

В качестве компонентов суррогатных композиций были выбраны:

- изооктан и толуол, так как имеют высокие октановые числа и присутствуют в больших количествах в бензине, а также обладают свойствами (содержание водорода и углерода, низшая теплота сгорания, плотность и т.д.) достаточно близкими к свойствам бензина;
- н-пентан и н-гептан, являющиеся представителями линейных парафинов. н-Гептан представляется наиболее подходящим соединением благодаря его низкому октановому числу (ОЧИ=ОЧМ=0). Использование н-пентана в качестве представителя линейных парафинов необходимо для уравновешивания высоких октановых чисел изооктана и толуола.

Для определения состава суррогатного топлива была составлена целевая функция, имеющая следующий вид:

$$\sum_{i=1}^6 \frac{(P_{ic} - P_{i\sigma})^2}{P_{i\sigma}^2} \rightarrow \min, \quad (1)$$

где  $P_i$  – свойство бензина и суррогата соответственно.  $P_i$  зависит от состава бензина и суррогата.

В качестве целевых свойств бензина для составления суррогата были выбраны: ОЧИ, ОЧМ, молекулярная масса, отношение Н/С, плотность.

Для решения данной задачи были поставлены следующие ограничения:

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad (2)$$

$$\frac{\sum_{i=1}^n x_i H_i}{\sum_{i=1}^n x_i C_i} = \frac{H}{C} \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i * RON_i = RON \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i * MON_i = MON \quad (5)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i * M_i = M \quad (6)$$

$$\sum_{i=1}^n V_i * \rho_i = \rho \quad (7)$$

Используя возможности программы Ms Excel, было определено мольное содержание каждого из выбранных компонентов, представленное в таблице 2.

Таблица 2 – Составы суррогатных смесей бензина

Компонент	образец 1	образец 2	образец 3	образец 4	образец 5
пентан	0,043	0	0,042	0	0,163
гептан	0,349	0,329	0,482	0,427	0,437
изооктан	0,417	0,437	0,335	0,421	0,283
толуол	0,191	0,234	0,141	0,152	0,117

Сравнение ОЧИ, ОЧМ, плотностей, молекулярной массы (ММ) и отношения Н/С для суррогатов и экспериментально определенных свойств бензинов приведено в таблице 3.

Таблица 3 - Физико-химические свойства образцов бензина и их суррогатных композиций

Свойство Номер образца		ОЧИ	ОЧМ	Плотность, кг/м <sup>3</sup>	ММ, г/моль	Н/С	Теплота сгорания, МДж/кг
1	бензин	66,5	63,8	723	103,30	2,06	44,09
	суррогат	66,5	63,9	723	103,30	2,06	44,09
2	бензин	70,8	67,7	732	110,94	2,06	44,07
	суррогат	70,8	67,6	732	104,40	2,02	43,89
3	бензин	51,9	49,8	703	98,66	2,15	44,47
	суррогат	51,9	50,3	704	98,66	2,15	44,47
4	бензин	59,7	57,6	723	108,04	2,10	44,26
	суррогат	59,7	57,6	717	104,88	2,10	44,26
5	бензин	52,4	50,4	713	102,61	2,13	44,37
	суррогат	52,4	50,5	713	102,61	2,12	44,33

В таблице 4 приведены данные по фракционному составу образцов бензинов и соответствующих им суррогатов.

Таблица 4 – Фракционный состав бензинов и суррогатов

Свойство Номер образца		Фракционный состав				
		н.к.	10%	50%	90%	к.к.
1	бензин	40,2	68,6	109,4	142,4	222,6
	суррогат	93,1	94,8	97,3	98,1	98,3
2	бензин	53,7	73,4	112,2	185,3	272,7
	суррогат	94				112
3	бензин	28,9	77,9	112,9	143,6	248,9
	суррогат	78,7	82,3	90,6	93,7	94,1
4	бензин	53,9	77,9	112,9	143,6	248,9
	суррогат	94				112
5	бензин	40,2	65,7	107,4	139,8	222,8
	суррогат	93,3	94,8	97,24	98,0	98,1

Исходя из данных таблиц 3 и 4, можно сделать вывод, что все выбранные свойства бензинов и суррогатов, за исключением фракционного состава, совпадают, это доказывает, что предлагаемые суррогаты достаточно достоверно воспроизводят реальные виды топлива. Для соответствия суррогатов фракционному составу бензинов необходим другой подход к разработке суррогатов, представленный в следующем разделе расчета.

#### **4.2.1 Разработка методики моделирования фракционного состава бензина с использованием суррогатных композиций**

1. Так как на основании данных о фракционном составе определить конкретный компонентный состав является трудной задачей, необходимо иметь информацию о групповом составе бензина для примерного представления о выборе компонентов и их содержании в составе образца.

2. На основании имеющихся данных о групповом составе выбор компонентов осуществляется с учетом следующих условий:

- в состав суррогата включаются компоненты с количеством атомов углерода 5 и более;

$$n_C \geq 5,$$

где  $n_C$  - количество атомов углерода

- в состав суррогата включаются группы углеводородов, общее содержание которых в составе бензина составляет не менее 1% об.;

$$V_{C_i} \geq 1 \% \text{ об.},$$

где  $C_i$  -  $i$ -я группа углеводородов

- в состав суррогата включаются классы углеводородов, содержание которых максимально в пределах рассматриваемой группы.

В таблице 5 в соответствии с условиями пункта 2 был произведен выбор групп компонентов с соответствующими им классами углеводородов для пяти образцов бензина.

Таблица 5 – Выбор компонентов суррогатов

Группа	Класс				
	образец 1	образец 2	образец 3	образец 4	образец 5
5	П	П	П	И	П
6	И	П	П	И	П
7	Н	П	Н	Н	Н
8	И	И	И	И	И
9	И	И	И	И	И
10	А	И	А	И	И
11	-	А	-	А	-

\*П - парафины, И - изопарафины, Н - нафтены, А - ароматика

3. Используя формулу Войнова (8), была установлена связь между молекулярными массами углеводородных групп бензина и температурами выкипания его фракций:

$$MM_i = 60 + 0,3T_k + 0,001 \cdot T_k^2, \quad (8)$$

где  $MM_i$  – молекулярная масса  $i$ -той УВ группы бензина, г/моль;  $T_k$  – температура выкипания  $k$ -го объема бензина, °С ( $k = 5, 10, 50, 90, 95, 98$  % об).

В таблице 6 приведены рассчитанные по формуле (8) молекулярные массы групп углеводородов для первого образца бензина.

Таблица 6 – Результаты расчета молекулярных масс

Группа	ММ, г/моль
5	80,78
6	88,29
7	104,79
8	122,10
9	129,14
10	148,19

Компоненты с их значениями молекулярных масс, выбранные в состав суррогата для первого образца, представлены в таблице 7.

Таблица 7 – Компоненты суррогата первого образца бензина

Компонент	ММ, г/моль
пентан	72,15
2-метилпентан	86,18
метилциклогексан	98,19
2-метилгептан	114,2
3-метилоктан	128,3
бутилбензол	134,2

Для поиска объемных долей компонентов была составлена целевая функция:

$$\frac{\left(\frac{MM_{C_i} - 60}{0,3} \cdot v_{C_i} + \frac{MM_{C_j} - 60}{0,3} v_{C_j} - 1\right)^2}{T_k} \rightarrow 0 \quad (9)$$

где  $MM_{C_i}, MM_{C_j}$  – молекулярные массы  $C_i$ -го и  $C_j$ -го компонента соответственно, г/моль;  $T_k$  – температура выкипания  $k$ -го объема бензина, °C ( $k = 5, 10, 50, 90, 95, 98$  % об).

С использованием программы Ms Excel определяется исходное приближенное значение объемной доли каждого из выбранных компонентов. Проверка реального образца бензина осуществляется в моделирующей среде UniSim Design по полученным данным температур выкипания суррогата в зависимости от его объемов отгона.

Удовлетворительным результат проверки считается в случае выполнения следующего условия:

$$\frac{|T_k^c - T_k^b|}{T_k^b} \leq 5\%, \quad (10)$$

где  $T_k^c, T_k^b$  – температуры выкипания  $k$ -го объема суррогата и бензина соответственно, °C ( $k = 5, 10, 50, 90, 95, 98$  % об).

При неудовлетворительных результатах воспроизведения фракционного состава бензина дальнейший расчет проводится, используя метод последовательного приближения (метод итерации), до выполнения условия (10).

В таблице 8 приведены составы компонентов суррогатных композиций для пяти образцов бензина.

Таблица 8 – Результаты расчета компонентного состава суррогатов

Группа	Номер образца					
	Компонент	1	2	3	4	5
5	пентан	0,1798	0,1329	0,2286	-	0,1670
	2-метилбутан	-	-	-	0,0608	-
6	2-метилпентан	0,1364	-	-	0,0942	-
	гексан	-	0,1520	0,2028	-	0,1199
7	метилциклогексан	0,3331	-	0,2463	0,2657	0,3137
	гептан	-	0,1672	-	-	-
8	2-метилгептан	0,2189	0,2292	0,1663	0,3628	0,1816
9	3-метилоктан	0,0767	0,0961	0,1201	0,1319	0,1646
10	бутилбензол	0,0551	-	0,0359	-	-
	3-метилнонан	-	0,0001	-	0,0101	0,0531
11	пентилбензол	-	0,2226	-	0,0744	-

В таблице 9 приведены результаты воспроизведения суррогатом фракционных составов пяти образцов бензина.

Таблица 9 – Оценка воспроизведения фракционного состава бензина

%	образец 1			образец 2			образец 3		
	бензин	суррогат	$\Delta, \%$	бензин	суррогат	$\Delta, \%$	бензин	суррогат	$\Delta, \%$
5	58,00	60,37	4,08	64,67	64,33	0,53	53,73	56,31	4,81
10	68,60	65,99	3,80	73,44	71,26	2,97	60,02	60,91	1,48
50	109,40	106,00	3,11	112,22	114,70	2,21	99,64	98,08	1,56
90	142,40	136,30	4,28	185,29	194,30	4,86	133,62	134,70	0,81
95	149,40	156,30	4,62	217,76	227,40	4,43	146,18	152,70	4,46
98	182,70	176,20	3,56	249,48	241,30	3,28	181,39	173,10	4,57
%	образец 4			образец 5					
	бензин	суррогат	$\Delta, \%$	бензин	суррогат	$\Delta, \%$			
5	65,45	67,64	3,34	57,14	59,80	4,66			
10	78,00	81,48	4,47	65,75	67,30	2,36			
50	112,97	118,20	4,63	107,40	109,00	1,49			
90	143,56	149,20	3,93	139,75	143,70	2,83			
95	164,92	170,00	3,08	146,72	153,60	4,69			
98	218,37	207,60	4,93	169,78	162,10	4,52			

Опираясь на результаты таблицы 9, можно сделать вывод, что полученные суррогаты достаточно точно воспроизводят фракционный состав целевых бензинов с погрешностью, не превышающей 5%. Для наглядности представления результатов на рисунках 1-5 приведены кривые выкипания бензинов и суррогатов.

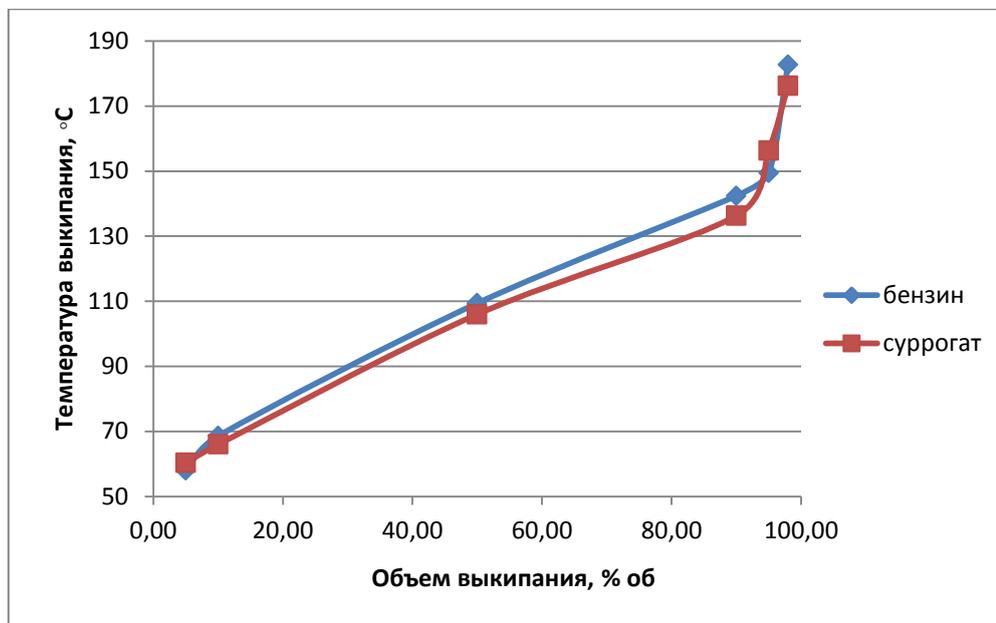


Рисунок 1 – Зависимость температур выкипания бензина и суррогата от процента отгона для образца 1

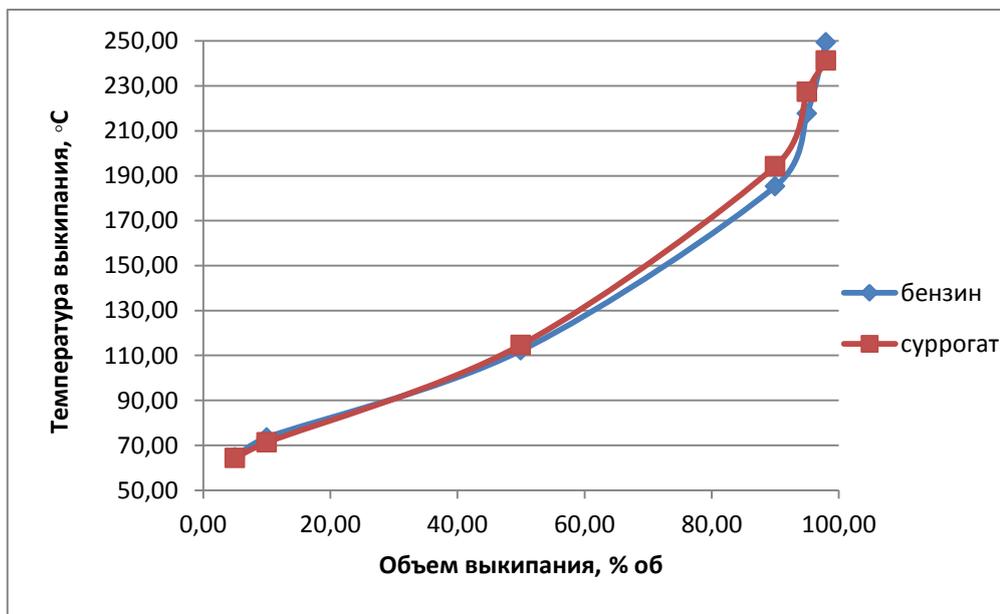


Рисунок 2 – Зависимость температур выкипания бензина и суррогата от процента отгона для образца 2

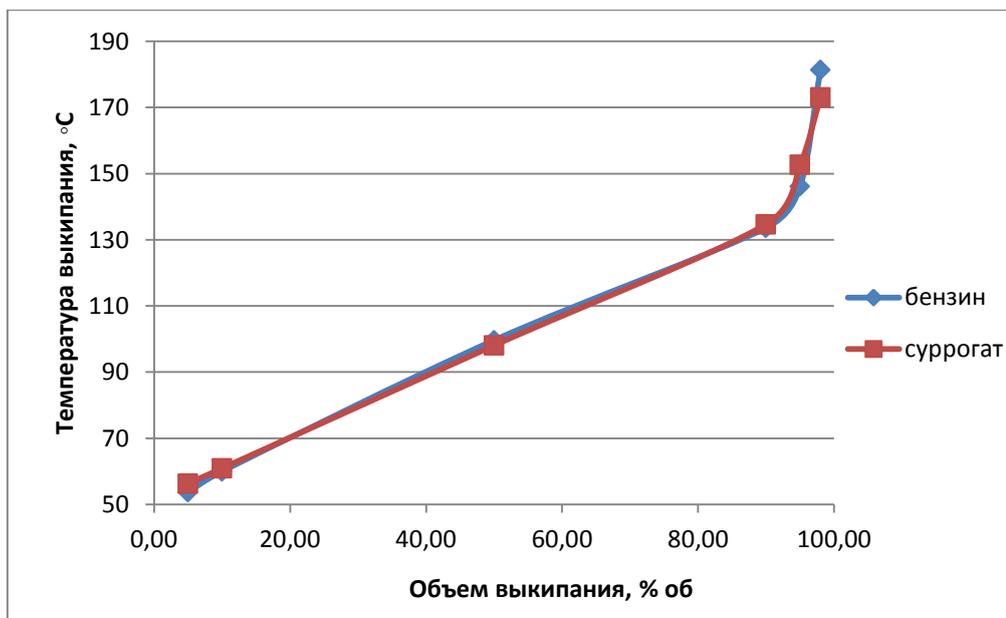


Рисунок 3 – Зависимость температур выкипания бензина и суррогата от процента отгона для образца 3

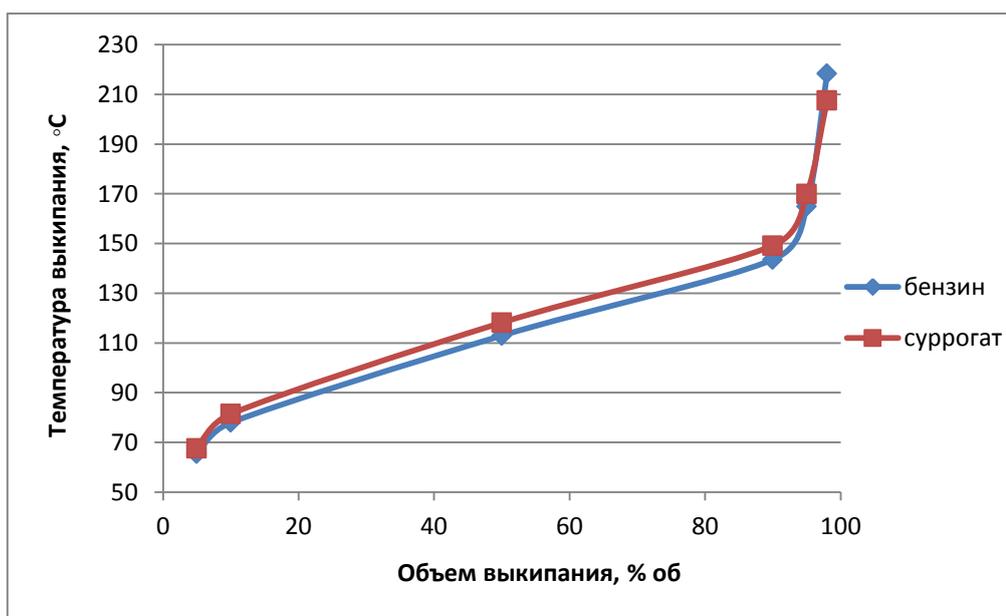


Рисунок 4 – Зависимость температур выкипания бензина и суррогата от процента отгона для образца 4

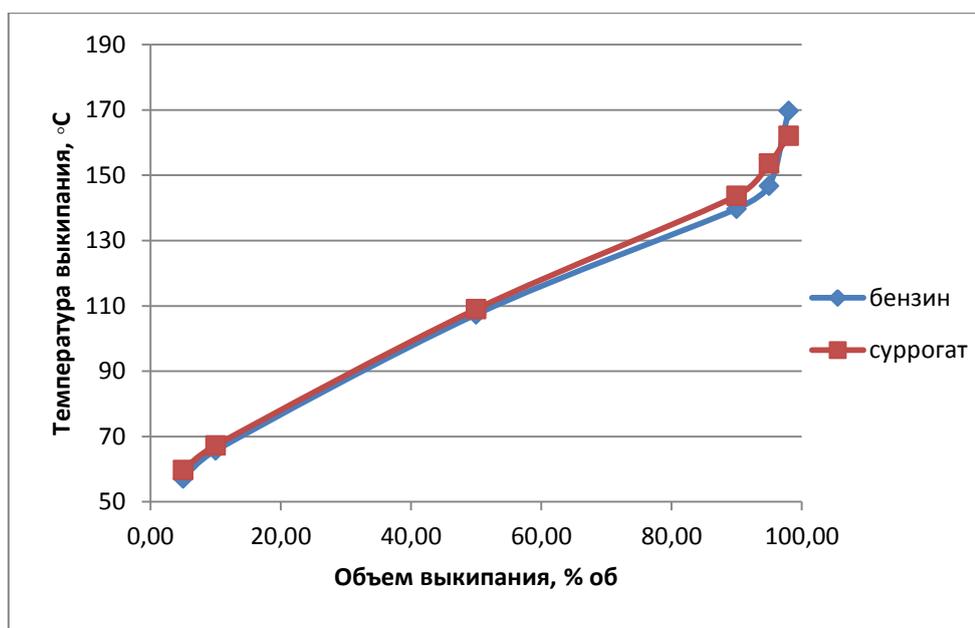


Рисунок 5 – Зависимость температур выкипания бензина и суррогата от процента отгона для образца 5

Полученные суррогаты также были проверены на соответствие по показателям ДНП реальных топлив. ДНП суррогатов были получены из среды UniSim Design. Результаты приведены в таблице 10.

Таблица 10 – Результаты ДНП бензинов и суррогатов

Свойство Номер образца		ДНП, кПа	Δ, %
1	бензин	38,39	1,51
	суррогат	37,81	
2	бензин	23,70	3,00
	суррогат	24,41	
3	бензин	55,07	2,38
	суррогат	53,76	
4	бензин	21,52	0,42
	суррогат	21,61	
5	бензин	40,33	0,71
	суррогат	39,64	

### 4.3 Разработка методики формирования дизельных суррогатов

В ходе проведения исследований трех проб исследуемых образцов дизелей получены данные об их физико-химических свойствах, которые представлены в таблице 11.

Таблица 11 – Физико-химические свойства исследуемых дизелей

Показатель	Образец		
	1	2	3
ЦЧ	56,5	54,9	58,8
Кинематическая вязкость, мм <sup>2</sup> /с	3,200	3,402	3,150
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	816	821	809
Молекулярная масса, г/моль	196,06	197,64	195,59

В качестве компонентов дизельных суррогатных композиций были выбраны цетан (гексадекан) с ЦЧ=100 и изоцетан (2,2,4,4,6,8,8-гептаметилнонан) с ЦЧ=15). Изоцетан заменил  $\alpha$ -метилнафталин в качестве нижнего эталона для цетанового числа ( $\alpha$ -метилнафталин имеет нулевое цетановое число) из-за нестабильности окисления и трудности использования  $\alpha$ -метилнафталина в эталонном двигателе. Для исключения  $\alpha$ -метилнафталина было несколько причин: во-первых, он легко образует пероксиды, которые меняют цетановое число основанных на нём смесей, во-вторых, он обладает канцерогенным действием, а также обладает неприятным запахом и его сложно получить в достаточно чистом виде.

В качестве третьего компонента был выбран нафтен циклогексан с целью уравнивания основных показателей цетана и изоцетана в общей смеси.

Для определения состава суррогатного топлива была составлена целевая функция, имеющая следующий вид:

$$\sum_{i=1}^6 \frac{(P_{ic} - P_{id})^2}{P_{id}^2} \rightarrow \min, \quad (11)$$

где  $P_i$  – свойство дизеля и суррогата соответственно.  $P_i$  зависит от состава дизеля и суррогата.

В качестве целевых свойств дизеля для составления суррогата были выбраны: ЦЧ, молекулярная масса, кинематическая вязкость и плотность.

Для решения данной задачи были поставлены следующие ограничения:

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad (12)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i * ЦЧ_i = ЦЧ \quad (13)$$

$$\sum_{i=1}^n V_i * \nu_i = \nu \quad (14)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i * M_i = M \quad (15)$$

$$\sum_{i=1}^n V_i * \rho_i = \rho \quad (16)$$

Используя возможности программы Ms Excel, было определено мольное содержание каждого из выбранных компонентов, представленное в таблице 12.

Таблица 12 – Составы суррогатных смесей дизельного топлива

Компонент	образец 1	образец 2	образец 3
цетан	0,4835	0,4648	0,5102
циклогексан	0,2133	0,1952	0,2166
изоцетан	0,3032	0,3399	0,2732

Сравнение ЦЧ, молекулярной массы (ММ), плотности и кинематической вязкости для суррогатов и экспериментально определенных свойств дизелей приведено в таблице 13.

Таблица 13 - Физико-химические свойства образцов дизеля и их суррогатных композиций

Свойство		ЦЧ	ММ, г/моль	Плотность, кг/м <sup>3</sup>	Кинематическая вязкость, мм <sup>2</sup> /с
1	дизель	56,5	196,06	816	3,200
	суррогат	56,5	196,06	808	3,367
2	дизель	54,9	197,64	821	3,402
	суррогат	54,9	198,63	810	3,402
3	дизель	58,8	195,59	809	3,150
	суррогат	58,8	195,59	804	3,371

Показатели ЦЧ, ММ, плотностей, и кинематических вязкостей для суррогатов и экспериментально определенных свойств для целевых видов топлива достаточно совпадают, это доказывает, что предлагаемые суррогаты достоверно воспроизводят реальные виды топлива.

#### **4.4 Выводы по работе**

По результатам проведения работы были получены следующие результаты:

1. Разработаны методики формирования суррогатных композиций и алгоритм оптимизации определения их состава для бензиновых и дизельных топлив.
2. Бензиновые суррогатные композиции, полученные в результате разработанного оптимизационного алгоритма, с высокой точностью воспроизводят целевые физико-химические свойства исследуемых образцов бензина, за исключением фракционного состава, по причине того, что выбранные компоненты суррогатного топлива имеют близкие температуры кипения.
3. Для моделирования фракционного состава бензинов была предложена отдельная методика формирования суррогатов.
4. Полученные смеси дизельных суррогатов достаточно близко воспроизводят основные физико-химические свойства исследуемых дизельных образцов.
5. Полученные суррогатные композиции могут использоваться для изучения кинетики горения и прогнозирования свойств реальных моторных топлив, например, для изучения влияния добавок и присадок.

## **5 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ**

В настоящее время перспективность научного исследования определяется не столько масштабом открытия, оценить которое на первых этапах жизненного цикла высокотехнологического и ресурсоэффективного продукта бывает достаточно трудно, сколько коммерческой ценностью разработки. Оценка коммерческой ценности разработки является необходимым условием при поиске источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов.

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение перспективности и успешности научно-технического исследования, оценка его эффективности, уровня возможных рисков, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации.

Для достижения цели необходимо решить следующие задачи:

- организовать работы по научному исследованию;
- осуществить планирование этапов выполнения исследования;
- оценить коммерческий потенциал и перспективность проведения научного исследования;
- рассчитать бюджет проводимого научно-технического исследования;
- произвести оценку социальной и экономической эффективности исследования.

### **5.1 Предпроектный анализ**

#### **5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования**

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

В данном проекте сегментами рынка являются:

- нефтехимические компании;
- научно-исследовательские организации, университеты;
- граждане.

## 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 анализируются свойства моторных топлив, а также влияние добавок к моторным топливам на их детонационные свойства, главным образом на основании суррогатных композиций.

В таблице 14 приведена оценка конкурентов, где  $\Phi$  – разрабатываемый проект,  $k1$  – исследование, проведенное инженером-экологом в научно-исследовательском институте,  $k2$  – исследование, проведенное организацией, которая занимается добычей золота.

Таблица 14 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		$B_{\Phi}$	$B_{k1}$	$B_{k2}$	$K_{\Phi}$	$K_{k1}$	$K_{k2}$
1	2	3	4	5	6	7	8
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>							
1. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,18	5	3	4	0,9	0,54	0,72
2. Точность	0,18	5	4	4	0,90	0,72	0,72
3. Скорость	0,15	5	4	3	0,75	0,60	0,45
4. Безопасность	0,13	4	4	4	0,52	0,52	0,52
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>							
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. Время	0,10	4	5	3	0,40	0,50	0,30
<b>Итого</b>	<b>1</b>	<b>33</b>	<b>27</b>	<b>24</b>	<b>4,77</b>	<b>3,81</b>	<b>3,53</b>

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:

$$K = \sum B_i \cdot \text{Б}_i$$

где: K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

$B_i$  – вес показателя (в долях единицы);

$\text{Б}_i$  – 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 времени на его выполнение.

### 5.1.3 SWOT-анализ

SWOT – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта (таблица 15). 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 15 – Матрица SWOT-анализа

<b>Сильные стороны</b>	<b>Слабые стороны</b>
С1. Энергоэффективность и экономичность технологии. С2. Экспрессность С3. Значимость промышленной технологии С4. Достаточно квалифицированный персонал С5. Ликвидность рабочего места	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

Продолжение таблицы 15

<p><b>Возможности</b>                  В1. Использование усовершенствованной инфраструктуры ТПУ                  В2. Появление дополнительного спроса на исследования                  В3. Увеличение стоимости конкурентных разработок</p>	<p><b>Угрозы</b>                  У1. Развитие конкуренции                  У2. Введение новых государственных требований к сертификации продукции                  У3. Использование альтернативного топлива</p>
---	---

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

Интерактивная матрица проекта представлена в таблице 16. 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 16 – 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.	+	+	+	-	0
		Слабые стороны проекта				
		Сл1.	Сл2.	Сл3.		
Угрозы	У1.	-	-	-		
	У2.	+	0	+		
	У3.	+	-	-		

В рамках *третьего этапа* должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа (таблица 17).

Таблица 17 –SWOT-анализ

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

#### 5.1.4 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 18).

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 18 – 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

Продолжение таблицы 18

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
	<b>ИТОГО БАЛЛОВ</b>	59	58

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

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

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 собственных 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 19).

Таблица 19 – Заинтересованные стороны проекта

<b>Заинтересованные стороны проекта</b>	<b>Ожидания заинтересованных сторон</b>
НИ ТПУ	Выпуск высококвалифицированных специалистов
Промышленные предприятия нефтехимической отрасли	Расчетный экспресс-метод свойств топлив

В таблице 20 представлена иерархия целей проекта и критерии достижения целей.

Таблица 20 – Цели и результат проекта

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

В таблице 21 представлена организационная структура проекта (роль каждого участника, их функции, трудозатраты).

Таблица 21 – Рабочая группа проекта

<b>№ п/п</b>	<b>ФИО, основное место работы, должность</b>	<b>Роль в проекте</b>	<b>Функции</b>	<b>Трудозатраты, час.</b>
1.	Самборская М.А., НИ ТПУ, Доцент ОХИ	Руководитель проекта	Консультирование, координация деятельности, определение задач, контроль выполнения.	100
2.	Нелюбова Д.М., магистрант НИ ТПУ ИШПР	Исполнитель по проекту	Анализ литературных источников, отбор проб, пробоподготовка, анализ лабораторных данных, написание работы	2000
<b>ИТОГО:</b>				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 реализованными в рамках данного проекта (таблица 22).

Таблица 22 – Ограничения проекта

<b>Фактор</b>	<b>Ограничения/ допущения</b>
3.1. Бюджет проекта	2238918
3.1.1. Источник финансирования	НИ ТПУ
3.2. Сроки проекта:	04.09.2020-31.05.2022
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	04.09.2020
3.2.2. Дата завершения проекта	31.05.2022

### 5.3 Планирование управления научно-техническим проектом

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 6).



Рисунок 6 – Иерархическая структура работ

### 5.3.2 План проект

В рамках планирования научного проекта построены календарный график проекта (таблица 23, 24).

Таблица 23– Календарный план проекта

Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Утверждение темы магистерской диссертации	10	04.09.20	14.09.20	Самборская М.А.
Согласование плана работ	10	08.09.20	26.09.20	Самборская М.А., Нелюбова Д.М.
Литературный обзор	125	16.09.20	3.01.21	Нелюбова Д.М.
Патентный поиск	21	27.01.21	17.02.21	Нелюбова Д.М.
Календарное планирование работ по теме	5	18.02.21	22.02.21	Самборская М.А., Нелюбова Д.М.
Выбор и проведение экспериментальных исследований	121	02.03.21	30.06.21	Нелюбова Д.М.
Анализ и сопоставление результатов, и проведение расчетов	30	07.09.21	06.10.21	Нелюбова Д.М.
Оценка эффективности проведенных исследований	12	07.09.21	19.10.21	Самборская М.А., Нелюбова Д.М.
Определение целесообразности проведения НИОКР	21	20.10.21	11.11.21	Самборская М.А., Нелюбова Д.М.
Обработка полученных данных и обсуждение результатов	45	12.11.21	26.12.21	Самборская М.А., Нелюбова Д.М.
Написание отчета	91	01.03.22	30.05.22	Нелюбова Д.М.
Итого:	491			

Таблица 24– Календарный план график проведения НИОКР по теме

Вид работ	Т, дней	Продолжительность выполнения работ																
		2020				2021								2022				
		Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь	Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Март	Апрель	Май
Утверждение темы магистерской диссертации		■																
Согласование плана работ		■																

Продолжение таблицы 24

Литературный обзор																			
Патентный поиск																			
Календарное планирование работ по теме																			
Выбор и проведение экспериментальных исследований																			
Анализ и сопоставление результатов, и проведение расчетов																			
Оценка эффективности проведенных исследований																			
Определение целесообразности проведения НИОКР																			
Обработка полученных данных																			
Написание отчета																			

■ – Самборская М.А.

■ – Нелюбова Д.М.

#### 5.4 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты сгруппированы по статьям. В данном исследовании выделены следующие статьи:

1. Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты;
2. Специальное оборудование для научных работ;

3. Заработная плата;
4. Отчисления на социальные нужды;
5. Научные и производственные командировки;
6. Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями;
7. 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 25).

Таблица 25 – 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	5010,0
	25 мл	2 шт	515,0	1030,0
Пипетка градуированная	10 мл	4 шт	36,0	144,0
	5 мл	4 шт	75,0	300,0
Груша резиновая	90 мл	1 шт	80,0	80,0
Мерный стакан	250 мл	6 шт	300,0	1800,0
Всего за материалы				11461,0
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				573,05
<b>Итого по статье</b>				<b>12034,05</b>

*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 26).

Таблица 26 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Марка	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1	Персональный компьютер	Acer	1	35000,0	35000,0
2	Газовый хроматограф	«Хроматэк-Кристалл 5000»	1	1050000,0	1050000,0
3	Октанометр	«Октан – ИМ»	1	55700	55700
<b>Итого, руб.:</b>					<b>1140700</b>

*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. Расчет основной заработной платы сводится в таблице 27.

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}$$

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:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб}$$

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:

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

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 27.

Таблица 27 – 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:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \text{ где}$$

$Z_{\text{б}}$  – 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:

$$Z_m = Z_b * K_p, \text{ где}$$

$Z_b$  – 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 28.

Таблица 28 – 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	-	-	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:

$$Z_{доп} = Z_{осн} * k_{доп}, \text{ где}$$

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

$k_{доп}$  – коэффициент дополнительной зарплаты;

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

В таблице 29 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 29 – Заработная плата исполнителей НИИ

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

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

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

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

На 2014 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%. Стипендиальные выплаты студентам, магистрам и аспирантам не облагаются налогом.

Отчисления на социальные нужды составляют:

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

*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.

Таким образом, затраты проекта составляет 2238918 рубля, которые приведены в таблице 30.

Таблица 30 – 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

### 5.4.1 Организационная структура проекта

Данный проект представлен в виде проектной организационной структуры. Проектная организационная структура проекта представлена на рисунке 7.



Рисунок 7 – Проектная структура проекта

### 5.4.2 План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта (таблица 31).

Таблица 31 – 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 дня контрольного события по плану управления

### 5.4.3 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 32.

Таблица 32 – 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

## 5.5 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности

### 5.5.1 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:

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

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 33. При расчете рентабельность проекта составляла 20-25 %, норма амортизации - 10 %.  
 $Ag = Cперв * Na / 100$ ,  $себ = 847228,2$  р., **Выручка = себестоимость \* 1,25**

Таблица 33 – Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб.	0	2798648	2798648	2798648	2798648
2	Итого приток, руб.	0	2798648	2798648	2798648	2798648
3	Инвестиционные издержки, руб.	-2238918	0	0	0	0
4	Операционные затраты, руб. (35% от бюджета)	0	783621,3	783621,3	783621,3	783621,3
5	Налогооблагаемая прибыль (1-4)	0	2015027	2015027	2015027	2015027
6	Налоги 20 %, руб. (5*20%)	0	403005,3	403005,3	403005,3	403005,3
8	Чистая прибыль, руб. (5-6)	0	1612021	1612021	1612021	1612021
9	Чистый денежный поток (ЧДП), руб. (чистая прибыль + амортизация)	-2238918	1835913,2	1835913,2	1835913,2	1835913,2
10	Коэффициент дисконтирования при $i=20\%$ (КД)	1	<u>0,833</u>	<u>0,694</u>	<u>0,578</u>	<u>0,482</u>
11	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб. (9*10)	-2238918	1529315,7	1274124,7	1061158,8	884910,1
12	$\sum$ ЧДД		<b>4749507,3 руб.</b>			
12	Итого NPV, руб.		<b>2510589,3 руб</b>			

$$NPV = 4749507,3 \text{ руб.} - 2238918 = 2510589,3 \text{ руб.} > 0$$

*Коэффициент дисконтирования* рассчитан по формуле:

$$КД = \frac{1}{(1 + i)^t}$$

где:  $i$  – ставка дисконтирования, 20 %; (10%)

$t$  – шаг расчета.

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 2510589,3 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:

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

где: ЧДД - чистый денежный поток, руб.;

$I_0$  – начальный инвестиционный капитал, руб.

Таким образом PI для данного проекта составляет:

$$PI = \frac{4749507,3}{2238918} = 2,12$$

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 ( $i$ ) с обратная зависимость, представленная в таблице 34 и на рисунке 8.

Таблица 34 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№	Наименование показателя	0	1	2	3	4	
1	Чистые денежные потоки, руб.	-2238918	1835913,2	1835913,2	1835913,2	1835913,2	NPV, руб.
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	1668845,1	1516464,3	1378770,8	1253928,7	3579090,9
	0,2	-2238918	1529315,7	1274123,8	1061157,8	884910,2	2510589,4
	0,3	-2238918	1411817,3	1086860,6	835340,5	642569,6	1737670,0
	0,4	-2238918	1310842,0	936315,7	668272,4	477337,4	1153849,6
	0,5	-2238918	1224554,1	815145,5	541594,4	363510,8	705886,8
	0,6	-2238918	1147445,8	716006,1	447962,8	280894,7	353391,4
	0,7	-2238918	1079517,0	615030,9	372690,4	205622,3	33942,5
	0,8	-2238918	1020767,7	567297,2	313941,2	174411,8	-162500,2
	0,9	-2238918	965690,3	508548,0	268043,3	141365,3	-355271,1
	1,0	-2238918	917956,6	458978,3	229489,2	113826,6	-518667,3

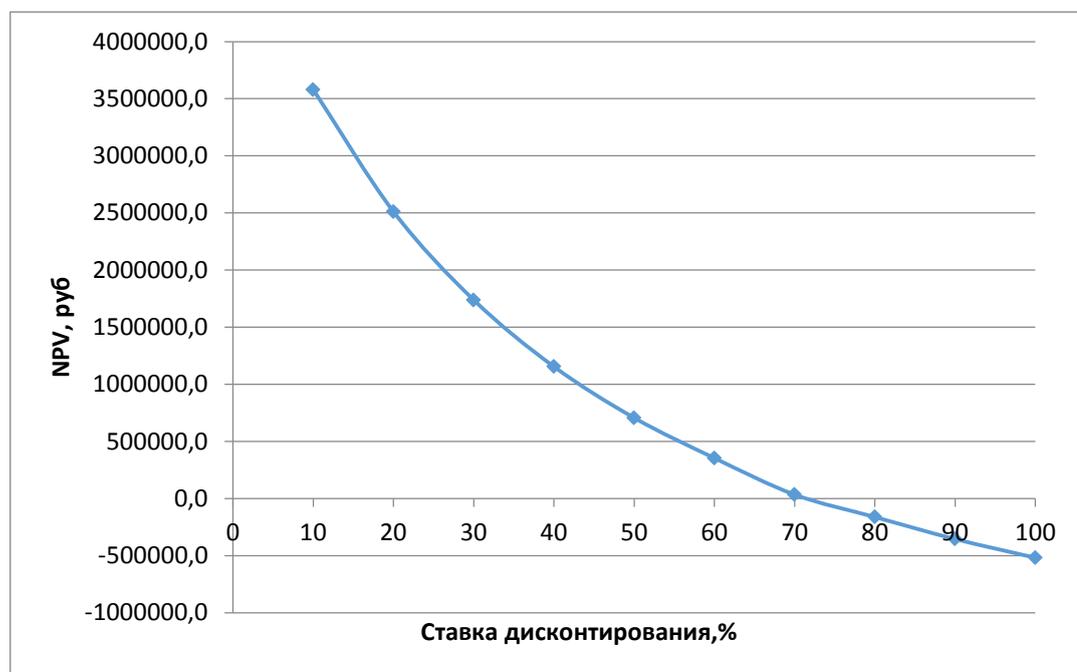


Рисунок 8 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Из таблицы и графика следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Значение ставки, при которой NPV обращается в ноль, носит название «внутренней ставки доходности» или «внутренней нормы прибыли». Из графика получаем, что IRR составляет 0,72.

$IRR > i$ , проект эффективен.

Запас экономической прочности проекта:  $72\% - 20\% = 52\%$

*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 35).

Таблица 35 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток ( $i = 0,20$ ), руб.	-2238918	1529315,7	1274124,7	1061158,8	884910,1
2	То же нарастающим итогом, руб.	-2238918	-709602,3	564522,4	1625681,2	2510591,3
3	Дисконтированный срок окупаемости	$DP_{диск} = 1 + (709602,3 / 1274124,7) = 0,56$ 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 36).

Таблица 36 – Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Отсутствие информации о 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

### 5.5.2 Оценка сравнительной эффективности исследования

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

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по следующей формуле:

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

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

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

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное

удешевление стоимости разработки в разгах (значение меньше единицы, но больше нуля).

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i$$

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

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

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

$n$  – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблицы (таблице 37).

Таблица 37 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

ПО Критерии	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	25	21

$$I_m^p = 0,4 \cdot 5 + 0,2 \cdot 5 + 5 \cdot 0,1 + 5 \cdot 0,2 + 5 \cdot 0,1 = 5,0$$

$$I_1^A = 5 \cdot 0,4 + 5 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,1 + 4 \cdot 0,2 + 3 \cdot 0,1 = 4,5$$

Интегральный показатель эффективности разработки  $I_{финр}^p$  и аналога  $I_{финр}^a$  определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_{ф}^p}; I_{финр}^a = \frac{I_m^a}{I_{ф}^a}$$

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

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^a}$$

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

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

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

Сравнительная эффективность разработки по сравнению с аналогами представлена в таблице 38.

Таблица 38 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Разработка	Аналог 1
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,68	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	5	4,5
3	Интегральный показатель эффективности	7,35	4,5
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,63	0,61

Выводы: Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет понять, что разработанный вариант проведения проекта является наиболее эффективным при решении поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

В ходе выполнения раздела финансового менеджмента определена чистая текущая стоимость, (NPV), равная 2510589,3 руб.; индекс доходности  $PI=2,12$ , внутренняя ставка доходности  $IRR=72\%$ , срок окупаемости  $PP_{\text{дск}}=0,56$  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, который также достоверно помогает определить физико – химические свойства моторных топлив.

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

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

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

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

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

- предоставление ему работы, обусловленной трудовым договором;

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

### **6.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны**

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

Данная работа осуществлялась в исследовательской лаборатории отделения химической инженерии технологии топлива и химической кибернетики. Лаборатория оборудована вентиляцией, водоснабжением и канализацией. Полы выполнены из жаростойкой и гидрофобной

керамогранитной плитки. Лабораторные столы имеют гладкие поверхности из материалов, не сорбирующих вредные вещества, и легко поддаются очистке.

Лабораторное помещение оснащено индивидуальной системой вентиляции, не связанной с вентиляцией других помещений, т.к. в лаборатории проводят исследования с веществами 1, 2 и 3-го классов опасности. В лаборатории присутствует следующее оборудование: термостат для измерения плотности нефти и нефтепродуктов, электронные весы, электрическая плитка, сушильные шкафы, печи и т. д.

Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного освещения люминесцентных ламп. Дополнительное освещение в лаборатории устанавливают так, чтобы можно было при необходимости менять направление светового потока.

Обработка данных происходила в аудитории 133, оборудованной компьютерами.

## 6.2 Производственная безопасность

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

В таблице 39, представленной ниже, показаны вредные и опасные факторы, которые могут повлиять на работников при проведении исследования.

Таблица 39 – Вредные и опасные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Разработка	Эксплуатация	Нормативные документы
1. Отклонение показателей микроклимата	+	+	СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений СНиП 23-05-95* Естественное и искусственное освещение ГОСТ Р 51337-99

### Продолжение таблицы 39

2.Отсутствие или недостаток естественного и искусственного света на рабочем месте	+	+	Температуры касаемых поверхностей. Эргономические данные для установления предельных величин горячих поверхностей 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 ГОСТ 12.1.030-81 Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление
3.Повышенная температура поверхностей оборудования, материалов	+	+	
4. Повышенный уровень шума	+	+	
5.Наличие электрических приборов			
	+	+	

#### 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). 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 [27].

Перечень вредных химических веществ, выделяющихся в воздух рабочей зоны, их ПДК и класс опасности приведены в таблице 40.

Таблица 40 – Предельно допустимые концентрации веществ на производстве

№	Название вещества	Величина ПДК, мг/м <sup>3</sup> СанПиН 1.2.3685-21 [27]	Класс опасности ГОСТ 12.1.007-76 [28]	Воздействие на человека
1	Анилин	0,05	2	Высокотоксичное вещество. Отравления им возможны как при вдыхании паров, так и при попадании жидкого анилина на кожу. Поражает ЦНС [29].

Продолжение таблицы 40

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 при приеме внутрь, при внутривенном введении, а также через легкие в виде паров с вдыхаемым воздухом. Поступивший в 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.

#### *– 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 3.

Таблица 41 – 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

*– 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 приведены в СНиП 23-05-95. [30]

Таблица 42 – Требования к освещению рабочих мест

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

– *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. [31]

Таблица 43 – Требования по допустимому уровню шума

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

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

– *Электроприборы*

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

Напряжения прикосновения и токи, протекающие через тело человека при нормальном (неаварийном) режиме электроустановки, не должны превышать значений, указаны в таблице 6 (напряжения прикосновения и токи приведены при продолжительности воздействия не более 10 мин в сутки).

Таблица 44 - Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов

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

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

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

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

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

В соответствии с техническим регламентом каждому работнику лаборатории выдаются средства индивидуальной защиты и смывающие

вещества в соответствии с нормами выдачи на 1 работника в месяц. Для исключения возможности несчастных случаев должны проводиться обучение, инструктажи и проверка работников на знание требований безопасности труда. За государственный и ведомственный контроль по охране труда отвечает штаб ГО ЧС, отдел по охране труда.

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

#### **6.2.4 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 (ЛД).

Таблица 45 – Основные характеристики люминесцентных ламп [32]

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  $\lambda$  удорожает устройство и обслуживание освещения, а чрезмерное увеличение ведёт к резкой неравномерности освещённости. В табл. приведены значения  $\lambda$  для разных светильников.

Таблица 46 – Наилучшее расположение светильников [32]

Наименование светильников	$\lambda$
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  $R_{п} = 40\%$ , потолка  $R_{п} = 50\%$ . Коэффициент запаса,  $k = 1,5$ . Коэффициент неравномерности  $Z = 1,1$ .

Рассчитываем систему общего люминесцентного освещения.

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

Приняв величину свеса светильников  $h_c = 0,5$  м, определяем расчетную высоту [32]:

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

Расстояние между светильниками  $L$  определяется [32]:

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

Оптимальное расстояние  $l$  от крайнего ряда светильников до стены рекомендуется принимать равным  $L/3$ :

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

Количество рядов светильников, с люминесцентными лампами определяется по формуле [32]:

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

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

Количество светильников с люминесцентными лампами определяется по формуле [32]:

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

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 [32]:

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

Коэффициент использования светового потока выбираем равным [32]:

$$\eta = 0,6$$

Определяем потребный световой поток ламп в каждом из рядов [32]:

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

где  $E_{\text{н}}$  – нормативная освещённость по СП 52.13330.2016, лк;  $S$  – площадь освещаемого помещения,  $\text{м}^2$ ;  $K_{\text{з}}$  – коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника (источника света, светотехнической арматуры, стен и

пр., т. е. отражающих поверхностей), наличие в атмосфере цеха дыма, пыли;  $Z$  – коэффициент неравномерности освещения (для люминисцентных ламп 1.1),  $N_L$  – число ламп в помещении (необходимо учесть число ламп в светильнике);  $\eta$  – коэффициент использования светового потока.

Из таблицы [32] выбираем ближайшую стандартную лампу - ЛБ 65 Вт с потоком 4600 лм. Делаем проверку выполнения условия [32]:

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

Получаем:

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

Определяем электрическую мощность осветительной установки:

$$P = 65 \cdot 40 = 2600 \text{ Вт}$$

### **6.3 Экологическая безопасность**

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

Автомобильные двигатели с выхлопными газами выделяют большое количество вредных веществ в атмосферу. Токсичные выбросы автомобилей включают: окись углерода (CO), оксиды азота (NO<sub>x</sub>), углеводороды (C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>), сажу (C), альдегиды (RCHO), диоксид серы (SO<sub>2</sub>) 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

диоксида 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.[33]

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 [34].

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 [35]. 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 [36].

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**

В ходе эксперимента возможно возникновение пожаров, взрывов, разрушение зданий в результате разрядов атмосферного электричества,

ураганов, землетрясений. Здания защищаются от прямых ударов молнии молнеприемниками, воспринимающими разряд на себя, заземлителями, служащими для отвода тока в землю и токопроводами, соединяющими молнеприемники и заземлители [37]. Для обеспечения безопасности людей рекомендуется ограждать заземлители или во время грозы не допускать людей к заземлителям на расстояние ближе 5-6 метров. Заземлители располагаются вдали от дорог. В случае стихийного бедствия (урагана, землетрясения) необходимо отключить воду, электричество и покинуть помещение согласно плану эвакуации.

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

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

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

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

Организационные мероприятия:

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

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

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

## **Заключение**

В ходе проведения технико-экономического обоснования были рассмотрены различные композиции моторных топлив, модифицирующие добавки и присадки, улучшающие эксплуатационные свойства моторных топлив, а также разрабатываемые альтернативные виды топлива.

Был проведен аналитический обзор важных физико-химических свойств бензиновых и дизельных топлив, а также существующих методов для формирования суррогатных композиций для моделирования свойств топлив.

Выполнено исследование различных образцов бензиновых и дизельных фракций, в ходе которого были установлены их основные физико-химические свойства.

Разработаны методики формирования суррогатных композиций и алгоритм оптимизации определения их состава для бензиновых и дизельных топлив, а также проведен расчет их целевых свойств. Полученные дизельные суррогаты достаточно близко воспроизводят основные физико-химические свойства исследуемых дизельных образцов. Бензиновые суррогаты также с высокой точностью воспроизводят целевые физико-химические свойства исследуемых образцов бензина, за исключением фракционного состава, по причине того, что выбранные компоненты суррогатного топлива имеют близкие температуры кипения. Для моделирования фракционного состава бензинов была предложена отдельная методика формирования суррогатов.

Полученные суррогатные композиции могут использоваться для изучения кинетики горения и прогнозирования свойств реальных моторных топлив, например, для изучения влияния добавок и присадок.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Высокооктановый бензин: патент Рос. Федерация № 2 740 554; заявл. 13.08.2020; опубл. 15.01.2021, Бюл. № 2 – 7 с.
2. Компонент автомобильных бензинов и способ его получения: патент Рос. Федерация № 2 685 255; заявл. 14.06.2018; опубл. : 17.04.2019, Бюл. № 11– 8 с.
3. Депрессорно-диспергирующая присадка к дизельным топливам и способ ее получения: патент Рос. Федерация № 2 715 896; заявл. 05.02.2019; опубл. : 04.03.2020, Бюл. № 7 – 9 с.
4. Альтернативное моторное топливо: патент Рос. Федерация № 2 671 639; заявл. 28.12.2017; опубл. 06.11.2018, Бюл. № 31– 10 с.
5. Композиция автомобильного бензина: патент Рос. Федерация № 2 656 850; заявл. 14.06. 2017; опубл. 07.06.2018, Бюл. № 16 – 9 с.
6. Сырбаков А.П., Корчуганова М.А. – Топливо и смазочные материалы/Издательство Томского политехнического университета, 2015.
7. 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.
8. Richards P. *Automotive fuels reference book*. 3rd ed Warrendale: Pennsylvania: SAE International; 2014.
9. Pitz W.J., Mueller C.J. Recent progress in the development of diesel surrogate fuels. *Prog Energy Combust Sci* 2011; 37:330 – 50.
10. Mehl M., Chen J.Y., Pitz W.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.

11. 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.
12. 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.
13. Pera C., Knop V. Methodology to define gasoline surrogates dedicated to auto-ignition in engines. Fuel 2012; 96:59 – 69.
14. 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.
15. 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.
16. 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.
17. Violi A., Yan S., Eddings E.G., Sarofim A.F, Granata S., Faravelli T., Ranzi E., Combust. Sci. Technol. 174 (2002) 399–417.
18. Charles J. Mueller, William J. Cannella, Thomas J. Bruno, Bruce Bunting, Heather Dettman, James A. Franz, Marcia L. Huber, Mani Natarajan, William J. Pitz, Matthew A. Ratcliff, Ken Wright - Methodology for Formulating Diesel Surrogate Fuels with Accurate Compositional, Ignition-Quality, and Volatility Characteristics.
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. K. Anand, Y. Ra, R.D. Reitz, B. Bunting, Energy Fuels 25 (2011) 1474–1484.
22. A. Krishnasamy, Y. Ra, R.D. Reitz, B.G. Bunting, Int. J. Engine Res. 14 (2) (2012) 191–208.
23. Y. Ra, R.D. Reitz, Combust. Flame 158 (2011) 69–90.
24. Е.В. Бешагина, С.Г. Маслов – Определение молекулярной массы нефтей методом криоскопии в бензоле на установке КРИОН-1/Издательство Томского политехнического университета, 2019.
25. ГОСТ Р 51069-97 – Метод определения плотности, относительной плотности и плотности в градусах API ареометром. – введ. 01-07-1998. – М.: Стандартинформ, 2006.
26. Н.И. Кривцова, Е.В. Бешагина – Определение вязкости нефти и нефтепродуктов/Издательство Томского политехнического университета, 2021.
27. СанПиН 1.2.3685-21 Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания.
28. ГОСТ 12.1.007-76 "Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности". – введ. 01.01.1977.– М.: ИПК Издательство стандартов, 2002.
29. ГОСТ 5819 – 78. Реактивы. Анилин. Технические условия. – введ. 01.01.1980.– М.: ИПК Издательство стандартов, 1998.
30. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95\*
31. ГОСТ 12.1.005–88. Общие санитарно–гигиенические требования к воздуху рабочей зоны. – введ. 01.01.1989. – М.: Стандартинформ, 2008. – 49 с.
32. Методическое указание «Расчет искусственного освещения» [Электронный ресурс]. Дата обращения: 22.04.2022 г

33. ГН 2.2.5.3532-18 "Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны" – введ. 13.02.2018.
34. 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.
35. ГОСТ 12.1.038–82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.
36. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности: Федеральный закон от 22 июля 2008 г. №123-ФЗ (ред. от 23.06.2014).
37. ГОСТ Р 22.0.01-2016. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения. – введ. 01.06.2017. - М.: Издательство стандартов, 2016.– 8 с.
38. High-octane gasoline: patent Ros. Federation No. 2 740 554; dec. 08/13/2020; publ. 01/15/2021, Bull. No. 2 - 7 p.
39. A component of motor gasoline and a method for its production: patent Ros. Federation No. 2 685 255; dec. 06/14/2018; publ. : 17.04.2019, Bull. No. 11–8 p.
40. Depressant-dispersant additive for diesel fuels and method for its production: patent Ros. Federation No. 2 715 896; dec. 02/05/2019; publ. : 04.03.2020, Bull. No. 7 - 9 p.
41. Alternative motor fuel: patent Ros. Federation No. 2 671 639; dec. 12/28/2017; publ. 11/06/2018, Bull. No. 31–10 p.
42. Composition of motor gasoline: patent Ros. Federation No. 2 656 850; dec. 14.06. 2017; publ. 06/07/2018, Bull. No. 16 - 9 p.
43. Edwards, T.; Maurice, L. Q. Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels. J. Propul. Power 2001, 17 (2), 461- 466.
44. Ahfaz Ahmed, Gokop Goteng, Vijai S.B. Shankar, Khalid Al-Qurashi, William L. Roberts, S. Mani Sarathy. A computational methodology for formulating gasoline surrogate fuels with accurate physical and chemical kinetic properties.

45. Charles J. Mueller, William J. Cannella, Thomas J. Bruno, Bruce Bunting, Heather D. Dettman, James A. Franz, Marcia L. Huber, Mani Natarajan, William J. Pitz, Matthew A. Ratcliff, and Ken Wright - Methodology for Formulating Diesel Surrogate Fuels with Accurate Compositional, Ignition-Quality, and Volatility Characteristics.
46. Rohit Kumar, Sudarshan Kumar. Formulation of a three-component gasoline surrogate model using laminar burning velocity data at elevated mixture temperatures.
47. Xiuxiu Sun, Mengmeng Wang, Incecik Atilla, Shizhe Feng, Zhixiong Li - Development of a multi-component surrogate fuel model of marine diesel engine.
48. Abdullah S. AlRamadan, S. Mani Sarathy, Jihad Badra. Unraveling the octane response of gasoline/ethanol blends: Paving the way to formulating gasoline surrogates

## Приложение А

Таблица А1 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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	0,070
<b>Итого</b>	<b>24,406</b>	<b>32,691</b>	<b>12,473</b>	<b>26,52</b>	<b>3,288</b>	<b>0,623</b>	<b>100,00</b>

Таблица А2 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
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
<b>Итого</b>	<b>26,337</b>	<b>34,418</b>	<b>10,342</b>	<b>25,072</b>	<b>3,254</b>	<b>0,576</b>	<b>100,00</b>

Таблица А3 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>26,071</b>	<b>31,764</b>	<b>11,761</b>	<b>26,484</b>	<b>2,908</b>	<b>1,011</b>	<b>100,00</b>

Таблица А4 – Физико-химические свойства бензинового 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
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
<b>Итого</b>	<b>103,303</b>	<b>0,723</b>	<b>38,388</b>

Таблица А5 – Фракционный состав бензинового 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
85,0	136,257
90,0	142,403
95,0	149,385
98,0	182,655
99,5	222,585

Таблица А6 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>27,453</b>	<b>34,844</b>	<b>16,252</b>	<b>17,129</b>	<b>3,107</b>	<b>1,216</b>	<b>100,00</b>

Таблица А7 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
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
<b>Итого</b>	<b>29,679</b>	<b>36,396</b>	<b>13,396</b>	<b>16,310</b>	<b>3,159</b>	<b>1,135</b>	<b>100,00</b>

Таблица А8 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>29,985</b>	<b>33,500</b>	<b>13,949</b>	<b>17,391</b>	<b>3,068</b>	<b>2,106</b>	<b>100,00</b>

Таблица А9 – Физико-химические свойства бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>110,940</b>	<b>0,732</b>	<b>23,696</b>

Таблица А10 – Фракционный состав бензинового 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
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 А11 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>32,606</b>	<b>32,367</b>	<b>6,326</b>	<b>25,932</b>	<b>2,659</b>	<b>0,111</b>	<b>100,00</b>

Таблица А12 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>34,855</b>	<b>33,531</b>	<b>5,076</b>	<b>23,860</b>	<b>2,578</b>	<b>0,101</b>	<b>100,0</b>

Таблица А13 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
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	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,025
<b>Итого</b>	<b>35,653</b>	<b>31,149</b>	<b>5,388</b>	<b>25,375</b>	<b>2,266</b>	<b>0,170</b>	<b>100,00</b>

Таблица А14 – Физико-химические свойства бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>98,660</b>	<b>0,703</b>	<b>55,066</b>

Таблица А15 – Фракционный состав бензинового 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 А16 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
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
<b>Итого</b>	<b>24,225</b>	<b>34,639</b>	<b>7,878</b>	<b>26,417</b>	<b>6,322</b>	<b>0,519</b>	<b>100,00</b>

Таблица А17 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>25,738</b>	<b>35,986</b>	<b>6,461</b>	<b>24,960</b>	<b>6,374</b>	<b>0,481</b>	<b>100,00</b>

Таблица А18 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
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
<b>Итого</b>	<b>25,463</b>	<b>33,872</b>	<b>6,721</b>	<b>26,925</b>	<b>0,895</b>	<b>0,895</b>	<b>100,00</b>

Таблица А19 – Физико-химические свойства бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>108,036</b>	<b>0,723</b>	<b>21,515</b>

Таблица А20 – Фракционный состав бензинового 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 А21 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
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
<b>Итого</b>	<b>27,136</b>	<b>34,890</b>	<b>6,281</b>	<b>27,525</b>	<b>3,624</b>	<b>0,543</b>	<b>100,0</b>

Таблица А22 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>29,090</b>	<b>36,045</b>	<b>5,120</b>	<b>25,691</b>	<b>3,560</b>	<b>0,494</b>	<b>100,00</b>

Таблица А23 – Детальный углеводородный анализ бензинового 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
<b>Итого</b>	<b>29,680</b>	<b>33,157</b>	<b>5,733</b>	<b>27,462</b>	<b>3,093</b>	<b>0,875</b>	<b>100,00</b>

Таблица А24 – Физико-химические свойства бензинового 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
12	160,751	0,887	0,002
13	184,342	0,756	0,000
14	198,390	0,760	0,000
15	<b>212,340</b>	<b>0,800</b>	<b>0,000</b>
<b>Итого</b>	<b>102,608</b>	<b>0,713</b>	<b>40,331</b>

Таблица А25 – Фракционный состав бензинового образца № 5

Отгон, %	Температура, °С
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

(справочное)

### Modeling the properties of motor fuels

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Нелюбова Дарья Михайловна		

Руководитель ВКР

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

Консультант-лингвист отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Надеина Луиза Васильевна	к.филол.н.		

## 1. Compositions of motor fuels and fuel additives

The priority direction in economic development is mainly based on decarbonization, which implies the abandonment of the use of traditional fuels in favor of alternative resources from renewable raw material sources.

This transition requires modernization of motor fuel production methods and technology. For example, the extensive use of oxygenates both as additives and as components of motor gasoline may be one of the available methods in addressing these issues. A variety of gasoline additives are also being developed, the action of which is aimed at improving the performance of internal combustion engines. These additives include anti-knock agents, fuel detergents, moisture displacers, etc. The chemical composition of additives is mainly represented by such classes as alcohols, aromatic amines, some metals, ethers, etc.

For example, the authors [38] proposed a method for producing high-octane gasoline with a boiling point not higher than 215°C and a research octane number with a minimum of 91 units, intended for use in technical equipment with reciprocating internal combustion engines with spark ignition. The main components are low-octane natural stable gas, aromatic component, methyl-tret-butyl ether and isooctene at the following ratio, % wt:

- aromatic component 1,0-41,0
- methyl-tret-butyl ether 3,0-21,0
- isooctene 0,0-17,0
- low-octane natural stable gas 42,0-61,0

The main feature of the developed gasoline is the content of aromatic hydrocarbons C<sub>7</sub> - C<sub>10</sub> as individual hydrocarbons or their mixtures, liquid pyrolysis products and as an aromatic component.

The invention [39] refers to a component of motor gasoline obtained with dissolving a low-boiling by-product of butanol production in a solvent followed by separation from dispersed water.

Dissolving of the low-boiling by-product in the solvent is carried out by mixing them with each other in a mass ratio of not more than 0.26:0.74 (low-boiling by-

product: solvent). Also, an anticorrosion additive in an amount of up to 0.05 % wt can be added to the motor gasoline component.

The oxygenates included in the composition of the low-boiling by-product improve the antiknock values of the final products and help decrease their cost by reducing the amount of octane-boosting additives involved and the use of by-products of the butanol production.

The authors of the patent [40] invented a depressant-dispersant additive to diesel fuel, which has antiwear properties and improves the low-temperature characteristics and lubricity of diesel fuel, as well as provides sedimentation stability of diesel during cold storage.

According to the invention, a polymer compound obtained with the reaction of radical copolymerization of maleic anhydride and a fraction of 1-olefins  $C_8 - C_{24}$  isolated from the products of thermocatalytic oligomerization of ethylene is used as a depressant component, and a polymer compound, obtained with the reaction of metathesis copolymerization of functionalized norbornene - n-butyl bicycle [2.2.1] hept5-en-2-carboxylate, synthetic divinyl rubber and 1-octene in the presence of a metal complex dimethyl ruthenium catalysts, is used as a dispersant component.

The depressor-dispersant additive is added at a concentration of 0.01-0.1 % wt to hydrotreated diesel fuel with a mass fraction of sulfur not exceeding 10 mg/kg.

The invention [41] relates to an alternative motor fuel with the motor octane number of at least 90.0 units, a saturated vapor pressure of at least 35.0 kPa and not more than 100.0 kPa. The fuel contains a hydrocarbon fraction and aliphatic alcohols. A feature of the invention is that the hydrocarbon fraction boils up to a temperature of 225°C and has a saturated vapor pressure of 30.0 - 105.0 kPa. Aliphatic alcohols are represented by  $C_3$  alcohols - n-propyl and /or isopropyl. The invention has the following ratio of components, % wt:

- aliphatic alcohols  $C_3$  20-50
- hydrocarbon fraction up to 100

Another difference is the content of  $C_1$  and/or  $C_2$  alcohols in concentrations up to 15 % wt as well as an anticorrosion additive in the amount of 12-350 mg/l.

The calorific heat value of the proposed invention is close to calorific heat value of motor gasoline, which is an advantage. The advantage can also be attributed to the simplicity of the composition of the fuel and the possibility of using several different refinery fractions.

The authors of the patent [42] have developed a composition of motor gasoline, including MTBE, toluene, alkylate, gasoline fraction of catalytic cracking and antioxidant additive Agidol. The peculiarity of the composition is the additional content of reformed gasoline. Catalytically cracked gasoline is represented by light gasoline fraction at the following ratio, % wt:

- reformed gasoline 10- 48
- toluene 5,5- 28
- alkylate 10-43
- catalytically cracked gasoline 17-26
- MTBE 6,0-14,5
- Agidol -12 0,01

The composition meets the requirements of GOST R 51866-2002 (EH 228-2004) and is applicable to the process design of LLC LUKOIL-Nizhegorodnefteorgsintez.

## **2. Physico-chemical and operational properties of gasoline**

Many factors affect the performance of an engine. The most important of these factors is the quality of the fuel used in the engine. Therefore, the fuel must meet the requirements for its specific properties and characteristics.

Density is one of the mandatory characteristics that require experimental determination and is specified in the certificate of fuels for engines. Knowing the density value, it is possible to determine the mass units of petroleum products by converting them from volumetric and vice versa.

Gasoline distillation is the most important property of its volatility, one of the most important characteristics of fuel quality, which determines the amount of distilled fuel when the temperature changes. Distillation characteristic affects the ease of starting the engine and its capacity in general.

The main fractions of motor gasoline include starting, power and tail fractions. Starting fraction (the first 10% of the total distillate) consists of low-boiling hydrocarbons and determines the initial volatility mixture, which affects the cold start of the engine and evaporative loss. Power fraction (distillates from 10 to 90% by volume) and tail fraction (from 90% to the end of the boil) affect engine acceleration, capacity, fuel economy and emissions of unburned hydrocarbons.

Gasoline distillation is determined according to GOST 2177-99, which defines the standards by five temperature characteristics: the initial boiling point, distillation 10%, 50%, 90% by volume and the end of boiling.

The chemical composition of gasoline is one of its important properties, determining all subsequent chemical properties (H/C ratio, heat of combustion, etc.) and physical properties (gasoline distillation, density, etc.). The chemical composition also determines the compliance of gasoline with environmental requirements, as there are restrictions on the content of certain individual substances in the composition of gasoline, for example, the content of benzene, oxygenates, etc. The exact chemical composition of gasoline can be determined by capillary gas chromatography according to GOST R 52714-2018.

Knocking in an engine occurs due to the rapid completion of fuel autoignition, followed by the formation of shockwaves propagating at supersonic velocities (1500-2000 m/s). If the fuel-air mixture burns normally, the average speed of flame propagation is within 10-40 m/s. Knocking is associated with increased formation of hydroperoxides in gasoline vapors due to oxidation by oxygen contained in the air, followed by burst of energy. Depending on the hydrocarbon composition, antiknock value of gasoline may vary between different values. The characteristic of the antiknock value of gasoline are research octane number (RON) and the motor octane number, which can be measured in accordance with GOST 32339-2013, using UIT-85M unit.

Paraffins have the lowest octane number of all gasoline hydrocarbons. They are usually not found in large volumes in commercial fuels. Isoparaffins have a higher octane number. The higher the number of methyl substituents is, the higher the octane

number, for that reason in gasoline the higher concentration belongs to paraffins ( $C_7 - C_8$ ) with the number of methyl substituents from one to three. A very small amount (less than 1%) accounts for the content of n-heptane and isooctane used as a reference fuel.

The content of naphthenes in gasoline should be small, because these compounds have a low octane number and are easily converted into aromatic compounds in the reforming process. The main representatives of naphthenes found in gasoline are  $C_5 - C_8$  hydrocarbons and include cycloheptane, cyclohexane, methylcyclopentane, methylcyclohexane and dimethylcyclohexane isomers. Cyclopentane has the highest octane number among cycloalkanes.

There are also restrictions on the content of olefins (alkenes) in gasoline. Olefins have poor oxidative stability, which reduces the shelf life of gasoline. In commercial gasoline, olefins should account for no more than 18% by volume. The range of alkenes present in gasoline is between  $C_5$  and  $C_8$  in the form of linear and branched isomers of pentene and hexene. The high octane numbers are ensured by double bonds in the molecular structure of olefins.

Aromatic hydrocarbons from  $C_6$  to  $C_9$  are the highest molecular weight in gasoline fuels. The end-boiling hydrocarbon composition in gasoline distillation is usually represented by high-molecular-weight alkylbenzenes. Although aromatic compounds have high octane numbers, their content in gasoline is limited to 35 vol. %, because their increased presence leads to increased emission of soot particles. Benzene is also a carcinogenic substance, so according to environmental requirements its concentration in gasoline must not exceed one percent by volume. As a consequence, the composition of aromatic hydrocarbons in gasoline is limited by the content of toluene, ethylbenzene, m-xylene, o-xylene and various trimethylbenzene isomers.

Saturated vapor pressure of gasoline is the pressure of the vapor phase of a fuel in dynamic equilibrium with the liquid phase, measured at a standard temperature and a certain ratio of the volumes of the vapor and liquid phases. The temperature at which the saturated vapor pressure becomes equal to the pressure in

the system is called the boiling point of the substance. Saturated vapor pressure increases sharply with increasing temperature. At the same temperature, lighter oil products are characterized by the higher saturated vapor pressure. The saturated vapor pressure of gasoline varies between 35 and 100 kPa. Saturated vapor pressure is measured in accordance with GOST EN 13016-1 in a closed chamber at a temperature of 37.8 °C and an ambient pressure of one atmosphere (101.325 kPa).

### **3. Physico-chemical and operational properties of diesel fuels**

Viscosity and density of diesel fuel affect the evaporation and mixture formation processes. A decrease or increase of kinematic viscosity (for various grades of fuel, the optimal value is in the range of 1.5-6.0 mm<sup>2</sup>/s) leads to interruptions of engine fuel supply process, the process of mixture formation and combustion of air and fuel mixture. Viscosity measurement is carried out with a viscometer according to GOST 33-2016. Density of diesel fuel is measured with a hydrometer at a temperature of 15°C (GOST 33364-2015): summer fuel does not exceed 863.4 kg/m<sup>3</sup>, winter fuel does not exceed 843.4 kg/m<sup>3</sup>, and arctic fuel does not exceed 833.5 kg/m<sup>3</sup>.

Distillation and volatility of diesel fuel also depend on its physical and chemical properties. If the viscosity of the fuel has a decisive influence on the first stage of mixture formation (spraying), the second stage (evaporation) is influenced by volatility. According to GOST 305-2013, the volatility of diesel fuel, characterized by fractional composition, is determined by the boiling points of 50% and 95% of the fuel volume. The boiling point of 95% of the volume indicates the content of high-boiling hydrocarbons in the fuel. Increasing the proportion of this fraction worsens the formation of the mixture and leads to incomplete combustion of the fuel, making it difficult to start a diesel engine, reducing the capacity of the diesel engine and increasing the amount of exhaust gases.

Chemical composition of diesel fuel determines the onset of fuel autoignition. The lighter hydrocarbons in diesel fuel and the faster they oxidize, the greater formation of unstable oxygen-containing substances and the lower fuel autoignition temperature. Paraffins (n-alkanes) are the most easily oxidizable hydrocarbons.

Naphthenic hydrocarbons (cycloalkanes) and isoalkanes are more difficult to oxidize. The most resistant to oxidation are aromatic hydrocarbons (arenes). It follows that the presence of those hydrocarbon components, which cause knocking and are not preferred in the composition of gasolines, are valuable components of fuels for high-speed diesel engines. As the number of carbon atoms increases, the total molecular weight of the chemical components of fuels also increases, which leads to an increasing instability of their oxidation. Thus, unbranched paraffinic hydrocarbons C14 - C18 are the most desirable components of diesel fuel due to their ability to quickly autoignite.

Autoignition of diesel fuel is usually evaluated according to GOST 32508 by comparing it with autoignition of reference fuels. The reference fuels used are hexadecane (cetane,  $C_{16}H_{34}$ ), which has a short ignition delay period (usually the autoignition of cetane is conventionally 100), and the aromatic hydrocarbon  $\alpha$ -methylnaphthalene ( $C_{10}H_7CH_3$ ), which has a long autoignition delay period (its autoignition is conventionally 0). Autoignition characteristic of diesel fuel, which determines the ignition delay period, is called cetane number. Optimal cetane number of diesel fuel is in the range of 40-55 units.

Olefins and alkanes of normal structure have the highest values of cetane numbers, and as their molecular weight increases, the values of cetane numbers increase, and as the hydrocarbons branch, cetane numbers decrease. Aromatic hydrocarbons, on the contrary, have the lowest cetane numbers.

#### **4. Methods for developing surrogate compositions and their areas of use**

As the global demand for fuel energy increases, so does the demand for automobile engines with higher performance and lower emissions.

The real fuels, such as gasoline, diesel, and jet fuel, are complex mixtures consisting of hundreds of different components. Thus, the combustion chemistry of fuels is very complex and difficult to predict accurately.

It will take a long period of time to investigate the physicochemical and operational properties of fuel blends and their components, as this research is a time-consuming and economically expensive process. The development of accurate

methods for predicting fuel properties using conventional and alternative sources will help to reduce the time and cost of fuel creating. The development and optimization of methods to determine the key characteristics of fuels is an urgent task to be solved.

Oftentimes, the documentation regulating the properties of fuels does not contain requirements regarding their exact chemical composition, but only regulates the general physical and chemical properties of individual groups of hydrocarbons. For this reason, the fuel composition is ambiguous, and the component composition can vary significantly for samples of different origins, so its use for numerical simulation of combustion processes in engine combustion chambers is not possible. In order to solve this problem, it is of interest to create a surrogate fuel, i.e., a simpler mixture that corresponds with sufficient accuracy to the main efficiency characteristics of the real fuel.

Since fuel composition certainly determines its properties and operating factors for a given engine operating mode, the approach is to characterize the composition of a commercial "target fuel" using the best available analytical methods, and then select and use surrogate compounds to closely match the compositional characteristics and key properties of the target fuel.

Some of these key properties, such as distillation characteristics, density or octane number, are required to be determined, while others, which are important to engine contractors, are not standardized. These include calorific heat value, H/C ratio or viscosity. However, modeling fuel properties is becoming increasingly difficult. The first reason is the lack of suitable components for compiling a surrogate. Also, using too many components in a surrogate can lead to mathematical errors, since each component contributes one variable to the objective function of the optimization algorithm.

Creating the single surrogate composition makes it possible to simulate several characteristics of the studied fuel, but several different surrogate mixtures are most often required to simulate a wide range of properties. A surrogate for modeling the processes of air-fuel mixture formation and evaporation will largely differ in composition from the surrogate that reflects autoignition of the fuel.

The development of a surrogate model of motor fuel, the chemical composition of which may vary depending on time, the origin of raw materials and the fuel producer, is a necessary method for predicting important chemical and physical properties. An appropriate surrogate composition can accurately simulate target properties chosen to evaluate the motor fuel. An important advantage of such a composition is also its stability in time, which entails the required experimental accuracy of modeling. An important advantage of surrogates is also its stability over time, which causes the required experimental accuracy of modeling.

Depending on purposes for which the fuel simulating surrogate will be used, it will have different requirements. To simulate fuel spraying, droplet formation and evaporation of real fuels, it is important to match surrogates with such characteristics as viscosity, density, saturated vapor pressure and distillation characteristics of fuels. In this case, surrogates are called physical surrogates. If surrogates reproduce chemical values responsible for antiknock properties or the opposite autoignition characteristics, as well as reproduce combustion and emission processes, such surrogates are referred to chemical surrogates. There are also complex surrogates which properties reproduce both chemical and physical characteristics of the corresponding motor fuels [43].

In early studies of the properties of gasoline fuels, one-component or binary mixtures of n-heptane and isooctane were used as surrogates. However, over the past decade, ternary blends, represented by normal heptane, 2,2,4-trimethylpentane and toluene, as well as multicomponent blends covering the entire range of gasoline fuel components ( $C_4 - C_{10}$ ) have become widespread. Mixtures of hexadecane and  $\alpha$ -methyl-naphthalene are used as an elementary binary surrogate for diesel fuel.

The general plan for creating a surrogate blend is to determine the physical and chemical properties to be selected as the target properties, as well as their connection to the combustion technology and operating conditions. Once the target gasoline properties have been selected, the surrogate fuel can be created from a mixture of components representing the motor fuel. The optimal mixture of components is best

determined using a computational algorithm that solves the target function to minimize error with respect to all target properties.

Ahfaz Ahmed and others [44] developed an algorithm to create a surrogate possessing the main target characteristics of gasoline fuel. This algorithm is based on regression modeling of physical and chemical kinetic mechanisms. The computations are done by using different programs together, which makes it possible to simulate the target fuel. The algorithm developed by the authors is shown in Figure 1.

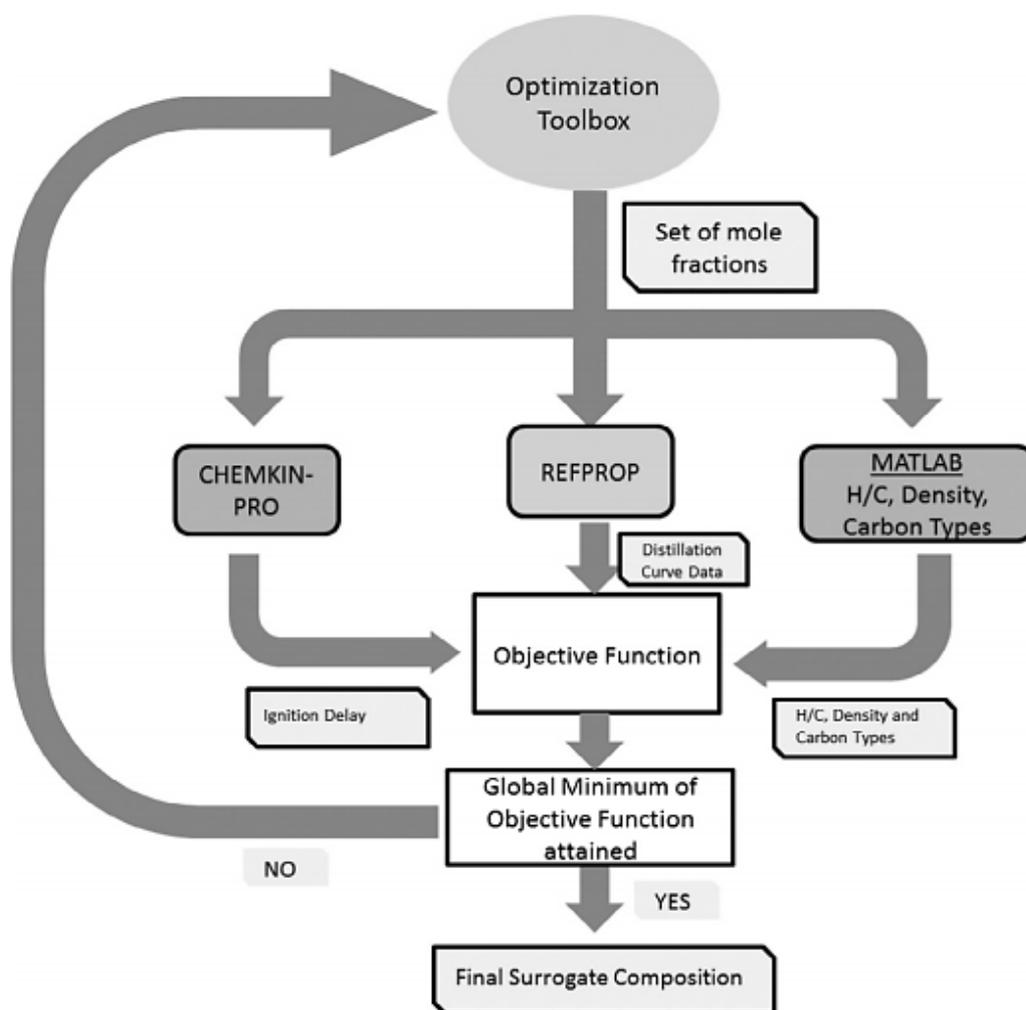


Fig.1 The computational approach for surrogate formulation

In their study, the authors used compounds with physical and chemical properties listed in Table 3:

Physical and chemical properties of compounds

Compound	Boiling point (K)	Density (kg/m <sup>3</sup> )	Mol. Wt. (g/mol)	RON
n-butane	273	602	58	93
2-methylhexane	363	696	100	42
n-heptane	372	688	100	0
2,2,4-trimethylpentane	373	696	114	100
2-methylbutane	303	625	72	92
toluene	384	870	92	124

The schematic of the molecular structure of components is represented in Figure 2.

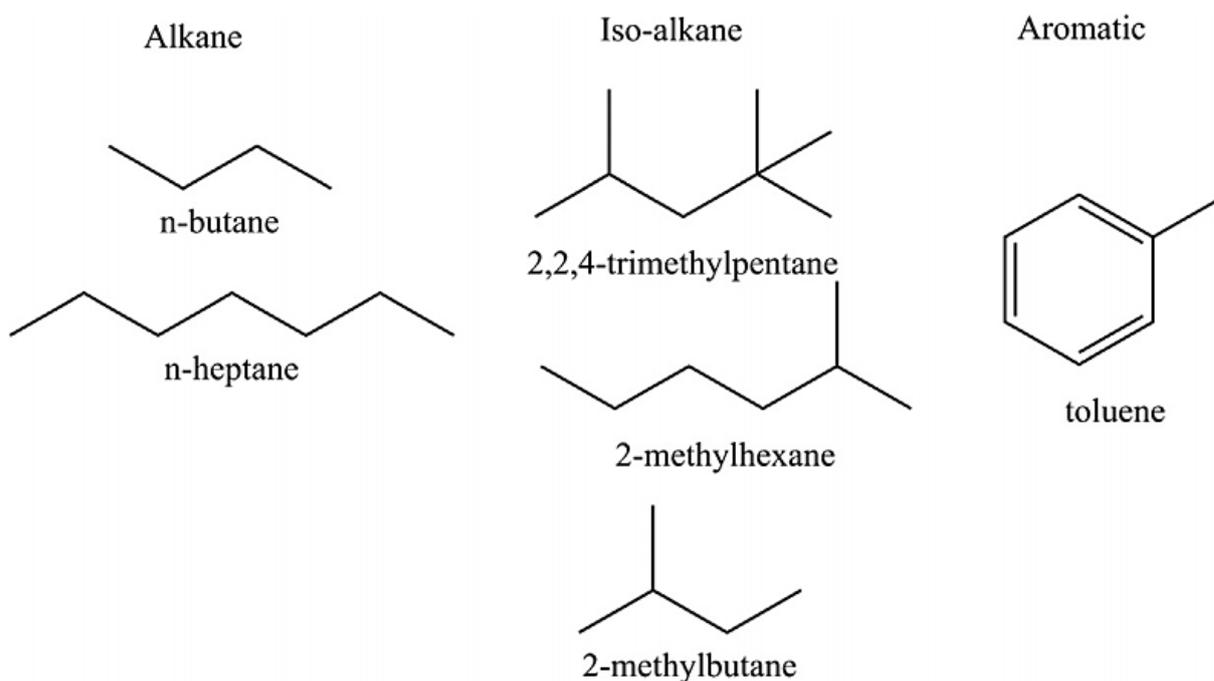


Fig. 2 The schematic of the molecular structure of components selected for surrogate formulation

The authors [45] proposed a methodology for formulating a surrogate fuel that matches the characteristics of diesel fuel. In order to determine the composition of the simulated fuel, the authors used the nuclear magnetic resonance spectroscopy method. The volatility characteristic of the fuel was evaluated using the distillation curve data. It was possible to estimate the characteristics of the autoignition of the

fuel based on the derived cetane number (DCN). The methodology developed by the authors is shown in Figure 3.

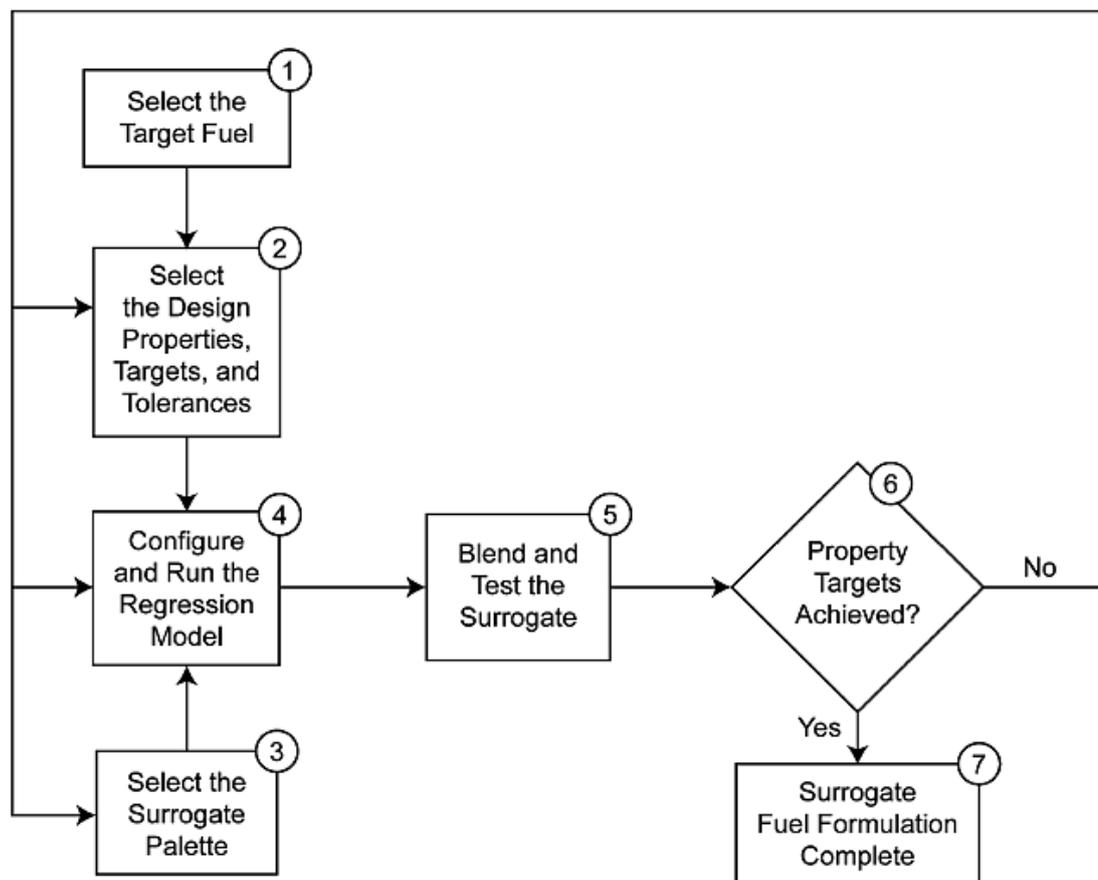


Fig.3 The methodology for surrogate formulation

Eight chemical components were involved in the process of creating the surrogate. In order to determine the composition of the surrogate corresponding to the characteristics of the diesel, a multiproperty regression model was compiled, which used data on the types of carbon bonds of the selected components, data on the ignition quality and volatility of the mixture of components.

In their study, the authors used compounds with physical and chemical properties listed in Table 4:

Physical and chemical properties of compounds

Compound	Boiling point (°C)	Density (kg/m <sup>3</sup> )	Mol. Wt. (g/mol)	DCN
n-hexadecane	286.8	756	226.4	100
n-octadecane	316.8	766	254.5	106
heptamethylnonane	246.4	768	226.4	15.1
n-butylcyclohexane	183.0	785	140.3	47.6
trans-decalin	187.3	851	138.2	31.8
1,2,4- trimethylbenzene	169.4	856	120.2	8.9
tetralin	207.7	949	132.2	8.9
1-methylnaphthalene	244.8	986	142.2	0

Rohit Kumar and Sudarshan Kumar [46] proposed a surrogate based on the externally heated diverging channel (EHDC) method to determine the laminar burning velocities of the fuel-air mixture. N-heptane, isooctane and methylcyclohexane (MCH) were used as components of the surrogate, the laminar burning velocities of which were compared with the measured values of gasoline.

The composition of the surrogate, which includes a set of these three components, was calculated based on the mixing rule. Verification of the obtained surrogate was carried out using a Ranzi's chemical kinetic model. A Monte-Carlo based correlation (KAUST) made it possible to compare the laminar burning velocities of the commercial gasoline and the surrogate.

Experimental configuration of EHDC method is shown in Figure 4.

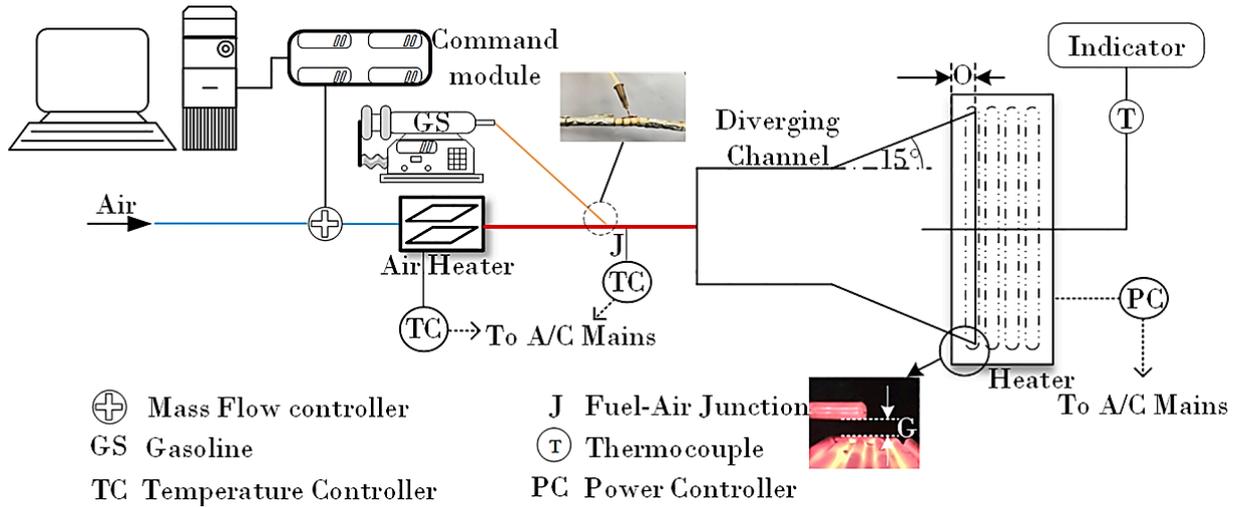


Fig.4 Experimental configuration of EHDC method

Xiuxiu Sun and others [47] proposed a decoupling methodology for diesel surrogate formulation based on the four most widespread components, which include n-tetradecane, ethanol, toluene and methylcyclohexane (MCH).

The accuracy of the proposed methodology was determined by comparing the results obtained when using it with the results of experimental data in shock tubes. The correspondence between the autoignition delay time of the surrogate and the autoignition delay time of the real diesel was validated.

The validation process of diesel surrogate fuel is shown in Figure 5.

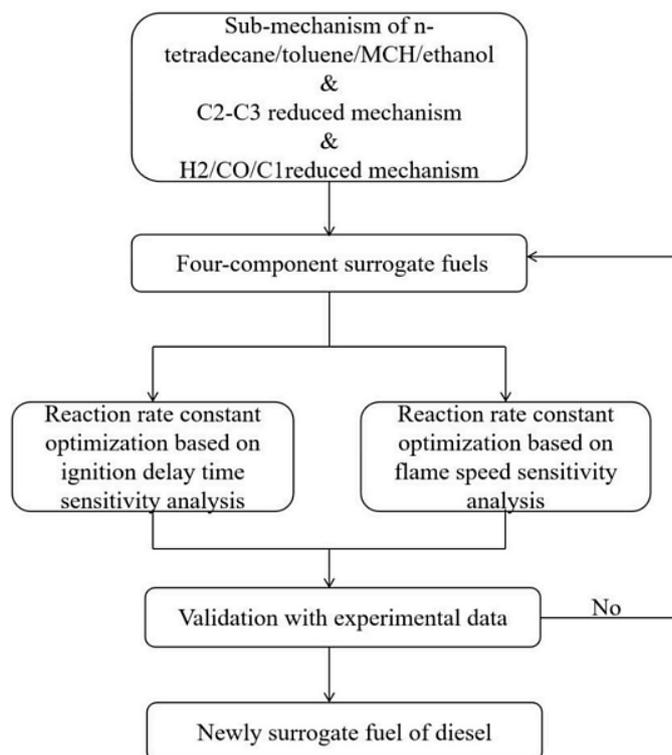


Fig.5 The validation process of diesel surrogate fuel

In a study [48], the authors Abdullah S. AlRamadan and others investigated the effect of ethanol additive on gasoline. The relevance of this study is that the effect of ethanol and gasoline blending has not yet been established. Gasoline and ethanol blending can cause both a synergistic effect and significantly exceed the expected results, and vice versa, give results lower than expected (antagonistic effect). For this study, ternary mixtures consisting of cyclopentane, 1-hexene, and 1,2,4-trimethylbenzene were formulated, to which ethanol was further added. Then, research and motor octane numbers were measured to quantify the antiknock value of the resulting blendings.

Figure 6 illustrates the modelling methodology of study [11]

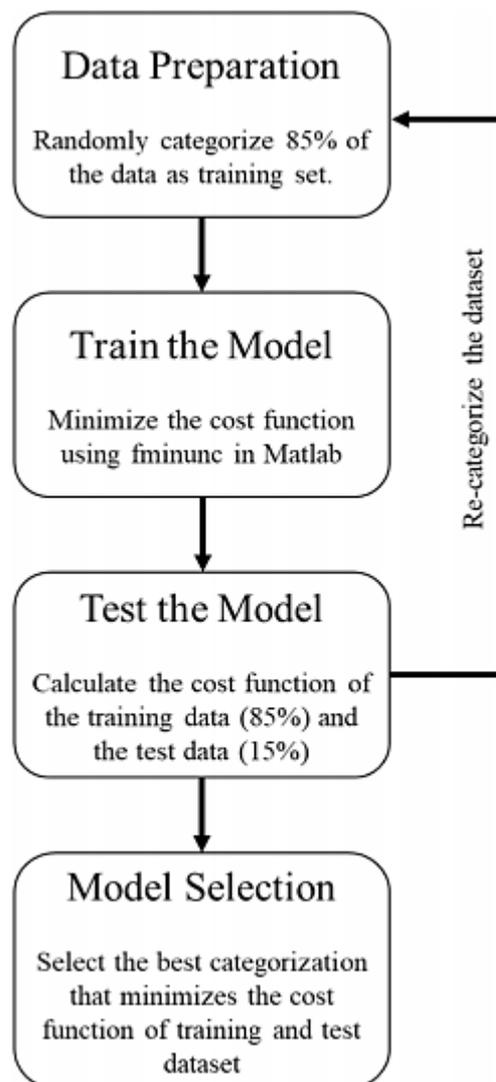


Fig.6 Algorithm for establishing blending rule of surrogates

In the study [48], multicomponent surrogates which include 9 components: n-heptane, n-pentane, cyclopentane, isopentane, cyclohexane, isooctane, 1-hexene, toluene and 124-trimethylbenzene were also used. The composition of each of the blendings proceeded according to the rule of linear molar blending to obtain a model capable to predict the octane numbers of surrogates. The developed model reproduces research octane number of gasoline with 87% accuracy and motor octane number of gasoline with 83% accuracy, which confirms the adequacy of its use for the formation of surrogates.

Table 8 shows the distribution of octane number measurements applied to train the ethanol-surrogate blending model.

*Table 8*

Percentage of dataset turned to the classes of gasoline surrogates to train the surrogate blending models.

Class	RON	MON
Single components	77%	82%
PRFs	87%	79%
TPRFs	88%	85%
Ternary Mixtures	94%	94%
Multicomponent Surrogates	78%	100%
Overall	85%	85%