

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**



Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология», профиль «Химическая технология подготовки и переработки нефти и газа»

**ОТЧЕТ ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ №1**

Название работы
<b>Расчет октанового числа смещения</b>
Вариант
<b>Вариант XX</b>
По дисциплине
<b>Системный анализ процессов химической технологии</b>

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата

Руководитель

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

Томск – 2021 г.

### Цель работы:

1. Определить октановое число смешения 6-ти потоков различного состава, используя неаддитивную методику расчета октановых чисел, разработанную в ТПУ.
2. Определить соотношение 6-ти потоков различного состава при котором достигается заданное октановое число (92 и 95 пунктов по исследовательскому методу).

### Исходные данные:

Исходные данные по потокам представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Исходные данные

Углеводород	*Bi	*RON	*П 1	*П 2	*П 3	*П 4	*П 5	*П 6
Пропан	0,09	100	0,0008	0,0056	0,0145	0,0000	0,0000	0,0000
Бутан	0	93,6	0,0113	0,0199	0,0461	0,0014	0,0015	0,0000
Пентан	0,16	61,7	0,0445	0,0871	0,1691	0,0175	0,0179	0,0674
Н-гексан	0	24,8	0,0287	0,0904	0,0603	0,1558	0,1593	0,0403
Н-гептан	0,1	0	0,0234	0,0229	0,0001	0,0339	0,0347	0,0230
Н-октан	0	-19	0,0054	0,0086	0,0000	0,0008	0,0008	0,0576
Н-нонан	0,1	-39	0,0018	0,0016	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Изобутан	0,17	101	0,0045	0,0044	0,0063	0,0003	0,0003	0,0498
2,2-диметилбутан	0,03	92	0,0046	0,0179	0,0000	0,1911	0,1955	0,0071
2,3-диметилбутан	0,16	101,7	0,0045	0,0197	0,0232	0,0276	0,0282	0,0095
2,2,3-триметилбутан	0,07	105,8	0,0007	0,0005	0,0205	0,0006	0,0006	0,0004
Изопентан	0,14	92,3	0,0567	0,2829	0,0000	0,0216	0,0221	0,1946
2-метилпентан	0,2	73,4	0,0306	0,1105	0,1720	0,1160	0,0957	0,0000
3-метилпентан	0,09	74,5	0,0212	0,0783	0,2005	0,1998	0,2044	0,0381
3,3-демитилпентан	0,05	80,8	0,0037	0,0031	0,1838	0,0042	0,0043	0,0029
2,3-деметилпентан	0,09	91,1	0,0097	0,0098	0,0000	0,0150	0,0153	0,0101
2,4-деметилпентан	0,29	83,1	0,0042	0,0044	0,0017	0,0705	0,0721	0,0042
2,2,3-триметилпентан	0,04	38	0,0000	0,0000	0,0001	0,0000	0,0000	0,0010
2-метил, 3-этилпентан	0,25	87,3	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0245
2,3,4-триметилпентан	0,2	101,3	0,0002	0,0002	0,0000	0,0000	0,0000	0,0006
2-метилгексан	0,1	42,4	0,0249	0,1993	0,0000	0,0385	0,0393	0,0262
3-метилгексан	0,09	52	0,0306	0,0303	0,0003	0,0398	0,0407	0,0319
2,5-диметилгексан	0	55,5	0,0015	0,0025	0,0003	0,0003	0,0003	0,0178
2,4-диметилгексан	0,26	65,2	0,0015	0,0000	0,0000	0,0005	0,0005	0,0218
2,3-диметилгексан	0,26	71,3	0,0018	0,0000	0,0000	0,0004	0,0004	0,0019
3,4-диметилгексан	0,03	76,3	0,0009	0,0000	0,0000	0,0002	0,0002	0,0103
2,3,5-ТМГ	0,29	90	0,0002	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0006
2,2,3-триметилгексан	0,09	92	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Продолжение таблицы 1

Углеводород	*Bi	*RON	*П 1	*П 2	*П 3	*П 4	*П 5	*П 6
2-метил,4-этилгексан	0,97	30	0,0002	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
2-метилгептан	0,09	21,7	0,0059	0,0000	0,0000	0,0010	0,0011	0,0000
4-метилгептан	0,15	26,7	0,0029	0,0000	0,0000	0,0005	0,0005	0,0329
3-метилгептан	0,17	26,8	0,0089	0,0000	0,0000	0,0016	0,0017	0,0256
2,2-диметилгептан	0,07	66	0,0003	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
2,4-диметилгептан	0,29	62	0,0006	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0024
2,6-диметилгептан	0,24	33	0,0004	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
2,5-диметилгептан	0,08	50	0,0010	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0006
3,3-диметилгептан	0,08	33,7	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0006
изононаны	0,15	40	0,0051	0,0000	0,0000	0,0001	0,0002	0,0000
непредельные	1,4	0	0,0014	0,0000	0,0008	0,0000	0,0000	0,0030
циклопентан	0	87	0,0053	0,0000	0,0276	0,0033	0,0034	0,0010
циклогексан	0	83	0,0010	0,0000	0,0060	0,0034	0,0035	0,0000
Метилциклопентан	0,15	91,3	0,1601	0,0000	0,0512	0,0006	0,0006	0,0062
1,3-диметилциклопентан (цис)	0,18	40	0,0008	0,0000	0,0000	0,0010	0,0011	0,0014
1,3-диметилциклопентан (транс)	0,01	40	0,0038	0,0000	0,0000	0,0056	0,0058	0,0047
1,2-диметилциклопентан (транс)	0,02	40	0,0009	0,0000	0,0000	0,0013	0,0014	0,0020
1,2-диметилциклопентан (цис)	0,13	40	0,0012	0,0000	0,0000	0,0007	0,0008	0,0103
1,1,3-триметилциклопентан	0,11	38	0,0006	0,0000	0,0000	0,0045	0,0046	0,0014
1-2-4-триметилциклопентан	0,24	38	0,0007	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0022
1,2,3-триметилциклопентан	0,19	38	0,0005	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0016
1,1,2-триметилциклопентан	0,03	38,8	0,0002	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0008
этилциклопентан	0,08	67,2	0,0015	0,0000	0,0000	0,0007	0,0007	0,1673
Метилциклогексан	0,22	74,8	0,0009	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0188
1,2-диметилциклогексан (транс)	0,25	80,9	0,0001	0,0000	0,0000	0,0002	0,0002	0,0000
1,3-диметилциклогексан (транс)	0,13	66,9	0,0002	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Нафтоновые до C8	0,11	50	0,0017	0,0000	0,0000	0,0003	0,0003	0,0090
Нафтоновые до C9	0,11	45	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
бензол	1,08	115	0,0316	0,0000	0,0148	0,0004	0,0004	0,0672

толуол	0,78	114	0,1038	0,0000	0,0004	0,0027	0,0028	0,0000
п-ксилол	-0,1	120	0,0131	0,0000	0,0001	0,0004	0,0005	0,0000
м-ксилол	-0,74	120	0,0315	0,0000	0,0002	0,0010	0,0010	0,0000
о-ксилол	-0,86	120	0,0210	0,0000	0,0002	0,0329	0,0337	0,0000
ЭЦГ+этилбензол	1,25	114	0,0203	0,0000	0,0000	0,0002	0,0002	0,0000
Тяжелые С9+	0,11	110	0,2492	0,0000	0,0000	0,0014	0,0015	0,0000
МТБЭ	0	130	0,0057	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

*Примечание:*  $V_i$  – коэффициент; RON – октановое число индивидуального компонента; П – поток

### Теоретическая часть:

*Октановое число* – это условная величина, характеризующая детонационную стойкость и численно равная процентному содержанию изооктана в эталонной смеси с н-гептаном, которая по детонационной стойкости эквивалентна испытываемому топливу в условиях стандартного одноцилиндрового двигателя.

Октановые числа индивидуальных углеводородов:

- наименьшим ОЧ обладают алканы нормального строения, наивысшим – ароматические УВ;
- ОЧ нормальных алканов резко снижается с увеличением их молекулярной массы;
- ОЧ изопарафинов значительно выше, чем у алканов нормального строения;
- олефиновые УВ обладают более высокими ОЧ в сравнении с алканами с тем же числом атомов углерода;
- ОЧ аренов повышается с увеличением числа углеродных атомов.

Расчет октанового числа при смешении компонентов бензина производится по формуле:

$$R = R_1 + C_1 \cdot (R_2 - R_1 \cdot J_x) + C_2 \cdot (O_1 - O_2) + C_3 \cdot (A_1 - A_2), \quad (1)$$

где:  $R$  – октановое число смеси по исследовательскому методу;

$R_0$  – октановое число каждого компонента по исследовательскому методу;

$R_1$  – сумма произведений октанового числа каждого компонента (ОЧ ИМ) на его объемную долю (октановое число, средневзвешенное по объему);

$R_2$  – сумма произведений  $R_0$  и  $J$  каждого компонента, умноженных на его объемную долю (произведения, средневзвешенные по объему);

$J_x$  – сумма произведений чувствительности каждого компонента ( $J$ ) на его объемную долю;

$O_1$  – сумма произведений квадрата процентного содержания олефинов в каждом компоненте на его объемную долю;

$O_2$  – квадрат суммы произведений процентного содержания олефинов в каждом компоненте на его объемную долю (квадрат суммы, средневзвешенной по объему);

$A_1$  – сумма произведений квадрата содержания ароматических углеводородов в каждом компоненте на его объемную долю;

$A_2$  – квадрат суммы произведений процентного содержания ароматических углеводородов в каждом компоненте на его объемную долю (квадрат суммы, средневзвешенной по объему).

Расчет октанового числа смешения можно рассчитать по формуле в виде суммы двух составляющих: аддитивной и неаддитивной:

$$OЧ_{см} = \sum_{i=1}^n (OЧ_i \cdot C_i) + B, \quad (2)$$

где:  $OЧ_{см}$  – октановое число смешения компонентов бензина;

$B$  – суммарное отклонение октановых чисел от аддитивности;

$C_i$  – концентрация  $i$  – го компонента, отн. ед.;

$ОЧ_i$  – октановое число  $i$  – го компонента;

$n$  – количество компонентов.

Суммарное отклонение определяется по формуле:

$$B = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n B_i \cdot B_j \cdot C_i \cdot C_j, \quad (3)$$

где:  $B_i \cdot B_j$  – величины, характеризующие склонность  $i$ -й молекулы к межмолекулярному взаимодействию с  $j$ -й молекулой.

### **Многомерная оптимизация:**

Задача, требующая нахождения оптимального значения функции  $m$  переменных  $f(X)=f(x_1, x_2, \dots, x_m)$ , называется задачей многомерной оптимизации. Так же, как и для случая одномерной оптимизации, задача нахождения максимума функции сводится к задаче нахождения минимума путем замены целевой функции  $f$  на  $-f$ .

Методы многомерной оптимизации:

1. Поиск локального экстремума:

- прямые методы (координатного спуска, спирального координатного спуска, поиска по симплексу);
- градиентные методы (алгоритм наискорейшего спуска).

2. Поиск глобального экстремума:

- метод отсекающих плоскостей;
- интервальный метод ветвей и границ;
- генетический алгоритм.

## Генетический алгоритм:

Генетический алгоритм – это эвристический алгоритм поиска, используемый для решения задач оптимизации и моделирования путём случайного подбора, комбинирования и вариации искоемых параметров с использованием механизмов, аналогичных естественному отбору в природе.

Является разновидностью эволюционных вычислений, с помощью которых решаются оптимизационные задачи с использованием методов естественной эволюции, таких как: *отбор, мутация и скрещивание*.

Отличительной особенностью генетического алгоритма является акцент на использовании оператора «скрещивания», который производит операцию рекомбинации решений-кандидатов, роль которой аналогична роли скрещивания в живой природе.

## Экспериментальная часть:

1. В среде PascalABC.NET, используя неаддитивную методику, разработанную в ТПУ, составили программу расчета для определения октанового числа смешения 6-ти потоков различного состава (Приложение А), используя исходные данные (Таблица 1). Для этого были выбраны различные соотношения долей потоков. Результаты расчета представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Результаты расчета октановых чисел при смешении исходных потоков

Соотношение потоков	Октановое число
0,3; 0,1; 0,2; 0,1; 0,2; 0,1	75,51

2. Рассчитали соотношение 6-ти потоков различного состава, при котором октановое число достигается 92 и 95 пунктов по исследовательскому методу (Приложение Б). Результаты расчета приведены в таблицах 3, 4.

Таблица 3 – Результаты расчета долей смешения потоков с ОЧ = 92

ОЧ смешения	Доля 1-го потока	Доля 2-го потока	Доля 3-го потока	Доля 4-го потока	Доля 5-го потока	Доля 6-го потока	Σ
89,85	0,999	1,926E-10	8,869E-09	7,492E-10	3,203E-10	4,389E-10	1,00
89,84	0,999	1,721E-06	7,923E-05	6,693E-06	2,861E-06	3,922E-06	1,00
89,84	0,999	6,385E-05	0,000352	5,978E-05	9,112E-05	5,439E-06	1,00
89,82	0,998	6,204E-05	0,001123	0,000191	0,000291	1,736E-05	1,00
89,70	0,991	0,000159	0,007318	0,000618	0,000264	0,000362	1,00
89,70	0,991	0,000159	0,007318	0,000618	0,000264	0,000362	1,00
89,23	0,969	0,003053	0,014715	0,003062	0,002344	0,008294	1,00
87,52	0,865	0,002727	0,091529	0,015549	0,023703	0,001415	1,00
87,23	0,842	0,002655	0,122267	0,008424	0,023076	0,001377	1,00
85,97	0,792	0,002498	0,115011	0,007924	0,029934	0,052418	1,00

Таблица 4 – Результаты расчета долей смешения потоков с ОЧ = 95

ОЧ смешения	Доля 1-го потока	Доля 2-го потока	Доля 3-го потока	Доля 4-го потока	Доля 5-го потока	Доля 6-го потока	Σ
89,85	0,999	3,379E-07	2,732E-07	2,371E-08	2,871E-08	1,692E-08	1,00
89,85	0,999	3,047E-05	1,251E-06	1,279E-06	1,549E-06	9,133E-07	1,00
89,83	0,999	0,000208	0,000168	0,000172	0,000219	0,000129	1,00
89,76	0,996	0,000921	0,000744	0,000762	0,000966	0,000569	1,00
88,74	0,950	0,029146	0,007844	0,005459	0,004694	0,002766	1,00
87,86	0,907	0,022075	0,017846	0,018258	0,022108	0,013028	1,00
86,48	0,842	0,037317	0,030169	0,030865	0,037374	0,022024	1,00
85,80	0,812	0,055294	0,033195	0,033961	0,041123	0,024233	1,00
84,41	0,714	0,045669	0,139818	0,043391	0,036135	0,021294	1,00
80,81	0,613	0,138480	0,021941	0,022447	0,027181	0,177398	1,00

3. В результате, получив 10 вариантов долей смешения потоков 1 – 6, выбрали наиболее подходящее решение, основываясь на значении ОЧ (Таблица 5).

Таблица 5 – Результаты расчета долей смешения потоков

Потоки	Доля	
1	0,999	0,999
2	1,926E-10	3,379E-07
3	8,869E-09	2,732E-07
4	7,492E-10	2,371E-08
5	3,203E-10	2,871E-08
6	4,389E-10	1,692E-08
Σ	1,00	1,00
ОЧ	92	95



4. Провели дополнительное исследование изменения значения ОЧ в зависимости от введения ограничения по содержанию бензола. Так согласно ГОСТ 32513-2013 Топлива моторные. Бензин неэтилированный, содержание бензола должно составлять не более 0,01 об. %. Результаты расчета приведены в таблицах 6, 7.

Таблица 6 – Результаты расчета при ограничении на бензол при ОЧ = 92

Октановое число	Содержание бензола
89,84	0,104
89,83	0,104
89,79	0,104
89,76	0,103
89,59	0,102
88,61	0,097
87,83	0,093
87,48	0,091
82,21	0,069
78,95	0,045

Таблица 7 – Результаты расчета при ограничении на бензол при ОЧ = 95

Октановое число	Содержание бензола
89,85	0,104
89,84	0,104
89,84	0,104
89,83	0,104
89,71	0,103
89,65	0,103
89,65	0,103
88,52	0,097
87,44	0,091
83,95	0,078

### **Вывод:**

В ходе выполнения лабораторной работы были изучены основы расчета ОЧ смешения, рассмотрены методики расчета ОЧ, а также методы многомерной оптимизации. С помощью PascalABC.NET была разработана программа расчета ОЧ при смешении 6-ти потоков различного состава на основе неаддитивной методики (Приложение А) и программа, на основе которой были рассчитаны составы 6-ти потоков, при смешении которых ОЧ

потока достигнет значения 92 и 95 пунктов по исследовательскому методу (Приложение Б).

Полученные результаты расчетов представлены в таблицах 2-7.

Согласно результатам, представленным в таблице 2, при изменении соотношения долей потоков изменяется ОЧ целевого продукта.

Использование генетического алгоритма (метод многомерной оптимизации) позволило получить наилучшие значения долей потоков (Таблица 5), при которых достигается максимально приближенное значение ОЧ к заданному с минимальным значением функции приспособленности.

Согласно исследованию при введении ограничения значения ОЧ ухудшились, к тому же количество бензола в смеси превысило допустимое. Это связано с начальным высоким содержанием бензола в исходном сырье. Поскольку велико содержание бензола в сырье, то, соответственно, и в целевом продукте его содержание будет довольно большим. Результаты расчета, представленные в таблице 6 и 7 подтверждают это.

## Приложение А

### Программа расчета в среде программирования PascalABC

```
uses UConst, UGeneticAlgorithm;

function read_txt(filename: string): array of array of real;
begin
    foreachvar(i, line) in ReadLines(filename).Enumerate do
    begin
        Setlength(result, i);
        result[i-1] := line.ToReals;
    end;
end;

function mixing(ratio: array of real;
flows: array of array of real): array of real;
begin
    result := ArrFill(flows.Length, 0.0);
    foreachvari in flows.Indices do
    foreachvarj in ratio.Indices do
        result[i] := result[i] + ratio[j] * flows[i][j];
    end;
end;

function calculate_octane_number(fractions: array of real;
                                Bi: array of real := UConst.Bi;
                                RON: array of real := UConst.RON): real;
begin
    result := 0.0;
    var B := ArrFill(Bi.Length, 0.0);

    foreachvari in Bi.Indices do
    forvarj := i+1 to Bi.High do
        B[i] := Bi[i] * B[j] * fractions[i] * fractions[j];

    foreachvari in fractions.Indices do
        result := result + fractions[i] * RON[i];
    result := result + B.Sum;
    end;

begin
    var data := read_txt('data.txt');
    var fractions := mixing(|0.3, 0.1, 0.2, 0.1, 0.2, 0.1|, data);
    var ron := calculate_octane_number(fractions);
    print('$Октановое число смешения = {ron:f}');
end.
```

## Приложение Б

### Программа расчета в среде программирования PascalABC

```
uses UConst, UGeneticAlgorithm;

function read_txt(filename: string): array of array of real;
begin
    foreachvar(i, line) in ReadLines(filename).Enumerate do
    begin
        Setlength(result, i);
        result[i-1] := line.ToReals;
    end;
end;

function mixing(ratio: array of real;
flows: array of array of real): array of real;
begin
    result := ArrFill(flows.Length, 0.0);
    foreachvar i in flows.Indices do
    foreachvar j in ratio.Indices do
        result[i] := result[i] + ratio[j] * flows[i][j];
    end;
end;

function calculate_octane_number(fractions: array of real;
                                Bi: array of real := UConst.Bi;
                                RON: array of real := UConst.RON): real;
begin
    result := 0.0;
    var B := ArrFill(Bi.Length, 0.0);

    foreachvar i in Bi.Indices do
    forvar j := i+1 to Bi.High do
        B[i] := Bi[i] * B[j] * fractions[i] * fractions[j];

    foreachvar i in fractions.Indices do
        result := result + fractions[i] * RON[i];
    result := result + B.Sum;
    end;

function normalize(x: array of real): array of real;
begin
    var s := x.Sum;
    result := ArrFill(x.Length, 0.0);

    foreachvar i in x.Indices do
        result[i] := x[i] / s;
    end;

function objective_func(ratio, actual_values: array of real): real;
begin
    var data := read_txt('data.txt');
    var fractions := mixing(normalize(ratio), data);
```

```

varron:= calculate_octane_number(fractions);
varbenzene:= fractions [57];

result:= (actual_values[0]-ron)** 2 + (actual_values[1] - benzene);
end;

```

## Окончание приложения Б

```

begin
vardata := read_txt('data.txt');
//   varfractions := mixing(|0.1, 0.1, 0.4, 0.1, 0.2, 0.1|,data);
//   varron :=calculate_octane_number(fractions);
//   print('$Октановое число смещения = {ron:f}');
varbounds:=||1e-5,0.99|, |1e-5,0.99|, |1e-5,0.99|,
            |1e-5,0.99|, |1e-5,0.99|, |1e-5,0.99||;
varres:= genetic_algorithm(bounds, objective_func,|92.0,0.01|);
varnorm_ratio: array of array of real;
SetLength(norm_ratio, res.Length);
foreachvariin res.Indicesdo
norm_ratio [i]:= normalize(res[i][:^1]);

foreachvariin norm_ratio.Indicesdo
Println (calculate_octane_number(mixing(norm_ratio[i], data)),
mixing(norm_ratio[i],data) [57]);

end.

```