**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 |
| **Расчет октанового числа** |
| Вариант |
| **№ …** |
| По дисциплине |
| **Системный анализ процессов химической технологии** |

Студент

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Группа** | **ФИО** | **Подпись** | **Дата** |
|  |  |  |  |

Руководитель

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Должность** | **ФИО** | **Ученая степень, звание** | **Подпись** | **Дата** |
| Доцент | Чузлов В.А. | к.т.н. |  |  |

Томск – 2023 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



Продолжение таблицы 1



**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 испытуемому 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:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

где,

октановое число смеси по исследовательскому методу;

октановое число каждого компонента по исследовательскому методу;

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

сумма произведений R0 и J каждого компонента, умноженных на его объемную долю (произведения, средневзвешенные по объему);

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

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

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

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

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:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

где:октановое число смешения компонентов бензина;

суммарное отклонение октановых чисел от аддитивности;

концентрация 𝑖 – го компонента, отн. ед.;

октановое число 𝑖 – го компонента;

количество компонентов.

Суммарное отклонение определяется по формуле:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

где: величины ,характеризующие склонность i-й молекулы к межмолекулярному взаимодействию с j-й молекулой.

**Многомерная оптимизация:**

Задача, требующая нахождения оптимального значения функции m переменных f(Х)=f(x1, x2, …, xm), 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 – это эвристический алгоритм поиска, используемый для решения задач оптимизации и моделирования путём случайного подбора, комбинирования и вариации искомых 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 |
| 0,1;0,1; 0,1; 0,1; 0,2; 0,4 | 87,369 |

Октановое число потока 1 = 68.984

Октановое число потока 2 = 89.995

Октановое число потока 3 = 74.250

Октановое число потока 4 = 62.914

Октановое число потока 5 = 90.207

Октановое число потока 6 = 99.278

Октановое число смеси = 87.369

**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)

**Приложение А**

**uses** UConst;

**function** read\_txt(filename: string): **array of array of** real;

**begin**

**foreach var** (i, line) **in** ReadLines(filename).Numerate(0) **do**

**begin**

SetLength(result, i + 1);

result[i] := line.ToReals

**end**;

**end**;

**function** mix\_flows(ratio: **array of** real;

fractions: **array of array of** real): **array of** real;

**begin**

result := ArrFill(fractions.Length, 0.0);

**foreach var** i **in** fractions.Indices **do**

**foreach var** j **in** ratio.Indices **do**

result[i] += ratio[j] \* fractions[i][j]

**end**;

**function** get\_octane\_number(c: **array of** real;

octane\_numbers: **array of** real;

bi: **array of** real): real;

**begin**

result := 0.0;

**foreach var** i **in** c.Indices **do**

result += octane\_numbers[i] \* c[i];

**foreach var** i **in** c.Indices **do**

**for var** j := i + 1 **to** c.High **do**

result += bi[i] \* bi[j] \* c[i] \* c[j]

**end**;

**begin**

**var** data := read\_txt('data.txt');

**var** ratio := Arr(0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 0.2, 0.4);

**var** fractions := mix\_flows(ratio, data);

**var** ron := get\_octane\_number(fractions, UConst.RON, UConst.Bi);

**var** flow := ArrFill(fractions.Length, 0.0);

**foreach var** j **in** ratio.Indices **do**

**begin**

**foreach var** i **in** data.Indices **do**

flow[i] := data[i][j];

println($'Октанове число потока {j + 1} = {get\_octane\_number(flow, UConst.RON, UConst.Bi):f3}')

**end**;

println;

println($'Октановое число смеси = {ron:f3}')

**end**.