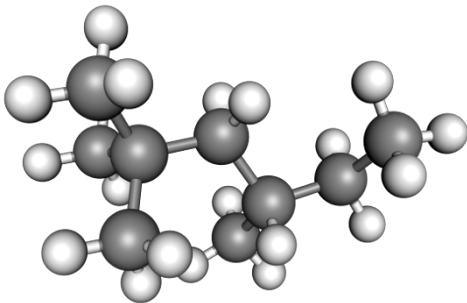


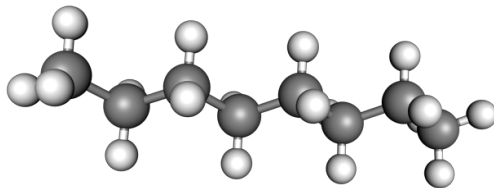
## Октановое число

**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.

### Эталонные углеводороды

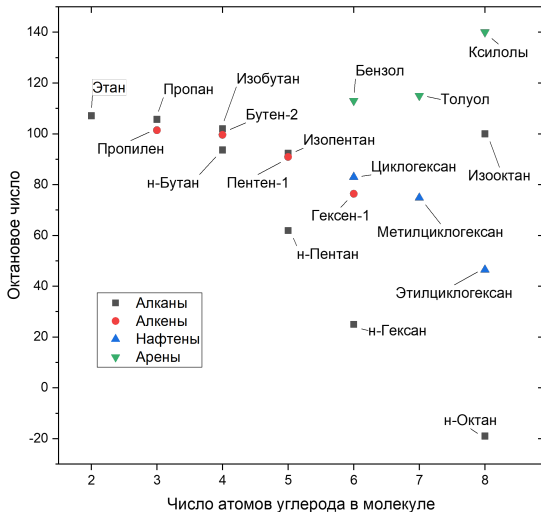


2,2,4-триметилпентан (изооктан)



н-гептан

# 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 смешения

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

$R$  – 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

Изучение данных по смешению компонентов бензина показало, что нелинейность поведения компонентов бензина при смешении можно описать следующим образом:

$$P_{\text{расч}} = P_{\text{об}} + I_{(1,2)} \cdot X_1 \cdot X_2 + I_{(1,3)} \cdot X_1 \cdot X_3 + \dots + I_{(8,9)} \cdot X_8 \cdot X_9 \quad (2)$$

$P_{\text{расч}}$  — Расчетное свойство;

$P_{\text{об}}$  — Средневзвешенное (по объему) свойство;

$I_{(1,2)} \dots I_{(8,9)}$  — Коэффициенты взаимодействия компонентов;

$X_1 \dots X_9$  — Объемная доля каждого компонента.

Коэффициент взаимодействия для бинарной смеси можно рассчитать по следующей формуле:

$$I_{(A,B)} = \frac{P_{\text{факт}} - P_{\text{об}}}{V_A \cdot V_B} \quad (3)$$

$I_{(A,B)}$  — Коэффициент взаимодействия компонентов  $A$  и  $B$ ;  
 $P_{\text{факт}}$  — Свойство смеси, определенное в лаборатории;  
 $P_{\text{об}}$  — Средневзвешенное (по объему) свойство смеси;  
 $V_A, V_B$  — Объемная доля компонентов  $A$  и  $B$ .

\*Паркаш Суриндер Справочник по переработке нефти / Перевод с английского. – М: ООО Премиум Инжиниринг, 2012. – 776 с., ил. – (Промышленный инжиниринг)

# Расчет октанового числа смешения

Октановое число смешения можно представить в виде суммы двух составляющих: аддитивной и неаддитивной:

$$\text{ОЧ}_{\text{см}} = \sum_{i=1}^n (\text{ОЧ}_i \cdot C_i) + B \quad (4)$$

## Метод SLSQP

- Метод SLSQP использует последовательное квадратичное программирование для минимизации функций нескольких переменных с любой комбинацией границ, а также ограничений на равенство и неравенство.
- Метод включает в себя подпрограмму оптимизации SLSQP, первоначально реализованную Дитером Крафтом (Dieter Kraft).
- Обратите внимание, что оболочка обрабатывает бесконечные значения в границах, преобразуя их в большие значения с плавающей точкой.

Метод SLSQP работает с задачей минимизации с ограничениями в следующей форме:

$$\begin{aligned}
 & \min_x f(x) \\
 & \text{при } c_j(x) = 0, \quad j \in \mathcal{E} \\
 & \quad c_j(x) \geq 0, \quad j \in \mathcal{I} \\
 & \quad lb_i \leq x_i \leq ub_i, \quad i = 1, \dots, N.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Здесь  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{I}$  – множества индексов, содержащих ограничения по равенству и неравенству.

## Метод SLSQP

`scipy.optimize.minimize(method='SLSQP')`

### Основные параметры:

`fun: callable`

Объектная функция для минимизации.

`fun(x, *args) -> float`

где `x` – одномерный массив размера `(n, )`; `args` – кортеж параметров, необходимых для вызова функции.

`x0: ndarray, shape (n,)`

Начальное приближение. Массив элементов размера `(n, )`, где `n` – количество независимых переменных.

`args: tuple, optional`

Дополнительные аргументы, передаваемые объектной функции и ее производным (функциям `fun`, `jac` и `hess`)

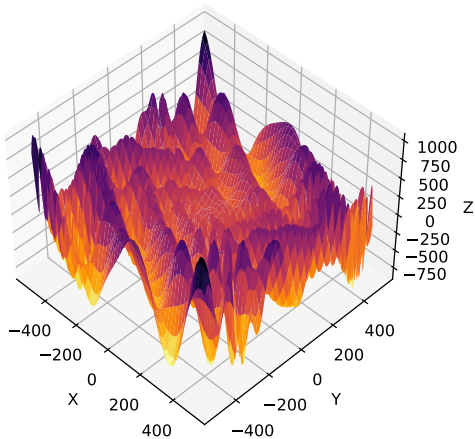
`bounds: sequence, optional`

Предельные значения для переменных.

`constraints: {Constraint, dict} or List of {Constraint, dict}, optional`

Описание функций, накладывающих ограничения на решение.

# Пример



Рассмотрим следующую функцию:

$$z = (-y + 47) \cdot \sin \sqrt{\left| \frac{x}{2} + y + 47 \right|} - x \cdot \sin \sqrt{\left| \frac{x}{2} - y - 47 \right|}$$

Найдем минимум данной функции при значениях  $x \in [400, 500]$ ;  $y \in [400, 500]$  и при условии, что  $x = y$ .



## Пример

```
1 import numpy as np
2 import scipy.optimize as opt
3
4
5 def func(x):
6     return (
7         (-x[1] + 47) * np.sin(np.sqrt(abs(x[0] / 2 + x[1] + 47)))
8         - x[0] * np.sin(np.sqrt(abs(x[0] - x[1] - 47)))
9     )
10
11
12 x = np.arange(-512, 513)
13 y = np.arange(-512, 513)
14 xgrid, ygrid = np.meshgrid(x, y)
15 xy = np.stack([xgrid, ygrid])
16
17 bounds = (400, 500), (400, 500)
18 constr = {
19     'type': 'eq',
20     'fun': lambda x: x[0] - x[1]
21 }
```

## Пример

```
22 |
23 |
24 | res = opt.minimize(
25 |     eggholder,
26 |     x0=(450, 450),
27 |     bounds=bounds,
28 |     constraints=constr,
29 |     method='SLSQP'
30 | )
31 | print(res)
32 |
    fun: -641.3734202306166
    jac: array([ 27.49101257, -27.49103546])
message: 'Optimization terminated successfully'
   nfev: 12
    nit: 4
   njev: 4
status: 0
success: True
      x: array([448.93802864, 448.93802864])
```