



Рис. 1. Состав продуктов термоллиза

Снижение выхода твёрдых продуктов в присутствии каталитической добавки объясняется тем, что образовавшийся активный водород подавляет реакции рекомбинации высокомолекулярных радикалов, которые могут образоваться при деструкции асфальтенов.

Таким образом, показано влияние сверхкритической водной среды на конверсию асфальтенов. При термоллизе в среде сверхкритической воды происходит снижение выхода твердых

продуктов с 67,0 до 53,1 % и увеличение выхода масел с 4,0 до 12,0 % мас. в сравнении с термоллизом без воды. Введение каталитической добавки позволяет увеличить выход масел до 38,6 % и сократить выход твёрдых продуктов до 41,7 % мас., соответственно.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии нефти СО РАН, финансируемого Министерством науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

1. Timko M. T., Ghoniem A. F., Green W. H. // *The Journal of Supercritical Fluids*, 2015. – V. 96. – P. 114–123.
2. Caniaz R. O. et al. // *The Journal of Supercritical Fluids*, 2019. – V. 152. – P. 104569.
3. Fedyaeva O. N., Shatrova A. V., Vostrikov A. A. // *The Journal of Supercritical Fluids*, 2014. – V. 95. – P. 437–443.

ФОРМИРОВАНИЕ СУРРОГАТНЫХ КОМПОЗИЦИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ МОТОРНЫХ ТОПЛИВ

Д. М. Нелюбова, Н. Д. Радченко

Научный руководитель – к.т.н., доцент ОХИ ИШПР М. А. Самборская

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, darianeliubova@yandex.ru

Исследование физико-химических и эксплуатационных свойств компонентов топлива и топливных смесей – трудоемкий и затратный процесс, требующий много времени. Надежные методы прогнозирования данных характеристик могут позволить сократить время и экономические затраты на создание топливных композиций на основе как традиционных, так и альтернативных источников [1]. Разработка методов

определения октанового и цетанового числа – основных характеристик топлива, является актуальной задачей. Одним из таких методов является моделирование топлива с использованием простых смесей (суррогатов), которые имитируют свойства реальных моторных топлив в определенных условиях [2].

Цель работы – разработка суррогатных композиций, удовлетворяющих основным целевым

свойствам исследуемых образцов бензинового и дизельного топлива.

Задача сводилась к поиску решения, при котором бы определялся компонентный состав смеси в объемных долях, удовлетворяющий основным, выбранным для исследования, целевым показателям реальных топлив.

Для оптимизации состава суррогатной композиции бензина были определены шесть целевых свойств: исследовательское октановое число (RON), плотность, фракционный состав, молярная масса и отношение водорода к углероду (H/C).

В исследовании была использована следующая целевая функция для оптимизации поиска состава суррогатной смеси:

$$\sum_{i=1}^6 (P_{ic} - P_{i6})^2 \rightarrow \min,$$

где P_{ic} , P_{i6} – свойство суррогата и бензина соответственно, зависят от состава суррогата и бензина.

Задачей оптимизации является минимизация целевой функции с учетом ограничений. В качестве ограничений были выбраны равенства свойств исследуемых топлив и свойств суррогатной смеси:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n x_i &= 1 \\ \sum_{i=1}^n x_i \cdot RON_i &= RON \\ \sum_{i=1}^n V_i \cdot \rho_i &= \rho \end{aligned}$$

Список литературы

1. Knopa V., Loosb M., Pera C., Jeuland N // *A linear-by-mole blending rule for octane numbers of n-heptane/iso-octane/toluene mixtures. Fuel*, 2014. – 115: 666–673.
2. Charles J. Mueller, William J. Cannella, J. Timothy Bays, Thomas J. Bruno, Kathy DeFabio, Heather D. Dettman, Rafal M. Gieleciak, Mar-

$$\sum_{i=1}^n x_i \cdot M_i = M$$

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

В ходе проведения исследования были выполнены экспериментальные работы по определению физико-химических свойств бензиновых фракций. Определены целевые свойства для прогнозирования и разработки суррогатных смесей. Составлен алгоритм расчета и оптимизации объемного содержания компонентов в смеси суррогатов с учетом выбранных для этих целей ограничений. Исследовано влияние антидетонационных добавок (АД) на октановое число суррогатных топлив. Выполнена проверка полученных закономерностей для образцов реального топлива на примере прямогонных бензиновых фракций и бензиновых фракций вторичных процессов. Предложен подход к расчету октановых чисел моторных топлив с добавками, что позволяет проводить поиск новых компонентов, получать оптимальные рецептуры смесей на ограниченном наборе экспериментальных данных.

В настоящий момент ведутся исследования по разработке методики для формирования суррогата, отражающего фракционный состав моторных топлив. Ведутся исследования по формированию суррогата, моделирующего свойства дизельных топлив.

cia L. Huber, Chol-Bum Kweon, Steven S. McConnell, William J. Pitz, and Matthew A. Ratcliff // *Diesel Surrogate Fuels for Engine Testing and Chemical-Kinetic Modeling: Compositions and Properties. Energy Fuels*, 2016. – 30. – 1445–146.