

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Уфимский государственный нефтяной технический университет»

На правах рукописи



ЯКУПОВ МАРАТ МУСАЕВИЧ

**РЕГУЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА АВТОМОБИЛЬНЫХ
БЕНЗИНОВ С ЦЕЛЬЮ УМЕНЬШЕНИЯ ВЫБРОСОВ ДИОКСИДА
УГЛЕРОДА В АТМОСФЕРУ**

2.6.12. – Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Научный руководитель
доктор технических наук, профессор
Рахимов Марат Наврузович

Уфа –2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ	5
ВВЕДЕНИЕ.....	6
ГЛАВА 1. РЕГУЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА БЕНЗИНОВ – ОДИН ИЗ ВОЗМОЖНЫХ СПОСОБОВ НИЗКОУГЛЕРОДНОГО РАЗВИТИЯ АВТОТРАНСПОРТА	14
1.1 Снижение выбросов CO ₂ – глобальная проблема современности.....	14
1.2 Оценка удельных выбросов диоксида углерода от химического состава моторных топлив	18
1.3 Современные высокооктановые компоненты бензинов	24
1.4 Компаундирование высокооктановых компонентов автомобильных бензинов	30
1.5 Анализ современных компьютерных методов оптимизации процесса компаундирования нефтепродуктов	33
1.6 Основные виды хроматографии	44
Выводы к главе 1	46
ГЛАВА 2. ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ	48
2.1 Объекты исследований	48
2.2 Методы исследований	48
2.2.1 Метод хроматографии в сочетании с масс-спектрометрией	48
2.2.2 Метод определения теплотворной способности.....	48
2.2.3 Метод определения коэффициентов выбросов углекислого газа	49
2.2.4 Расчеты основных показателей качества компонентов компаундирования и состава смесей	50

2.2.5 Исследование физико-химических показателей проб и компонентов автомобильных бензинов	52
2.3 Определение оптимального решения задачи	53
2.4 Выбор инструментов программирования для автоматизации расчетов	58
Выводы к главе 2	60
ГЛАВА 3. ИССЛЕДОВАНИЯ УДЕЛЬНЫХ ВЫБРОСОВ КОМПОНЕНТОВ ТОВАРНЫХ АВТОБЕНЗИНОВ ПО УДЕЛЬНЫМ ВЫБРОСАМ CO₂ И ИХ РАНЖИРОВАНИЕ	61
3.1 Исследования зависимостей удельных выбросов CO ₂ от плотности углеводородов и высокооктановых компонентов бензинов.....	61
3.2 Удельные выбросы высокооктановых компонентов автомобильных бензинов	67
3.3 Исследования удельных выбросов CO ₂ товарных бензинов	78
Выводы к главе 3	81
ГЛАВА 4. ТЕХНИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО РЕГУЛИРОВАНИЮ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА БЕНЗИНОВ С ЦЕЛЬЮ СНИЖЕНИЯ ВЫБРОСОВ CO₂	117
4.1 Компьютерное моделирование процесса компаундирования бензина	117
4.1.1 Предлагаемое решение по автоматизации расчетов	117
4.1.2 Взаимодействие пользователя и аналитической системы	119
4.2 Рекомендации по минимизации выбросов диоксида углерода в атмосферу от автомобильных бензинов	125
4.2.1 Сохранение нативного водорода в составе компонентов товарных бензинов	126
4.2.2 Перераспределение нативного водорода в пользу моторных топлив, в том числе и бензина.....	132

4.2.3 Введение водорода в состав товарных бензинов извне	134
4.3 Технико-экономическое обоснование некоторых технологических рекомендаций по минимизации выбросов CO ₂	137
4.3.1 Технико-экономические аспекты по максимальному вовлечению бутанов в состав товарных бензинов.....	137
4.3.2 Технико-экономические аспекты увеличения доли изомеризата в бензиновом пуле НПЗ	142
4.4 Подходы к внедрению новой марки «ЭКО-CO ₂ » для популяризации низкоуглеродного развития автотранспорта	143
Выводы к главе 4	145
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	147
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	148
ПРИЛОЖЕНИЯ	167
Приложение А Справка о внедрении	167
Приложение Б База данных основных углеводородов и оксигенатов	168
Приложение В Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода БКК MSCC (UOP) до и после его гидрооблагораживания по технологии Prime G+.....	182

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

АВТ – атмосферно-вакуумная трубчатка

ББФ – бутан-бутиленовая фракция

БД – база данных

БКК – бензин установки каталитического крекинга

ВАК – высшая аттестационная комиссия

ВСГ – водород содержащий газ

ДВС – двигатель внутреннего сгорания

ДИПЭ – диизопропиловый эфир

ДНП – давление насыщенных паров

ИВАС – информационно-вычислительная аналитическая система

ЛБ КК – легкий бензин установки каталитического крекинга

МТБЭ – метил-трет-бутиловый эфир

НПЗ – нефтеперерабатывающий завод

ОЧИМ – октановое число исследовательским методом

ОЧММ – октановое число моторным методом

ПА – пропан автомобильный

ПБА – пропан-бутан автомобильный

ППФ – пропан пропиленовая фракция

ТАМЭ – трет-амилметиловый эфир

ТБ КК ГО – тяжелый бензин установки каталитического крекинга после гидроочистки

УЗК – установка замедленного коксования

ФХС – физико-химическое свойство

ХМС – хромато-масс-спектрометрия

ЭТБЭ – этил-трет-бутиловый эфир

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования

Антропогенный выброс парниковых газов считают одним из основных факторов глобального изменения климата на планете. Значимость данной проблемы ежедневно растет и имеет свое отражение в «зелёной повестке» всемирной экономики и политической стратегии развитых стран. Транспортный сектор, в частности автомобильный, вносит основной вклад в выбросы CO_2 - на его долю выпадает около 20 % от всех выбросов.

Следует отметить, что основные изменения, которые произошли в последние десятилетия в направлении повышения качества моторных топлив, в основном коснулись их экологических характеристик. Прежде всего, это снижение содержания в бензинах серы, ароматических углеводородов и отдельно бензола, содержания олефинов и введение в их состав оксигенатов. Основная причина снижения ароматических углеводородов, в том числе и бензола, связана с тем, что они являются причиной образования в выхлопных газах бенз-а-пирена и других соединений, характеризующихся высокой канцерогенной активностью. Также обращают на себя внимание отрицательные последствия присутствия в бензинах ароматических углеводородов, которые откладываются на стенках поршневой пары двигателя внутреннего сгорания (ДВС). Нагар в камерах сгорания вызывает значительное ухудшение мощностных и экономических характеристик двигателя, повышает требования к детонационным свойствам топлив, усиливает калильное зажигание топлива в камере сгорания. На сегодняшний день в литературе отсутствуют сведения о количественной оценке удельных выбросов CO_2 , источниками которых являются компоненты автомобильных бензинов или отдельные индивидуальные соединения в их составе.

По принятой на сегодня методике при оценке удельных выбросов CO_2 от автотранспорта учитывается лишь разновидности бензинов и дизельных топлив и их марки, которые отличаются лишь по плотности. Состав выхлопных газов в первую очередь, определяется не плотностью, а химическим составом топлива.

Следовательно, решение проблемы требует детального исследования, прежде всего от состава топлива.

В настоящее время в международной практике предложены инновационные проекты по снижению выбросов CO_2 в атмосферу от автомобильного транспорта, такие как переход на электромобили, использование водородного топлива и другие альтернативы, которые требуют многомиллиардных инвестиций.

Таким образом, наряду с мерами, позволяющими кардинально решать проблему перехода к низкоуглеродной модели развития транспорта, исследование удельных выбросов CO_2 в зависимости от химического состава топлива является весьма актуальной задачей. Данный метод можно рассматривать, как один из наиболее доступных вариантов, не требующий преобразований в конструкции двигателя внутреннего сгорания или внедрения новой инфраструктуры. Применение современных методов исследований и компьютерного программирования для регулирования состава бензина могут позволить в оперативном режиме выполнять задачи оптимизации компаундирования компонентов бензина с учетом соответствия их действующим стандартам качества и минимальных выбросов CO_2 в атмосферу.

Степень разработанности темы исследования

С точки зрения влияния на экологию, состав автомобильных бензинов оставался под пристальным вниманием исследователей в конце прошлого и в начале нынешнего столетия. Прежде всего, это относится к содержанию в нем серы, ароматических углеводородов и отдельно бензола, олефинов и др. В этой области широко известны исследования Емельянова В.Е., Танатарова М.А., Ахметова А.Ф., Гуреева А.А. и другие, а также многих зарубежных ученых.

Однако, в перечисленных исследованиях уделено мало внимания вопросам зависимостей удельных выбросов CO_2 в составе выхлопных газов автомобилей от состава топлива, не оценены и возможности регулирования выбросов в атмосферу.

В нашей стране под руководством опытных учёных сформировался ряд научных школ в области экологии, к которым относятся: АО «ВНИИ НП», РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, ФГБОУ ВО «УГНТУ» и др.

Вопросами моделирования и регулирования качества моторных топлив по известному их химическому составу занимались в ряде научно-исследовательских институтов, как у нас в стране, так и за рубежом. В частности, Иванчиной Э.Д., Кравцовым А.В., Бавыкиным В.М., Рыжовой А.Н., Смышляевой Ю.А., Доломатовым М.Ю. и Колединым О.С. и др. предложены различные варианты оценки физико-химических и эксплуатационных свойств бензинов на основе хроматографического анализа их состава с учетом неаддитивности ряда свойств. Исследованиям моделирования в части расчетов планирования свойств нефти и топлив посвящены труды Хаймович И.Н., Лисицына Н.В., Капустина В.М., Чернышевой Е.А., Сизиковой А.П., Кувыкина В.И., Daly Sh.R., Voigt M., Cooper J.B., Flecher Ph.E., Welch S.A., Singh A. и др.

Соответствие паспорту научной специальности

Тема и содержание диссертационной работы соответствуют паспорту специальности 2.6.12. - «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ», пункты:

п. 12 «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов на основе цифрового прогнозирования, математических методов, системного анализа и информационных технологий применительно к производствам»;

п. 13 «Экологические аспекты переработки топлив. Разработка технических и технологических средств и способов защиты окружающей среды от вредных выбросов производств по переработке топлив, товарных нефтепродуктов и высокоэнергетических веществ».

Объект исследования:

Бензиновые фракции процессов каталитического риформинга и крекинга, изомеризации, сернокислотного алкилирования, а также прямогонные бензиновые фракции углеводородного сырья и оксигенаты, входящие в состав товарных автомобильных бензинов.

Цель исследования

Разработать технические и технологические способы снижения выбросов диоксида углерода путем системного анализа и регулирования химического состава автомобильных бензинов.

Для достижения поставленной цели решались следующие **задачи**:

1. Оценить актуальные методы снижения выбросов CO_2 от автотранспорта и выполнить анализ существующих систем оптимизации процессов компаундирования товарных бензинов для планирования рецептур с низкими выбросами диоксида углерода.

2. Провести количественную оценку основных высокооктановых компонентов товарных бензинов по удельным выбросам CO_2 .

3. Разработать комплекс мер по регулированию химического состава бензина с целью снижения удельных выбросов CO_2 .

4. Предложить основные технические и технологические решения снижения выбросов диоксида углерода в атмосферу от автомобильных бензинов.

Научная новизна

1. Впервые на базе комплексного анализа удельных выбросов CO_2 от химического состава компонентов автомобильных бензинов показано, что для бензинов, содержащих оксигенаты, отсутствует корреляционная зависимость между удельными выбросами CO_2 и плотностью. Предложен новый метод оценки выбросов CO_2 от автомобильного транспорта на бензиновых двигателях, основанный на идентификации химического состава бензинов.

2. Впервые дана количественная оценка и произведено ранжирование основных компонентов автомобильных бензинов по удельным выбросам CO_2 . Показано, что отличие по массовым коэффициентам удельных выбросов диоксида углерода между высокооктановыми компонентами автомобильных бензинов может составить до 143 %, а по коэффициентам удельных выбросов на единицу получаемой энергии до 22 %.

Выявлено, что с утяжелением сырья процессов изомеризации и риформинга разница в удельных выбросах CO_2 между компонентами падает.

3. Впервые показаны зависимости удельных выбросов CO_2 автобензинов от содержания в них отдельных компонентов. При введении в состав товарного бензина АИ-95 максимально допустимого содержания МТБЭ массовые удельные выбросы CO_2 снижаются на 3,4, а на единицу получаемой энергии всего на 0,7 %. При аналогичных значениях вводимого в состав бензинов изомеризата массовые удельные выбросы CO_2 снижаются на 1,3 %, а на единицу получаемой энергии на 1,0 %. В случае толуола, наоборот, аналогичные показатели повышаются на 0,8 и 1,7 % соответственно.

4. Показано, что введение в бензиновый пул дополнительно 1 т бутанов позволяет снизить выбросы CO_2 от среднестатистического показателя бензина АИ-92 на 5 % масс. на тонну топлива и на 10 % в расчете на единицу поучаемой энергии. Аналогичные показатели для изомеризата составляют 4 и 8 %. Введение в бензиновый пул дополнительно 1 т толуола приводит к повышению аналогичных показателей на 5 и 10 % соответственно.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая значимость диссертационной работы заключается в научном обосновании использования химического состава автомобильных бензинов для оценки удельных выбросов диоксида углерода в атмосферу при их применении.

Предложен метод оценки и снижения выбросов диоксида углерода в атмосферу от потребления автомобильных бензинов. Приведенный метод может послужить основой для разработки подобных методик по снижению выбросов CO_2 при использовании других видов топлива.

Практическая значимость работы заключается в следующем:

1. Предложенный метод оценки по снижению выбросов диоксида углерода в атмосферу может быть использован профильными предприятиями при расчете углеродного следа продукции.

2. Предложенные технические и технологические рекомендации по снижению выбросов диоксида углерода в атмосферу от автомобильных бензинов могут быть реализованы на ряде НПЗ как одни из наиболее доступных вариантов низкоуглеродной модели развития выпускаемой продукции.

3. Разработанная база данных основных углеводородов и оксигенатов, входящих в состав товарных бензинов, и методика оценки выбросов CO_2 , образующихся в результате сжигания бензина, может быть использована предприятиями переработки нефти для оценки и снижения «углеродного» следа вырабатываемой ими продукции.

4. Разработанная программа для ЭВМ «Информационно-вычислительная аналитическая система оптимизации состава бензина с учетом минимальных выбросов CO_2 » (ИВАС) позволяет в оперативном режиме регулировать процесс компаундирования бензинов для получения товарного бензина, отвечающего необходимым требованиям.

5. Предложенная методика оценки выбросов CO_2 в атмосферу от автомобильных бензинов используется в учебном процессе при изучении дисциплин магистрами направления 18.04.01 Химическая технология, направленность «Химическая технология топлива и газа» в ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет».

Методология и методы исследования

Методология исследований заключается в изучении химического состава бензинов, их теплофизических и эксплуатационных свойств, а также удельных выбросов углекислого газа в зависимости от их химического состава. Регулирование состава бензинов с учетом минимизации выбросов CO_2 осуществляется при условии их соответствия современным стандартам. Индивидуальный состав углеводородов исследовали хроматографически.

Создана база данных оксигенатов и углеводородов, присутствующих в составе товарных бензинов, и информационно-аналитическая система, целью которой является минимизация выбросов CO_2 при сжигании товарных автомобильных бензинов. Разработка программы выполнялась в среде программирования Python с применением методов и алгоритмов нелинейного программирования. Для решения задач с нелинейными зависимостями применялся метод множителей Лагранжа.

Положения, выносимые на защиту:

1. Новый метод оценки и снижения выбросов диоксида углерода в атмосферу от потребления автомобильных бензинов, основанный на анализе их химического состава.
2. Результаты количественной оценки и ранжирование высокооктановых компонентов товарных бензинов по удельным выбросам CO_2 .
3. Технические и технологические рекомендации по минимизации выбросов диоксида углерода в атмосферу от автомобильных бензинов, основанные на: сохранении нативного водорода в бензиновых фракциях, перераспределении нативного водорода в пользу бензинов, введении водорода извне. На примерах известных технологических решений показана степень их эффективности в части сокращения выбросов CO_2 в атмосферу.
4. ИВАС регулирования рецептуры автомобильных бензинов требуемого качества для минимизации выбросов CO_2 , включающая «Базу данных основных углеводородов и оксигенатов, входящих в состав автомобильных бензинов для оценки удельных выбросов CO_2 », защищенные свидетельствами о государственной регистрации базы данных, и программы для ЭВМ (№ 2025620533 РФ, №2025615693 РФ).

Степень достоверности и апробация результатов

Для обеспечения достоверности полученных результатов использовались стандартизованные методы оценки качества автомобильных бензинов и современные программные продукты. Все экспериментальные исследования проводились на оборудовании, которое прошло государственную поверку.

Результаты диссертационного исследования докладывались и обсуждались на: VIII Международной научно-практической конференции «Булатовские чтения», 31 марта 2024 года, г. Краснодар; Международной конференции «Динамические процессы в каталитических структурах», 28 октября – 01 ноября 2024 года, г. Тюмень; Международной конференции «Актуальные проблемы технических, естественных и гуманитарных наук», 14 ноября 2024 года, г. Уфа; Международной научно-практической конференции молодых ученых

«Актуальные проблемы науки и техники - 2025», 07 - 11 апреля 2025 года, г. Уфа; Всероссийской научной конференции аспирантов и обучающихся «Охрана окружающей среды и рациональное использование природных ресурсов», 16-17 апреля 2025 года, г. Донецк; VII Международной научно-технической конференции «Защита окружающей среды от экотоксикантов: международный опыт и российская практика» 24 апреля 2025 года, г. Уфа.

Публикации

По материалам представленной диссертационной работы опубликовано 14 работ: 5 статей опубликованы в ведущих рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК, в том числе 1 статья в издании, индексируемом в международной базе WoS; 7 работ в материалах научно-практических конференций; 1 свидетельство о государственной регистрации базы данных; 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Структура и объем работы

Диссертация представлена на 187 страницах и состоит из введения, 4 глав, выводов, списка литературы из 146 наименований, 3 приложений, включая 39 рисунков, 30 формул, 31 таблицу.

ГЛАВА 1. РЕГУЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА БЕНЗИНОВ – ОДИН ИЗ ВОЗМОЖНЫХ СПОСОБОВ НИЗКОУГЛЕРОДНОГО РАЗВИТИЯ АВТОТРАНСПОРТА

1.1 Снижение выбросов CO₂ – глобальная проблема современности

В настоящее время проблема изменения климата требует немедленного внимания и если не предпринять действий для сдерживания или хотя бы ослабления темпов глобального потепления, то это чревато возникновением многочисленных неблагоприятных последствий для экологии, хозяйственной деятельности и общества. Глобальное потепление, прежде всего, связано с выбросами углекислого газа, выделяющегося при сжигании углеводородного сырья - нефти, природного газа и угля. Уровень обеспокоенности этой проблемой растет среди ученых, политиков, чиновников, журналистов и общественности. Справиться с изменением климата возможно только через коллективные усилия, путем сокращения выбросов парниковых газов, сосредотачиваясь, прежде всего, на снижении выбросов диоксида углерода. Стратегии устойчивого развития, обмен опытом и ресурсами между странами — вот ключ к решению проблемы, и только сотрудничество всех стран и профильных организаций может привести к положительным результатам [23,40,89,105].

В 2015 году ООН было принято Парижское соглашение, целью которого явилось ограничение глобального потепления ниже 2°C по сравнению с уровнем доиндустриальной эпохи [40,85]. Присоединение в 2019 году к данному соглашению Российской Федерации (РФ) послужило основой для научных исследований и практических действий в области экологии окружающей среды [79,97].

В 2020 году был утвержден Указ Президента РФ № 666 «О сокращении выбросов парниковых газов», предполагающий сокращение выбросов газов до 70% к 2030 году относительно уровня 1990 года [80].

Из рисунка 1.1, где показана статистика удельных выбросов CO₂ в мире в 1990-2022гг., видно, что основными источниками выбросов являются:

электричество и тепло, транспорт, строительство, здания, производство, землепользование, лесное хозяйство и прочие. Транспорт занимает второе место в общем балансе, и его доля в 2022 году составила 20 % от всех выбросов (8 млрд. т). Это обстоятельство является одним из доказательств необходимости разработки мер по снижению выбросов CO₂ от транспорта [22].

Выбросы CO₂, млрд. т.

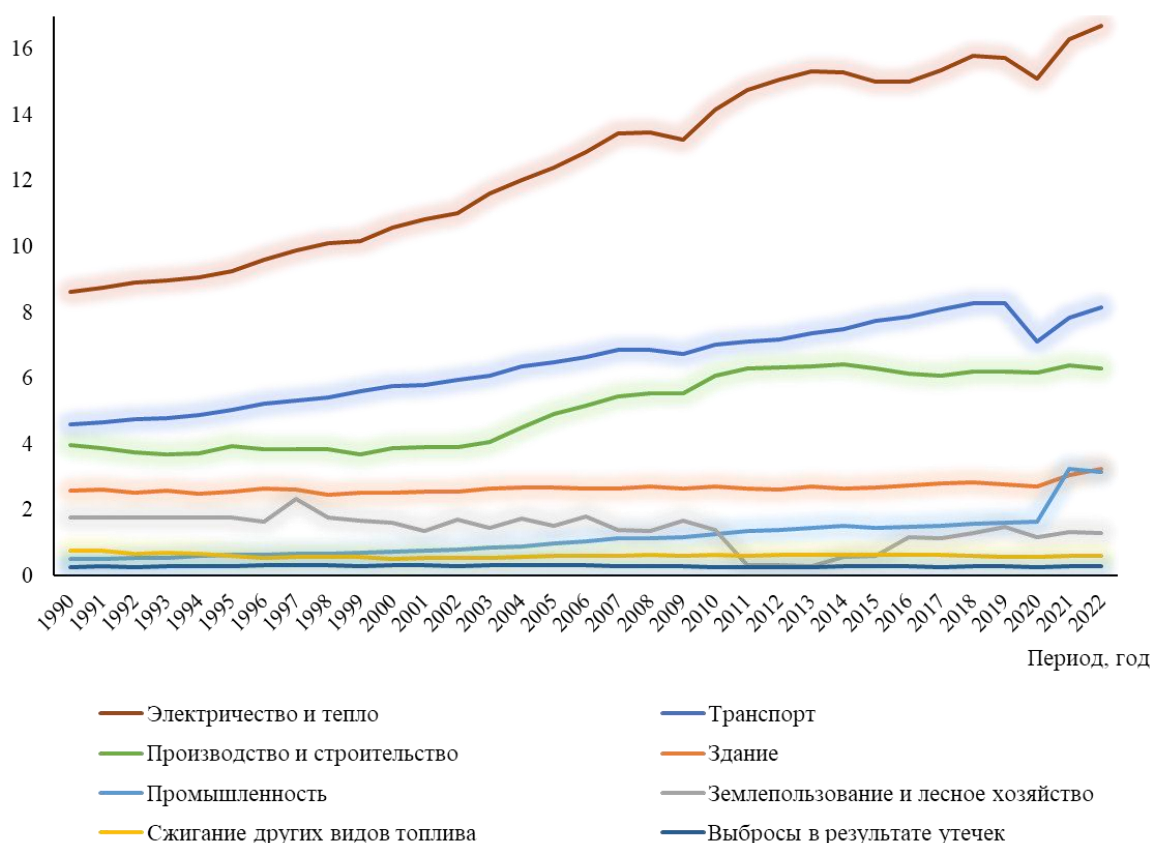


Рисунок 1.1 – Статистика выбросов CO₂ в мире с 1990 г. по 2022 г.

На рисунке 1.2 представлены данные национального доклада, где показана структура выбросов в РФ по видам транспорта. Среди всего транспорта наибольший выброс углекислого газа исходит от автомобильного транспорта - за 2020 год выбросы составили 183,38 млн. т. Автотранспорт является крупнейшим эмитентом выбросов среди всех видов транспорта, следовательно для максимального положительного результата в первую очередь именно в нем

требуется разработать эффективные механизмы регулирования выбросов CO₂ (Рисунок 1.2) [1,99,114,141].

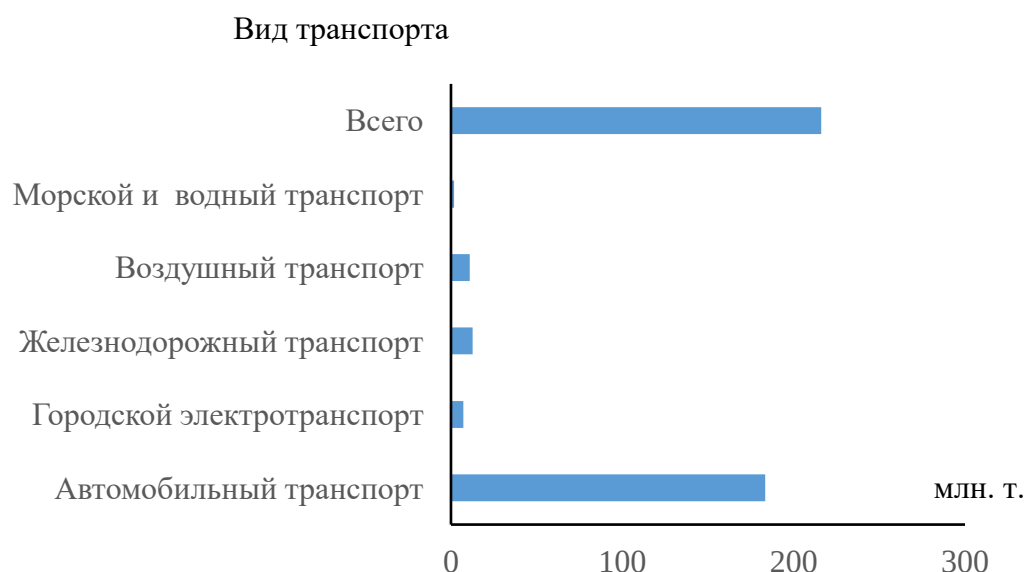


Рисунок 1.2 - Распределение массы эмиссий выбросов по типам транспортных средств

Определенным толчком в развитии низкоуглеродной стратегии стало утверждение нормативно-правовых актов: ППРФ № 3052-р от 29.10.2021 «Стратегия социально-экономического развития РФ с низким уровнем выбросов парниковых газов до 2050 года», ППРФ № 3363-р от 27.11.2021 «Транспортная стратегия РФ до 2030 года с прогнозом на период до 2035 года», Указ Президента №812 от 26.10.2023 РФ «Об утверждении Климатической доктрины Российской Федерации» [106, 112, 81].

Каждая страна имеет свой индивидуальный уровень развития в отдельных направлениях (численность населения, количество транспорта, уровень развития технологий, инфраструктура и другие), поэтому большинство стран при переходе на низкоуглеродную экономику сталкиваются со специфическими проблемами в различных сферах экономики [140].

В настоящее время развитие электротранспорта как метода урегулирования проблем с экологией, обсуждается и испытывается многими государствами, тем

самым центры управления страной пытаются различными мерами поддерживать данную инициативу. При этом главными препятствиями «экологичного» транспорта являются денежные (дороговизна электротранспорта) и инфраструктурные (отсутствие требуемого количества электростанций и переработка использованных батарей) факторы. Фундаментальным драйвером прироста глобального рынка электромобилей эксперты считают государственные субсидии на природосберегающие типы транспортных средств, принятые большинством стран Евросоюза, в США и КНР. Отечественный рынок электротранспорта сегодня фактически не поддерживается государством, поэтому развивается медленными темпами [133,116].

Водородную энергетику относят к перспективному направлению в части будущей чистой энергии. При горении водород выделяет только воду, что делает его экологически благоприятным энергетическим ресурсом. Однако существуют недостатки – производство, доставка, хранение водорода, которые связаны с технологическими, инфраструктурными и финансовыми трудностями. В зависимости от способа производства создаются различные виды водорода, условно их разделяют по цветам (серый, голубой, зеленый, розовый, бирюзовый, желтый, красный, пурпурный, бурый, черный, белый и др.). Самые распространенные, такие как серый водород – вырабатывают из природного газа посредством паровой конверсии (достоинства: дешевизна производства; недостатки: экологическая нецелесообразность); голубой водород – делают из газа, но с помощью технологий улавливания CO_2 с дальнейшей его транспортировкой и захоронением (достоинства: сниженные выбросы CO_2 ; недостатки: требуется новый комплекс инфраструктуры и дополнительные расходы); зеленый водород – готовят с использованием электролиза воды, применяя для этого электроэнергию, выработанную на возобновляемых источниках энергии (достоинства: самый экологичный метод – без выбросов CO_2 ; недостатки: самый дорогой метод). Развитие водородной энергетики является одним из ключевых приоритетов социально-экономического развития во многих государствах, и эта сфера активно поддерживается на государственном уровне [134,20,131].

Проведя анализ мирового перехода декарбонизации транспорта, мероприятия по снижению выбросов CO_2 можно разбить на следующие направления:

- 1) Повышение энергоэффективности транспортных технологий, которые работают на традиционном топливе (бензин, дизельное топливо, газ);
- 2) Использование альтернативных видов топлива и энергии (водородное топливо, биотопливо, электроэнергия и др.);
- 3) Снижение нерационального перемещения грузов и пассажиров при управлении транспортом [1,101,21,120,135,136,140].

Почти все приведенные выше методы нуждаются в инвестировании и больших финансовых вложениях, по данной причине множество компаний не имеет возможности осуществить переход на низкоуглеродную стратегию в кратчайшие сроки [60].

С появлением первых автомобилей и до сегодняшнего дня в России традиционными видами топлива для автотранспорта считаются нефтепродукты, такие как бензин (~ 42 %), дизельное топливо (~ 50 %), природный газ (~ 6 %) и другие (~ 2 %) [11].

Во многих странах прогнозируется увеличение автомобильного парка к 2030 году более чем в 2 раза [126]. В РФ при исполнении оптимистических сценариев демографического плана к 2040 году прогнозируется увеличение количества транспортных средств на 28 %, что составит 66,2 млн. автомобилей. Данный фактор будет активно способствовать росту спроса на жидкие углеводороды в среднесрочном прогнозе, соответственно транспорт останется одним из основных эмитентов выбросов CO_2 [71].

1.2 Оценка удельных выбросов диоксида углерода от химического состава моторных топлив

Оценка выбросов углекислого газа в атмосферу в настоящее время осуществляется согласно Приказу Минприроды России от 27.05.2022 № 371 «Об

утверждении методик количественного определения объемов выбросов парниковых газов и поглощений парниковых газов» [82].

По формуле (1.1) выполняется расчет выбросов CO_2 от стационарного сжигания моторного топлива:

$$E_{\text{CO}_2,y} = \sum_{j=1}^n (FC_{j,y} \cdot EF_{\text{CO}_2,j,y} \cdot OF_{j,y}), \quad (1.1)$$

где $E_{\text{CO}_2,y}$ - выбросы диоксида углерода от стационарного сжигания топлива за период y , т CO_2 ;

$FC_{j,y}$ - расход топлива j за период y , тыс. м^3 , т, т.у.т. или ТДж;

$EF_{\text{CO}_2,j,y}$ - коэффициент выбросов CO_2 от сжигания топлива j за период y , т CO_2 /ед.;

$OF_{j,y}$ - коэффициент окисления топлива j , доля;

j - вид топлива, используемого для сжигания;

n - количество видов топлива, используемых за период y .

Для определения выбросов углекислого газа при сгорании топлива обычно применяют коэффициент пересчета (EF), который обозначает, сколько CO_2 поступает в атмосферу при сжигании 1 тонны того или иного топлива. В таблице 1.1 указаны коэффициенты пересчета выбросов для топлив. Для автобензинов, например, коэффициенты составляют 3,030 т CO_2 /т, а для дизельных топлив – 3,150 т CO_2 /т [82].

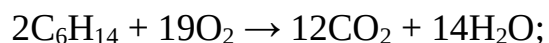
Как следует из таблицы 1.1, коэффициенты выбросов всех марок автомобильных бензинов и дизельных топлив одинаковы, и при расчетах вводятся лишь поправки по плотности. Например, для самых распространенных марок автомобильных бензинов АИ-92 и АИ-95 разница в плотности составляет 0,015 кг/л. На наш взгляд, данный метод не дает достоверную картину об удельных эмиссиях углекислого газа при использовании топлив, а более корректные

результаты можно получить на основании детального анализа химического состава топлив и их теплотворной способности.

Таблица 1.1 - Коэффициенты выбросов CO₂ при сжигании топлива, а также плотность разных топлив

Вид топлива	Коэффициент выбросов (EF)			Плотность
	т CO ₂ /т (тыс. м ³)	кг/ТДж	кг/т.у.т.	(P), кг/л
Бензин АИ-92	3,026	69 300	2 031	0,735
Бензин АИ-93	3,026	69 300	2 031	0,745
Бензин АИ-95	3,026	69 300	2 031	0,750
Бензин АИ-98	3,026	69 300	2 031	0,765
Дизельное топливо летнее	3,149	74 100	2 172	0,860
Дизельное топливо зимнее	3,149	74 100	2 172	0,840
Дизельное топливо арктическое	3,149	74 100	2 172	0,830
Сжиженный нефтяной газ (СНГ) (пропан)	2,903	63 100	1 849	0,528 (при t = 0 °C)
Сжиженный нефтяной газ СНГ (изобутан)	2,903	63 100	1 849	0,582 (при t = 0 °C)
Сжиженный нефтяной газ СНГ (н-бутан)	2,903	63 100	1 849	0,601 (при t = 0 °C)
Компримированный природный газ (КПГ)	1,840	54 400	1 594	0,668 (при t = 0 °C)
Сжиженный природный газ (СПГ)	2,710	54 400	1 594	0,424 (при t = 0 °C)
Авиационный керосин	3,160	71 900	2 100	0,800
Авиационный бензин	3,100	69 300	2 050	0,800
Топливо для реактивных двигателей	3,100	71 900	2 110	0,800

Выбросы углекислого газа можно рассчитать из стехиометрических соотношений по известному химическому составу топлива. Например, для гексана коэффициент выброса CO₂ составляет:



$$m(C_6H_{14}) = 1 \text{ т} = 1\,000\,000 \text{ г};$$

$$M(CO_2) = 12 + 16 \cdot 2 = 44 \text{ г/моль};$$

$$M(C_6H_{14}) = 12 \cdot 6 + 1 \cdot 14 = 86 \text{ г/моль};$$

$$n(C_6H_{14}) = \frac{m(C_6H_{14})}{M(C_6H_{14})} = \frac{1\,000\,000}{86} = 11\,627,91 \text{ моль};$$

$$n(CO_2) = n(C_6H_{14}) \cdot 6 = 11\,627,91 \cdot 6 = 69\,767,44 \text{ моль};$$

$$m(CO_2) = M(CO_2) \cdot n(CO_2) = 44 \cdot 69\,767,44 = 3\,069\,767,44 \text{ г } CO_2/\text{г} = 3,070 \text{ т } CO_2/\text{т}.$$

Подобный расчет можно применить для любого индивидуального вещества, тем самым при известном химическом составе можно определить коэффициент выбросов CO_2 для топлива [58,95].

Вычисление эмиссий углекислого газа при окислении топлива делится на следующие этапы: оценка расхода топлива в массе, поправка на несгоревший углерод, определение отдачи тепла при окислении топлива, пересчет выбросов углерода путем произведения 44/12.

По формуле (1.2) вычисляется расчет выбросов CO_2 при типовом методе для индивидуального вида топлива

$$E = M \cdot K_1 \cdot \text{ТНЗ} \cdot K_2 \cdot \frac{44}{12}, \quad (1.2)$$

где E - эмиссия выброса диоксида углерода в весовых единицах за год, т/год;

M - фактический расход топлива, т/год;

K_1 - коэффициент, показывающий полное сгорание углерода в топливе (уголь - 0,980; нефть и нефтепродукты 0,990; газ - 0,995);

ТНЗ - теплотворное нетто-значение или теплотворная способность, (Дж/т);

K_2 - коэффициент выбросов углерода (уголь 25,7 т/Дж; нефть - 20 т/Дж; автомобильный бензин- 18,9 т/Дж; газ горючий природный - 14,8 т/Дж)

44/12 - коэффициент пересчета углерода в углекислый газ (молекулярные веса соответственно: углерод - 12 г/моль, $O_2 = 2 \cdot 16 = 32$ г/моль, $CO_2 = 44$ г/моль) [69,43,82].

Важнейшей энергетической характеристикой топлива является теплота сгорания (или теплотворная способность) [53].

Под термином «сгорание» применительно к автомобильным двигателям понимают реакцию взаимодействия компонентов топлива с кислородом воздуха, сопровождающуюся выделением тепла. Химическая энергия сгорания топлива при этом превращается в тепловую и далее в механическую. От хода процесса сгорания зависит мощность двигателя, его экономические показатели, надежность и долговечность.

Теплота сгорания вещества (Q) – это тепловой эффект реакции окисления кислородом его составных частей с образованием высших оксидов ($\text{CO}_{2(\text{г})}$, $\text{H}_2\text{O}_{(\text{ж})}$).

Существует низшая и высшая теплота сгорания топлива. Низшая теплота сгорания высчитывается без учета тепла, выделяющегося при конденсации водяного пара. Высшая теплота сгорания топлива — объем теплоты, который образуется при полном окислении топлива, при учете теплового эффекта, возникающего в результате конденсации водяного пара во время охлаждения продуктов горения.

В ДВС температура исходящих газов превышает температуру конденсации водяного пара, поэтому при вычисления используют величину низшей теплоты сгорания.

Вычислить низшую теплоту сгорания $Q_{\text{н}}$ (МДж/кг) возможно с использованием уравнения Д.И. Менделеева, применимого к кислородосодержащим соединениям и отдельным углеводородам [39,90].

Вычисляется низшая теплота сгорания $Q_{\text{н}}$ (МДж/кг) согласно определенной формуле (1.3)

$$Q_{\text{н}} = 339,4 \cdot \omega(\text{C}) + 1257 \cdot \omega(\text{H}) - 108,9 \cdot [(\omega(\text{O}) + \omega(\text{N})) - \omega(\text{S})] - 25,1 \cdot [9 \cdot \omega(\text{H}) + \omega(\text{W})], \quad (1.3)$$

где $\omega(\text{C})$, $\omega(\text{H})$, $\omega(\text{S})$, $\omega(\text{N})$ – массовые доли элементов в веществе, %;
 $\omega(\text{W})$ – содержание влаги в веществе, %.

Теплотворная способность углеводородов, в первую очередь, зависит от их элементного состава. Согласно основным положениям термодинамики, соединения, имеющие одинаковую брутто формулу, но разные структуры строения, имеют разные энтальпии образования и должны показывать различную теплотворную способность. Однако, во многих источниках данный показатель для изомеров представлен одинаковыми значениями, что явно противоречит вышеуказанным принципам. Авторы [50], в результате исследования влияния различных факторов на теплотворную способность углеводородов, пришли к выводу, что решающим фактором является элементный состав углеводорода, т.е. отношение числа атомов водорода к числу атомов углерода (m/n). Для технических расчетов теплотворной способности авторы предлагают использовать формулу:

$$\Delta_c H^{B,H}(C_n H_m) = [m_c \cdot \Delta_c H^{B,H}(C) + m_H \cdot \Delta_c H^{B,H}(H)]. \quad (1.4)$$

Погрешность расчетов не превышает 1 %, что свидетельствует об эффективности прогнозирования массовой теплоты сгорания $\Delta_c H^{B,H}(C_n H_m)$.

Анализ литературных источников показывает, что теплотворная способность товарных моторных топлив сильно разнится по разным источникам. На наш взгляд, основной причиной этого является различный компонентный состав товарных топлив.

В различных литературных источниках, например, теплотворная способность для бензинов варьируется от 41 до 46 МДж/кг (отличаются на 12,2 % и более). Также имеются большие расхождения теплотворной способности и для других топлив. В таблице 1.2 представлены значения теплотворной способности некоторых индивидуальных соединений и видов топлива согласно литературным данным [94].

Таблица 1.2 - Теплотворная способность некоторых углеводородов и видов топлив

Вид топлива	Теплотворная способность	
	МДж/кг	МДж/м ³
Водород	119,91; 119,95; 120	10,78; 10,79; 10,8
Природный газ	48,94-50,15	34,10-39,00
Этилен	47,16; 47,17	59,07; 59,08; 60,10
Пропан	46,33; 46,34; 46,35	90,909; 91,27; 91,3; 92,91; 93,18; 93,37
Сжиженный газ	45,20	-
н-Гексан	45,10; 45,11	173,17
Бензол	40,14; 40,37; 40,58	140; 155,67
Бензин	43,3-44,0; 41-44; 43,8; 43,75	-
Керосин	43,0; 42,96	-
Дизельное топливо	43,12; 42,0-43,0; 42,4; 42,62	-
Мазут (котельное топливо)	40,0-41,3; 39,06-41,68; 39,78-40,61	-

Как было отмечено ранее, по различным литературным данным теплотворная способность топлив значительно разнится. Одной из причин этого является различный компонентный состав топлив, например, химический состав бензинов зависит от того, на основе каких бензиновых фракций процессов переработки нефти они были приготовлены [94].

1.3 Современные высокооктановые компоненты бензинов

Бензин представляет собой смесь углеводородов, а не моновещество, состоящее из одинаковых молекул. Существует множество различных типов

бензиновых фракций, отличающихся химическим составом. В зависимости от типа бензина, его физико-химические свойства могут отличаться, что расширяет область его применения. Верный выбор топлива оказывает большое влияние на долговечность двигателя [83].

Бензин – легковоспламеняющаяся бесцветная или несколько желтоватая (при отсутствии определенных красителей) жидкость, имеющая плотность от 725 до 750 кг/м³. Бензин имеет завышенную летучесть, температура его кипения находится в интервале от 30 до 200 °С, температура застывания не должна превышать минус 60 °С. При сгорании бензинов образуется вода и СО₂. При концентрациях паров в воздухе от 70 до 120 г/м³ образуется взрывоопасная смесь [107].

После присоединения РФ к общеевропейской природосберегающей концепции появилась резкая потребность в формировании индустриального изготовления автобензинов, отвечающих общеевропейским условиям (EN-228) [121]. В таблице 1.3 представлены критерии Евросоюза к автомобильным бензинам [37].

Таблица 1.3 - Критерии Евросоюза к автомобильным бензинам

Параметр	Евро-2	Евро-3	Евро-4	Евро-5
Количество бензола, %, не выше	5,0	1,0		
Количество серы, не выше	0,05 %	150 ppm	50 ppm	10 ppm
Количество ароматических углеводородов, %, не выше	-	42,0	35,0	35,0
Количество олефиновых углеводородов, %, не выше	-	18	14	14
Количество кислорода, %, не выше	-	2,7		
Фракционный состав %, не ниже:				
- до 100 °С	-	46		
- до 150 °С	-	75		
ДНП, кПа, не выше	-	60		
Присутствие моющих добавок	-	Обязательно		

В настоящее время экологическая обстановка определила вектор развития переработки нефти и главные требования к показателям качества бензина:

антидетонационные свойства (октановое число), испаряемость (ДНП), химическая стабильность, ограничение содержания серы, бензола, ароматических и олефиновых углеводородов [51,96].

Бензин для автомобилей готовится путем компаундирования компонентов с высоким содержанием октанового числа разных методов переработки нефтяного сырья, таких как каталитический крекинг, каталитический риформинг, изомеризация, алкилирование изобутана олефинами, прямогонный бензин, бутан-бутиленовая фракция, бензин термических процессов, оксигенаты и другие. Углеводородный состав товарных бензинов представлен ароматическими, нафтеновыми, парафиновыми, олефиновыми углеводородами и кислородсодержащими соединениями [53].

Показатели структуры бензинового фонда России, Европы и США различны, но основным компонентом автомобильных бензинов для большинства стран на сегодняшний день является риформат - целевой продукт процесса каталитического риформинга. В таблице 1.4 показана структура суммарного бензинового фонда [9].

Таблица 1.4 - Структура суммарного бензинового фонда

Бензин	ОЧИМ	Ед. изм.	Россия	Европа	США
Риформат	90-100	%	54,0	48,2	33,0
Каталитического крекинга	90-94	%	20,0	27,0	34,5
Изомеризат	88-92	%	1,5	5,0	7,0
Алкилат	90-94	%	0,3	5,0	11,2
Оксигенаты	до 117 и до 135	%	0,4	2,0	3,6
Прямогонный, гидрокрекинга и гидроочистки	до 70, 84-86	%	13,2	7,3	3,1
Термических процессов	72	%	4,9	0,5	0,6
Бутан-бутиленовая фракция	95-100	%	5,7	5,0	7,0
Сумма	-	%	100,0	100,0	100,0

Для производства высокооктанового компонента бензина в процессе риформинга применяют прямогонную бензиновую фракцию от 85 до 180° С. Суть

процесса – преобразование низкооктановых алкановых углеводородов в высокооктановые ареновые углеводороды при высоких температурах и давлениях на платино-рениевом алюмооксидном катализаторе. Риформат характеризуется малым содержанием серы, отсутствием олефинов, что обеспечивает его высокую химическую стабильность. Тем не менее, высокое содержание в нем ароматических соединений с природосберегающей стороны является ограничивающим фактором. Также недостаткам этого бензина относится неравномерное распределение устойчивости к детонации по фракциям [42].

Следующим значительным ресурсом высокооктановой составляющей товарного бензина выступает процесс каталитического крекинга вакуумного газойля. БКК содержит большую долю ароматических углеводородов (от 30 % до 40 %) и олефинов (от 25 % до 35 %), диеновые углеводороды в его составе практически отсутствуют. БКК характеризуется относительно высокой массовой долей серы, ОЧИМ составляет 90–93 пункта. Он также характеризуется более равномерным распределением детонационной стойкости по фракциям [15,77].

Главное назначение процесса изомеризации – повышение октанового числа посредством превращения парафиновых углеводородов в их изомеры, имеющие более высокое октановое число. Ключевой особенностью изомеризатов является наименьшая разница между октановым числом по исследовательскому и моторному методам. Высокооктановый изомеризат является одним из наиболее подходящих компонентов товарного автобензина, так как он повышает октановое число легкой части автобензина и снижает содержание ароматических соединений, включая бензол. В процессе изомеризации применяют бифункциональные катализаторы, содержащие платину на оксиде алюминия, (промотированном фтором или хлором), цеолитах, внесенных в матрицу оксида алюминия, а также сульфатированном оксиде циркония, модифицированного алюминием [51,56,68,130].

Бензины алкилирования почти полностью состоят из изопарафинов, соответствуют самым строгим современным требованиям, предъявляемым к новому поколению автобензинов - являются идеальным и ценнейшим

компонентом реформулированных экологически чистых автобензинов. Алкилат имеет значительно большее октановое число (96 по исследовательскому методу), не имеет в составе ароматических и олефиновых углеводородов, не токсичен, обладает малым давлением насыщенных паров, поэтому меньше испаряется при хранении и поставке, не имеет в составе серы, кислорода и азота. Для получения алкилата применяются катализаторы - 96–100 % серная или фтористоводородная кислота [9].

Оксигенаты – высокооктановые кислородсодержащие соединения, используемые для регулирования октанового числа товарных бензинов. Среди них наибольшее распространение этанол, МТБЭ, МТАЭ и другие. Допустимое содержание оксигенатов в товарном бензине -2,7 % масс., что составляет от 3 % до 15 % в пересчете на объем бензина. Введение в состав бензинов оксигенатов способствует снижению выбросов оксида углерода в смеси отработанных газов. Ввиду этого, особое внимание акцентируют на применение в составе товарных бензинов оксигенатов, которые считаются экологически менее вредными компонентами автобензинов [108,13,46,75].

Прямогонный бензин представляет собой базу низкооктановых бензинов, которые в настоящее время используются в ограниченном объеме в качестве компонента в составе товарных топлив. Октановое число прямогонных бензинов по моторному методу редко превышает 60 единиц. В составе бензина доминируют главным образом парафиновые и нафтенновые углеводороды, отличающиеся слабой устойчивостью к детонации, причем этот параметр уменьшается по мере повышения их температуры кипения [5].

Бензин, прошедший гидроочистку, практически лишён сернистых примесей и обладает минимальным количеством олефиновых углеводородов. В составной части товарного бензина используется легкая часть бензина гидроочистки фракции НК 85°C, которая содержит не более 85 % изопарафиновых соединений с октановым числом по моторному методу равным 85-86 единиц [5].

Гидрокрекинг - каталитический процесс, целевым назначением которого является получение средних дистиллятов, а также жирных газов $C_3 - C_4$ –сырья для

нефтехимии. В ходе процесса тяжелые нефтяные фракции крекируются в более лёгкие и ценные продукты под давлением водорода. Выход легкого бензина может составить до 17,5 % и до 33,3 % масс. тяжелого (температура выкипания 85°C - 115°C), когда процесс настроен на максимальный выход бензина. В легком бензине в основном содержатся изопарафины с октановым числом равным 85 единиц (моторный и исследовательский метод). Тяжелый бензин состоит из изопарафинов, но его октановое число значительно ниже (60 единиц). В бензине гидрокрекинга отсутствуют непредельные углеводороды, он считается химически стабильным и его октановое число повышают в процессе каталитического риформинга [63].

В бензинах термокрекинга и коксования обычно содержится не более 60 % олефиновых соединений, чаще всего они обладают большей детонационной стойкостью по сравнению с прямогонным бензином, но по этому параметру значительно уступают БКК. Данные бензины помимо олефинов, содержат ещё ароматические и парафиновые углеводороды, также в достаточно больших количествах в них содержатся и соединения серы. Бензины данных процессов вовлекаются в производство товарных бензинов только после их гидроочистки и, как правило, повышения октанового числа [63].

Продукты олигомеризации бутан-бутиленовой фракции (ББФ) также могут вовлекаться в состав автобензина. Часто в качестве катализатора процесса олигомеризации используют цеолит, реакция проходит при температуре от 285 °C до 375 °C и при давлении от 0,4 МПа до 3 МПа. При этом на выходе получается компонент товарного бензина с октановым числом по исследовательскому методу равным 92 единицам и практически полностью состоящий из олефинов. К недостаткам процесса олигомеризации ББФ также относится быстрая скорость дезактивации катализатора [124,87].

Отдельные индивидуальные компоненты бензина, учитывая обеспечение качества товарного продукта, могут обладать рядом отрицательных свойств. По этой причине на НПЗ реализован ряд процессов, целевым назначением которых является облагораживание и повышение качества бензинов. Соотношение данных процессов регулируется требованиями рынка и обосновывается результатами

технико-экономического расчета и бизнес-планирования. В таблице 1.5 показаны положительные и отрицательные качества основных компонентов бензина [42].

Таблица 1.5 – Положительные и отрицательные качества основных компонентов бензина

Компонент бензина	Положительное качество	Отрицательное качество
Каталитический риформинг	Высокое октановое число, стабильный, мало серы, доступность сырья.	Большое содержание ароматических углеводородов, плохой коэффициент распределения октанового числа.
Каталитический крекинг	Доступность сырья, высокое ОЧИМ.	Низкое ОЧММ, много серы, химически не стабильный.
Алкилирование	Высокое октановое число, стабильный, не содержит ароматики и бензола, мало серы.	Высокая себестоимость, ограниченная доступность сырья.
Изомеризация	Высокое октановое число, стабильный, не содержит ароматики и бензола, мало серы.	Ограниченная доступность сырья.

1.4 Компаундирование высокооктановых компонентов автомобильных бензинов

Выпускаемый товар, произведенный на НПЗ, можно формально разделить на товар, выработанный на отдельной установке и товар, приготовленный путем компаундирования аналогичных продуктов разных установок (процессов). Товарные бензины получают компаундированием высокооктановых компонентов различных технологических установок. Данные компоненты имеют отличные друг друга характеристики: химический состав, октановое число, плотность, давление насыщенных паров, содержание ароматических углеводородов и прочее, а также имеют определенную себестоимость. На НПЗ компаундирование бензина

представляет собой важный, заключительный этап полной технологической цепи процесса, его подготовка и проведение обуславливают качество товарной продукции и соответствие требованиям стандартов [145,137].

Существуют два основных метода компаундирования:

- Циркуляционный метод. Компоненты бензина различных процессов поступают в изолированные резервуары, проводится анализ их качества, затем компоненты переправляются в смесительную емкость с помощью насосов. В последнем топливо многократно перекачивается по пути «емкость-насос-емкость» до получения желаемого равномерного состава (Рисунок 1.3) [52].

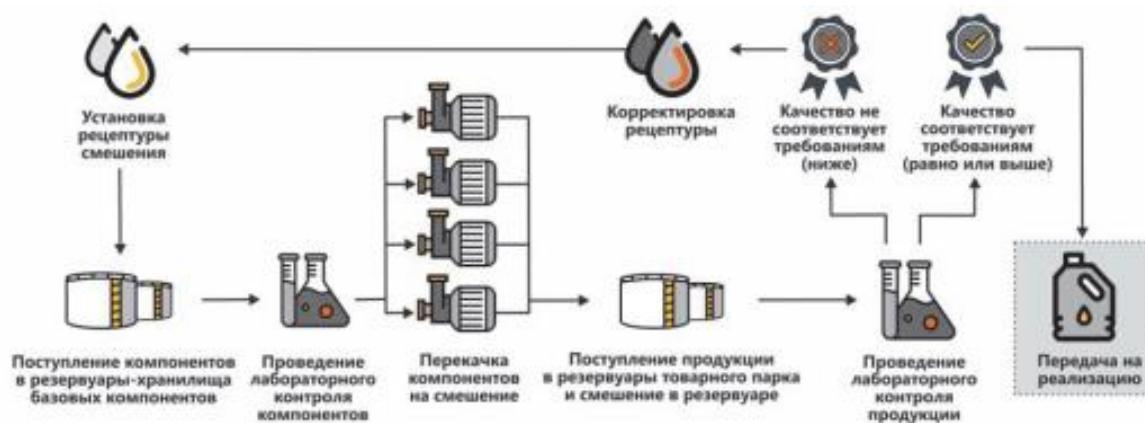


Рисунок 1.3 – Схема циркуляционного метода компаундирования

- Метод поточного смешения. Приготовление товарного бензина осуществляется в непрерывном режиме с дальнейшим скапливанием продукции в резервуаре. Имеется автоматическая станция смешения, которая позволяет синхронно смешивать компоненты бензинов благодаря запрограммированным счетчикам автоподачи. Существует возможность непрерывно наблюдать за изменением характеристик товарных бензинов с использованием поточных анализаторов качества, кроме этого, в процессе смешения есть возможность изменить рецептуру состава. В настоящий момент данный метод становится более практичным и множество научных работ посвящены превосходству его применения и разработке методик увеличения рентабельности предприятий благодаря повышению точности процедуры компаундирования [25]. Стоит

отметить, что поточные анализаторы представляют собой дорогостоящие и сложные приборы и нуждаются в периодическом высококвалифицированном техническом осмотре. На рисунке 1.4 изображена схема поточного метода компаундирования [59].



Рисунок 1.4 – Схема поточного метода компаундирования

На территории РФ на НПЗ циркуляционный метод смешения является основным, поскольку большинство НПЗ было построено много десятилетий назад, когда метод поточного смешения еще не был распространен. Модифицировать метод компаундирования бензинов на заводе станет возможным при условии замены технической платформы и организационного процесса в целом [66].

При использовании морально устарелого оборудования на НПЗ с циркуляционным смешением сотрудник цеха тратит массу времени на ручной труд (включение перекачки, проверка параметров наполнения резервуаров, перемещение и прочее). Конечное состояние товарного бензина сотрудник определяет после выполнения проверочной пробы, а после принимает решение о возможности завершения процедуры компаундирования. В таком случае обычно функциональная работа автоматизирована по минимуму. Чаще всего отсутствует программное обеспечение и механизмы управления, которые позволяют повысить эффективность производственного процесса цеха компаундирования и проверки качества товарного бензина [26].

Компаундирование очень трудная для оптимизации процедура по следующим причинам:

- присутствие многочисленного количества различных компонентов;
- отклонение от аддитивности некоторых свойств компонентов бензинов;
- сложность разработки математических методов, соответствующих процессу в массивном диапазоне изменения характеристик компонентов;
- периодическое изменение химического состава нефтяного сырья и смешиваемых компонентов [55].

В области планирования наиболее эффективные решения по производству продукции и управлению процессом компаундирования бензинов выполняются с использованием разработок различных компаний, таких как Aspen Tech, ABB, Honeywell, Emerson, Yokogawa, ООО «МЦЭ-Инжиниринг», ООО «Центр Цифровых Технологий». Таким образом, задача увеличения энергоэффективности и оптимизации процесса компаундирования, а также регулирования состава и качества получаемого товарного продукта на НПЗ является особенно актуальной, как со стороны повышения качества товарного бензина, так и с общеэкономической стороны [59,144,146].

1.5 Анализ современных компьютерных методов оптимизации процесса компаундирования нефтепродуктов

На сегодняшний день при смешении нефтепродуктов без компьютерных систем оптимизации невозможно получить высококачественный бензин. Существуют специальные программные пакеты, которые вполне допустимо разделить на 2 основных класса:

- программы для решения производственных задач оптимизации компаундирования топлив в автономном режиме (офлайн-режим);
- программы для создания текущих рецептур смешения, которые ведут расчёт в системе онлайн оптимизации. На рынке предлагаются специализированные программы для смешения компонентов бензина и того и другого класса [4].

Aspen PIMS – один из наиболее часто встречающихся программных продуктов, который предназначен для оптимизации планирования в нефтепереработки. Данная программа рассчитывает оптимальный план производства завода в зависимости от рынка продаж и рентабельности товарной продукции предприятия. Программное обеспечение Aspen PIMS своим присутствием на НПЗ охватывает долю свыше 80 % всего рынка на территории РФ и свыше 60 % рынка по всему миру [61,65]. Области применения Aspen PIMS: производственное планирование, стратегический прогноз, оптимизация технологических процессов, оценка сырья, оптимизация смешения продуктов, принятие решений по капитальным вложениям. Программа основана на математической модели, которая представляет собой совокупность линейных ограничений (уравнений, неравенств), и построена на системе уравнения матриц ограничений (Рисунок 1.5) [19].

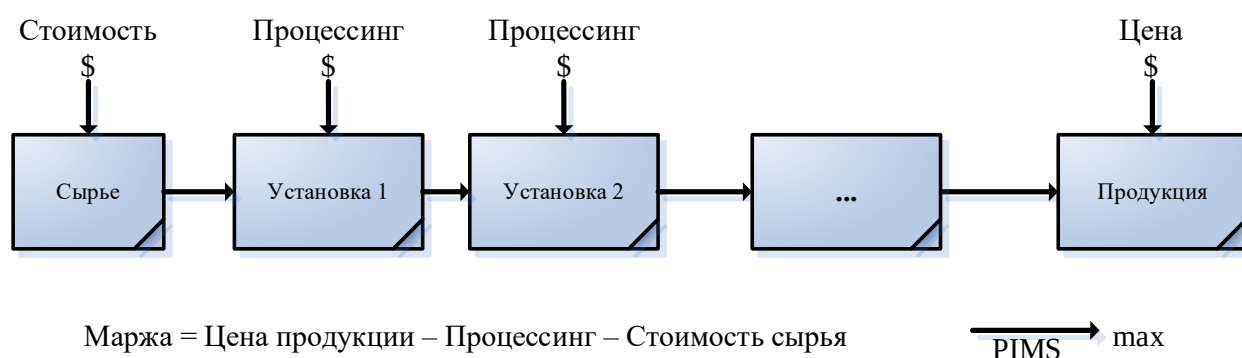


Рисунок 1.5 - Решатель Aspen PIMS: построение целевой функции

На примере одной из динамично развивающейся компании отрасли можно вкратце описать использование в нефтеперерабатывающей промышленности системы моделирования Aspen PIMS (Рисунок 1.6) [44].

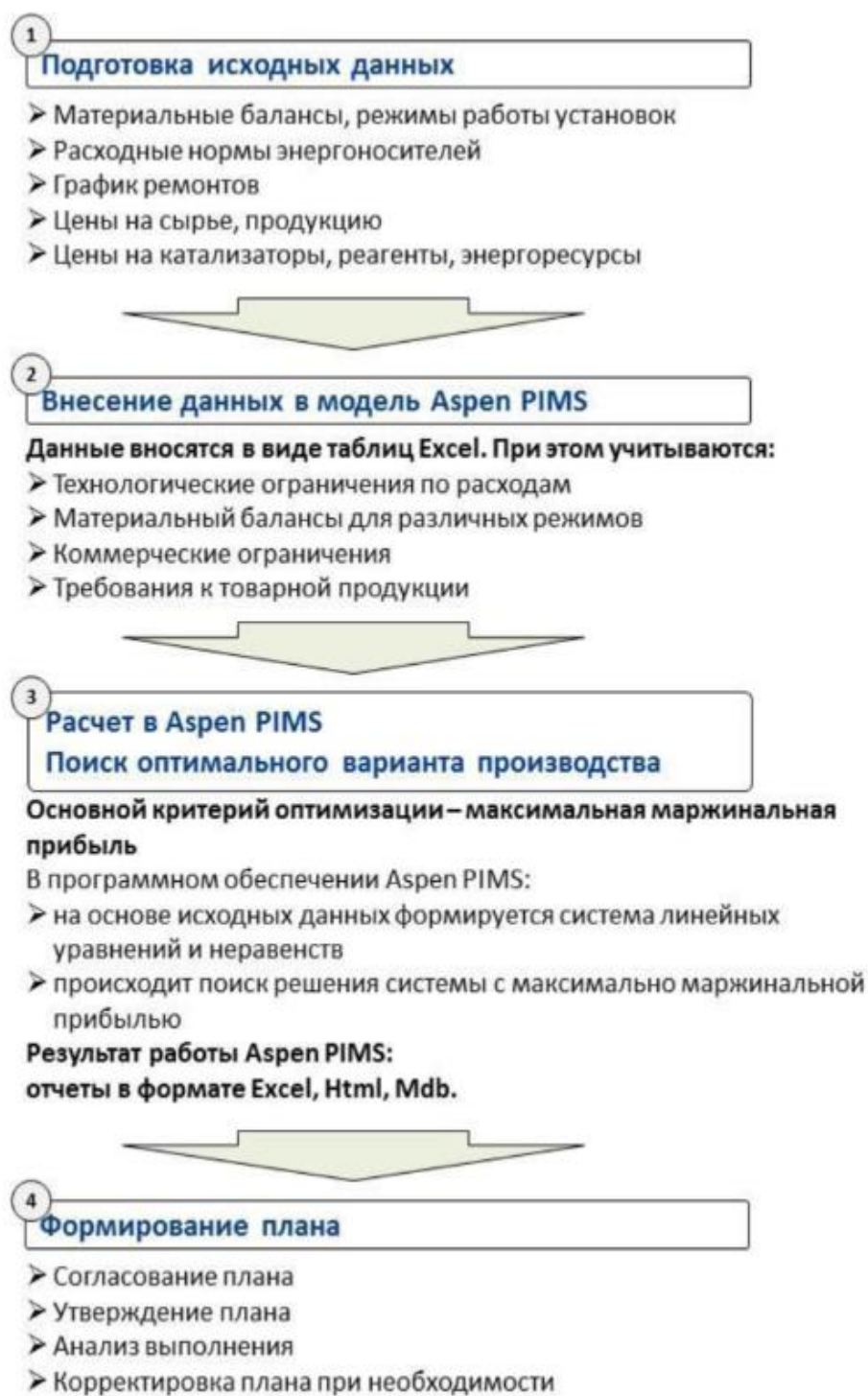


Рисунок 1.6 - Структура процесса планирования

При решении программа генерирует несколько таблиц, из них создается база данных и отправляется решателю. Учитывая операционные затраты и прибыль от реализации конечной продукции, Aspen PIMS оптимизирует покупку сырья, загрузку ключевых установок и компаундирование компонентов для получения

бензина для получения товарного бензина, отвечающего требуемым характеристикам и минимальной стоимости.

Положительные стороны системы ABC:

- минимальные нарушения в части требований по показателям ОЧИМ, ОЧММ, упругости паров по Рейду;
- увеличение производительности по причине отсутствия необходимости получения данных от лаборатории;
- эффективность и простота системы, требующая минимального количества специалистов для обслуживания [110].

Фирмой Хоневелл разработан специальный программный пакет для решения производственных задач, связанный с оптимизацией рецептур и оперативным прогнозированием процесса компаундирования, состоящего из:

1) Системы BLEND, которая предназначена для определения оптимальной рецептуры компаундирования компонентов бензина. Данная программа просчитывает прибыль с учетом требований и технологических ограничений (качество, доступность компонентов, рецепт, цена и прочие). BLEND обладает умным решателем, который использует линейные и целочисленные алгоритмы программы, также система включает набор нелинейных моделей и моделирует особенности смесительных операций;

2) Рецепт поступает в систему онлайн оптимизации Open Blend Property Control (ОВРС). Система при помощи поточных анализаторов изменяет рецептуру в соответствии с требованиями (стоимости, качества и др.);

3) Конечная стадия смешения бензинов выполняется системой Exregion BLEND Controller (EBC). Основные функции системой управлением EBC: автоматическое регулирование смесителем и присутствующим здесь оборудованием, мониторинг соответствия рецептуры, онлайн корректировка рецептуры, выдача отчетов о компаундировании [4].

С.И. Недельченко с соавторами провели анализ мирового рынка систем оптимизации. Целью исследования стало установление ясной картины применения

различных видов программного обеспечения и их особенностей. На рисунке 1.7 приведен обзор рынка [74].

Характеристики characteristics	Honeywell	Yokogawa	Aspen	Schneider Electric	Emerson	Napcon
Открытость и модульность решения, возможность наращивания системы Solution openness and modularity, the possibility of expanding the system	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Совместимость с оборудованием и программным обеспечением других производителей Compatible with hardware and software from other manufacturers	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Возможность настройки системы персоналом заказчика после ввода в эксплуатацию Ability to configure the system by customer personnel after commissioning	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Опыт внедрения в России/СНГ Implementation experience in Russia/CIS	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Русификация программного обеспечения и документации Russification of software and documentation	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Наличие центров обучения в России Availability of training centers in Russia	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Наличие групп технической поддержки в России Availability of technical support groups in Russia	✓	✓	✓	✓	✓	✓

✓ Да Yes ✓ Нет No ✓ Частично Partial

Рисунок 1.7 – Обзор различных системных программ для оптимизации.

На отечественном рынке спрос на программные комплексы в большей степени удовлетворялся иностранными вендорами производственной автоматизации. Их выход с российского рынка поставил для экономики РФ критически важную задачу быстрого импортозамещения, так как после отключения от технической поддержки система начинает со временем деградировать. Агафонов Д.В. с соавторами утверждают, что российские создатели подобных систем совсем не разрабатывали, и, по большому счету, мы отстаем, в данном направлении [49,125].

В связи с подписанием указа Президента РФ №166 от 30.03.2022 «О мерах по обеспечению технологической независимости и безопасности критической информационной инфраструктуры РФ» к 2025 году компании обязаны перейти на отечественные программные продукты [78]. В настоящее время организации

находятся в процессе разработки нового программного продукта или на стадии перехода уже готовых отечественных программ.

СМПР (Система Моделирования Производства) является российской разработкой компании ООО «Центр Цифровых Технологий». Данный программный комплекс создан для разработки и эксплуатации оптимизационных моделей нефтеперерабатывающих и нефтехимических производств. Основной задачей комплекса является предоставление пользователям возможности эффективно моделировать указанные производства для целей планирования и модернизации с учетом их технико-экономических характеристик. На рисунке 1.8 структура многозаводской модели смешения [117].

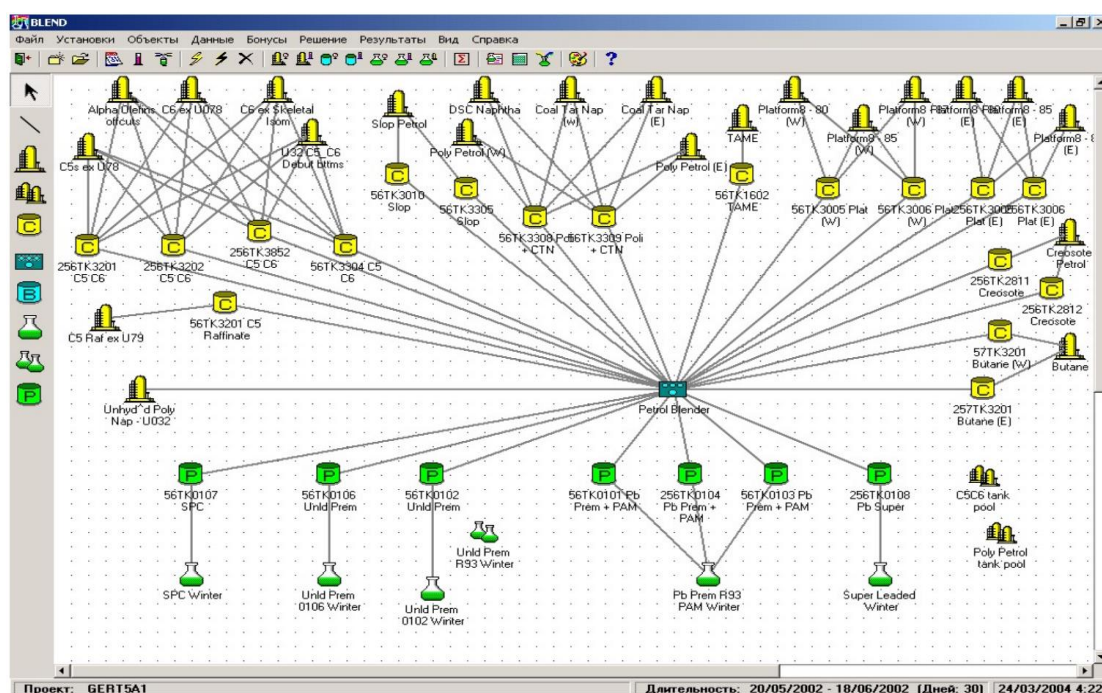


Рисунок 1.8 - Структура многозаводской модели смешения

Трудовой процесс специалиста в СМПР упрощен посредством автоматизации за счет методов проверки и изменения исходных данных к моделированию производственных процессов. Вычисление всевозможных режимов работы производств осуществляется в автономном порядке с протягиванием уровня качества в целом по схеме переработки (от сырьевых ресурсов до товарного продукта), с применением нелинейных моделей для

составления всей технико-экономической структуры промышленности. С целью выполнения нелинейной задачи применяется методика хронологического линейного кодирования программы. В случае появления дискретных переменных, например, по причине транспортных отгрузок готового товара, система автоматом присоединяет блок смешанного целочисленного программирования (MIP). СМПР обеспечен наглядным объектно-ориентированным интерфейсом клиента. В разнообразных интерактивных полях имеется возможность формировать и изменять модель с применением наглядной схемы, устанавливать параметры предмета модели, производить анализ результатов решения в формате текста протокола и отчётов в формате html и excel. СМПР содержит библиотеки по нефтепереработки, нефтехимии. СМПР при помощи применения продвинутых программ оптимизации дает возможность НПЗ и вертикально-интегрированным организациям получать наибольшую прибыль [103].

Принципиальные отличия СМПР от оппонентов AspenTech и Хоневелл:

- сохранение первичной информации в базе данных: быстрая работа от устройства клиента к серверу, общее хранение информации, улучшенные параметры внедрения, удобное опубликование информации для иных пользователей;
- применение любых решателей – это сертифицированная лицензия, удобство определения цены, качества или скорости;
- обновленные формы кодирования предметов модели обеспечивают увеличение число знаков для кодировки, также в Хоневелл присутствует лимит до 8 знаков для имени в уравнениях (проблемы в многозаводских моделях – 1 знак на код организации + код срока, 2 знака на код дуги и др.);
- значительное расширение базовых возможностей моделирования-автоматизированная актуализация моделей, интеграция с корпоративной цифровой средой предприятия [84].

Программный комплекс оптимального планирования и оптимизации рецептур смешения бензинов и мазутов (ПК ОПОР) разработана российской компанией ООО «МЦЭ-Инжиниринг». (Рисунок 1.9)

	Изомеризат	Изомеризат легкий	Бензин КАС	Стаб. катализат	Стаб кат-т 35/11-300	Стаб кат-т 35/11-600	Алкил...
ОБЪЕМНАЯ ДОЛЯ, %	16.88	0.00	0.00	0.00	0.00	37.08	35.74
	23.11	0.00	0.00	0.00	0.00	50.76	48.92
ОБЪЕМ, м³	462.25	0.00	0.00	0.00	0.00	1015.23	978.4
МАССОВАЯ ДОЛЯ, %	15.00	0.00	0.00	0.00	0.00	40.00	34.00
МАССА, т	300.00	0.00	0.00	0.00	0.00	800.00	680.00
ЦЕНА, руб./т	31000.00	32000.00	31000.00	30000.00	34000.00	35000.00	34800.00
Стоимость компонентов в смеси, руб.	9300000.00	0.00	0.00	0.00	0.00	28000000.00	23698000.00
ОСТАТОК КОМПОНЕНТОВ, м³	700.00	0.00	0.00	0.00	0.00	200.00	320.00

Стоимость смеси по рецептуре, руб. 69 908 000,00

Сохранить в Excel

ОТМЕНА РАСЧЕТ ВЫХОД

Рисунок 1.9 – Итоговые результаты оптимизации разработки

ООО «МЦЭ-Инжиниринг»

Программа реализовывает четыре главные цели: конфигурацию, вычисление наилучшей рецептуры, прогнозирование, исполнение балансового метода планирования [93].

Для математического расчета система применяет линейные уравнения, а также учитывает нелинейные эффекты. Исходной информацией для ПК ОПОР являются:

- система SAP Advanced Planner and Optimizer - объем бензинов для диапазона прогнозирования; резервы компонентов компаундирования с учетом баланса; стоимость компонентов компаундирования; определение цели (требования оптимальности компаундирования);

- лабораторная информационная система менеджмента (ЛИМС) -обработка характеристик параметров качества индивидуального химического состава автобензина и мониторинг ограничения по октановому числу.

- автоматизированная система управления технологическими процессами (АСУ ТП) – формирование ключевых величин процедуры компаундирования (температура и давление в различных узлах системы, информация с поточных анализаторов).

Выходной информацией ПК ОПОР является оптимизация остатков бензиновых компонентов компаундирования с учётом выполнения требований к рецептуре [28].

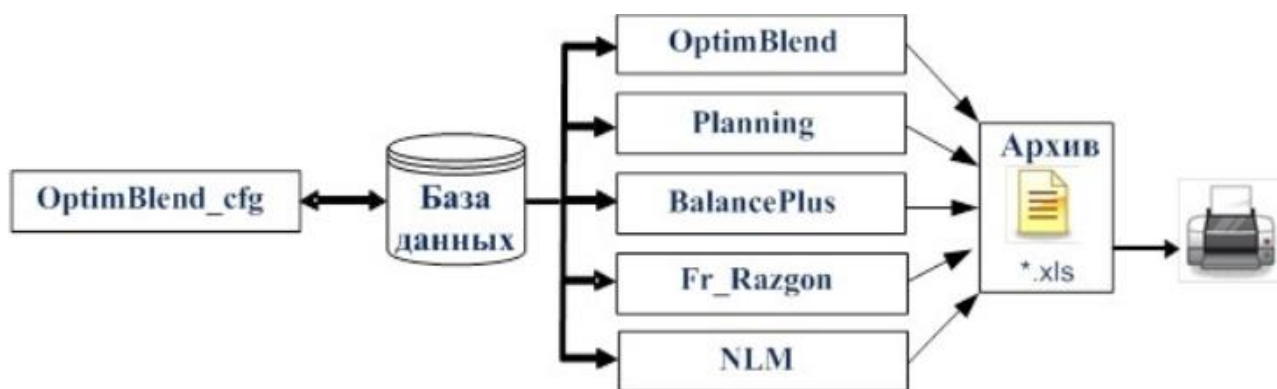


Рисунок 1.10 – Блок-схема работы ПК ОПОР

Упрощенная блок-схема ПК ОПОР производства ООО «МЦЭ-Инжиниринг», которая состоит из нескольких блоков (Рисунок 1.10):

- блок 1 (OptimBlend_cfg) конфигуратор, данный блок помогает создать и осуществлять корректировку хранилища информации;
- блок 2 (OptimBlend), осуществляет расчет наилучшего состава бензинов с учетом применения уравнений линейной зависимости и нелинейных эффектов;
- блок 3 (Planning), определяет цель наилучшего прогнозирования требуемых компонентов компаундирования при установленном прогнозе производства автобензина;
- блок 4 (Balance Plus), исполняет задачу балансирования по компонентам компаундирования;
- блок 5 (NLM), определяет параметры нелинейной модели качества продукции (давления насыщенных паров, ОЧММ, ОЧИМ и др.);

- блок 6 (Fr_Razgon), выполняет расчет фракционной разгонки нефтепродуктов [29].

Разработчиком имитационной модели представлена имитационная модель цеха компаундирования, которая написана на языке Visual Basic for Application. Автор создал математическую модель, способствующую адаптации рецептуры компаундирования под технические требования. Принцип данной модели заключен в анализе определения технологического процесса (выбор вариантов смешения между поточным и циркуляционным методом), выборе характеристик работы насосов и увеличении рентабельности завода (Рисунок 1.11) [27].



Рисунок 1.11 – Интерфейс имитационной модели цеха смешения бензинов

В разделе 1.5 проработаны проблемы создания компьютерной системы, предназначенной для совершенствования процесса смешивания высокооктановых бензинов. Проведен сравнительный анализ существующих зарубежных и российских программных комплексов, предназначенных для оптимизации. Рассмотрены ключевые принципы, лежащие в основе их работы.

Многофункциональные моделирующие системы обычно обладают несколькими недостатками, включая модели, основанные на статистических данных, низкую чувствительность к изменениям в углеводородной структуре сырья и приблизительные методы расчета. Также на сегодняшний день важным актуальным недостатком является отсутствие расчетов в части моделирования оптимального состава бензинов с учетом минимальных выбросов CO_2 .

1.6 Основные виды хроматографии

Создание ИВАС регулирования состава бензина с целью минимизации выбросов CO_2 невозможно без четкого анализа и контроля его индивидуального химического состава. Данная проблема успешно может быть решена с применением современных физико-химических методов анализа. В частности, хромато-масс-спектрометрией, базирующейся в комбинации ресурса хроматографа и масс-спектрометра, применяющийся для количественного и качественного обнаружения индивидуальных компонентов в многосложных смесях [24].

В зависимости от характеристики рассматриваемого состава и критерия точности результата, применяется одна из следующих методик: жидкостная хроматография или газовая хроматография с масс-спектрометрическим детектированием.

Анализируемый углеводородный состав вводят в испаритель хроматографа, где смесь мгновенно превращается в газообразную форму, перемешивается с инертным газом-носителем и под напором поступает в колонку. Двигаясь через хроматографическую колонку, проба делится на компоненты, которые подаются в

масс-спектрометрию и пропускаются через спектрометрическую составляющую прибора.

С целью получения спектра частицы компонентов пробы насыщаются ионами, где специализированный индикатор считывает изменения ионного тока, начинается записываться хроматограмма. Программа для анализа хроматограмм дает сопоставить снятые пики с записанными ранее, таким образом, выполняя их количественное и качественное определение. Параллельно с этим выполняется кадр масс-спектра, который дает представление о структуре компонентов, в том числе и ранее не идентифицированных элементов [72,62,54].

В рамках мониторинга химического состава различных процессов переработки нефти целесообразно использовать поточные хроматографы в комбинации с масс-спектрометрами и иными анализаторами. Эти приборы постоянно дорабатываются и развиваются.

На НПЗ в Европейском союзе и США активно используются новейшие поточные хроматографы, созданные мировыми лидирующими компаниями ABB, Hamilton Sundstrand, Shimadzu, Siemens AG, Gilent Technologies Inc. и в последние годы технологические потоки полностью контролируются для своевременной корректировки режимных показателей в онлайн режиме.

Применение поточных анализаторов позволяет интегрировать структуру улучшенного контроля производственным режимом, которая помогает исполнять многофункциональную оптимизацию работы в рамках достижения лучших экономических показателей. Использование поточных анализаторов помогает производить продукт высокого качества на всех промышленных установках по производству компонентов товарного бензина.

Таким образом, применение микроконтроллеров, новейших аналитических методов анализа и контроля индивидуального химического состава бензинов, а также современных программных систем позволяют управлять технологическими параметрами процессов, в том числе для сокращения выбросов CO₂ в атмосферу.

Выводы к главе 1

Оценены выбросы CO_2 по различным секторам экономики - одним из крупных эмитентов является транспорт. Проведен обзор нормативных документов, которые отражают стратегию развития РФ с низким уровнем выбросов парниковых газов и указывают нам, что даже если все проектные решения по снижению потребления топлив будут исполнены, то в среднесрочной перспективе востребованность в бензинах и дизельном топливе останется на достаточно высоком уровне, следовательно транспортный сектор будет продолжать являться одним из основных источников выбросов CO_2 .

В ходе анализа литературных источников установлено, что действующая в настоящее время методика расчета удельных выбросов углекислого газа в атмосферу от автомобильных бензинов не учитывает химический состав топлива. Коэффициенты удельных выбросов углекислого газа для всех марок бензинов одинаковы, и введена лишь поправка на плотность. Так как, выбросы CO_2 в атмосферу при сжигании топлива напрямую зависят от его химического состава, то регулирование состава бензинов может быть рассмотрено как один из эффективных способов уменьшения углеродного следа, связанного с автомобильным транспортом. Данный метод не нуждается в реконструкции двигателя транспорта, создании альтернативного комплекса производственных и непроизводственных отраслей и сфер деятельности, обеспечивающих процесс и условия производства, как, к примеру, использование двигателей, эксплуатируемых на чисто водородном топливе.

Проведен анализ зарубежных и отечественных специализированных программных комплексов по приготовлению высокооктановых бензинов с оптимальной рецептурой смешения компонентов для получения продукта требуемого качества, однако данные программные продукты моделируют оптимальный состав бензина без учета минимальных выбросов CO_2 .

Таким образом, разработка технических и технологических способов снижения выбросов диоксида углерода путем системного анализа и регулирования химического состава автомобильных бензинов является актуальной задачей.

ГЛАВА 2. ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

2.1 Объекты исследований

Объектами исследований являются бензиновые фракции процессов каталитического риформинга, каталитического крекинга, изомеризации, сернокислотного алкилирования, а также прямогонные бензиновые фракции углеводородного сырья и оксигенаты, входящие в состав товарных автомобильных бензинов.

2.2 Методы исследований

2.2.1 Метод хроматографии в сочетании с масс-спектрометрией

Для изучения индивидуального химического состава бензиновых фракций в исследованиях использовали метод хроматографии в сочетании с масс-спектрометрией (применялся газовый хроматограф Shimadzu GC 2010 Plus с капиллярной колонкой и газовый хроматограф Хроматэк Кристалл 5000) [54,14]. Анализы выполнялись в ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет», а также заводских лабораториях НПЗ.

2.2.2 Метод определения теплотворной способности

Как было отмечено ранее, по различным литературным данным теплотворная способность топлив значительно отличается, что прежде всего, связано с различиями в их химическом составе [94].

В диссертации при расчете теплотворной способности углеводородов был применен единый подход. Для быстрого определения величины массовой теплотворной способности индивидуальных веществ применили формулу (2.1) [50]. Согласно данным авторов, погрешность расчетов по методике не превышает 1 %.

$$\Delta_c H^{B,H}(C_n H_m) = m_C \cdot \Delta_c H^{B,H}(C) + m_H \cdot \Delta_c H^{B,H}(H), \quad (2.1)$$

где $\Delta_c H^{B,H}(C_n H_m)$ - массовая теплота сгорания, МДж/кг;

n и m - число атомов углерода и водорода в молекулах;

m_C , m_H - массы соответствующих атомов в 1 кг (г) углеводорода, то есть $m_C + m_H = 1$ кг (г);

$\Delta_c H^{B,H}(C)$ и $\Delta_c H^{B,H}(H)$ - доли теплот сгорания, приходящиеся на соответствующие атомы.

2.2.3 Метод определения коэффициентов выбросов углекислого газа

Состав и количество выбросов при сжигании топлив можно рассчитать стехиометрически по известному химическому составу [58,95]. Например:

- для октана $2 C_8 H_{18} + 25 O_2 = 16 CO_2 + 18 H_2O$ (3,088 т CO_2 /т);

- для бензола $2 C_6 H_6 + 15 O_2 = 12 CO_2 + 6 H_2O$ (3,385 т CO_2 /т);

- для бутана $2 C_4 H_{10} + 13 O_2 = 8 CO_2 + 10 H_2O$ (3,034 т CO_2 /т).

Таким образом при сжигании одной тонны октана выделяется - 3,088 т CO_2 /т, при сжигании одного килограмма бензола и бутана выделяется 3,385 и 3,034 т CO_2 /т соответственно.

Количество диоксида углерода, приходящегося на единицу выделяющейся при этом энергии определяли, как отношение массового удельного выброса углеводорода на его теплотворную способность, т.е. для октана оно составляет: $\frac{3,088}{44,44} = 69483$ кг/ТДж, для бензола и бутана данный показатель равен 84085 и 67151 кг/ТДж соответственно.

2.2.4 Расчеты основных показателей качества компонентов компаундирования и состава смесей

В диссертации для расчета основных показателей качества компонентов компаундирования и состава приготавливаемой окончательной смеси используются различные формулы:

1) Основанные на известных законах и правилах аддитивности качественных показателей товарного бензина, например: массовая доля серы, объемные доли ароматических, олефиновых соединений, оксигенатов и бензола, плотности соединений. Данные показатели качества можно определить по формуле (2.2) [109,119]

$$П = a \cdot П_1 + b \cdot П_2 + c \cdot П_3 + \dots + i \cdot П_i, \quad (2.2)$$

где $П$ – показатель качества компонента готовой смеси;

$a, b, c, \dots, n$ – содержание компонентов в долях от единицы;

$П_1, П_2, П_3, \dots, П_i$ – показатели качества компонентов, содержание компонентов в долях от единицы;

i – номер компонента, применяемого в компаундировании.

2) Поскольку не все показатели подчиняются законам аддитивности, в отношении неаддитивных показателей качества компонента готовой смеси применяются следующие методы:

2.1) Расчеты ОЧИМ проводились по методике [57,64,104,139,142]. Данный расчет опирается на поправку на неаддитивность показателя по формулам 2.3-2.5

$$\text{ОЧИМ}_{\text{см}} = \sum_{i=1}^m (\text{ОЧИМ}_i \cdot C_i) + B, \quad (2.3)$$

где $\text{ОЧИМ}_{\text{см}}$ - ОЧИМ смешения бензинов, ед.;

ОЧИМ_i – ОЧИМ компонентов углеводородной смеси бензинов, ед.;

B – суммарное отклонение ОЧИМ от аддитивности, ед.;

C_i – массовая доля i -го компонента;

m – число компонентов.

Вычисление общего отклонения ОЧИМ от аддитивности осуществляется по формуле

$$B = \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=2}^m B_i \cdot B_j \cdot C_i \cdot C_j, \quad (2.4)$$

где B – общее отклонения ОЧИМ от аддитивности, ед.;

m – число компонентов;

C_i, C_j – концентрация i -го (j -го) компонента;

B_i, B_j – показатель, характеризующий склонность i -й (j -й) молекулы к межмолекулярному взаимодействию, который выражается через дипольный момент молекулы (ед.)^{1/2}.

Расчет величины B_i выполняется по формуле

$$B_i = \alpha \cdot D_i^n, \quad (2.5)$$

где α и n – коэффициенты, определяющие связь интенсивности межмолекулярных взаимодействий от дипольного момента D , численно равные $2,21 \frac{(\text{ед.})^{1/2}}{\text{Дебай}}$ и $1,09$ соответственно;

D – дипольный момент, Дебай.

Таким образом, на ОЧИМ многокомпонентных смесей бензинов воздействуют не только ОЧИМ отдельных компонентов, но и межмолекулярные взаимодействия. Также стоит отметить, что неаддитивное свойство ярко проявляется при большом значении ароматических и олефиновых углеводородов в бензине.

2.2) Для ДНП применялся расчет [115,47], который определялся методом Антуана по формуле 2.6

$$\lg P = A' - \frac{B}{(T+C'_A)}, \quad (2.6)$$

где P – ДНП смеси, кПа;

A' , B , C'_A – константы формулы Антуана;

T - температура, °С.

2.2.5 Исследование физико-химических показателей проб и компонентов автомобильных бензинов

В процессе исследований экспериментально были установлены несколько физико-химических показателей проб и компонентов автобензинов: ОЧИМ, ОЧММ, фракционный состав, ДНП, плотность и др. ОЧИМ определяли в соответствии с ГОСТ 8226-2022 «Топливо для двигателей. Исследовательский метод определения октанового числа» [34], ГОСТ 511-2015 «Топливо для двигателей. Моторный метод определения октанового числа» [33], фракционный состав определили согласно ГОСТ 2177-99 «Нефтепродукты. Методы определения фракционного состава» [31], давление насыщенных паров - согласно ГОСТ 1756-2000 «Нефтепродукты. Определение давления насыщенных паров» [30], плотность согласно - ГОСТ 3900-2022 «Нефть и нефтепродукты. Методы определения плотности» [32], а также Межгосударственный стандарт ГОСТ EN 13016-1-2013

«Нефтепродукты жидкие. Часть 1. Определение давления насыщенных паров, содержащих воздух (ASVP), и расчет эквивалентного давления сухих паров (DVPE)» [35], содержание серы определяли Межгосударственным стандартом ГОСТ ISO 20884-2016 «Нефтепродукты жидкие. Определение содержания серы в автомобильных топливах. Метод рентгенофлуоресцентной спектроскопии с дисперсией по длине волны» [124].

2.3 Определение оптимального решения задачи

В рамках формирования целевой функции при подборе рецептуры смешения с учетом минимальных выбросов CO_2 необходимо, чтобы состав компонентов бензина и их количественные соотношения удовлетворяли заданным технологическим требованиям по качеству и соответствовали минимальным выбросам.

Целевая функция имеет ограничения по определенным параметрам: нелинейные ограничения (октановое число, давление насыщенных паров) и линейные ограничения (содержание ароматических и олефиновых углеводородов, коэффициент выбросов CO_2 , плотность бензина, ограничения на объем компонентов), а также должны соблюдаться условия неотрицательности переменных, баланса смеси.

Для решения задач с нелинейными зависимостями применялся метод множителей Лагранжа. Метод множителей Лагранжа преобразует задачу с ограничениями в задачу безусловной оптимизации. Функция Лагранжа имеет вид

$$L(x, \lambda, \mu) = F(x) + \lambda_1 \cdot g_1(x) + \sum_{k=2}^7 \mu_k \cdot g_k(x) + \sum_{j=1}^n \mu_{7+j} \cdot h_j(x), \quad (2.7)$$

где x – объем компонентов в смеси;

λ – множитель Лагранжа для ограничения-равенства знак (=);

μ – множители для ограничений-неравенств знак ($\leq$);

$F(x)$ – целевая функция задачи;

λ_1 – множитель Лагранжа для ограничения-равенства (октановое число);

g_1 – ограничение по октановому числу;

k – индекс ограничения ($k= 2, \dots, n$);

μ_k – множители для ограничений-неравенств знак ($\leq$);

g_k – множители ограничений;

n – общее количество компонентов смеси бензина;

j – индекс компонента бензина, применяемого в компаундировании;

h – множитель для неотрицательных переменных;

μ_{7+j} – множитель для ограничений-неравенств знак ($\leq$).

Целевая функция задачи

$$F(x) = \sum_{j=1}^n x_j \rightarrow \min. \quad (2.8)$$

При получении товарного бензина требуемого качества для целевой функции необходимо задать ограничения:

1) Ограничение по октановому числу

$$\sum_{j=1}^n \left(\left(\sum_{i=1}^{m_i} (OЧ_{ij} \cdot C_{ij}) + 100 \cdot \sum_{k=1}^{m_j-1} \sum_{l=k+1}^{m_j} (2,21 \cdot D_{kj}^{1,09}) \cdot (2,21 \cdot D_{lj}^{1,09}) C_{kj} \cdot C_{lj} \right) \cdot x_j \right) - 92 \cdot V = 0, \quad (2.12)$$

где i – индекс молекулы углеводорода;

j – индекс компонентов смеси;

k – шаг для одной молекулы;

m – количество молекул в компоненте;

n – количество компонентов бензина в смеси;

1 – шаг для другой молекулы;

ОЧ– октановое число i -го углеводорода в j -м компоненте смеси, ед.;

С – концентрация массовая i -го углеводорода в j -м компоненте;

D – дипольный момент молекулы;

V – общий объем бензина, который нужно получить, т;

1,09 – константа;

2,21 – константа;

92 – ограничение по октановому числу (АИ-92), ед.

2) Ограничение по содержанию ароматических углеводородов

$$g_2(x) = \sum_{j=1}^n A_j \cdot x_j - A \cdot V \leq 0, \quad (2.9)$$

где A – содержание ароматических углеводородов, % масс.;

A_j – массовое содержание ароматических углеводородов, в j -м компоненте, % масс.

3) Ограничение по содержанию олефиновых углеводородов

$$g_3(x) = \sum_{j=1}^n O_j \cdot x_j - O \cdot V \leq 0, \quad (2.10)$$

где O – содержание олефиновых углеводородов, % масс.;

O_j – массовое содержание олефиновых углеводородов, в j -м компоненте % масс.

4) Ограничение по коэффициенту выбросов углекислого газа

$$g_4(x) = \sum_{j=1}^n E_j \cdot x_j - E \cdot V \leq 0, \quad (2.11)$$

где E – коэффициент выбросов углекислого газа, т CO_2 /т;

E_j – коэффициент выбросов углекислого газа в j -м компоненте, т CO_2 /т.

5) Ограничение по плотности бензина

$$g_5(x) = \sum_{j=1}^n \rho_j \cdot x_j - \rho \cdot V \leq 0, \quad (2.12)$$

где ρ – плотность бензина, кг/л;

ρ_j – плотность бензина в j -м компоненте, кг/л.

6) Ограничение по давлению насыщенных паров

$$g_6(x) = \sum_{i=1}^n \left[\left(\sum_{k=1}^{N_i} \left(10^{\left(A'_{i,k} - \frac{B_{i,k}}{T+C_{i,k}} \right)} \times \left(\frac{x_{i,k}/M_{i,k}}{\sum_{m=1}^{N_i} x_{i,m}/M_{i,m}} \right) \right) \cdot \frac{x_i \cdot \rho_i / \left(\sum_{k=1}^{N_i} x_{i,k}/M_{i,k} \right)}{\sum_{j=1}^n x_j \cdot \rho_j / \left(\sum_{k=1}^{N_i} x_{j,k}/M_{j,k} \right)} \right] - P \cdot V \leq 0, \quad (2.16)$$

где N – количество индивидуальных компонентов;

M – молярная масса;

P – давление насыщенных паров, кПа.

7) Ограничение на объем компонентов

$$h_j(x) = x_j - V_j \leq 0, \quad (2.13)$$

где j – индекс компонентов смеси ($j=1, \dots, n$);

Баланс объема смеси:

$$g_7(x) = \sum_{j=1}^n x_j - V \leq 0. \quad (2.14)$$

1) Условие не отрицательности переменных (объемы не могут быть отрицательными)

$$x_j \geq 0, \quad (2.15)$$

где j – индекс компонентов смеси ($j=1, \dots, n$).

2) Условия оптимальности Куна-Таккера. Для нахождения минимума должны выполняться:

- Стационарность (если для допустимой точки выполняются условия стационарности, дополняющей нежёсткость и неотрицательность, то эта точка имеет решение задачи)

$$\nabla_x L = 0 \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial x_j} = 0, \quad (2.16)$$

где ∂L - вычисление частной производной;

∂x_j – частная производная по x ;

j – индекс компонентов смеси ($j=1, \dots, n$).

$$\frac{\partial L}{\partial x_j} = \lambda_1 \frac{\partial g_1}{\partial x_j} + \sum_{k=2}^7 \mu_k \frac{\partial g_k}{\partial x_j} + \mu_{7+j} = 0, \quad (2.17)$$

где ∂g_1 - вычисление частной производной;

∂g_k - частная производная по g .

- Допустимость (одно из условий Куна-Таккера требует, чтобы ограничение неравенства также удовлетворялось оптимальной точкой. Это нужно, чтобы гарантировать, что оптимальная точка находится в допустимой области)

$$g_1(x) = 0, \quad (2.18)$$

$$g_k(x) \leq 0, \quad (2.19)$$

$$h_j(x) \leq 0. \quad (2.20)$$

- Условия дополняющей нежесткости (необходимое условия решения задачи нелинейного программирования)

$$\mu_k g_k(x) = 0, \quad (2.21)$$

$$\mu_{7+j} h_j(x) = 0. \quad (2.22)$$

- Условие неотрицательности множителей (необходимое условие решения задачи нелинейного программирования)

$$\mu_k(x) \geq 0, \quad (2.23)$$

$$\mu_{7+j}(x) \geq 0. \quad (2.24)$$

2.4 Выбор инструментов программирования для автоматизации расчетов

Для исключения человеческого фактора и компьютеризации расчета оптимального и химического состава высокооктанового бензина с учетом решения всех задач диссертационной работы, требуется разработать ИВАС регулирования состава бензинов с учетом минимальных выбросов CO_2 .

В рамках создания ИВАС регулирования состава бензинов с учетом минимальных выбросов CO_2 был использован программный язык Python. Данный код программирования известен простотой использования. Python задействован в создании веб-платформы, пользовательской программы и в машинном обучении для вычисления большого объема данных.

В системе Python были применены инструменты нелинейного программирования: SciPy (многофункциональный набор для научных расчетов с Python), SymPy (символьная библиотека для решения численных методов), Qt Designer (пакет, позволяющий оформить интерфейс программного обеспечения), PyQt5 (набор библиотек для создания графического интерфейса), HyperChem

(комплексный программный продукт, предназначенный для задач квантово-механического моделирования атомных и молекулярных структур) [7].

На рисунке 2.1 изображена блок-схема основной логики работы модуля ИВАС регулирования состава бензинов с учетом минимальных выбросов CO₂ [8].

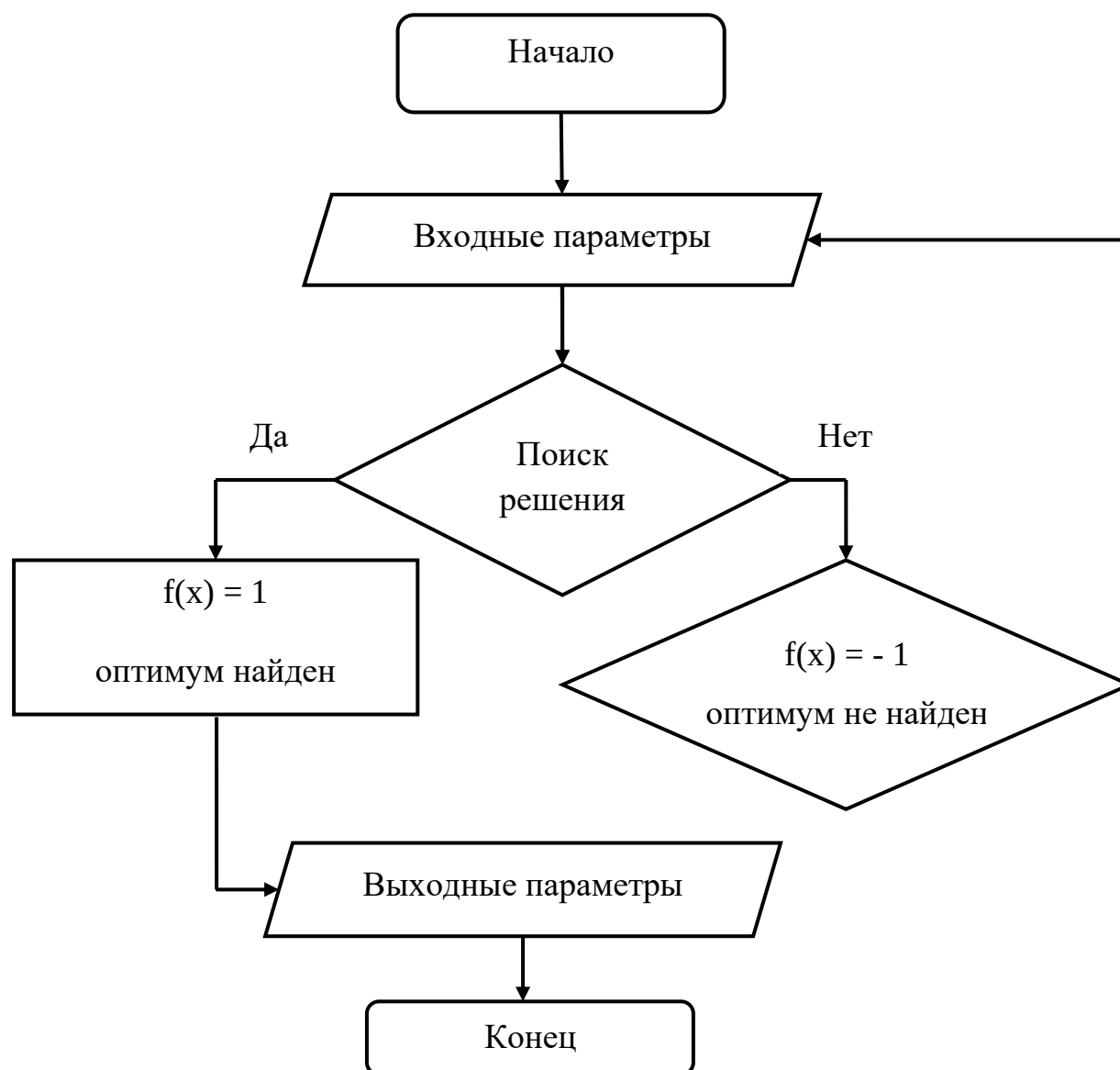


Рисунок 2.1 – Блок-схема ИВАС регулирования состава бензинов с учетом минимальных выбросов CO₂

Выводы к главе 2

Во второй главе приведены характеристики выбранных объектов и методы исследования. Объектами исследования являются высокооктановые компоненты бензинов и их смеси. Выбраны методы расчетов основных показателей качества компонентов и товарных автомобильных бензинов.

Для автоматизации расчетов были исследованы возможности применения численных методов в сложных нелинейных системах, в частности, функции множителей Лагранжа и инструменты нелинейного программирования языка Python. Исследованы алгоритмы поиска оптимума целевой функции.

ГЛАВА 3. ИССЛЕДОВАНИЯ УДЕЛЬНЫХ ВЫБРОСОВ КОМПОНЕНТОВ ТОВАРНЫХ АВТОБЕНЗИНОВ ПО УДЕЛЬНЫМ ВЫБРОСАМ CO₂ И ИХ РАНЖИРОВАНИЕ

3.1 Исследования зависимостей удельных выбросов CO₂ от плотности углеводородов и высокооктановых компонентов бензинов

В третьей главе изложены результаты исследования углеводородного состава наиболее распространенных высокооктановых компонентов автомобильных бензинов, расчеты их теплотворной способности и удельных выбросов CO₂, а также ранжирования компонентов бензинов по удельным выбросам.

Как было отмечено в литературном обзоре, по принятой на сегодня методике в качестве критерия оценки выбросов диоксида углерода при сжигании топлив используют коэффициент пересчета, который обозначает, сколько тонн CO₂ поступает в атмосферу при сжигании 1 тонны того или иного топлива или сколько кг CO₂ поступает в атмосферу при получении ТДж энергии.

Согласно данной методике, марки топлив отличаются только по плотности, при этом значения коэффициентов одинаковы. Как видно из таблицы 1.1 для всех марок автомобильных бензинов коэффициенты составляют 3,026 т CO₂/т и 69300 кг/ТДж, а для дизельных топлив – 3,149 т CO₂/т и 74100 кг/ТДж. Расчеты показывают, что такие распространенные марки автомобильных бензинов как АИ-92 и АИ-95 с учетом поправки на плотность (или по объемным коэффициентам удельных выбросов, т/м³) отличаются друг от друга всего на 2 %. Такая методика оценки выбросов CO₂ в атмосферу на наш взгляд является слишком упрощенной и не позволяет детально оценить истинную картину происходящего.

Более точные результаты получаются при подробном анализе химического состава топлива, и теплотворной способности этих компонентов.

На рисунках 3.1 и 3.2 приведены зависимости коэффициентов удельных выбросов CO₂ от плотности наиболее распространенных компонентов автомобильных бензинов, оксигенатов, а также индивидуальных углеводородов, входящих в их состав.

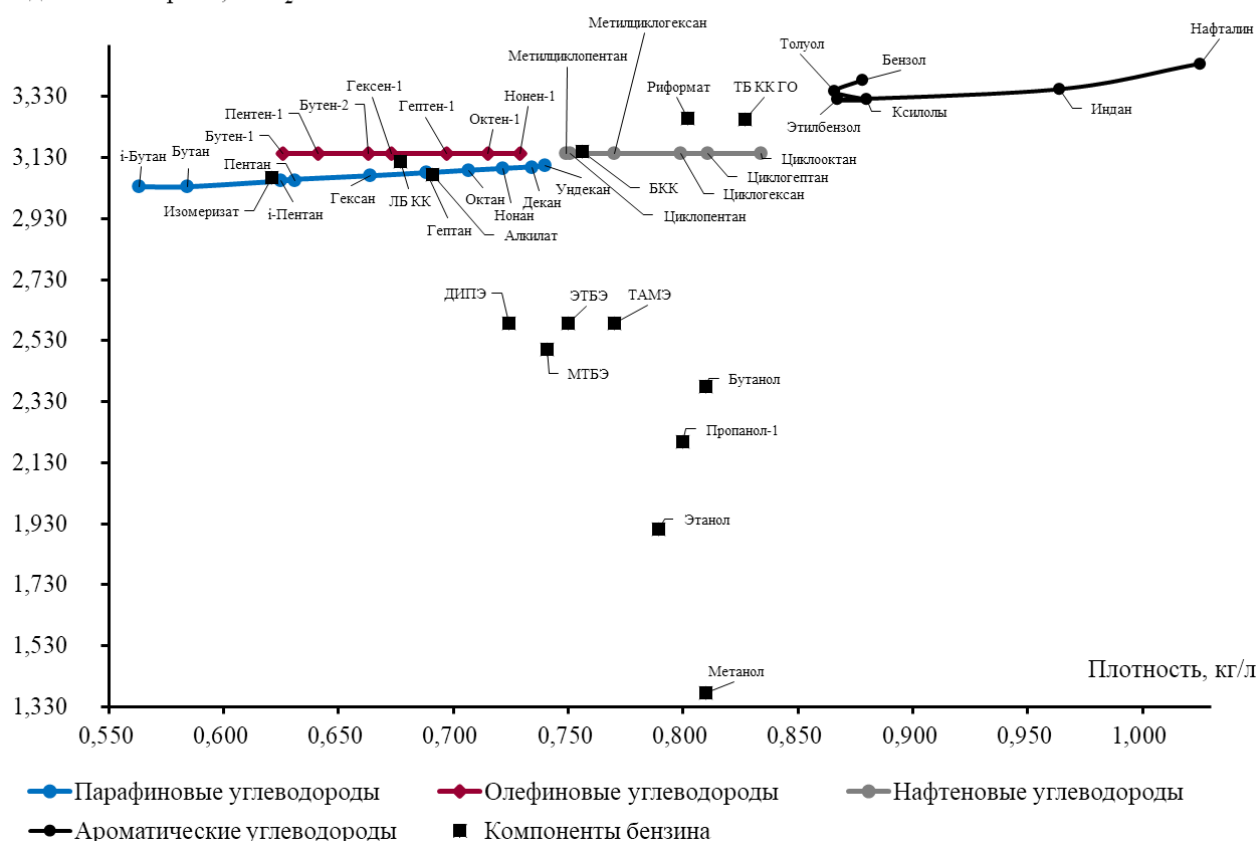
Удельные выбросы, т CO₂/т

Рисунок 3.1 – Зависимость массового коэффициента удельных выбросов CO₂ от плотности углеводородов, высокооктановых компонентов бензинов и оксигенатов

Как видно из рисунков 3.1 и 3.2, нет прямых зависимостей между коэффициентами удельных выбросов CO₂, и плотностью углеводородов и компонентов бензинов. Наблюдаются существенные отличия коэффициентов удельных выбросов как внутри класса, так и между различными классами углеводородов, присутствующих в составе бензинов. Парафины, присутствующие в бензине, такие как, например, изобутан и ундекан, по количеству выбросов на единицу объема отличаются друг от друга на 34,4 %, а по объемному коэффициенту удельных выбросов CO₂ на единицу получаемой энергии – на 37,3 %. Аналогичные показатели для изобутана и бензола составляют 74,0 и 95,2 %, а для изобутана и толуола – 69,7 и 88,1 % соответственно.

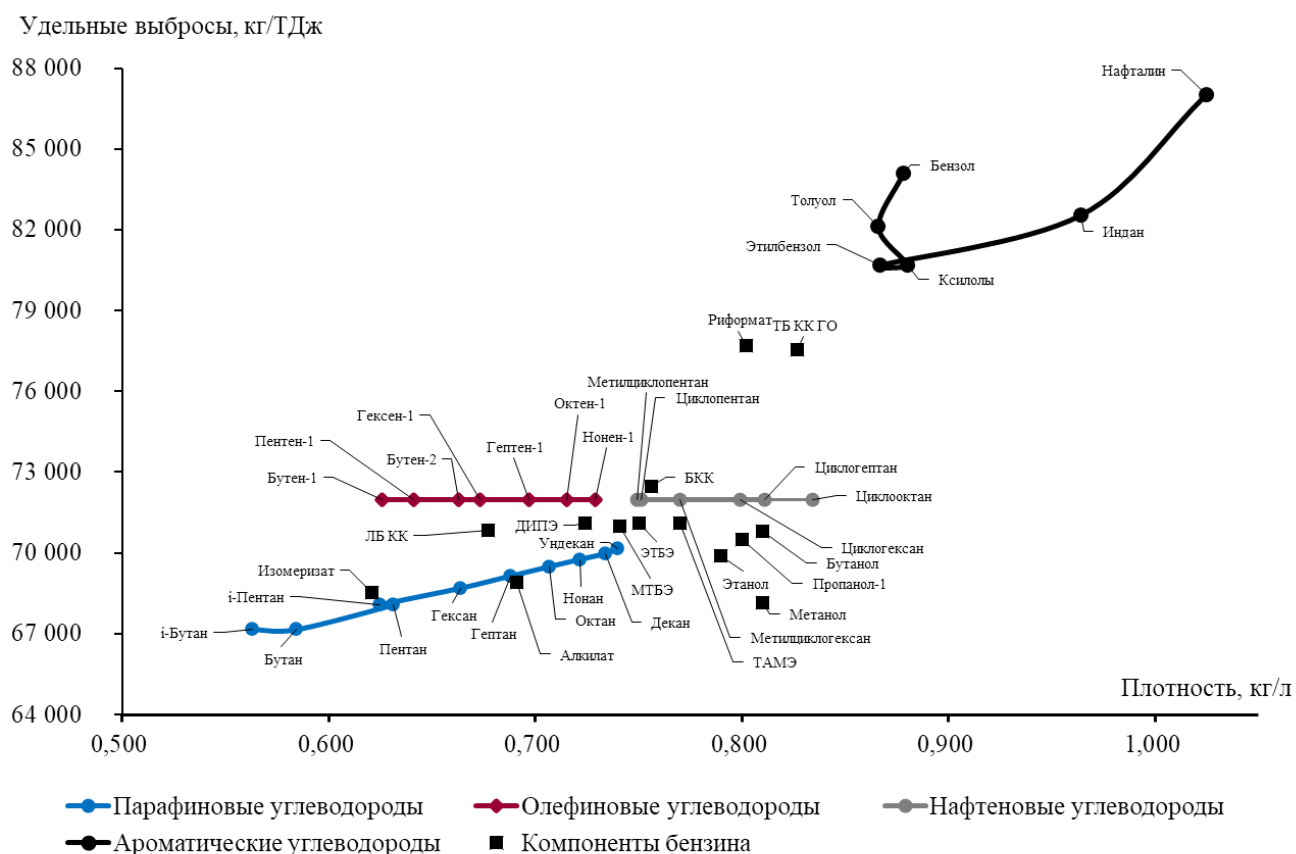


Рисунок 3.2 – Зависимость коэффициента удельных выбросов на единицу получаемой энергии CO_2 от плотности углеводородов, высокооктановых компонентов бензинов и оксигенатов

Сильно отличаются по коэффициентам объемных удельных выбросов и высокооктановые компоненты бензинов. Например, такие компоненты бензинов, как изомеризат и риформат по количеству выбросов на единицу объема отличаются друг от друга на 37,2 %, а по объемному коэффициенту удельных выбросов CO_2 на единицу получаемой энергии – на 46,4 %. Расчеты показывают, что объемный коэффициент удельных выбросов изомеризата на 2,8 % выше, чем у МТБЭ, а по коэффициенту удельных выбросов CO_2 на единицу получаемой энергии, наоборот у МТБЭ выше на 23,6 %.

В тоже время прослеживается определенная зависимость коэффициентов удельных выбросов от плотности для высокооктановых компонентов на углеводородной основе. Как видно из рисунков 3.3 и 3.4, данные зависимости с

достаточной точностью описываются полиномом третьего порядка. Величина достоверности аппроксимации составляет $R^2=0,9758$ и $R^2=0,9765$ соответственно.

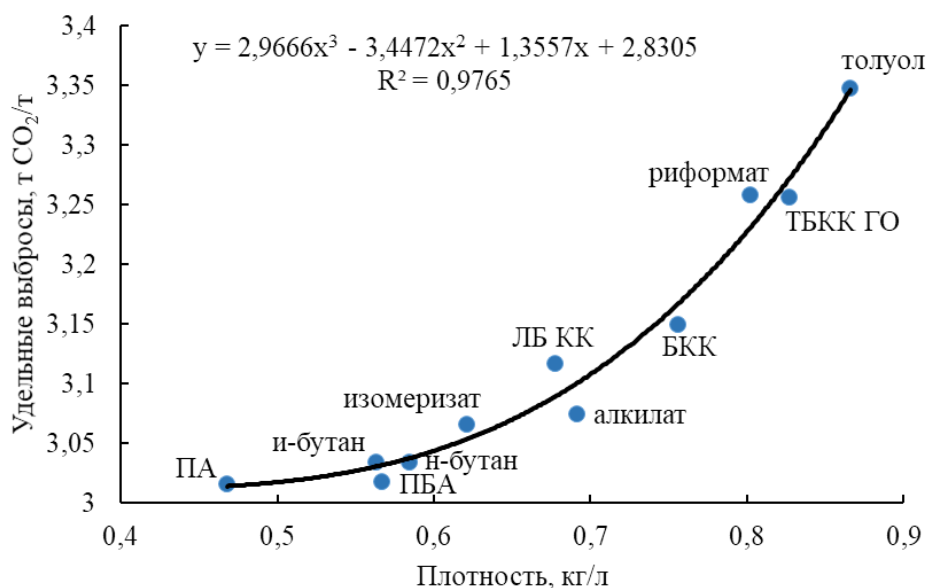


Рисунок 3.3 – Зависимость массового коэффициента удельных выбросов CO₂ от плотности высокооктановых компонентов бензинов на углеводородной основе

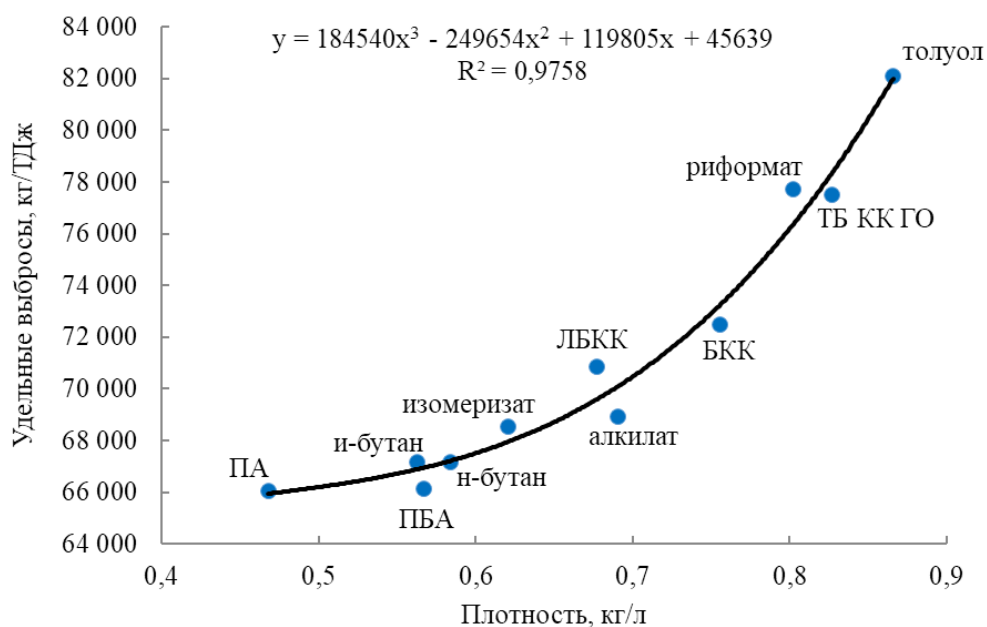


Рисунок 3.4 – Зависимость коэффициента удельных выбросов CO₂ на единицу получаемой энергии от плотности высокооктановых компонентов бензинов на углеводородной основе

Следует также отметить, что даже при введении поправки на плотность (или объемные коэффициенты выбросов) невозможно корректировать смесь бензина без учета полного химического состава. Для наглядности на рисунках 3.5, 3.6 представлены данные о зависимости вышеуказанных показателей для всех исследованных высокооктановых компонентов бензинов, в т.ч. оксигенатов.

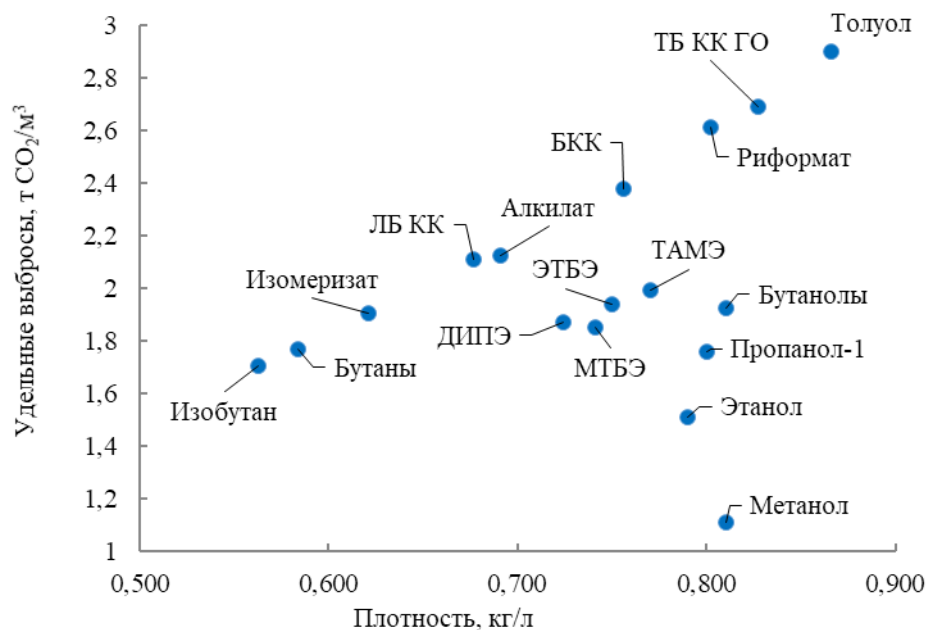


Рисунок 3.5 – Зависимость объемных коэффициентов удельных выбросов CO₂ от ПЛОТНОСТИ ВЫСОКООКТАНОВЫХ КОМПОНЕНТОВ

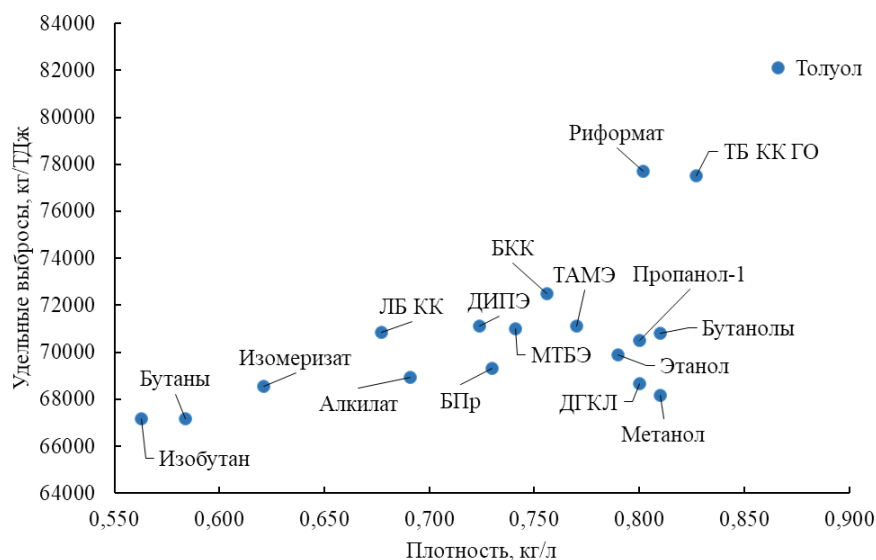


Рисунок 3.6 – Зависимость коэффициента удельных выбросов CO₂ на единицу получаемой энергии от плотности высокооктановых компонентов

С целью более детального исследования зависимостей удельных выбросов автомобильных бензинов от их углеродного состава нами были рассчитаны коэффициенты выбросов CO_2 для различных классов углеводородов, отдельных оксигенатов и высокооктановых компонентов, входящих в состав товарных топлив [127]. Полученные результаты представлены на рисунке 3.7.

Как видно из рисунка 3.7, наибольшее значение коэффициента выброса CO_2 у полициклической ароматики, затем у моноциклической ароматики, а минимальные значения коэффициентов у парафиновых углеводородов. Значения коэффициентов у олефинов и нафтенов с изменением числа атомов углерода не меняется, в то время как у парафинов и полициклической ароматики происходит их повышение, а у моноциклической ароматики наоборот снижение [129].

Удельные выбросы, т CO_2 /т

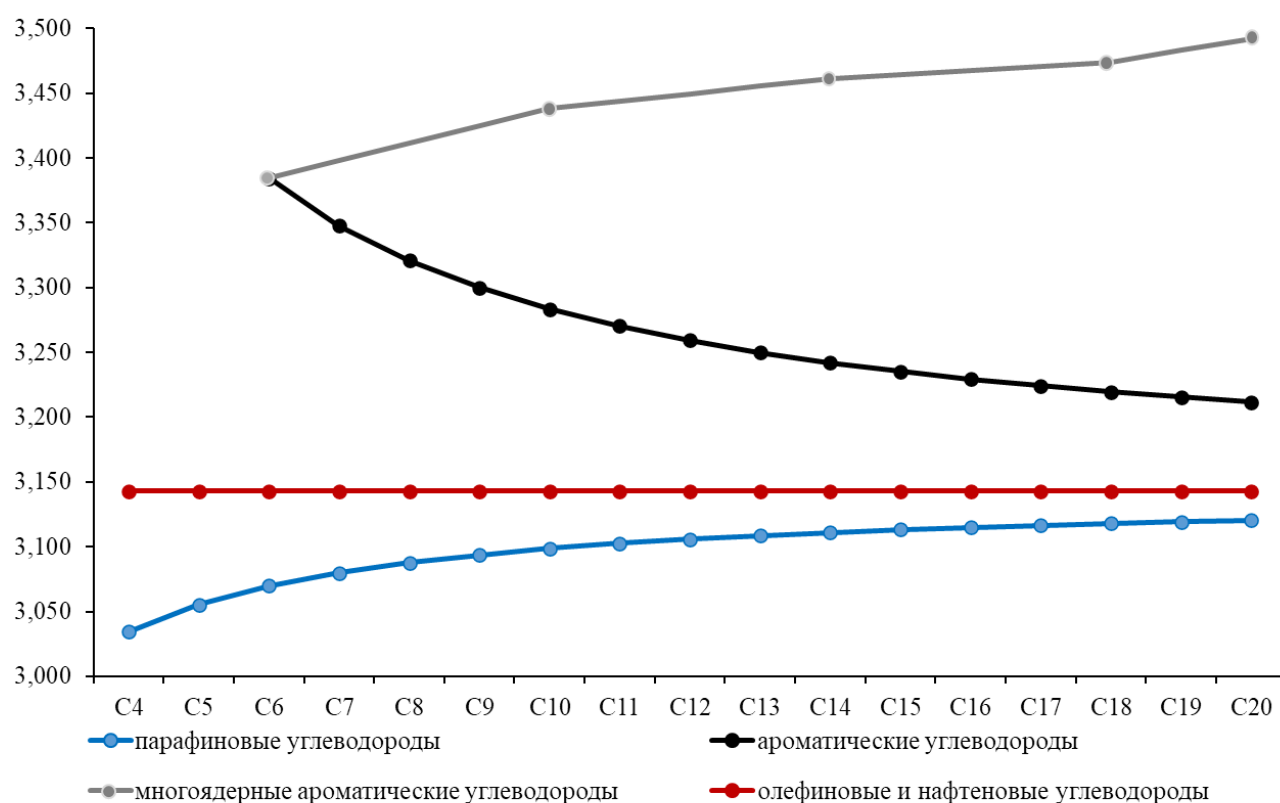


Рисунок 3.7 – Зависимость коэффициента выброса CO_2 для различных классов углеводородов от количества атомов углерода в их молекулах

3.2 Удельные выбросы высокооктановых компонентов автомобильных бензинов

Для проведения исследований зависимости удельных выбросов CO_2 от химического состава бензинов на промышленных установках были отобраны пробы наиболее распространенных высокооктановых компонентов бензинов таких как: риформат; бензин каталитического крекинга (БКК); легкий бензин каталитического крекинга не гидроочищенный (ЛБ КК); тяжелый бензин каталитического крекинга после гидроочистки (ТБ КК ГО); изомеризат; алкилат; бензин прямогонный (БПр); дистиллят газового конденсата лёгкий (ДГКЛ).

Основные физико-химические показатели исследуемых проб приведены в таблицах 3.1-3.4.

Таблица 3.1 – Физико-химические показатели пробы стабильного риформата

Наименование показателя	Ед. изм.	Значение
ОЧИМ	ед.	96,7
ОЧММ	ед.	85,5
Плотность при 15 °С	кг/л	0,804
Плотность при 20 °С	кг/л	0,802
Давление насыщенных паров	кПа	23,6
Молекулярная масса	-	129
Фракционный состав:		
- температура начала кипения (НК)		36
- перегоняется при температуре:		
- 10 % об, бензина	°С	88
- 50 % об, бензина		118
- 90 % об, бензина		156
- 98 % об, бензина		171
- температура конца кипения (КК)		188

Таблица 3.2 – Физико-химические показатели проб бензина каталитического крекинга

1. БКК		
Наименование показателя	Ед. изм.	Значение
ОЧИМ	ед.	95,1
ОЧММ	ед.	83,2
Плотность при 15 °С	кг/л	0,756
Молекулярная масса	-	102,5
2. ЛБ КК		
Наименование показателя	Ед. изм.	Значение
ОЧИМ	ед.	93,7
ОЧММ	ед.	82,1
Плотность при 15 °С	кг/л	0,677
Молекулярная масса	-	80,2
3. ТБ КК ГО		
Наименование показателя	Ед. изм.	Значение
ОЧИМ	ед.	91,1
ОЧММ	ед.	80,6
Плотность при 15 °С	кг/л	0,827
Молекулярная масса	-	125,9

Таблица 3.3 – Физико-химические показатели пробы изомеризата

Наименование показателя	Ед. изм.	Значение
ОЧИМ	ед.	76,9
ОЧММ	ед.	74,8
Плотность при 15 °С	кг/л	0,660
Плотность при 20 °С	кг/л	0,655
Давление насыщенных паров	кПа	95,9
Молекулярная масса	-	76
Фракционный состав:		
- температура начала кипения (НК)	°С	36
- температура конца кипения (КК)		64

Таблица 3.4 – Физико-химические показатели пробы алкилата

Наименование показателя	Ед. изм.	Значение
1	2	3
ОЧИМ	ед.	96,4
ОЧММ	ед.	93,2
Плотность при 15 °С	кг/л	0,703

Продолжение Таблицы 3.4

1	2	3
Плотность при 20 °С	кг/л	0,698
Давление насыщенных паров	кПа	43
Молекулярная масса	-	92,5
Фракционный состав: - температура начала кипения (НК) - перегоняется при температуре: - 10 % об, бензина - 50 % об, бензина - 90 % об, бензина - температура конца кипения (КК)	°С	42 81 106 121 188

Углеводородный состав проб определили на хроматографе Shimadzu GC 2010 Plus с капиллярной колонкой и методом газожидкостной хроматографии на аппарате Хроматэк – Кристалл 5000. Групповой углеводородный состав исследованных проб представлен в таблице 3.5.

Таблица 3.5 – Групповой углеводородсодержащий состав проб, % масс.

Группа	Риформат	БКК	ЛБ КК	ТБ КК ГО	Изомеризат	Алкилат
Н-парафины	7,68	8,91	4,91	4,57	12,48	4,11
Изо-парафины	19,86	35,47	46,46	16,91	83,10	95,89
Нафтенy	0,85	6,91	6,30	1,90	4,42	0,00
Олефины	0,00	25,63	36,92	0,00	0,00	0,00
Ароматика	71,61	23,07	5,40	76,63	0,00	0,00
Сумма	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00

Исследования состава риформата показали, что в нем преобладают ароматические углеводороды (71,61 %). Максимальное содержание в риформате углеводородов с числом атомов углерода C_8 , далее у C_7 и C_9 (20,60 %, 19,56 %, 15,72 % соответственно). В общей сложности их содержание составляет 84,02 % от общего содержания ароматики в риформате. Детальный анализ хроматограмм показывает, что C_8 представлен в основном 1,3-диметилбензолом (8,71 %), 1,2-диметилбензолом (5,01 %), 1,4-диметилбензолом (3,69 %) и этилбензолом (3,19 %). Углеводороды C_9 представлены в основном: 1,2,4-триметилбензолом

(5,60 %), 1,3-метилэтилбензолом (3,12 %), 1,4-метилэтилбензолом (1,41 %), 1,3,5-триметилбензолом (1,40 %), 1,2,3-триметилбензолом (1,27 %) и 1,2-метилэтилбензолом (1,23 %).

Анализы показывают, что изомеризат практически полностью состоит из парафинов, суммарное содержание которых составляет более 95 %, в т.ч. парафинов изо-строения – более 83 %.

В хроматограммах пробы БКК обнаружено 414 углеводорода, суммарное содержание которых составляет 99,33 % масс. (0,67 % - неидентифицированные). В БКК обнаружено восемь гомологов диметилнафталинов с температурой кипения выше 250 °С, общее содержание которых составляет 0,02 % от массы, а также некоторые полициклические ароматические углеводороды и серосодержащие соединения с температурой кипения значительно превышающей температуру конца кипения бензина [128].

Для большинства стран и отдельных компаний БКК является одним из основных компонентов автобензинов. Часть его в суммарном бензиновом пуле порой превышает 35 % [9,17]. В связи с продолжающимся ростом глубины нефтепереработки на сегодняшний день отмечается динамика увеличения доли БКК в глобальном бензиновом балансе. Этому также способствует принятие более строгих экологических норм касательно автомобильных бензинов [61].

БКК по сравнению с риформатом отличается более равномерным распределением стойкости к детонации по фракциям бензина. К недостаткам БКК можно отнести то, что он считается ключевым источником серы и олефиновых соединений в автомобильных бензинах. В тяжелой части бензина каталитического крекинга содержание ароматических углеводородов достигает до 40 % об. и более, в том числе и бензола – в рамках 0,3-1,5 % об. [15,77].

Для удаления серы БКК подвергают «постгидроочистке», в процессе которой происходит и гидрирование олефинов [100,138]. Поскольку октановое число компаундирования олефинов немного выше таковых у соответствующих парафинов, это может вызвать определенное снижение октанового числа бензина [76,70]. Серосодержащие соединения неравномерно распределены по фракциям

бензина – чем легче фракция, тем меньше в ней содержание серы. С учетом этого гидроочистке подвергают не весь БКК, а в основном только тяжелую часть, где сконцентрированы основные серосодержащие соединения [3,48].

Обзор литературы [45] показывает, что по итогам гидроочистки тяжелой части бензина, содержание олефинов может сохраняться на достаточно высоком уровне – более 20 % масс. Например, содержание олефинов после гидроочистки снизилось всего на 4,2 % масс. в пересчете на весь суммарный бензин. Как было уже отмечено выше, нет необходимости полного гидрирования олефинов, так как это приводит к снижению октанового числа бензина. Параметры процесса подбирают так, чтобы в товарном бензине суммарное содержание олефинов не превышало требований стандартов (например, по К-5 не более 18 %). По данным авторов содержание парафинов при гидроочистке повысилось на 7,67 %, что объясняется частичным гидрированием и ароматики (минус 1,57 % масс.).

Расчеты показывают, что после гидроочистки произошло повышение теплотворной способности бензина на 0,22 % (с 43,24 МДж/кг до 43,34 МДж/кг после гидроочистки), удельные выбросы CO_2 на тонну бензина, наоборот повысились на 0,22 %, а на единицу получаемой энергии – на 0,43 %. Согласно расчетам, при полном гидрировании олефинов теплотворная способность бензина может повыситься только на 0,71 % масс. [128]. При этом удельные выбросы CO_2 на тонну бензина снизятся на 0,70 %, а на единицу получаемой энергии – на 1,35% соответственно.

В хроматограммах пробы ЛБ КК обнаружен 171 углеводород, с общим содержанием 99,98 % масс. (0,02 % - неопознанные). В ЛБ КК доминируют углеводороды изостроения, содержание изопарафинов составляет около 47 %, а изоолефинов – 37 % масс.

В пробе ТБ КК ГО зафиксировано 347 углеводородов с общим содержанием 100,00 %. Среди классов углеводородов в ней преобладают ароматические – 76,62%, далее идут изопарафины – 16,91 %. Следует отметить, что содержание ароматических углеводородов в ТБ КК ГО даже несколько выше, чем в риформате.

Содержание олефинов в бензине равно нулю, что свидетельствует об их полном гидрировании в ходе гидроочистки.

Алкилат представлен практически полностью парафиновыми углеводородами, 96 % из которых имеют изостроение.

В таблицах 3.10 – 3.15 представлены углеводороды, содержание которых в исследованных пробах составляет более 0,3 %. Там же приведены значения теплотворной способности и коэффициентов выброса диоксида углерода вышеуказанных углеводородов. В таблице 3.16 – 3.18 приведены аналогичные свойства основных оксигенатов, вводимых в состав товарных бензинов и бензинов прямогонного и газоконденсатного, которые также на некоторых НПЗ вводятся в состав товарных бензинов.

Как следует из таблиц 3.10 – 3.18, среди исследованных проб бензинов минимальной теплотворной способностью обладают ТБ КК ГО и риформат – 42,07 и 42,04 МДж/кг соответственно. Низкая теплотворная способность данных компонентов связана, в первую очередь, с высоким содержанием в них ароматических углеводородов. Максимальные значения теплотворной способности у изомеризата и алкилата (44,74 и 44,62 МДж/кг соответственно), что объясняется преобладанием в их составе насыщенных водородом парафинов.

Анализ показывает, что максимальные значения коэффициентов выбросов CO_2 , наоборот у риформата и ТБ КК ГО (3,258 т CO_2 /т, 77702 кг/ТДж и 3,256 т CO_2 /т, 77527 кг/ТДж соответственно). Среди углеводородных высокооктановых компонентов товарных автомобильных бензинов, по данным показателям вышеуказанные компоненты уступают лишь толуолу (3,348 т CO_2 /т и 82113 кг/ТДж соответственно), который на некоторых НПЗ нефтехимического профиля также используется в качестве высокооктанового компонента товарных бензинов. Минимальные выбросы у изомеризата и алкилата (3,066 т CO_2 /т, 68535 кг/ТДж и 3,075 т CO_2 /т, 68914 кг/ТДж соответственно).

В таблице 3.6 представлены теплотворная способность и коэффициенты выбросов диоксида углерода основных высокооктановых компонентов

автомобильных бензинов в порядке убывания их массового коэффициента выбросов диоксида углерода.

Как следует из таблицы 3.6, среди высокооктановых компонентов автомобильных бензинов максимальные коэффициенты выбросов диоксида углерода, как на единицу массы топлива, так и на единицу получаемого тепла, у толуола, далее следуют риформат и ТБ КК ГО. Минимальные значения этих показателей среди углеводородных высокооктановых компонентов у бутанов и изомеризата. Среди всех высокооктановых компонентов бензинов минимальные выбросы диоксида углерода на единицу массы топлива у метанола и этанола. В то же время, коэффициенты выбросов на единицу получаемой энергии у вышеуказанных оксигентов несколько выше, чем у бутана и изомеризата. В таблице 3.7 те же высокооктановые компоненты бензинов расположены по мере снижения их коэффициента выброса диоксида углерода на единицу получаемой энергии.

Таблица 3.6 – Теплотворная способность и массовые коэффициенты выбросов диоксида углерода основных высокооктановых компонентов автомобильных бензинов в порядке убывания

Компонент	Теплотворная способность, МДж/кг	Коэффициент выбросов	
		т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4
Толуол	40,77	3,348	82 113
Риформат	42,04	3,258	77 702
ТБ КК ГО	42,07	3,256	77 527
БКК	43,56	3,150	72 474
ЛБ КК	44,03	3,117	70 858
БПр	44,50	3,083	69 298
Алкилат	44,62	3,075	68 914
ДГКЛ	44,70	3,069	68 669
Изомеризат	44,74	3,066	68 535
Бутаны	45,19	3,034	67 151
ТАМЭ	36,40	2,588	71 102

Продолжение Таблицы 3.6

1	2	3	4
ДИПЭ	36,40	2,588	71 102
МТБЭ	35,22	2,500	70 980
Бутанолы	33,59	2,378	70 797
Пропанол-1	31,21	2,200	70 495
Этанол	27,37	1,913	69 898
Метанол	20,17	1,375	68 166

Таблице 3.7 – Теплотворная способность и в порядке убывания коэффициенты выбросов диоксида углерода на единицу получаемой энергии основных высокооктановых компонентов автомобильных

Компонент	Теплотворная способность, МДж/кг	Коэффициент выбросов	
		т CO ₂ /т	кг/ТДж
Толуол	40,77	3,348	82 113
Риформат	42,04	3,258	77 702
ТБ КК ГО	42,07	3,256	77 527
БКК	43,56	3,150	72 474
ЭТБЭ	36,40	2,588	71 102
ТАМЭ	36,40	2,588	71 102
ДИПЭ	36,40	2,588	71 102
МТБЭ	35,22	2,500	70 980
ЛБ КК	44,03	3,117	70 858
Бутанолы	33,59	2,378	70 797
Пропанол-1	31,21	2,200	70 495
Этанол	27,37	1,913	69 898
БПр	44,50	3,083	69 298
Алкилат	44,62	3,075	68 914
ДГКЛ	44,70	3,069	68 669
Изомеризат	44,74	3,066	68 535
Метанол	20,17	1,375	68 166
Бутаны	45,19	3,034	67 151

Расчеты также показывают, что значение массовых выбросов на единицу объема с учетом плотности топлива среди высокооктанового компонентов

бензинов максимально у толуола (2,899 т $\text{CO}_2/\text{м}^3$), далее идут ТБ КК ГО и риформат. Минимальное значение выбросов у метанола (1,114 т $\text{CO}_2/\text{м}^3$), что на 160,3 % меньше по сравнению с толуолом. Выбросы диоксида углерода на единицу получающегося тепла с учетом плотности топлива также максимальны у толуола (71110 кг/ТДж), и минимальны у изобутана (37813 кг/ТДж). Разница между выбросами составляет 81,3 %, что значительно выше таковых без учета плотности. В таблицах 3.8 и 3.9 те же высокооктановые компоненты бензинов расположены по мере снижения их массового коэффициента выброса диоксида углерода и коэффициента выброса диоксида углерода на единицу получаемого тепла с учетом поправки на плотность.

Как показывают исследования индивидуального химического состава высокооктановых компонентов автомобильных бензинов, а также расчеты их теплотворной способности и удельных выбросов CO_2 , вышеуказанные компоненты сильно разнятся как по составу, так и по исследованным показателям. Хотя и прослеживается определенная зависимость удельных выбросов CO_2 от плотности, эти показатели определяются, в первую очередь, химическим составом топлива.

Таблица 3.8 – Теплотворная способность и массовые коэффициенты выбросов диоксида углерода основных высокооктановых компонентов автомобильных бензинов с учетом поправки на плотность в порядке убывания

Компонент	Теплотворная способность, МДж/кг	Плотность, кг/л	Коэффициент выбросов	
			т $\text{CO}_2/\text{м}^3$	кг/ТДж
1	2	3	4	5
Толуол	40,77	0,866	2,899	71 110
ТБ КК ГО	42,07	0,827	2,693	64 115
Риформат	42,04	0,802	2,613	62 317
ДГКЛ	44,70	0,800	2,455	54 935
БКК	43,56	0,756	2,381	54 790
БПр	44,50	0,730	2,251	50 588
Алкилат	44,62	0,691	2,125	47 620
ЛБ КК	44,03	0,677	2,110	47 971
ТАМЭ	36,40	0,770	1,993	54 749

Продолжение Таблицы 3.8

1	2	3	4	5
ЭТБЭ	36,40	0,750	1,941	53 327
Бутанолы	33,59	0,810	1,926	57 346
Изомеризат	44,74	0,621	1,904	42 560
ДИПЭ	36,40	0,724	1,874	51 478
МТБЭ	35,22	0,741	1,853	52 596
Бутан	45,19	0,584	1,772	39 216
Пропанол-1	31,21	0,800	1,760	56 396
Изобутан	45,19	0,563	1,708	37 813
Этанол	27,37	0,790	1,511	55 219
Метанол	20,17	0,810	1,114	55 214

Таблица 3.9 – Теплотворная способность и коэффициенты выбросов диоксида углерода на единицу получаемого тепла основных высокооктановых компонентов автомобильных с учетом поправки на плотность в порядке убывания

Компонент	Теплотворная способность, МДж/кг	Плотность, кг/л	Коэффициент выбросов	
			т CO ₂ /м ³	кг/ТДж
Толуол	40,77	0,866	2,899	71 110
ТБ КК ГО	42,07	0,827	2,693	64 115
Риформат	42,04	0,802	2,613	62 317
Бутанолы	33,59	0,810	1,926	57 346
Пропанол-1	31,21	0,800	1,760	56 396
Этанол	27,37	0,790	1,511	55 219
Метанол	20,17	0,810	1,114	55 214
ДГКЛ	44,70	0,800	2,455	54 935
БКК	43,56	0,756	2,381	54 790
ТАМЭ	36,40	0,770	1,993	54 749
ЭТБЭ	36,40	0,750	1,941	53 327
МТБЭ	35,22	0,741	1,853	52 596
ДИПЭ	36,40	0,724	1,874	51 478
БПр	44,50	0,730	2,251	50 588
ЛБ КК	44,03	0,677	2,110	47 971
Алкилат	44,62	0,691	2,125	47 620
Изомеризат	44,74	0,621	1,904	42 560
Бутан	45,19	0,584	1,772	39 216
Изобутан	45,19	0,563	1,708	37 813

Полученные данные показывают, что максимальное отличие по массовым коэффициентам удельных выбросов диоксида углерода между высокооктановыми компонентами автомобильных бензинов может составить до 143 % (толуол и метанол – 3,348 и 1,375 т $\text{CO}_2/\text{т}$ соответственно), а такие распространенные компоненты как риформат и МТБЭ отличаются на 30,3 %.

Если перейти к удельным выбросам отдельных углеводородов или соединений, входящих в состав бензинов замечено, что максимальное отличие по массовому коэффициенту удельных выбросов диоксида углерода среди индивидуальных соединений, входящих в состав бензинов, может составить 146 % (у бензола 3,385 т $\text{CO}_2/\text{т}$ и 1,375 т $\text{CO}_2/\text{т}$ у метанола), а по коэффициенту удельных выбросов на единицу получаемой энергии – 25 % (у бензола 84085 кг/ТДж и 67151 кг/ТДж у бутанов). Среди углеводородов, входящих в состав бензинов, максимальная разница между бензолом и бутанами составляет 11,6 % на единицу массы (3,385 и 3,034 т $\text{CO}_2/\text{т}$) и 25,2 % (84085 и 67151 кг/ТДж) на единицу выделяющейся энергии.

Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что высокооктановые компоненты автомобильных бензинов сильно разнятся по удельным выбросам диоксида углерода, как на единицу массы сгораемого топлива, так и на единицу получаемой энергии.

Следовательно, регулирование химического состава автомобильных бензинов с учетом минимизации выбросов диоксида углерода в атмосферу в процессе их потребления можно рассматривать как один из наиболее доступных вариантов низкоуглеродной модели развития транспортного сектора. Данное направление не требует изменения конструкции двигателей внутреннего сгорания или внедрения новой инфраструктуры, как в случае, например, применения двигателей, работающих на чистом водороде.

3.3 Исследования удельных выбросов CO₂ товарных бензинов

Для исследования удельных выбросов CO₂ товарных автомобильных бензинов на промышленных предприятиях были получены данные по компонентному составу и проведены расчеты выбросов наиболее распространенных марок бензинов – АИ-92 и АИ-95. На данных предприятиях товарные бензины готовят на базе следующих компонентов: риформат, ТБ КК ГО, ЛБ КК, алкилат, изомеризат, МТБЭ, толуол, бутаны, ККФ (бензин каталитического крекинга флюид), бензин прямогонный (БПр), дистиллят газового конденсата лёгкий (ДГКЛ), бутанолы и др. Результаты исследований приведены в таблице 3.19.

Расчеты показывают, что максимальная разница массовых удельных выбросов среди партий бензина АИ-92 составляет 3,1 % (3,231 и 3,134 т CO₂/т), а на единицу выделяющегося тепла - на 5,5 % (76389 и 72379 кг/ТДж). Аналогичные показатели для партий бензина АИ-95 составляют 3,8 % (3,197 и 3,081 т CO₂/т) и 3,3 % (74781 и 72412 кг/ТДж). Средние значения данных показателей для АИ-92 составило 3,204 т CO₂/т, а для АИ-95 - 3,175 т CO₂/т. Следует отметить, что как по максимальному, так и по минимальному значениям, удельные выбросы у марки бензина АИ-92 выше, чем у марки АИ-95. В то же время согласно принятой методике, утвержденной приказом Минприроды №371 от 27.05.2022, при одинаковых значениях коэффициента массовых выбросов обоих марок бензинов равных 3,026 т CO₂/т, значение плотности для бензина марки АИ-92 принято за 0,735 кг/л, а для АИ-95 - 0,750 кг/л. Максимальная разница в массовых удельных выбросах среди всех исследованных партий бензинов составила 4,9 % (3,231 и 3,081 т CO₂/т), а на единицу выделяющегося тепла - 5,5 %.

Также были проведены исследования влияния содержания некоторых компонентов на удельные выбросы CO₂ товарных бензинов.

Как видно из рисунков 3.8, 3.9 при введении в состав товарного бензина АИ-95 до максимально допустимого значения МТБЭ (15 % об.), массовые удельные выбросы снижаются на 3,4 %, а на единицу получаемой энергии на 0,7%.

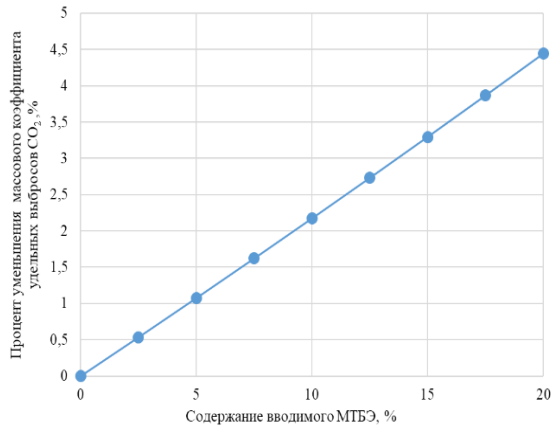


Рисунок 3.8 – Изменение массового коэффициента удельных выбросов CO₂ от содержания МТБЭ

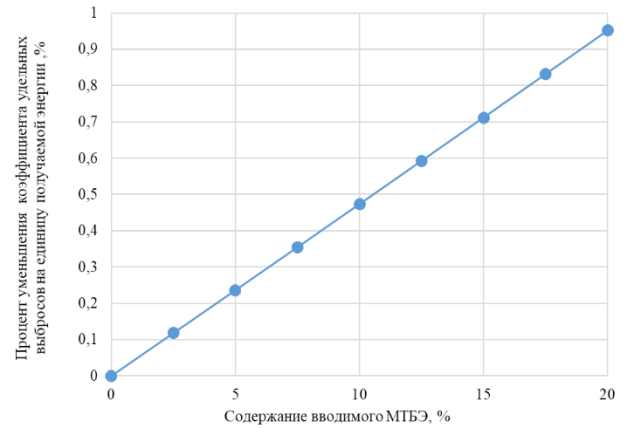


Рисунок 3.9 – Изменение коэффициента удельных выбросов CO₂ на единицу получаемой энергии от содержания МТБЭ

При аналогичных значениях вводимого в состав бензинов изомеризата массовые удельные выбросы CO₂ снижаются на 1,3 % масс., а на единицу получаемой энергии на 1,0 % (рисунок 3.10 и 3.11). В случае толуола наоборот, аналогичные показатели повышаются на 0,8 и 1,7 % соответственно (рисунки 3.12 - 3.13).

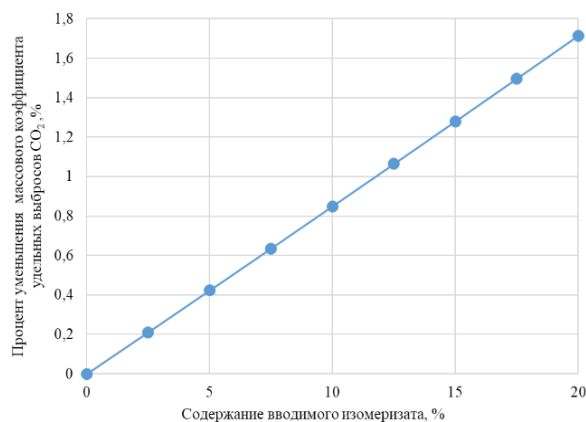


Рисунок 3.10 – Изменение массового коэффициента удельных выбросов CO₂ от содержания изомеризата

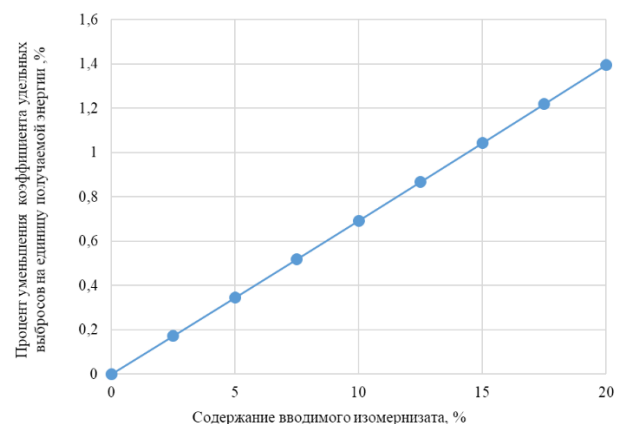


Рисунок 3.11 – Изменение коэффициента удельных выбросов CO₂ на единицу получаемой энергии от содержания изомеризата

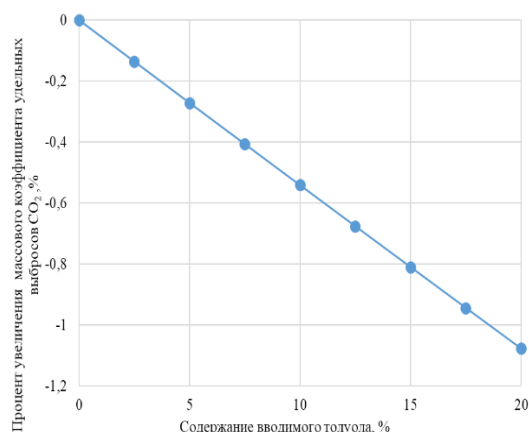


Рисунок 3.12 – Изменение массового коэффициента удельных выбросов CO₂ от содержания толуола

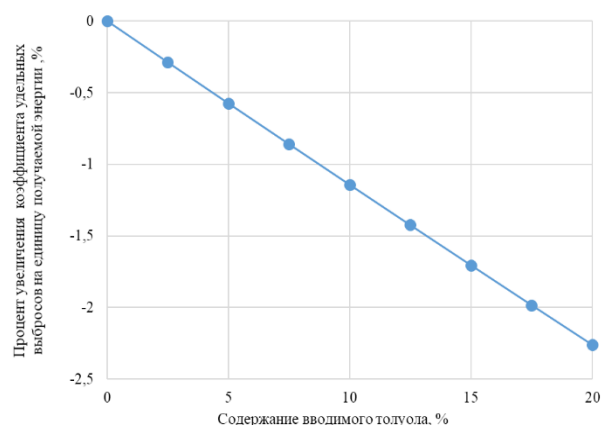


Рисунок 3.13 – Изменение коэффициента удельных выбросов CO₂ на единицу получаемой энергии от содержания толуола

Как было показано в предыдущей главе, типовые пробы риформата и изомеризата по массовому коэффициенту удельных выбросов CO₂ отличаются на 6,3 %, а по коэффициенту удельных выбросов на единицу получаемой энергии CO₂ 13,4 %.

На рисунке 3.14 показана зависимость разницы в коэффициентах удельных выбросов CO₂ на единицу получающегося энергии для основных углеводородов в риформате и изомеризате от числа атома углерода в их молекулах. Как следует из рисунка если разница в удельных выбросах при числе атомов углерода C₆ составляет 22,4 %, то при числе атомов C₇ она составляет 18,8 %, а при числе атомов C₈ - 16,1 %. Следовательно, с утяжелением сырья процессов разность между удельными выбросами изомеризата и риформата будет снижаться. Расчеты показывают, что удельные выбросы CO₂ на единицу получаемой энергии даже с утяжелением сырья у изомеризата остается выше, чем у наиболее распространенных оксигенатов.

Следует отметить, что при относительно небольших изменениях удельных выбросов бензина в целом при введении отдельных компонентов, ввод в бензиновый пул дополнительно 1 т бутанов, позволяет снизить выбросы CO₂ от

среднестатистического показателя бензина АИ-92 на 5 % масс. и 10 % на единицу получаемой энергии. Аналогичные показатели для изомеризата составляют 4 и 8 % соответственно. При введении в бензиновый пул дополнительно 1 т толуола, аналогичные показатели, наоборот, повышаются на 5 и 10 %, а при введении риформата и ТБ КК ГО на 2 и 4 % соответственно.

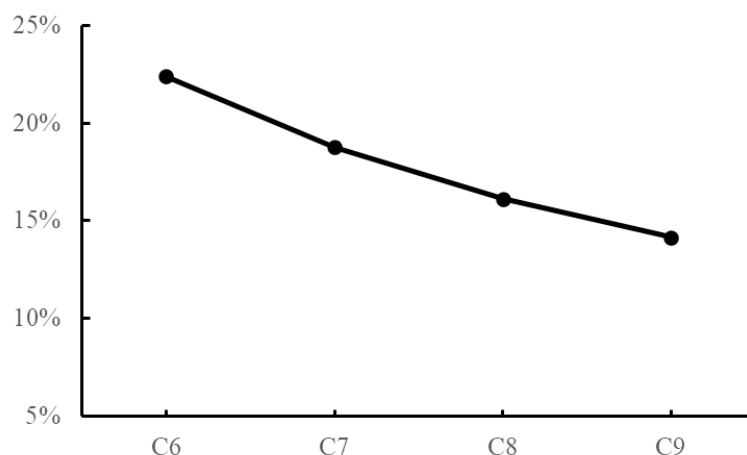


Рисунок 3.14 – Зависимость разницы коэффициента удельных выбросов CO_2 на единицу получающейся энергии от числа атомов углерода

Выводы к главе 3

В результате проведенных исследований показано, что высокооктановые компоненты автомобильных бензинов сильно разнятся по удельным выбросам CO_2 на единицу массы сгораемого топлива и по удельным выбросам CO_2 на единицу получаемой энергии.

По массовому коэффициенту удельных выбросов CO_2 , составляющие бензинов могут отличаться до 143 %, а по коэффициенту удельных выбросов на единицу получаемой энергии - до 22,3 %. Следовательно, регулирование химического состава автомобильных бензинов с учетом минимизации выбросов диоксида углерода в атмосферу в процессе их потребления можно рассматривать, как один из наиболее доступных вариантов низкоуглеродной модели развития транспортного сектора. Данное направление не требует изменения конструкции двигателей внутреннего сгорания или внедрения новой инфраструктуры, как в случае, например, применения двигателей, работающих на чистом водороде.

Таблица 3.10 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода риформата

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot$ МДж	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
						т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Парафины	пентан	C ₅ H ₁₂	1,151	44,89	52	3,056	68 065	0,035	784
Парафины	гексан	C ₆ H ₁₄	2,414	44,69	108	3,070	68 688	0,074	1 658
Парафины	гептан	C ₇ H ₁₆	3,151	44,55	140	3,080	69 140	0,097	2 179
Парафины	октан	C ₈ H ₁₈	0,960	44,44	43	3,088	69 483	0,030	667
Изо-парафины	изо-пентан	i-C ₅ H ₁₂	1,694	44,89	76	3,056	68 065	0,052	1 153
Изо-парафины	2,2-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	0,370	44,69	17	3,070	68 688	0,011	254
Изо-парафины	2,3-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	0,415	44,69	19	3,070	68 688	0,013	285
Изо-парафины	2-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	2,118	44,69	95	3,070	68 688	0,065	1 455
Изо-парафины	3-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	1,672	44,69	75	3,070	68 688	0,051	1 148
Изо-парафины	2-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	7,493	44,55	334	3,080	69 140	0,231	5 181

Продолжение Таблицы 3.10

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Изо-парафины	2,4-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	0,585	44,55	26	3,080	69 140	0,018	405
Изо-парафины	2,3-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	1,241	44,55	55	3,080	69 140	0,038	858
Изо-парафины	3,3-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	0,484	44,55	22	3,080	69 140	0,015	334
Изо-парафины	2,2-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	0,463	44,55	21	3,080	69 140	0,014	320
Изо-парафины	3-метил-3-этил-пентан	i-C ₈ H ₁₈	0,440	44,44	20	3,088	69 483	0,014	306
Изо-парафины	2-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	0,921	44,44	41	3,088	69 483	0,028	640
Изо-парафины	3-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	1,123	44,44	50	3,088	69 483	0,035	780
Изо-парафины	2,2,4-триметил-пентан	i-C ₈ H ₁₈	0,412	44,44	18	3,088	69 483	0,013	286
Изо-парафины	2,4-диметилгексан	i-C ₈ H ₁₈	0,428	44,44	19	3,088	69 483	0,013	297
Нафтены	метилциклопентан	C ₆ H ₁₂	0,853	43,66	37	3,143	71 983	0,027	614
Ароматика	бензол	C ₆ H ₆	7,978	40,25	321	3,385	84 085	0,270	6 708

Продолжение Таблицы 3.10

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ароматика	толуол	C ₇ H ₈	21,063	40,77	859	3,348	82 113	0,705	17 295
Ароматика	этилбензол	C ₈ H ₁₀	3,438	41,15	141	3,321	80 694	0,114	2 774
Ароматика	1,3-диметилбензол	C ₈ H ₁₀	9,384	41,15	386	3,321	80 694	0,312	7 573
Ароматика	1,2-диметилбензол	C ₈ H ₁₀	5,390	41,15	222	3,321	80 694	0,179	4 350
Ароматика	1,4-диметилбензол	C ₈ H ₁₀	3,970	41,15	163	3,321	80 694	0,132	3 203
Ароматика	н-пропилбензол	C ₉ H ₁₂	1,068	41,45	44	3,300	79 623	0,035	850
Ароматика	1-метил-3-этил-бензол	C ₉ H ₁₂	3,361	41,45	139	3,300	79 623	0,111	2 676
Ароматика	1,2,3-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	1,368	41,45	57	3,300	79 623	0,045	1 090
Ароматика	1,3,5-триметил-бензол	C ₉ H ₁₂	1,504	41,45	62	3,300	79 623	0,050	1 197
Ароматика	1-метил-4-этил-бензол	C ₉ H ₁₂	1,515	41,45	63	3,300	79 623	0,050	1 206
Ароматика	1-метил-2-этил-бензол	C ₉ H ₁₂	1,329	41,45	55	3,300	79 623	0,044	1 058
Ароматика	1,2,4-триметил-бензол	C ₉ H ₁₂	6,029	41,45	250	3,300	79 623	0,199	4 800

Продолжение Таблицы 3.10

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ароматика	изо-пропилбензол	C ₉ H ₁₂	0,339	41,45	14	3,300	79 623	0,011	270
Ароматика	1,4-диметил-2-этилбензол	C ₉ H ₁₄	0,412	42,21	17	3,246	76 902	0,013	317
Ароматика	1,3-диметил-2-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,714	41,68	30	3,284	78 787	0,023	562
Ароматика	1,3-метил-н-пропилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,557	41,68	23	3,284	78 787	0,018	439
Ароматика	1,2,3,5-тетраметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,575	41,68	24	3,284	78 787	0,019	453
Ароматика	1,3-диметил-5-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,527	41,68	22	3,284	78 787	0,017	415
Ароматика	1-этил-2,4-диметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,372	41,68	16	3,284	78 787	0,012	293
Ароматика	1,2,4,5-тетраметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,391	41,68	16	3,284	78 787	0,013	308
Ароматика	1,4-метил-н-пропилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,330	41,68	14	3,284	78 787	0,011	260
Итого 42	-	-	100,000	-	4204	-	-	3,258	77 702

Таблица 3.11 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода БКК

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot$ МДж	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
						т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Парафины	бутан	C ₄ H ₁₀	1,653	45,19	75	3,034	67 151	0,050	1 110
Парафины	пентан	C ₅ H ₁₂	1,709	44,89	77	3,056	68 065	0,052	1 163
Парафины	гексан	C ₆ H ₁₄	2,495	44,69	112	3,070	68 688	0,077	1 714
Парафины	гептан	C ₇ H ₁₆	1,350	44,55	60	3,080	69 140	0,042	934
Парафины	октан	C ₈ H ₁₈	0,852	44,44	38	3,088	69 483	0,026	592
Парафины	нонан	C ₉ H ₂₀	0,487	44,35	22	3,094	69 752	0,015	340
Парафины	декан	C ₁₀ H ₂₂	0,367	44,29	16	3,099	69 969	0,011	257
Изо-парафины	изо-бутан	i-C ₄ H ₁₀	2,555	45,19	115	3,034	67 151	0,078	1 716
Изо-парафины	изо-пентан	i-C ₅ H ₁₂	9,944	44,89	446	3,056	68 065	0,304	6 768
Изо-парафины	2,3-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	1,154	44,69	52	3,070	68 688	0,035	793

Продолжение Таблицы 3.11

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Изо-парафины	2-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	5,238	44,69	234	3,070	68 688	0,161	3 598
Изо-парафины	3-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	3,427	44,69	153	3,070	68 688	0,105	2 354
Изо-парафины	2-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	3,077	44,55	137	3,080	69 140	0,095	2 128
Изо-парафины	2,4-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	0,646	44,55	29	3,080	69 140	0,020	446
Изо-парафины	3-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	2,371	44,55	106	3,080	69 140	0,073	1 640
Изо-парафины	2-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	1,119	44,44	50	3,088	69 483	0,035	778
Изо-парафины	3-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	1,303	44,44	58	3,088	69 483	0,040	905
Изо-парафины	2,5-диметилгексан	i-C ₈ H ₁₈	0,243	44,44	11	3,088	69 483	0,008	169
Изо-парафины	2,4-диметилгексан	i-C ₈ H ₁₈	0,305	44,44	14	3,088	69 483	0,009	212
Изо-парафины	4-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	0,486	44,44	22	3,088	69 483	0,015	338
Изо-парафины	3-этилгексан	i-C ₈ H ₁₈	0,299	44,44	13	3,088	69 483	0,009	208
Изо-парафины	3-метилоктан	i-C ₉ H ₂₀	0,602	44,35	27	3,094	69 752	0,019	420

Продолжение Таблицы 3.11

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Изо-парафины	2-метилоктан	i-C ₉ H ₂₀	0,574	44,35	25	3,094	69 752	0,018	400
Изо-парафины	4-метилоктан	i-C ₉ H ₂₀	0,452	44,35	20	3,094	69 752	0,014	315
Изо-парафины	2,5-диметилгептан	i-C ₉ H ₂₀	0,293	44,35	13	3,094	69 752	0,009	205
Изо-парафины	3-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	0,333	44,29	15	3,099	69 969	0,010	233
Изо-парафины	4-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	0,270	44,29	12	3,099	69 969	0,008	189
Изо-парафины	2-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	0,354	44,29	16	3,099	69 969	0,011	247
Изо-парафины	3,6-диметилоктан	i-C ₁₀ H ₂₂	0,427	44,29	19	3,099	69 969	0,013	299
Нафтенy	циклопентан	C ₅ H ₁₀	0,320	43,66	14	3,143	71 983	0,010	230
Нафтенy	метилциклопентан	C ₆ H ₁₂	2,297	43,66	100	3,143	71 983	0,072	1 654
Нафтенy	1-метилциклопентен	C ₆ H ₁₂	0,706	43,66	31	3,143	71 983	0,022	508
Нафтенy	цис-1,3-диметилциклопентан	C ₇ H ₁₄	0,778	43,66	34	3,143	71 983	0,024	560

Продолжение Таблицы 3.11

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Нафтыны	транс-1,3-диметил-циклопентан	C7H14	0,576	43,66	25	3,143	71 983	0,018	415
Нафтыны	транс-1-диметил-циклопентан-2	C7H14	0,359	43,66	16	3,143	71 983	0,011	258
Нафтыны	метилциклогексан	C7H14	1,173	43,66	51	3,143	71 983	0,037	844
Нафтыны	этилциклопентан	C7H14	0,423	43,66	18	3,143	71 983	0,013	304
Нафтыны	1-цикло-3-диметил-циклогексан	C8H16	0,280	43,66	12	3,143	71 983	0,009	201
Олефины	бутен-1	C4H8	0,453	43,66	20	3,143	71 983	0,014	326
Олефины	транс-бутен-2	C4H8	3,564	43,66	156	3,143	71 983	0,112	2 566
Олефины	цикло-бутен-2	C4H8	1,888	43,66	82	3,143	71 983	0,059	1 359
Олефины	изо-бутилен	i-C4H8	1,532	43,66	67	3,143	71 983	0,048	1 103
Олефины	транс-пентен-2	C5H10	3,646	43,66	159	3,143	71 983	0,115	2 624
Олефины	пентен-1	C5H10	0,316	43,66	14	3,143	71 983	0,010	227

Продолжение Таблицы 3.11

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Олефины	2-метил-бутен-2	i-C ₅ H ₁₀	5,405	43,66	236	3,143	71 983	0,170	3 891
Олефины	2-метил-бутен-1	i-C ₅ H ₁₀	1,195	43,66	52	3,143	71 983	0,038	860
Олефины	цис-гексен-3	C ₆ H ₁₂	0,391	43,66	17	3,143	71 983	0,012	282
Олефины	цис-гексен-2	C ₆ H ₁₂	0,287	43,66	13	3,143	71 983	0,009	207
Олефины	3-метил-транс-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	1,064	43,66	46	3,143	71 983	0,033	766
Олефины	транс-гексен-2	i-C ₆ H ₁₂	0,781	43,66	34	3,143	71 983	0,025	562
Олефины	2-метил-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	1,012	43,66	44	3,143	71 983	0,032	729
Олефины	2-метил-пентен-1	i-C ₆ H ₁₂	0,429	43,66	19	3,143	71 983	0,013	309
Олефины	3,3-диметил-бутен-1	i-C ₆ H ₁₂	1,257	43,66	55	3,143	71 983	0,040	905
Олефины	3-метил-циклопентен-2	i-C ₆ H ₁₂	0,667	43,66	29	3,143	71 983	0,021	480
Олефины	4-метил-цис-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	0,349	43,66	15	3,143	71 983	0,011	251

Продолжение Таблицы 3.11

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Олефины	транс-гептен-3	C ₇ H ₁₄	0,347	43,66	15	3,143	71 983	0,011	250
Олефины	3-этил-цис-пентен-2	i-C ₇ H ₁₄	0,280	43,66	12	3,143	71 983	0,009	202
Олефины	3-метил-гексен-2	i-C ₇ H ₁₄	0,293	43,66	13	3,143	71 983	0,009	211
Олефины	2,4-диметил-гексен-2	i-C ₈ H ₁₆	0,477	43,66	21	3,143	71 983	0,015	343
Ароматика	бензол	C ₆ H ₆	0,742	40,25	30	3,385	84 085	0,025	624
Ароматика	толуол	C ₇ H ₈	3,791	40,77	155	3,348	82 113	0,127	3 113
Ароматика	м-ксилол	C ₈ H ₁₀	3,454	41,15	142	3,321	80 694	0,115	2 788
Ароматика	о-ксилол	C ₈ H ₁₀	1,733	41,15	71	3,321	80 694	0,058	1 399
Ароматика	п-ксилол	C ₈ H ₁₀	1,195	41,15	49	3,321	80 694	0,040	964
Ароматика	этилбензол	C ₈ H ₁₀	1,070	41,15	44	3,321	80 694	0,036	864
Ароматика	1-метил-3-этилбензол	C ₉ H ₁₂	1,626	41,45	67	3,300	79 623	0,054	1 295

Продолжение Таблицы 3.11

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ароматика	1,2,3-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	0,721	41,45	30	3,300	79 623	0,024	574
Ароматика	1,3,5-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	0,963	41,45	40	3,300	79 623	0,032	767
Ароматика	1-метил-4-этилбензол	C ₉ H ₁₂	0,631	41,45	26	3,300	79 623	0,021	503
Ароматика	1-метил-2-этилбензол	C ₉ H ₁₂	0,475	41,45	20	3,300	79 623	0,016	378
Ароматика	1,2,4-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	2,879	41,45	119	3,300	79 623	0,095	2 292
Ароматика	1,4-диметил-2-этилбензол	C ₉ H ₁₄	0,390	42,21	16	3,246	76 902	0,013	300
Ароматика	нафталин	C ₁₀ H ₈	0,510	39,51	20	3,438	87 011	0,018	444
Ароматика	1,2-диметил-4-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,628	41,68	26	3,284	78 787	0,021	495
Ароматика	1,3,5-диметил-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,522	41,68	22	3,284	78 787	0,017	411
Ароматика	1-метил-3-н-пропилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,489	41,68	20	3,284	78 787	0,016	385
Ароматика	1,3-диметил-4-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,332	41,68	14	3,284	78 787	0,011	261

Продолжение Таблицы 3.11

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ароматика	1,2,3,5-тетраметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,530	41,68	22	3,284	78 787	0,017	418
Ароматика	1,2,4,5-тетраметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	0,387	41,68	16	3,284	78 787	0,013	305
Итого 79	-	-	100,000	-	4356	-	-	3,150	72 474

Таблица 3.12 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода ЛБ КК

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, 10 ² · МДж	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
						т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Парафины	бутан	C ₄ H ₁₀	0,581	45,19	26	3,034	67 151	0,018	390
Парафины	пентан	C ₅ H ₁₂	2,220	44,89	100	3,056	68 065	0,068	1 511
Парафины	гексан	C ₆ H ₁₄	1,449	44,69	65	3,070	68 688	0,044	995
Парафины	гептан	C ₇ H ₁₆	0,660	44,55	29	3,080	69 140	0,020	456
Изо-парафины	изо-пентан	i-C ₅ H ₁₂	20,565	44,89	923	3,056	68 065	0,628	13 998

Продолжение Таблицы 3.12

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Изо-парафины	2,3-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	2,589	44,69	116	3,070	68 688	0,079	1 779
Изо-парафины	2-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	9,409	44,69	421	3,070	68 688	0,289	6 463
Изо-парафины	3-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	5,526	44,69	247	3,070	68 688	0,170	3 796
Изо-парафины	2-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	3,171	44,55	141	3,080	69 140	0,098	2 192
Изо-парафины	2,4-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	1,207	44,55	54	3,080	69 140	0,037	835
Изо-парафины	2,3-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	0,808	44,55	36	3,080	69 140	0,025	559
Изо-парафины	3-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	2,440	44,55	109	3,080	69 140	0,075	1 687
Изо-парафины	3-этилпентан	i-C ₇ H ₁₆	0,390	44,55	17	3,080	69 140	0,012	270
Изо-парафины	2-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	0,356	44,44	16	3,088	69 483	0,011	248
Нафтенy	метилциклопентан	C ₆ H ₁₂	3,731	43,66	163	3,143	71 983	0,117	2 686
Нафтенy	цис-1,3-диметилциклопентан	C ₇ H ₁₄	0,831	43,66	36	3,143	71 983	0,026	598

Продолжение Таблицы 3.12

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Нафтенy	транс-1,3-диметил циклопентан	C7H14	0,678	43,66	30	3,143	71 983	0,021	488
Нафтенy	транс-1-диметил циклопентан-2	C7H14	0,474	43,66	21	3,143	71 983	0,015	341
Нафтенy	метилциклогексан	C7H14	0,588	43,66	26	3,143	71 983	0,018	423
Олефины	транс-бутен-2	C4H8	2,062	43,66	90	3,143	71 983	0,065	1 485
Олефины	1,2-бутадиен	C4H6	1,500	42,02	63	3,259	77 565	0,049	1 164
Олефины	пентен-1	C5H10	1,639	43,66	72	3,143	71 983	0,052	1 180
Олефины	циклопентен	C5H10	0,711	43,66	31	3,143	71 983	0,022	512
Олефины	3-метил-бутен-1	C5H10	0,565	43,66	25	3,143	71 983	0,018	407
Олефины	2-метил-бутен-2	i-C5H10	6,634	43,66	290	3,143	71 983	0,209	4 776
Олефины	транс-пентен-2	i-C5H10	4,353	43,66	190	3,143	71 983	0,137	3 133
Олефины	цис-пентен-2	i-C5H10	2,441	43,66	107	3,143	71 983	0,077	1 757

Продолжение Таблицы 3.12

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Олефины	2-метил-бутен-1	i-C ₅ H ₁₀	3,440	43,66	150	3,143	71 983	0,108	2 476
Олефины	гексен-1	C ₆ H ₁₂	1,793	43,66	78	3,143	71 983	0,056	1 290
Олефины	цис-гексен-3	C ₆ H ₁₂	0,837	43,66	37	3,143	71 983	0,026	603
Олефины	цис-гексен-2	C ₆ H ₁₂	0,953	43,66	42	3,143	71 983	0,030	686
Олефины	3-метил-транс-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	1,277	43,66	56	3,143	71 983	0,040	919
Олефины	транс-гексен-2	i-C ₆ H ₁₂	1,695	43,66	74	3,143	71 983	0,053	1 220
Олефины	2-метил-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	1,926	43,66	84	3,143	71 983	0,061	1 387
Олефины	3-метил-цис-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	1,910	43,66	83	3,143	71 983	0,060	1 375
Олефины	2-метилциклопентен	i-C ₆ H ₁₀	0,384	42,58	16	3,220	75 611	0,012	291
Олефины	2-этил-бутен-1	i-C ₆ H ₁₂	0,382	43,66	17	3,143	71 983	0,012	275
Олефины	3-метил-пентен-1	i-C ₆ H ₁₂	0,373	43,66	16	3,143	71 983	0,012	269

Продолжение Таблицы 3.12

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Олефины	цис-гептен-3	C7H14	0,634	43,66	28	3,143	71 983	0,020	456
Олефины	3-этил-пентен-1	i-C7H14	0,496	43,66	22	3,143	71 983	0,016	357
Олефины	3-метил-гексен-2	i-C7H14	0,487	43,66	21	3,143	71 983	0,015	350
Олефины	3-метил-цис-гексен-3	i-C7H14	0,430	43,66	19	3,143	71 983	0,014	310
Ароматика	бензол	C6H6	1,880	40,25	76	3,385	84 085	0,064	1 581
Ароматика	толуол	C7H8	3,149	40,77	128	3,348	82 113	0,105	2 586
Ароматика	м-ксилол	C8H10	0,373	41,15	15	3,321	80 694	0,012	301
Итого 45	-	-	100,000	-	4403	-	-	3,117	70 858

Таблица 3.13 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода ТБ КК ГО

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot$ МДж	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
						т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Парафины	октан	C ₈ H ₁₈	1,301	44,44	58	3,088	69 483	0,040	904
Парафины	нонан	C ₉ H ₂₀	1,419	44,35	63	3,094	69 752	0,044	990
Парафины	декан	C ₁₀ H ₂₂	1,071	44,29	47	3,099	69 969	0,033	749
Парафины	ундекан	C ₁₁ H ₂₄	0,777	44,23	34	3,103	70 147	0,024	545
Изо-парафины	2-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	0,726	44,44	32	3,088	69 483	0,022	505
Изо-парафины	3-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	1,052	44,44	47	3,088	69 483	0,032	731
Изо-парафины	3-метилоктан	i-C ₉ H ₂₀	1,886	44,35	84	3,094	69 752	0,058	1 315
Изо-парафины	2-метилоктан	i-C ₉ H ₂₀	1,686	44,35	75	3,094	69 752	0,052	1 176
Изо-парафины	4-этилгептан	i-C ₉ H ₂₀	1,316	44,35	58	3,094	69 752	0,041	918
Изо-парафины	3,5-диметилгептан	i-C ₉ H ₂₀	4,027	44,35	179	3,094	69 752	0,125	2 809
Изо-парафины	2,4-диметилгептан	i-C ₉ H ₂₀	0,446	44,35	20	3,094	69 752	0,014	311

Продолжение Таблицы 3.13

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Изо-парафины	3-этилгептан	i-C ₉ H ₂₀	0,414	44,35	18	3,094	69 752	0,013	289
Изо-парафины	3-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	1,489	44,29	66	3,099	69 969	0,046	1 042
Изо-парафины	4-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	1,097	44,29	49	3,099	69 969	0,034	768
Изо-парафины	2-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	0,875	44,29	39	3,099	69 969	0,027	612
Изо-парафины	5-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	1,245	44,29	55	3,099	69 969	0,039	871
Изо-парафины	2,5-диметилоктан	i-C ₁₀ H ₂₂	0,653	44,29	29	3,099	69 969	0,020	457
Нафтенy	3-транс-этил-метилциклопентан	C ₈ H ₁₆	0,412	43,66	18	3,143	71 983	0,013	297
Нафтенy	этилциклогексан	C ₈ H ₁₆	0,583	43,66	25	3,143	71 983	0,018	420
Нафтенy	1-цикло-3-диметил-циклогексан	C ₈ H ₁₆	0,462	43,66	20	3,143	71 983	0,015	332
Нафтенy	1-цикло-4-диметил-циклогексан	C ₈ H ₁₆	0,438	43,66	19	3,143	71 983	0,014	315
Ароматика	толуол	C ₇ H ₈	0,562	40,77	23	3,348	82 113	0,019	461

Продолжение Таблицы 3.13

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ароматика	1,3-диметилбензол	C ₈ H ₁₀	9,462	41,15	389	3,321	80 694	0,314	7 635
Ароматика	1,2-диметилбензол	C ₈ H ₁₀	5,168	41,15	213	3,321	80 694	0,172	4 170
Ароматика	1,4-диметилбензол	C ₈ H ₁₀	3,401	41,15	140	3,321	80 694	0,113	2 745
Ароматика	2,3-дигидроинден	C ₉ H ₁₀	1,905	40,66	77	3,356	82 544	0,064	1 572
Ароматика	н-пропилбензол	C ₉ H ₁₂	1,516	41,45	63	3,300	79 623	0,050	1 207
Ароматика	1-метил-3-этилбензол	C ₉ H ₁₂	5,616	41,45	233	3,300	79 623	0,185	4 472
Ароматика	1,2,3-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	2,737	41,45	113	3,300	79 623	0,090	2 180
Ароматика	1,3,5-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	3,146	41,45	130	3,300	79 623	0,104	2 505
Ароматика	1-метил-4-этилбензол	C ₉ H ₁₂	2,283	41,45	95	3,300	79 623	0,075	1 818
Ароматика	1-метил-2-этилбензол	C ₉ H ₁₂	1,750	41,45	73	3,300	79 623	0,058	1 393
Ароматика	1,2,4-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	10,678	41,45	443	3,300	79 623	0,352	8 502

Продолжение Таблицы 3.13

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ароматика	1,4-диметил-2-этилбензол	C ₉ H ₁₄	1,884	42,21	80	3,246	76 902	0,061	1 449
Ароматика	нафталин	C ₁₀ H ₈	1,307	39,51	52	3,438	87 011	0,045	1 137
Ароматика	5-метилиндан	C ₁₀ H ₁₂	2,344	40,98	96	3,333	81 350	0,078	1 907
Ароматика	4-метилиндан	C ₁₀ H ₁₂	0,436	40,98	18	3,333	81 350	0,015	355
Ароматика	тетрагидронафталин	C ₁₀ H ₁₂	1,065	40,98	44	3,333	81 350	0,035	866
Ароматика	1,3-диметил-2-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	3,961	41,68	165	3,284	78 787	0,130	3 121
Ароматика	1,3-метил-н-пропилбензол	C ₁₀ H ₁₄	1,983	41,68	83	3,284	78 787	0,065	1 562
Ароматика	1,2,3,5-тетраметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	1,959	41,68	82	3,284	78 787	0,064	1 544
Ароматика	1,3-диметил-5-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	1,797	41,68	75	3,284	78 787	0,059	1 416
Ароматика	1-этил-2,4-диметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	1,783	41,68	74	3,284	78 787	0,059	1 404
Ароматика	1,2,4,5-тетраметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	1,381	41,68	58	3,284	78 787	0,045	1 088

Продолжение Таблицы 3.13

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ароматика	1,4-метил-н-пропилбензол	C10H14	1,057	41,68	44	3,284	78 787	0,035	833
Ароматика	1,3-диэтилбензол	C10H14	1,047	41,68	44	3,284	78 787	0,034	825
Ароматика	1,2-метил-н-пропилбензол	C10H14	0,704	41,68	29	3,284	78 787	0,023	555
Ароматика	1,2-диметил-3-этилбензол	C10H14	0,684	41,68	29	3,284	78 787	0,022	539
Ароматика	1,2-диэтилбензол	C10H14	0,679	41,68	28	3,284	78 787	0,022	535
Ароматика	1,2-ди-и-пропилбензол	C10H14	0,621	41,68	26	3,284	78 787	0,020	489
Ароматика	s-пентилбензол	C11H16	1,234	41,86	52	3,270	78 116	0,040	964
Ароматика	1,1-этил-н-пропилбензол	C11H16	0,520	41,86	22	3,270	78 116	0,017	406
Ароматика	1,3-ди-и-пропилбензол	C12H18	1,959	42,02	82	3,259	77 565	0,064	1 519
Итого 53	-	-	100,000	-	4207	-	-	3,256	77 527

Таблица 3.14 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода изомеризата

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot \text{МДж}$	Коэффициент выбросов,		Удельные выбросы,	
						т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
Парафины	бутан	C ₄ H ₁₀	0,10	45,19	5	3,034	67 151	0,003	70
Парафины	пентан	C ₅ H ₁₂	12,32	44,89	553	3,056	68 065	0,377	8 388
Парафины	гексан	C ₆ H ₁₄	0,05	44,69	2	3,070	68 688	0,002	35
Изо-парафины	изо-бутан	i-C ₄ H ₁₀	0,21	45,19	9	3,034	67 151	0,006	138
Изо-парафины	изо-пентан	i-C ₅ H ₁₂	34,78	44,89	1561	3,056	68 065	1,063	23 670
Изо-парафины	2,2-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	28,81	44,69	1287	3,070	68 688	0,884	19 787
Изо-парафины	2,3-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	5,06	44,69	226	3,070	68 688	0,155	3 474
Изо-парафины	2-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	11,23	44,69	502	3,070	68 688	0,345	7 712
Изо-парафины	3-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	3,03	44,69	135	3,070	68 688	0,093	2 078
Нафтенy	циклопентан	C ₅ H ₁₀	4,42	43,66	193	3,143	71 983	0,139	3 182
Итого 10	-	-	100,00	-	4474	-	-	3,066	68 535

Таблица 3.15 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода алкилата

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot$ МДж	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
						т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Парафины	бутан	C ₄ H ₁₀	4,114	45,19	186	3,034	67 151	0,125	2 763
Изо-парафины	изо-бутан	i-C ₄ H ₁₀	14,334	45,19	648	3,034	67 151	0,435	9 625
Изо-парафины	изо-пентан	i-C ₅ H ₁₂	5,392	44,89	242	3,056	68 065	0,165	3 670
Изо-парафины	2,3-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	5,619	44,69	251	3,070	68 688	0,172	3 859
Изо-парафины	2,4-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	3,244	44,55	145	3,080	69 140	0,100	2 243
Изо-парафины	2,3-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	1,820	44,55	81	3,080	69 140	0,056	1 258
Изо-парафины	2,2,4-триметилпентан	i-C ₈ H ₁₈	27,556	44,44	1225	3,088	69 483	0,851	19 147
Изо-парафины	2,5-диметилгексан	i-C ₈ H ₁₈	3,010	44,44	134	3,088	69 483	0,093	2 092
Изо-парафины	2,4-диметилгексан	i-C ₈ H ₁₈	2,210	44,44	98	3,088	69 483	0,068	1 535
Изо-парафины	2,3,4-триметилпентан	i-C ₈ H ₁₈	15,100	44,44	671	3,088	69 483	0,466	10 492

Продолжение Таблицы 3.15

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Изо-парафины	2,3,3-триметил-пентан	i-C ₈ H ₁₈	15,061	44,44	669	3,088	69 483	0,465	10 465
Изо-парафины	2,3-диметилгексан	i-C ₈ H ₁₈	2,541	44,44	113	3,088	69 483	0,078	1 765
Итого 12	-	-	100,000	-	4462	-	-	3,075	68 914

Таблица 3.16 – Теплотворная способность и выбросы диоксида углерода оксигенатов

Оксигенат	Формула	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, 10 ² · МДж	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
				т СО ₂ /т	кг/ТДж	т СО ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8
этанол	C ₂ H ₆ O	27,37	2737	1,913	69 898	1,913	69 898
н-бутанол	C ₄ H ₁₀ O	33,59	3359	2,378	70 797	2,378	70 797
изо-бутанол	C ₄ H ₁₀ O	33,59	3359	2,378	70 797	2,378	70 797
метил-трет-бутиловый эфир	C ₅ H ₁₂ O	35,22	3522	2,500	70 980	2,500	70 980
этил-трет-бутиловый эфир	C ₆ H ₁₄ O	36,40	3640	2,588	71 102	2,588	71 102

Продолжение Таблицы 3.16

1	2	3	4	5	6	7	8
трет-амилметиловый эфир	$C_6H_{14}O$	36,40	3640	2,588	71 102	2,588	71 102
метанол	CH_3OH	20,17	2017	1,375	68 166	1,375	68 166
диизопропиловый эфир	$C_6H_{14}O$	36,40	3640	2,588	71 102	2,588	71 102
пропанол-1	C_3H_7OH	31,21	3121	2,200	70 495	2,200	70 495

Таблица 3.17 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода компонентов бензина прямогонного

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot \text{МДж}$	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
						т CO_2 /т	кг/ТДж	т CO_2 /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Парафины	бутан	C_4H_{10}	0,020	45,19	1	3,034	67 151	0,001	13
Парафины	пентан	C_5H_{12}	0,060	44,89	3	3,056	68 065	0,002	41
Парафины	гексан	C_6H_{14}	5,340	44,69	239	3,070	68 688	0,164	3 668
Парафины	гептан	C_7H_{16}	11,730	44,55	523	3,080	69 140	0,361	8 110
Изо-парафины	изо-бутан	i- C_4H_{10}	0,020	45,19	1	3,034	67 151	0,001	13

Продолжение Таблицы 3.17

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Изо-парафины	изо-пентан	i-C ₅ H ₁₂	1,570	44,89	70	3,056	68 065	0,048	1 069
Изо-парафины	2,2-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	0,070	44,69	3	3,070	68 688	0,002	48
Изо-парафины	2-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	1,900	44,69	85	3,070	68 688	0,058	1 305
Изо-парафины	3-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	2,110	44,69	94	3,070	68 688	0,065	1 449
Изо-парафины	2,2,3-триметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	0,360	44,69	16	3,070	68 688	0,011	247
Изо-парафины	2-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	23,230	44,55	1035	3,080	69 140	0,715	16 061
Изо-парафины	2,4-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	2,680	44,55	119	3,080	69 140	0,083	1 853
Изо-парафины	2,3-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	10,040	44,55	447	3,080	69 140	0,309	6 942
Изо-парафины	3-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	26,100	44,55	1163	3,080	69 140	0,804	18 046
Изо-парафины	3-этилпентан	i-C ₇ H ₁₆	4,360	44,55	194	3,080	69 140	0,134	3 015
Изо-парафины	3,3-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	3,960	44,55	176	3,080	69 140	0,122	2 738
Изо-парафины	2,2-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	1,670	44,55	74	3,080	69 140	0,051	1 155
Нафтенy	метилциклопентан	C ₆ H ₁₂	1,870	43,66	82	3,143	71 983	0,059	1 346
Нафтенy	1,3 -диметил-циклопентан	C ₇ H ₁₄	0,400	43,66	17	3,143	71 983	0,013	288
Нафтенy	1,2 -диметил-циклопентан	C ₇ H ₁₄	0,900	43,66	39	3,143	71 983	0,028	648
Нафтенy	цис-1,3-диметил-циклопентан	C ₇ H ₁₄	0,160	43,66	7	3,143	71 983	0,005	115
Нафтенy	метилциклогексан	C ₇ H ₁₄	0,330	43,66	14	3,143	71 983	0,010	238

Продолжение Таблицы 3.17

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Нафтенy	этилциклопентан	C ₇ H ₁₄	0,230	43,66	10	3,143	71 983	0,007	166
Олефины	2-метил-бутен-2	i-C ₅ H ₁₀	0,030	43,66	1	3,143	71 983	0,001	22
Олефины	2-метил-бутен-1	i-C ₅ H ₁₀	0,010	43,66	0	3,143	71 983	0,000	7
Ароматика	толуол	C ₇ H ₈	0,760	40,77	31	3,348	82 113	0,025	624
Ароматика	м-ксилол	C ₈ H ₁₀	0,090	41,15	4	3,321	80 694	0,003	73
Итого 27	-	-	100,000	-	4450	-	-	3,083	69 298

Таблица 3.18 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода компонентов бензина газоконденсатного

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, 10 ² · МДж	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
						т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Парафины	бутан	C ₄ H ₁₀	4,32	45,19	195	3,034	67 151	0,131	2 901
Парафины	пентан	C ₅ H ₁₂	18,16	44,89	815	3,056	68 065	0,555	12 361
Парафины	гексан	C ₆ H ₁₄	15,04	44,69	672	3,070	68 688	0,462	10 331
Парафины	гептан	C ₇ H ₁₆	13,73	44,55	612	3,080	69 140	0,423	9 493
Парафины	октан	C ₈ H ₁₈	2,12	44,44	94	3,088	69 483	0,065	1 473
Парафины	нонан	C ₉ H ₂₀	0,31	44,35	14	3,094	69 752	0,010	216
Изо-парафины	изо-бутан	i-C ₄ H ₁₀	3,02	45,19	136	3,034	67 151	0,092	2 028

Продолжение Таблицы 3.18

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Изо-парафины	изо-пентан	i-C ₅ H ₁₂	15,33	44,89	688	3,056	68 065	0,468	10 434
Изо-парафины	2,2-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	13,26	44,69	593	3,070	68 688	0,407	9 108
Изо-парафины	2-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	10,56	44,55	470	3,080	69 140	0,325	7 301
Изо-парафины	3-метил-3-этилпентан	i-C ₈ H ₁₈	0,23	44,44	10	3,088	69 483	0,007	160
Изо-парафины	3-метилоктан	i-C ₉ H ₂₀	0,10	44,35	4	3,094	69 752	0,003	70
Нафтенy	циклопентан	C ₅ H ₁₀	0,31	43,66	14	3,143	71 983	0,010	223
Нафтенy	циклогексан	C ₆ H ₁₂	0,78	43,66	34	3,143	71 983	0,025	561
Нафтенy	циклогептан	C ₇ H ₁₄	1,15	43,66	50	3,143	71 983	0,036	828
Нафтенy	3-транс-этил-метилциклопентан	C ₈ H ₁₆	0,80	43,66	35	3,143	71 983	0,025	576
Нафтенy	циклононан	C ₉ H ₁₈	0,30	43,66	13	3,143	71 983	0,009	216
Олефины	транс-пентен-2	C ₅ H ₁₀	0,03	43,66	1	3,143	71 983	0,001	22
Олефины	гексен-1	C ₆ H ₁₂	0,02	43,66	1	3,143	71 983	0,001	14
Ароматика	бензол	C ₆ H ₆	0,10	40,25	4	3,385	84 085	0,003	84
Ароматика	толуол	C ₇ H ₈	0,25	40,77	10	3,348	82 113	0,008	205
Ароматика	м-ксилол	C ₈ H ₁₀	0,08	41,15	3	3,321	80 694	0,003	65
Итого 22	-	-	100,00	-	4470	-	-	3,069	68 669

Таблица 3.19 - Результаты исследований удельных выбросов CO₂ товарных автомобильных бензинов наиболее распространенных марок бензинов АИ-92 и АИ-95

[illegible]

Продолжение Таблицы 3.19

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
№4 (АИ-92)	Содержание, % масс.	37,80	41,15	0,00	0,00	21,05	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	1,232	1,340	0,000	0,000	0,645	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	3,217
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	29 371	31 902	0	0	14 427	0	0	0	0	0	0	0	75 700
№5 (АИ-92)	Содержание, % масс.	34,85	0,00	0,00	0,00	22,16	0,18	0,00	0,00	41,44	0,00	0,00	1,37	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	1,135	0,000	0,000	0,000	0,679	0,005	0,000	0,000	1,305	0,000	0,000	0,033	3,157
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	27 079	0	0	0	15 187	128	0	0	30 033	0	0	970	73 397
№6 (АИ-92)	Содержание, % масс.	34,08	0,00	0,00	0,00	18,77	0,00	0,00	7,82	34,90	0,00	2,54	1,90	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	1,110	0,000	0,000	0,000	0,575	0,000	0,000	0,237	1,099	0,000	0,078	0,045	3,145
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	26 478	0	0	0	12 863	0	0	5 250	25 290	0	1 743	1 348	72 972

Продолжение Таблицы 3.19

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
№7 (АИ-92)	Содержание, % масс.	34,55	0,00	0,00	0,00	21,12	0,00	0,00	7,72	34,55	0,00	0,00	2,05	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	1,126	0,000	0,000	0,000	0,647	0,000	0,000	0,234	1,088	0,000	0,000	0,049	3,145
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	26 849	0	0	0	14 473	0	0	5 186	25 042	0	0	1 452	73 003
№8 (АИ-92)	Содержание, % масс.	34,53	0,00	0,00	0,00	17,36	0,00	0,00	7,89	40,22	0,00	0,00	0,00	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	1,125	0,000	0,000	0,000	0,532	0,000	0,000	0,239	1,267	0,000	0,000	0,000	3,164
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	26 828	0	0	0	11 897	0	0	5 299	29 151	0	0	0	73 175
№9 (АИ-92)	Содержание, % масс.	30,62	0,00	0,00	0,00	13,89	0,97	0,00	11,30	43,22	0,00	0,00	0,00	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	0,998	0,000	0,000	0,000	0,426	0,024	0,000	0,343	1,361	0,000	0,000	0,000	3,152
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	23 792	0	0	0	9 519	688	0	7 591	31 321	0	0	0	72 912

Продолжение Таблицы 3.19

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
№10 (АИ-92)	Содержание, % масс.	24,28	0,00	0,00	0,00	10,98	0,45	0,00	6,45	41,74	0,00	14,68	1,44	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	0,791	0,000	0,000	0,000	0,337	0,011	0,000	0,196	1,315	0,000	0,450	0,034	3,134
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	18 868	0	0	0	7 523	317	0	4 328	30 248	0	10 079	1 017	72 379
№11 (АИ-95)	Содержание, % масс.	72,49	0,00	0,00	22,41	0,00	5,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	2,362	0,000	0,000	0,689	0,000	0,128	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	3,178
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	56 326	0	0	15 444	0	3 620	0	0	0	0	0	0	75 390
№12 (АИ-95)	Содержание, % масс.	32,65	0,00	0,00	0,00	38,99	0,00	1,86	0,00	25,55	0,00	0,00	0,95	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	1,064	0,000	0,000	0,000	1,195	0,000	0,062	0,000	0,805	0,000	0,000	0,023	3,149
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	25 370	0	0	0	26 722	0	1 527	0	18 517	0	0	673	72 808

Продолжение Таблицы 3.19

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
№13 (АИ-95)	Содержание, % масс.	40,32	7,38	38,10	14,20	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	1,314	0,240	1,188	0,437	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	3,178
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	31 329	5 721	26 997	9 786	0	0	0	0	0	0	0	0	73 834
№14 (АИ-95)	Содержание, % масс.	61,74	0,00	23,51	0,00	14,75	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	2,011	0,000	0,733	0,000	0,452	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	3,197
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	47 973	0	16 659	0	10 109	0	0	0	0	0	0	0	74 741
№15 (АИ-95)	Содержание, % масс.	34,81	0,00	0,00	0,00	24,47	6,05	0,00	4,93	26,13	0,00	0,00	3,61	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	1,134	0,000	0,000	0,000	0,750	0,151	0,000	0,150	0,823	0,000	0,000	0,086	3,094
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	27 048	0	0	0	16 771	4 294	0	3 311	18 937	0	0	2 556	72 917

Продолжение Таблицы 3.19

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
№16 (АИ-95)	Содержание, % масс.	28,35	0,00	0,00	0,00	17,66	0,00	0,00	6,36	39,64	0,00	7,99	0,00	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	0,924	0,000	0,000	0,000	0,541	0,000	0,000	0,193	1,249	0,000	0,245	0,000	3,152
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	22 025	0	0	0	12 103	0	0	4 272	28 731	0	5 487	0	72 618
№17 (АИ-95)	Содержание, % масс.	28,34	0,00	0,00	0,00	17,65	6,49	0,00	6,49	28,39	0,00	9,09	3,54	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	0,923	0,000	0,000	0,000	0,541	0,162	0,000	0,197	0,894	0,000	0,279	0,084	3,081
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	22 017	0	0	0	12 097	4 609	0	4 360	20 579	0	6 243	2 508	72 412
№18 (АИ-95)	Содержание, % масс.	31,42	0,00	0,00	0,00	17,54	5,95	0,00	7,31	29,75	0,00	4,85	3,18	100,00
	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	1,024	0,000	0,000	0,000	0,538	0,149	0,000	0,222	0,937	0,000	0,149	0,076	3,094
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	24 414	0	0	0	12 019	4 223	0	4 907	21 561	0	3 333	2 254	72 710

Продолжение Таблицы 3.19

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
№19 (АИ-95)	Содержание, % масс.	31,28	0,00	0,00	0,00	16,03	5,43	0,00	7,15	32,01	0,00	4,86	3,24	100,00
	Коэффициент выбросов, т СО ₂ /т	1,019	0,000	0,000	0,000	0,492	0,136	0,000	0,217	1,008	0,000	0,149	0,077	3,098
	Коэффициент выбросов, кг/ТДж	24 305	0	0	0	10 987	3 855	0	4 804	23 199	0	3 335	2 292	72 777

ГЛАВА 4. ТЕХНИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО РЕГУЛИРОВАНИЮ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА БЕНЗИНОВ С ЦЕЛЮ СНИЖЕНИЯ ВЫБРОСОВ CO₂

4.1 Компьютерное моделирование процесса компаундирования бензина

4.1.1 Предлагаемое решение по автоматизации расчетов

Как было показано в предыдущей главе, удельные выбросы диоксида углерода в атмосферу сильно зависят от химического состава бензинов и их можно регулировать в процессе компаундирования. Методика оценки выбросов CO₂ в атмосферу от автомобильных бензинов используется в учебном процессе при изучении магистрами дисциплин направления 18.04.01 Химическая технология, направленность «Химическая технология топлива и газа» в ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет» (Приложение А).

На рынке выпускается множество программных комплексов, позволяющих моделировать смешение состава бензина, но без учета минимальных выбросов CO₂. Наша задача может быть значительно упрощена в случае, если в качестве инструмента расчета снижения выбросов использовать информационно-аналитическую систему.

Предлагаемый алгоритм регулирования рецептуры смешения компонентов автомобильного бензина предоставляет возможность регулировать состав товарного бензина с учётом минимизации выбросов CO₂ в атмосферу.

Исходя из возможностей множества языков программирования, был выбран программный код Python — высокоуровневый язык программирования, отличающийся эффективностью, простотой и универсальностью использования. Он широко применяется в разработке веб-приложений и прикладного программного обеспечения, а также в машинном обучении и обработке больших данных. За счёт простого и интуитивно понятного синтаксиса, Python является одним из распространённых языков для обучения программированию [143]. Для корректной работы системы должны быть соблюдены требования к компьютеру или ноутбуку - операционная система Windows 10 и 11. Таким образом, ИВАС

регулирования состава бензина с учётом минимальных выбросов CO_2 написана на языке программирования Python версии v 3.12.1 (64-разрядная).

Схема расчетов исполнена как поэтапное вычисление процедуры смешения в зависимости от отобранных ограничений по: (т $\text{CO}_2/\text{т}$), плотности (кг/л), ДНП (кПа), объемной доле олефиновых углеводородов (% об.), объемной доле ароматических углеводородов (% об.), необходимого количества автобензина (т). В ИВАС имеется возможность внесения сведений о производственных ресурсах — объемах и себестоимости, задействованных в процессе смешивания компонентов (рифформат, БКК, ЛБ КК, ТБ КК ГО, изомеризат, алкилат, бутан, метанол, этанол, пропанол, бутанол, изобутанол, МТБЭ, ЭТБЭ, ТАМЭ, ДИПЭ).

ИВАС предназначена для определения общей массы смеси и характеристик её качества с учетом информации о каждом компоненте бензина. Для расчета основных показателей качества компонентов компаундирования и состава товарных бензинов использовались формулы, основанные на известных законах и правилах аддитивности. Для расчета показателей, не подчиняющихся законам аддитивности, применялись иные методы расчетов, например, для ОЧИМ использовались методики авторов Э.Д. Иванчиной, Ю.А. Смышляевой и О.С. Коледина др., а для ДНП - метод Б.С. Жирова и формула Антуана, где расчет опирается на поправку неаддитивности показателя. Система имеет возможность регулирования всех входных и выходных параметров. Данная система демонстрирует подробную визуализацию графических и численных данных, она удобна в использовании в том числе тем, что при отсутствии точки оптимума выдает предупреждение с указанием на ошибку в конкретном месте.

На рисунке 4.1 представлен общий вид основной формы ИВАС регулирования состава бензина с учётом минимальных выбросов CO_2 .

Визуально интерфейс системы состоит из следующих отдельных оконных областей: блок основных характеристик компонентов бензина (рисунок 4.2 – блок 1), блок выбора октанового числа по марке товарного бензина (рисунок 4.3 – блок 2), блок регулируемых ограничений (рисунок 4.4 – блок 3), блок постоянных ограничений (рисунок 4.5 – блок 4), блок ввода данных по объёмам компонентов

(рисунок 4.6 – блок 5), блок ввода данных по себестоимостям компонентов (рисунок 4.7 – блок 6), блок ввода требуемого объема товарного бензина (рисунок 4.8 – блок 7), блок вывода программы (рисунок 4.9 – блок 8) и блок визуализации данных (рисунок 4.10 – блок 9) [8].

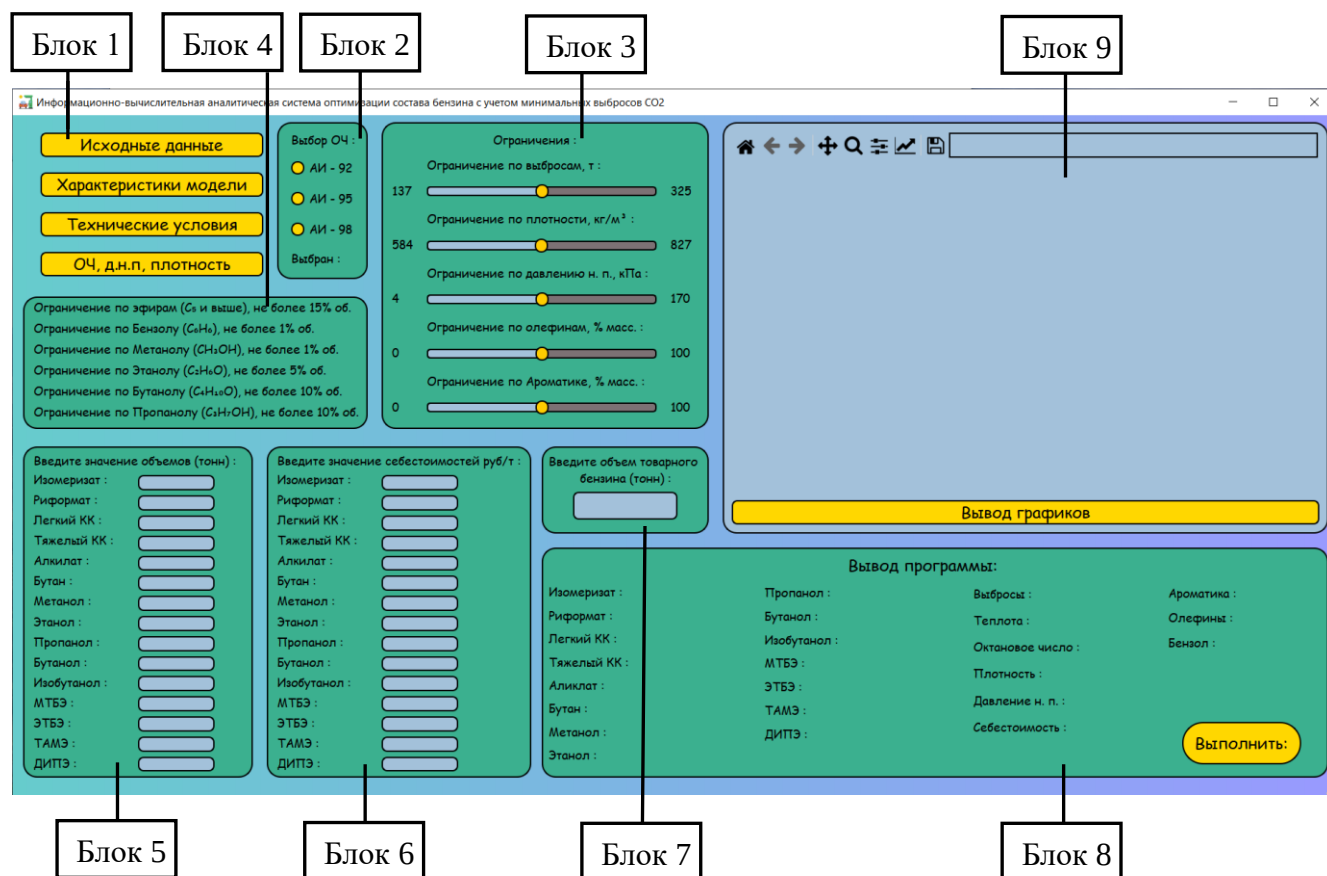


Рисунок 4.1 – Общий вид основной формы ИВАС регулирования состава бензина с учётом минимальных выбросов CO₂

4.1.2 Взаимодействие пользователя и аналитической системы

Взаимодействие с пользователем происходит через нажатие кнопок на основной форме ИВАС регулирования состава бензина с учётом минимальных выбросов CO₂.

Блок 1.

1) Вкладка «Исходные данные» предназначена для просмотра и внесения изменений по содержанию углеводородных компонентов.

Составлена база данных для расчета выбросов CO₂, состоящая из 150 соединений и охватывающая не менее 92 % масс. состава индивидуальных соединений товарных автомобильных бензинов. База данных основных углеводородов и оксигенатов, входящих в состав товарных бензинов для оценки удельных выбросов CO₂, приведена в Приложении Б.

Информация о суммарном количестве углеводородов в высокооктановых компонентах, количестве неидентифицированных, внесенных в БД и процентное содержание углеводородов компонента в входящих в БД приведены в таблице 4.1.

Таблица 4.1 - Информация о компонентах автомобильных бензинов, на основе которых составлена база данных для расчета выбросов CO₂

Группа	Риформат	БКК	ЛБ КК	ТБ КК ГО	Изомеризат	Алкилат
Общее количество углеводородов, ед.	316	414	171	347	10	12
Неидентиф., %	0,00	0,67	0,21	0,00	0,00	0,00
Внесены в БД, %	92,86	81,50	88,98	78,91	100,00	100,00
Внесены в БД, ед.	42	79	45	53	10	12

2) Во вкладке «Характеристики модели» содержится информация в виде таблицы со следующей информацией: название углеводородов, формула углеводородов, теплотворная способность, выбросы CO₂, дипольный момент, октановое число по исследовательскому методу.

3) Во вкладке «Технические условия» для удобной ориентации пользователю по классу качества товарного бензина приложен ГОСТ 32513-2013 «Топлива моторные. Бензин неэтилированный».

4) Вкладка «ОЧ, д.н.п, плотность» содержит в себе информацию об октановом числе по ГОСТ данных хроматографии, давлении насыщенных паров и плотности проб для сравнения полученных результатов.

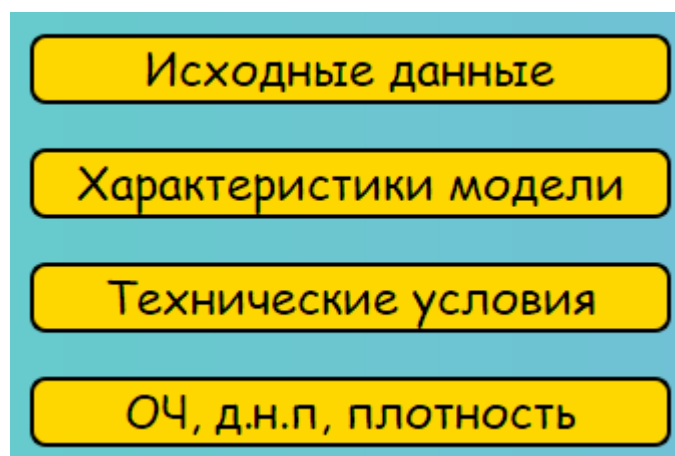


Рисунок 4.2 – Блок 1 - основные характеристик компонентов бензина

Блок 2.

В данном блоке для пользователя имеется возможность выбора октанового числа по марке товарного бензина, которая дублируется в ограничении математической модели по октановому числу.

Рисунок 4.3 – Блок 2 - выбор ОЧИМ

Блок 3.

Блок ограничений позволяет пользователю выставить параметры по классу качества бензина К5 и К6. Также имеется возможность снизить максимальное количество выбросов CO_2 .

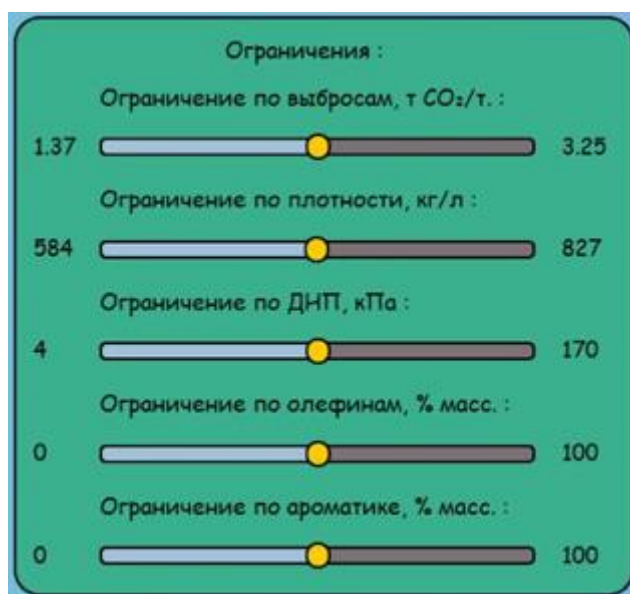


Рисунок 4.4 – Блок 3 - регулируемые ограничения

Блок 4.

Блок постоянных ограничений не регулируется и имеет постоянное значение по требованиям ГОСТ 32513-2013.

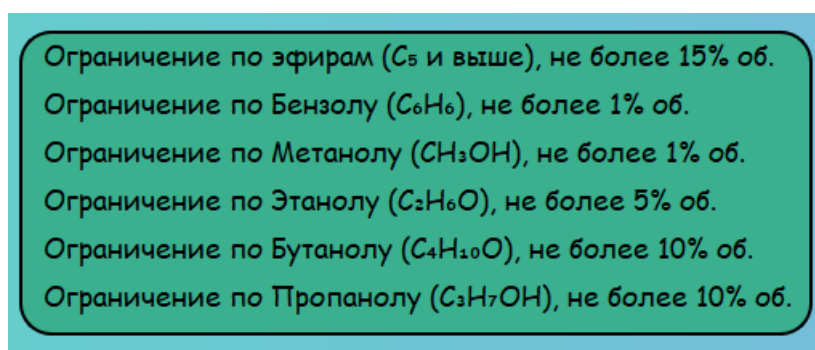


Рисунок 4.5 – Блок 4 - постоянные ограничения

Блок 5.

На данном этапе пользователь вносит данные по объёмам имеющихся компонентов у производства.

Введите значение объемов (тонн) :

Изомеризат :	
Риформат :	
Легкий КК :	
Тяжелый КК :	
Алкилат :	
Бутан :	
Метанол :	
Этанол :	
Пропанол :	
Бутанол :	
Изобутанол :	
МТБЭ :	
ЭТБЭ :	
ТАМЭ :	
ДИПЭ :	

Рисунок 4.6 – Блок 5 - ввод данных по объёмам компонентов

Блок 6.

Пользователь вносит данные по себестоимостям компонентов в рублях.

Введите значение себестоимостей руб/т :

Изомеризат :	
Риформат :	
Легкий КК :	
Тяжелый КК :	
Алкилат :	
Бутан :	
Метанол :	
Этанол :	
Пропанол :	
Бутанол :	
Изобутанол :	
МТБЭ :	
ЭТБЭ :	
ТАМЭ :	
ДИПЭ :	

Рисунок 4.7 – Блок 6 - ввод данных по себестоимости компонентов

Блок 7.

Блок для ввода требуемого количества товарного бензина в тоннах с учётом всех выставленных ограничений.

Рисунок 4.8 – Блок 7 - ввод требуемого объёма товарного бензина

Блок 8.

В блоке вывода программы имеется надпись «статус: 1» (оптимум найден) или «статус: -1» (оптимум не найден). Кнопка «Выполнить» запускает процесс расчёта ИВАС регулирования состава бензина с учётом минимальных выбросов CO_2 , при недостоверных или недостающих данных всплывает ошибка «Введите данные и ограничения!». При отсутствии оптимума функции пользователю требуется пересмотреть ограничения и исходные данные и провести расчёт снова.

Вывод программы:			
Изомеризат :	Пропанал :	Выбросы :	Ароматика :
Риформат :	Бутанол :	Теплота :	Олефины :
Легкий КК :	Изобутанол :	ОЧИМ :	Бензол :
Тяжелый КК :	МТБЭ :	Плотность :	
Алкилат :	ЭТБЭ :	ДНП. :	
Бутан :	ТАМЭ :	Себестоимость :	
Метанол :	ДИПЭ :		
Этанол :			

Рисунок 4.9 – Блок 8 - вывод программы

Блок 9.

Завершающий этап, на котором пользователь может просмотреть визуальное исполнение программы, если оптимум найден. При отсутствии оптимума функции выдаётся ошибка «Что-то пошло не так».

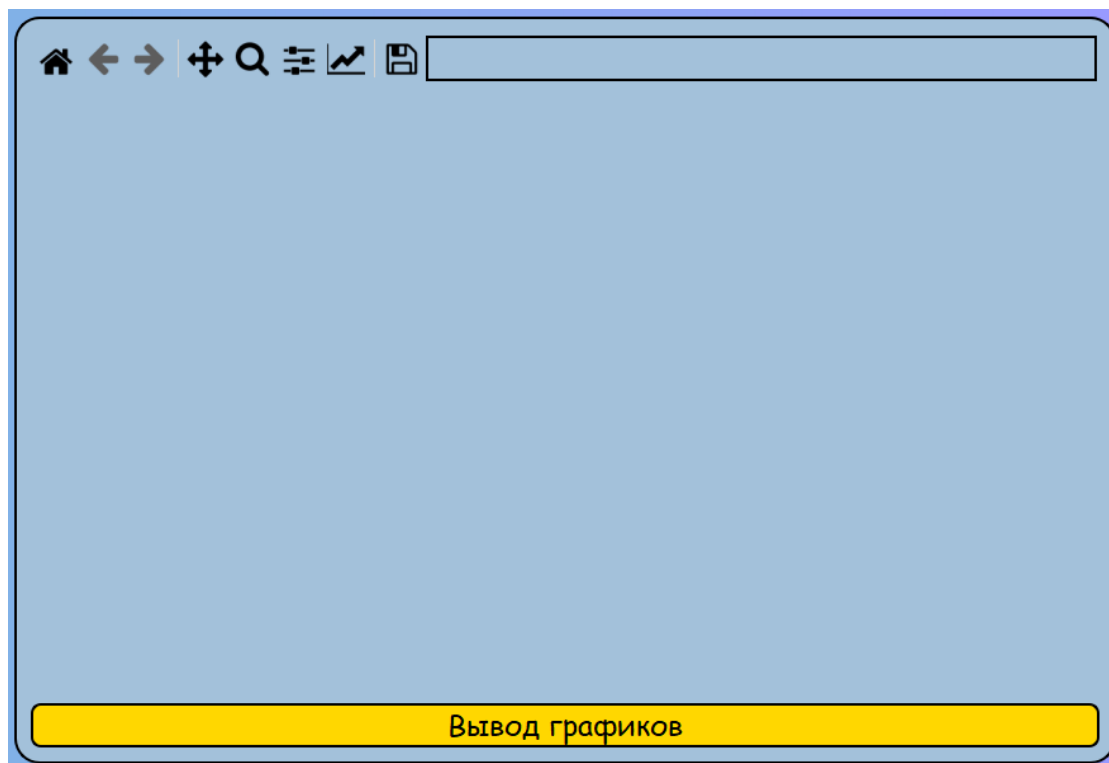


Рисунок 4.10 – Блок 9 - визуализация данных (графики)

4.2 Рекомендации по минимизации выбросов диоксида углерода в атмосферу от автомобильных бензинов

Как было показано в третьей главе, такие распространенные компоненты бензинов как риформат и изомеризат, например, по массовому коэффициенту выбросов отличаются на 6,2 %, а по коэффициенту на единицу энергии – на 13,4 %. В целом по массовому коэффициенту удельных выбросов диоксида углерода, компоненты бензинов могут отличаться до 143 %, а по коэффициенту удельных выбросов на единицу получаемой энергии - до 22,3 %. Следовательно, регулирование химического состава автомобильных бензинов с учетом минимизации выбросов диоксида углерода в атмосферу в процессе их потребления можно рассматривать, как один из наиболее доступных вариантов

низкоуглеродной модели развития транспортного сектора. С учетом полученных данных о зависимостях удельных выбросов углекислого газа от компонентного и индивидуального химического состава бензинов предложены основные технические и технологические направления снижения выбросов от автомобильных топлив.

4.2.1 Сохранение нативного водорода в составе компонентов товарных бензинов

Наглядными примерами данного направления могут служить: максимальное вовлечение бутанов содержащихся в нефтезаводских газах в состав товарных бензинов, увеличение доли изомеризата в бензиновом пуле НПЗ и др.

Как показали результаты исследований зависимости выбросов углекислого газа от химического состава компонентов автомобильных бензинов в предыдущей главе, из всех присутствующих в них углеводородов (за исключением пропана, который также может присутствовать в незначительных количествах) бутаны имеют наименьшие выбросы. Следовательно, повышение содержания бутанов в составе автомобильных бензинов можно считать одним из наиболее рациональных способов снижения их удельных выбросов. При этом введение бутанов в состав товарных бензинов практически не вызывает проблем, связанные с их октановыми числами, однако стоит учесть, что это может привести к повышению ДНП бензинов и снижению плотности смеси, установленных стандартами.

Процессы глубокой переработки нефти, основным назначением которых является получение из нефтяных остатков дополнительно «светлых» нефтепродуктов, сопровождаются перераспределением водорода, содержащегося в сырье. В легких продуктах процессов водорода значительно больше, чем в продуктах уплотнения сырья, которые, как правило, образуются в результате параллельных – конкурирующих реакций.

Следует также отметить, что в ходе процессов, направленных на углубление переработки нефти, большое количество водорода переходит в состав

газообразных продуктов, которые в основном, за исключением бутан-бутиленовой и реже пропан-пропиленовой фракций газов каталитического крекинга, поступают в топливную сеть завода и используются как технологическое топливо для собственных нужд завода. Одним из направлений по минимизации выбросов диоксида углерода в атмосферу от автомобильных бензинов следует считать рациональное использование содержащихся в их составе таких компонентов как сумма C_4 и C_3 и вплоть до C_2 . Следует обратить особое внимание на чистый водород в составе топочных газов, который поступает в основном с водород содержащим газом (ВСГ) гидрогенизационных процессов или «отдувом».

В таблице 4.2 приведены результаты хроматографического анализа углеводородных газов в %, поступающих в топливную сеть одного из нефтеперерабатывающих заводов с различных установок нефтепереработки: жирный газ установки атмосферно-вакуумной трубчатки (АВТ); сухой газ установки замедленного коксования (УЗК); сухой газ установки гидроочистки прямогонной дизельной фракции (ГО ПрФ); сухой газ каталитического крекинга (КК); углеводородный газ установки риформинга (УР); водородсодержащий газ установки риформинга (ВСГ УР); сухой газ установки гидроочистки бензина каталитического крекинга (ГО БКК).

Как следует из таблицы 4.2 в газах установок АВТ, УЗК, риформинга и гидроочистки бензина каталитического крекинга, поступающих на топливную сеть, суммарное содержание углеводородов C_4 превышает 10 % масс., а в газах установок АВТ и риформинга - достигает 19 % и более.

Стоит обратить особое внимание на то, что содержание водорода в газах некоторых установок может превышать 70 % и более. Причем при поступлении такого газа в топливную сеть с низким давлением возникают сложности технического характера, связанные, в частности, с низкой плотностью и соответственно низкой теплотворной способностью (калорийностью) такого газа.

Таблица 4.2 - Состав углеводородных газов основных процессов нефтепереработки, поступающих в топливную сеть завода

Компонент	АВТ	УЗК	ГО ПрФ	КК	УР	ВСГ УР	ГО БКК
Метан	4,94	30,12	2,28	30,24	5,62	3,67	8,22
Этан	16,54	11,85	3,06	12,53	16,25	3,93	12,60
Этилен	0,16	6,68	0,00	12,64	0,00	0,00	0,00
Сумма C₂	16,70	18,53	3,06	25,17	16,25	3,93	12,60
Пропан	57,83	15,55	4,07	6,39	24,10	2,69	7,14
Пропилен	0,10	11,84	0,00	21,18	0,03	0,00	0,00
Сумма C₃	57,93	27,39	4,07	27,57	24,13	2,69	7,14
Изо-бутан	13,82	7,10	4,16	3,56	15,57	1,00	4,32
Н-бутан	5,41	2,64	4,87	0,66	9,26	0,69	7,96
1-бутен	0,02	3,88	0,00	2,68	0,08	0,01	0,03
цис-2-бутен	0,00	1,57	0,01	0,70	0,01	0,00	0,00
транс-2-бутен	0,00	1,75	0,00	0,97	0,00	0,00	0,00
Сумма бутиленов	0,02	7,20	0,01	4,35	0,09	0,01	0,03
Сумма C₄	19,25	16,94	9,04	8,57	24,92	1,70	12,31
Изо-пентан	0,01	1,04	3,74	1,01	1,35	0,39	2,22
Н-пентан	0,00	0,16	2,25	0,15	0,17	0,13	0,41
Сумма пентенов	0,00	0,60	1,11	0,96	0,03	0,07	0,00
Сумма C₅	0,01	1,80	7,10	2,12	1,55	0,59	2,63
Сумма непредельных углеводородов	0,28	26,32	1,12	39,13	0,15	0,08	0,03
Сероводород	1,12	0,02	0,21	0,20	0,00	0,00	0,53
Водород	0,05	5,20	74,24	6,13	27,53	87,42	56,57
Сумма	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00

Варианты вовлечения в состав автомобильных бензинов ценных с точки зрения снижения выбросов CO₂ в атмосферу компонентов топочных газов требуют, в каждом конкретном случае (завода, установки), определенных технических решений и соответствующего технико-экономического обоснования.

На некоторых НПЗ организовано производство сжиженного углеводородного топлива марок ПА - пропан автомобильный и ПБА - пропан бутан автомобильный согласно ГОСТ Р 52087-2018 «Газы углеводородные сжиженные топливные» [38]. В таблицах 4.3, 4.4 приведены состав, теплотворная способность

и выбросы диоксида углерода типовых проб «Пропана автомобильного» и «Пропана-бутана автомобильного», приготовленных согласно данному стандарту.

Расчеты показывают, что по массовому коэффициенту удельных выбросов, ПА отличается от углеводородного высокооктанового компонента товарных бензинов с минимальными коэффициентами удельных выбросов изомеризата - на 0,7 %, а на единицу получаемой энергии - на 7,9 %. Разница показателей ПА от риформата - углеводородного высокооктанового компонента товарных бензинов с максимальными коэффициентами удельных выбросов, составляет 7,9 и 16,9 % соответственно.

Также следует отметить, что при введении в состав товарных бензинов каждой тонны бутана, при среднем значении коэффициентов удельных выбросов товарных бензинов АИ-92 и АИ-95 (3,183 и 3,139 т $\text{CO}_2/\text{т}$), снижение удельных выбросов CO_2 составляет 4,9 и 3,5 % соответственно.

Следующим вариантом сохранения водорода, поступившего на переработку с нефтью в составе компонентов товарных бензинов, является - увеличение доли изомеризата в бензиновом пуле НПЗ.

Одним из основных факторов, сдерживающих развитие процесса изомеризации легких углеводородов с целью получения высокооктановых компонентов автомобильных бензинов, является дефицит сырья. Традиционно изомеризации подвергали пентановую (C_5) фракцию. В связи с введением экологических стандартов на автомобильные бензины и ограничением в так называемых реформулированных бензинах суммарного содержания ароматики, в том числе бензола, процесс изомеризации получил определенный скачок, так как в него начали вовлекать ПГФ - пентан - гексановую ($\text{C}_5\text{-C}_6$) фракцию, что позволило существенно сократить в общем бензиновом пуле, в первую очередь, содержание бензола, а также и сумму ароматических углеводородов.

Таблица 4.3 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода ПА

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot \text{МДж}$	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
						т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
Парафины	этан	C ₂ H ₆	2,07	45,19	94	2,933	64 912	0,061	1 344
Олефины	пропилен	C ₃ H ₆	0,46	43,66	20	3,143	71 983	0,014	331
Парафины	пропан	C ₃ H ₈	85,50	45,68	3905	3,000	65 681	2,565	56 157
Парафины	бутан	C ₄ H ₁₀	11,97	45,19	541	3,034	67 151	0,363	8 038
Итого 4	-	-	100,00	-	4560	-	-	3,003	65 870

Таблица 4.4 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода ПБА

Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot \text{МДж}$	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
						т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
Парафины	этан	C ₂ H ₆	0,57	45,19	26	2,933	64 912	0,017	370
Олефины	пропилен	C ₃ H ₆	3,44	43,66	150	3,143	71 983	0,108	2 476
Парафины	пропан	C ₃ H ₈	55,25	45,68	2524	3,000	65 681	1,658	36 289
Парафины	бутан	C ₄ H ₁₀	40,74	45,19	1841	3,034	67 151	1,236	27 357
Итого 4	-	-	100,00	-	4541	-	-	3,019	66 492

В литературе известны разработки, включая отечественные [123,122,86,18,118], где показано, что процессу изомеризации с достаточно высокой рентабельностью можно вовлекать и гептановую фракцию (C_7). Особенно данная модификация процесса изомеризации актуальна для тех НПЗ, где отсутствуют установки алкилирования изобутана олефинами или по производству МТБЭ.

Наряду со снижением как суммарной ароматики, так и бензола в общем бензиновом пуле, вовлечение в процесс изомеризации более тяжелого сырья, и, следовательно, снижение в бензиновом пуле доли риформата, способствует:

- увеличению вырабатываемого на НПЗ суммарного объема товарных бензинов (выход изомеризата на 5-12 % выше, чем риформата);
- уменьшению себестоимости товарных бензинов (себестоимость изомеризата на 5-7 % ниже себестоимости риформата);
- снижению жесткости технологического режима риформинга, вследствие более селективного ведения процесса, что в свою очередь положительно сказывается на выходе риформата и межрегенерационном пробеге установок и др.

К недостаткам направления можно отнести:

- меньшее октановое число изомеризата по сравнению с риформатом;
- отсутствие выработка дешевого ВСТ и прием его со стороны.

Если основным углеводородом риформата фракции C_7 является толуол, то у процесса изомеризации это изо-парафины C_7 . Коэффициенты удельных выбросов у толуола составляют 3,348 т CO_2 /т и 82113 кг/ТДж, у изо-гептана 3,080 т CO_2 /т и 69140 кг/ТДж соответственно. Следовательно, теоретические сокращения удельных выбросов CO_2 в атмосферу при этом могут составить 8,7 % на тонну углеводорода и 18,8 % на единицу получаемой при этом энергии.

4.2.2 Перераспределение нативного водорода в пользу моторных топлив, в том числе и бензина

Следует также отметить, что в связи с дальнейшим углублением переработки нефти следует ожидать дальнейшего увеличения ресурсов нефтезаводских газов и соответственно и суммы углеводородов C_4 .

В качестве следующего направления увеличения ресурсов бутан-бутиленовой (ББФ) и пропан-пропиленовой фракций (ППФ) можно рассматривать селективный каталитический крекинг, настроенный на максимальный выход ББФ - аналог варианта каталитического крекинга с целью получения сырья для нефтехимии [2,91,6]. Данная разновидность процесса сопровождается перераспределением водорода в сторону более низкомолекулярных продуктов (C_3 , C_4 , C_5 , C_6), что сопровождается с некоторым повышением выхода кокса.

Основными причинами, ограничивающими содержание бутанов в бензинах, являются повышение ДНП бензина и снижение его плотности. При соответствующем экологическом и технико-экономическом обосновании значений данных показателей, содержание бутанов в бензине также может быть рассмотрено в сторону их повышения.

Варианты увеличения компонентов бензинов на основе ББФ в промышленных масштабах уже давно отработаны, это:

- алкилирование изобутана олефинами;
- производство МТБЭ или других эфиров;
- олигомеризация бутиленов;
- максимальное введение бутанов (в первую очередь н-бутана) в состав топлив.

Продукты данных процессов среди высокооктановых компонентов бензинов характеризуются значительно низкими удельными выбросами CO_2 .

Наиболее приемлемыми вариантами вовлечения компонентов бензина на основе пропилена стоит считать:

- димеры пропилена (массовый коэффициент выбросов – 3,143 т CO_2 /т);

- изопропил бензол (массовый коэффициент выбросов – 3,300 т CO₂/т против 3,385 т CO₂/т у бензола);
- диизопропиловый эфир (массовый коэффициент выбросов – 2,588 т CO₂/т);
- метил или этил третично-гептиловые эфиры на основе димера пропилена (массовый коэффициент выбросов – 2,655 т CO₂/т).

Следует также обратить внимание на третичные изоамилены, гексены и гептены бензина каталитического крекинга как источники разветвленных олефинов для производства простых эфиров. Если этерифицировать низкокипящий бензин каталитического крекинга, а не только фракцию C₅, выработка эфиров возрастает на 40-50 %. На установках каталитического крекинга разделением бензина в процессе каталитической дистилляции можно получить бензин фракции C₅ - 100 °С, пригодный для этерификации. Поскольку МТАЭ и сумму МТГЭ (метил-трет-гексиловый и метил-трет-гептиловый эфиры) можно использовать для нужд данного завода, их выделение в чистом виде не требуется, т.е. технологически целесообразно оставить эфиры в бензине каталитического крекинга в качестве компонентов товарного бензина.

Вовлечение дополнительного количества эфиров в общий бензиновый пул может служить эффективным вариантом компенсирования снижения октановых чисел бензинов вследствие общего снижения содержания ароматики. Одним из недостатков эфиров, сдерживающих вовлечение их в состав товарных бензинов, является их низкая теплотворная способность, которая компенсируется повышенным содержанием водорода в других компонентах, вовлекаемых в состав бензинов. Кроме того, этерификация позволяет увеличить суммарный бензиновый пул бензина, за счет вовлечения метанола. Следует отметить, что на сегодняшний день на предприятиях РФ наблюдается определенный избыток мощностей метанола и основным фактором, сдерживающим производство метанола является отсутствие его спроса.

4.2.3 Введение водорода в состав товарных бензинов извне

Одним из методов снижения удельных выбросов углекислого газа в атмосферу от автомобильных бензинов является обогащение его составляющих соединений водородом (гидрирование). Водород, полученный всеми известными в настоящее время методами – зеленый, голубой, серый может быть введен в состав товарных бензинов путем его химического связывания. Примерами данного направления могут служить такие процессы, как гидрирование олефинов, входящих в состав компонентов товарных бензинов, гидроизомеризация бензола в метилциклогексан «процесс РЕГИЗ» и его аналоги и др.

Теоретически это можно сделать не только путем гидрирования олефинов присутствующих, в основном, в бензине каталитического крекинга, но и путем последующего гидрирования ароматики до нафтенов и далее последних - до соответствующих парафинов.

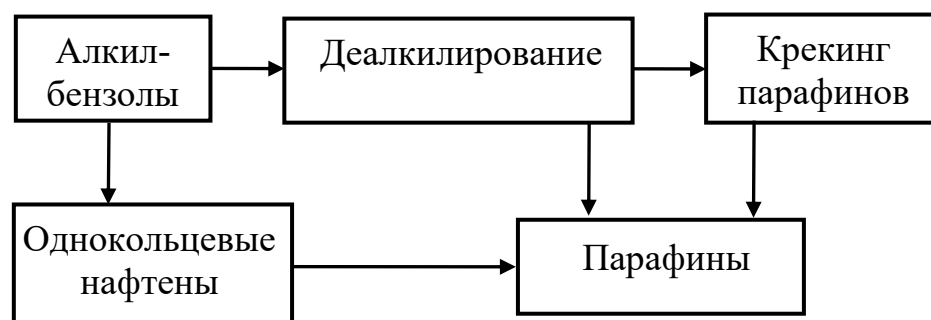
Олефиновые соединения, находящиеся в товарных автомобильных бензинах, как и подавляющая часть серосодержащих соединений поступают в их состав с БКК несмотря на то, что предварительно сырье каталитического крекинга подвергается гидроочистке. Серосодержащие соединения в БКК удаляют «постгидроочисткой», во время которой происходит гидрирование олефинов [100]. Поскольку октановое число компаундирования парафиновых углеводородов, полученных по итогам гидрирования олефинов, меньше по сравнению с таковыми для соответствующих олефиновых углеводородов, в ходе гидроочистки, как правило, происходит некоторое уменьшение октанового числа гидрогенизата [76,70]. Сера, находящаяся в БКК, неравномерно распределена по фракциям бензина. Как правило, чем легче фракция бензина, тем меньше в ней содержится серы. В связи с этим легкую фракцию бензина не очищают от серы, сосредоточившись на очистке преимущественно тяжелой части в щадящих режимах [3,48]. Режим процесса подбирают так, чтобы при компаундировании компонентов товарных бензинов содержание олефинов в продукте не превышало установленных норм ГОСТ. По данным авторов [45], в ходе гидроочистки тяжелой

части бензина произошло снижение содержания олефинов, в расчете на весь бензин - всего на 4,2 % масс., остаточное содержание олефинов при этом составило 21,4 % масс. При этом произошло повышение содержания парафинов на 7,67 %, что объясняется частичным гидрированием в процессе гидроочистки и ароматических углеводородов. Содержание ароматических углеводородов в ходе процесса уменьшилось на 1,57 % масс.

Расчеты показывают, что массовые удельные выбросы БКК в результате очистки снижаются всего на 0,22 %, а в расчете на единицу выделяющегося энергии - на 0,43 %. При полном гидрировании олефинов вышеуказанные показатели повышаются на 0,70 % по массе и на 1,35 % на единицу получаемой энергии (Приложение В) [45]. В целом, согласно расчетам при полном гидрировании олефинов в БКК вышеуказанные показатели могут повышаться на 0,5 - 0,8 % по массе и на 1,0 - 1,5 % единицу получаемой энергии.

Таким образом, было показано, что при действующих в стандартах товарных бензинов допустимых значениях содержания олефинов до 18 %, гидроочистка тяжелой части БКК не позволяет существенно снизить удельные выбросы углекислого газа в атмосферу.

Теоретически все углеводороды, присутствующие в бензиновых фракциях, можно гидрировать до соответствующих парафинов, и целесообразность данного процесса в конечном итоге определяется энерго- и ресурсозатратами (рисунок 4.11).

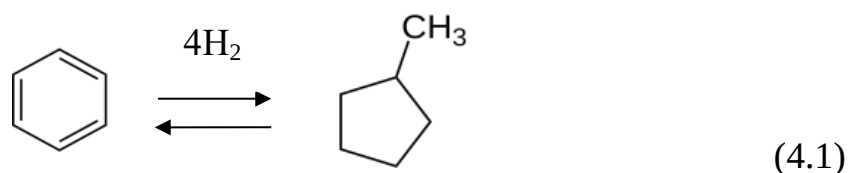


Разрыв кольца (с последующим деалкилированием) —————>

Рисунок 4.11 – Блок-схема гидрирования групп углеводородов

Одним из наиболее эффективных вариантов в этом направлении является процесс «РЕГИЗ». Сущность процесса заключается в гидрировании бензола до циклогексана с дальнейшей изомеризацией в метилциклопентан. Теоретические основы процесса РЕГИЗ были разработаны в Уфимском нефтяном университете еще середине 80-х годов прошлого столетия и в последующем там же нашли свое развитие применительно к различным фракциям риформата [11,10,88,113,12]. Аналогичные процессы были разработаны и за рубежом, в частности компанией UOP [67].

Процесс базируется на целевой реакции:



Характерной особенностью процесса «РЕГИЗ» является то, что при принятых условиях его проведения не происходит снижения октанового числа продукта.

Коэффициенты удельных выбросов у бензола составляют 3,385 т CO_2 /т и 84085 кг/ТДж, у метилциклопентана 3,143 т CO_2 /т и 71983 кг/ТДж соответственно. Следовательно, теоретические сокращения удельных выбросов CO_2 в атмосферу при этом могут составить 7,8 % на тонну топлива и 16,8 % на единицу получающейся при ее сгорании энергии.

Следует отметить, что в работах, целью которых является снижение ароматических углеводородов, в том числе и бензола, актуальность проблемы связывают с тем, что присутствующие в отработавших газах транспортных средств ароматические углеводороды, прежде всего бензол и конденсированные полициклические ароматические углеводороды, являются причиной образования бенз-а-пирена, характеризующегося высокой канцерогенной активностью, а также других аналогичных соединений. Кроме того, обращают на себя внимание отрицательные последствия присутствия в бензинах ароматических

углеводородов, с точки зрения образования нагара на стенках камеры сгорания двигателя внутреннего сгорания (ДВС).

В литературе отсутствуют сведения о количественной оценке удельных выбросов CO_2 в продуктах окисления данного процесса, как и о компонентах автомобильных бензинов или отдельных индивидуальных соединений в составе других аналогичных процессов.

4.3 Технико-экономическое обоснование некоторых технологических рекомендаций по минимизации выбросов CO_2

Как было показано в третьей главе, среди основных высокооктановых компонентов автомобильных бензинов коэффициенты удельных выбросов CO_2 минимальны у компонентов с преобладанием в их составе парафинов, следовательно повышение в общем бензиновом пуле продуктов таких процессов как изомеризация, алкилирование изобутана олефинами и в первую очередь «технического» бутана позволяет сократить выбросы углекислого газа в атмосферу.

В данном разделе в качестве примера приведены технико-экономические аспекты вовлечения в состав товарных бензинов бутана, увеличения доли изомеризата в бензиновом пуле НПЗ, а также выработки автомобильного бензина новой марки «ЭКО- CO_2 » с заниженным содержанием CO_2 для популяризации низкоуглеродного развития автотранспорта.

4.3.1 Технико-экономические аспекты по максимальному вовлечению бутанов в состав товарных бензинов

Среди высокооктановых компонентов парафиновой основы, выбросы минимальны у бутанов. Основной причиной сдерживания содержания «технического» бутана в товарных бензинах являются его высокое ДНП, низкая плотность, и в некоторых случаях состав или «чистота». С целью выявления

возможности вовлечения бутана в состав автомобильных бензинов, нами на одном из НПЗ были проведены совместные исследования влияния бутана на ДНП, на примере гидгенизата - сырья процесса риформинга. В товарный резервуар с гидрогенизатом в определенной пропорции вводили бутан и определяли ДНП смеси по ГОСТ EN 13016-1-2013, а также, с учетом относительно высокого содержания серы в бутане, в смеси наряду с ДНП определяли и общее содержание серы по ГОСТ ISO 20884-2016. Результаты экспериментов приведены в таблице 4.5.

Таблица 4.5 – Зависимости ДНП и содержания серы в гидрогенизате от содержания «технического» бутана

Показатели	Ед. изм.	1 опыт	2 опыт	3 опыт	4 опыт	5 опыт	6 опыт
Содержание бутана	%	0,0	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0
ДНП	кПа	7,4	15,1	20,9	24,4	30,9	32,5
Содержание серы	%	0,3	1,4	2,2	3,0	4,2	5,2

На рисунке 4.12 приведены кривые зависимости ДНП и содержания серы в смеси от концентрации в ней «технического» бутана.

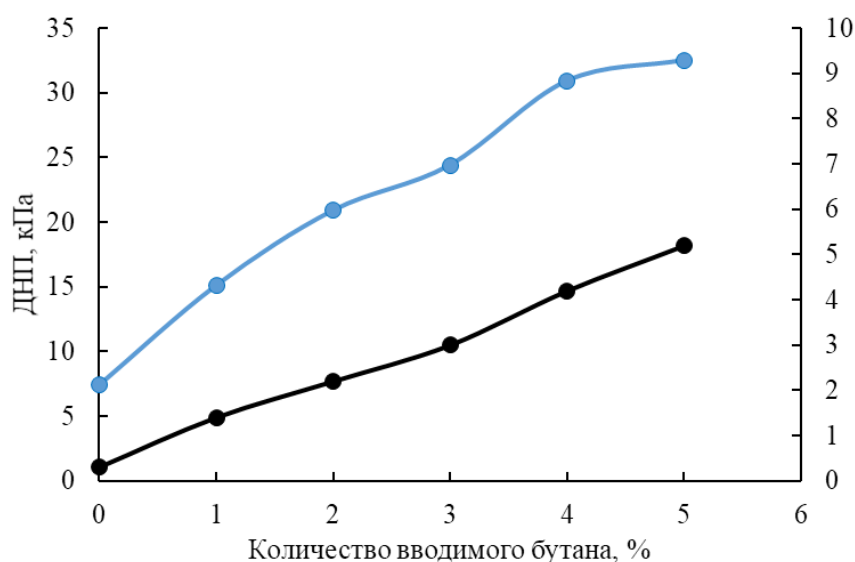


Рисунок 4.12 - Зависимости ДНП и содержания серы в гидрогенизате от содержания «технического» бутана

Как следует из рисунка 4.12, причиной, ограничивающей содержание бутана в смеси, является высокое содержание в нем серы - если в исходном гидрогенизате ее содержание составило 0,3 ppm, то при содержании 8-9 % бутана в смеси содержание серы может оказаться выше требований К-5 для автомобильных бензинов (ограничение не более 10 ppm).

Согласно ретроспективным данным, себестоимость 1 тонны бутанов ниже на 20 % относительно общей себестоимости товарного бензина.

Например, при введении в состав товарных бензинов до 8 % бутана, при котором остается ДНП в пределах норм стандарта (80 кПа), себестоимость бензина будет ниже на 2 %. Удельные выбросы CO_2 по массовому коэффициенту выбросов станут ниже на 1 %, а по коэффициенту на единицу энергии - на 1,5 %.

При этом, каждая вводимая в состав бензина тонна бутана взамен товарному бензину марок АИ-92 и АИ-95, при средних значениях массовых коэффициентов удельных выбросов последних - 3,204 и 3,175 т CO_2 /т позволяет снизить массовые удельные выбросы CO_2 на 5,3 и 4,5 %, а в расчете на единицу получаемой энергии - на 10 и 9 % соответственно.

На рисунке 4.13 приведена принципиальная технологическая схема компаундирования товарных бензинов товарно-сырьевого цеха одного из НПЗ в Республике Башкортостан с блоком приготовления низкоуглеродного автомобильного бензина марок «ЭКО- CO_2 ». Схема дополнена резервуарами для приема и хранения технического бутана (Р-14 и Р-15) с обвязкой с несколькими имеющимися резервуарами (Р-4 и Р-7) для приготовления бензинов марок «ЭКО- CO_2 ».

При смешении компонентов в процессе компаундирования бензинов на современных НПЗ всегда используются компьютерные системы оптимизации. Предлагаемая ИВАС по снижению выбросов CO_2 может быть привязана как к автономным системам (офлайн-режим), предназначенным для решения задач регулирования состава топливных смесей, так и к онлайн-программам, осуществляющим расчёт и корректировку рецептур смешения в реальном времени.

Одним из самых распространённых программ, используемых оптимизации производственного планирования в нефтеперерабатывающей отрасли РФ, является Aspen PIMS.

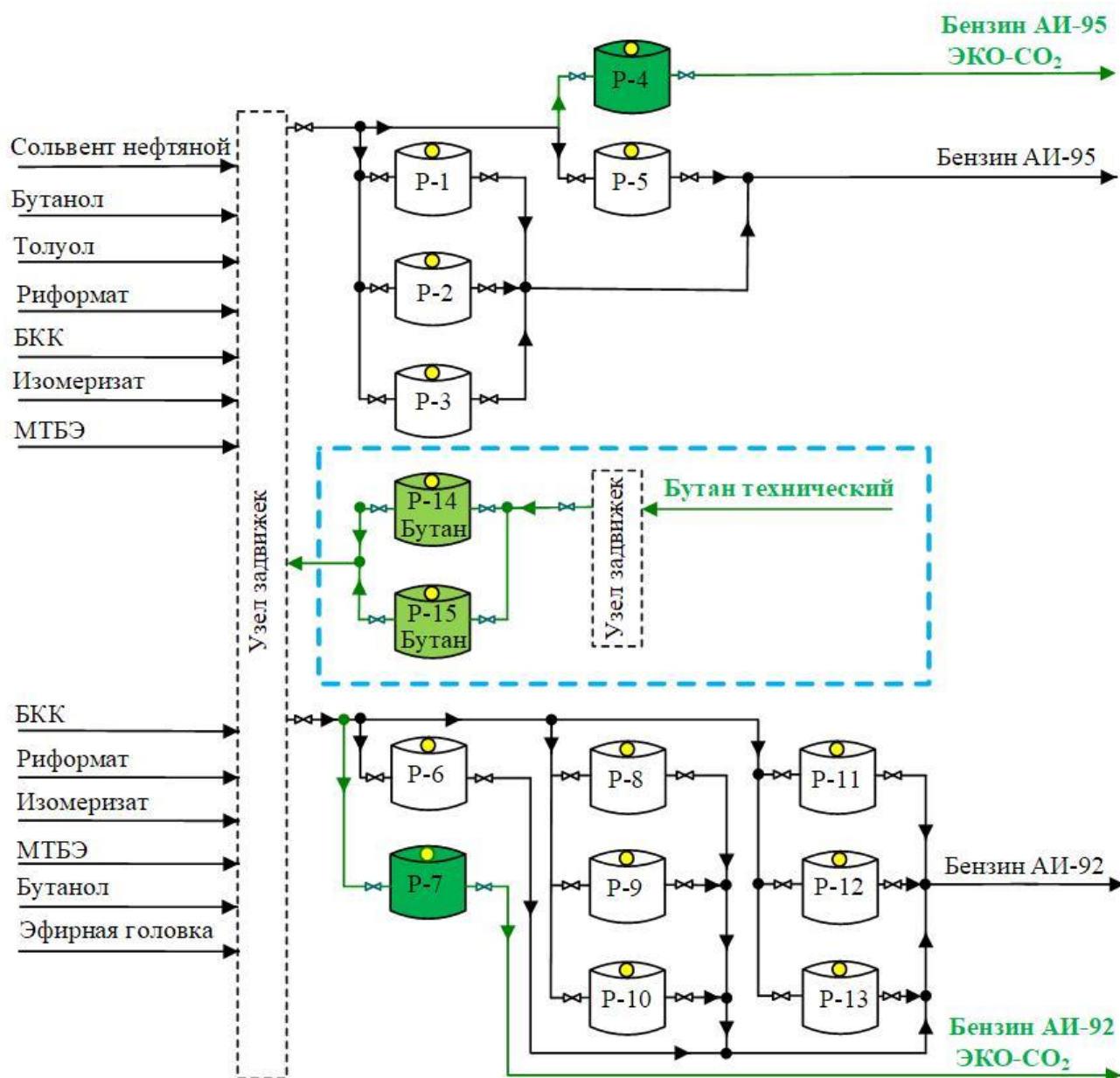


Рисунок 4.13 - Принципиальная технологическая схема компаундирования автомобильных бензинов

Следует обратить особое внимание на «чистоту» технического бутана. Желательно, чтобы в нем было максимальное содержание норм-бутана, так как по ключевым показателям ДНП и плотности, норм-бутан и изо-бутаны отличаются на

40,3 % и 3,9 % соответственно, а для пропана отличия данных показателей значительно выше.

Как известно, на ДНП компонентов и товарных бензинов большое влияние оказывает содержание в них растворенных газов. Это связано, в первую очередь, с присутствием бутанов, а в некоторых случаях и с наличием пропана. В ГОСТ на бензины нет ограничений на состав тех или иных индивидуальных углеводородов, и их содержание в большинстве случаев определяется работой колонн стабилизации бензинов, которые в свою очередь настроены на показатель ДНП стабилизата.

В таблице 4.6 приведено содержание газообразных углеводородов в некоторых компонентах товарных бензинов, поступающих на компаундирование в НПЗ в Республике Башкортостан.

Таблица 4.6 – Содержание газообразных углеводородов в некоторых компонентах товарных бензинов

Компонент бензина		Содержание, % масс.			ДНП, кПа	Выборка
		Сумма C ₃	Изо-бутан	Норм-бутан		
Изомеризат	Среднее	0,24	1,41	3,23	56	363
	Min	0,00	0,00	0,49	64	
	Max	3,75	6,93	15,96	176	
Алкилат	Среднее	0,00	1,24	1,90	61	852
	Min	0,00	0,02	0,02	30	
	Max	0,51	14,89	6,12	165	
Риформат (Л-35-11)	Среднее	0,07	1,19	2,60	54	791
	Min	0,00	0,00	0,16	31	
	Max	0,92	1,19	5,26	71	
Риформат (Жекса)	Среднее	0,32	1,50	2,97	60	603
	Min	0,00	0,80	1,80	49	
	Max	0,67	2,47	3,79	72	

Ограничения по исключению пропана и снижению содержания изо-бутана в компонентах позволили бы значительно повысить количество норм-бутана в товарных бензинах.

Вовлечение в состав бензинов огромных ресурсов технического бутана, попадающего в топливную сеть заводов, позволяет не только несколько снизить выбросы CO₂ в атмосферу практически без снижения октанового числа бензина, но и уменьшить их себестоимость.

4.3.2 Техничко-экономические аспекты увеличения доли изомеризата в бензиновом пуле НПЗ

Для расчета некоторых технико-экономических показателей при вовлечении в процесс изомеризации гептановой фракции (C₇) были использованы статистические данные одного из ведущих нефтеперерабатывающих заводов Республики Башкортостан. На заводе присутствуют установки каталитического риформинга и изомеризации. В таблице 4.7 приведены ретроспективные данные себестоимости продукции в период с 2017 по 2024 годы.

Таблица 4.7 – Ретроспективные данные себестоимости продукции в период с 2017 по 2024 гг.

Наименование показателя	Ед. изм.	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	2024	Сред. знач.
Себестоимость риформата*	тыс. руб./т	23	30	29	23	46	50	51	64	39
Себестоимость изомеризата*	тыс. руб./т	21	28	28	23	43	48	49	60	38
Разница, %	%	-8 %	-5 %	-4 %	0 %	-6 %	-4 %	-5 %	-6 %	-5 %

* Себестоимость с учетом приведения к единым условиям срока службы эксплуатации работы установок в части амортизационных отчислений по объекту основных средств.

Согласно среднесрочной статистике, себестоимость 1 тонны продукта установки изомеризации ниже в среднем на 5 % относительно установки риформинга, что также согласуется с литературными источниками [18,102].

Как было показано в разделе 3, в составе сырья риформинга содержание фракции (C₇) составляет от 25 до 35 %, а в риформате - от 15 до 30 %, в случае

перевода данной фракции на процесс изомеризации себестоимость товарного бензина может быть снижена до 0,8 %.

В случае вовлечения гептановой фракции (C_7) в процесс изомеризации, взамен риформингу массовые удельные выбросы CO_2 могут быть снижены на 1,7 %, а на единицу получаемой энергии - на 3,5 % соответственно.

Следует отметить, что процесс изомеризации влечет за собой дополнительный выход изомеризата на 5-12 % выше относительно риформата, снижающего себестоимость товарного бензина до 1,5 % и повышающего маржинальную прибыль завода.

Также перевод фракции C_7 в процесс изомеризации наряду со снижением как суммарной ароматики, так и бензола в общем бензиновом пуле (это особенно важно для тех НПЗ, где нет процессов алкилирования и (или) производства МТБЭ), способствует снижению жесткости технологического режима риформинга, вследствие более селективного ведения процесса, что в свою очередь положительно сказывается на выходе риформата и межрегенерационном пробеге установок.

Увеличение в общем бензиновом пуле НПЗ доли изомеризата и снижение доли риформата приводит к некоторому снижению октанового числа, что потребует повышения доли более дорогих высокооктановых компонентов, таких как МТБЭ, бутанолы или алкилат, что также приведет к дополнительному снижению выбросов CO_2 .

4.4 Подходы к внедрению новой марки «ЭКО- CO_2 » для популяризации низкоуглеродного развития автотранспорта

Нефтяные компании создают новую линейку инновационных топлив, соответствующих экологическим критериям качества [41,16]. Например, компания «ЛУКОЙЛ» запустила продажу бензина с усовершенствованными экологическими и эксплуатационными свойствами под торговой маркой «ЭКТО». Данные

изменения дают возможность компаниям повысить конкурентоспособность на рынке и укрепить имидж лидеров производства качественной продукции.

Использование моторных экологичных топлив, наряду с повышением безопасной эксплуатации автотранспорта, способствует снижению выбросов канцерогенов, соединений серы, азота и других вредных веществ [111,132].

Проведя анализ литературы экологичных брендов новых товарных бензинов, стоит отметить, что данные инициативы по «эко-бензинам» не затрагивают проблему сокращения выбросов углекислого газа в атмосферу.

Предложенные технические и технологические рекомендации по снижению выбросов диоксида углерода в атмосферу могут быть использованы профильными предприятиями для выработки премиальных партий товарных бензинов со сниженными выбросами диоксида углерода в атмосферу. Товарный бензин, произведенный с использованием предложенного метода, можно будет реализовывать под отдельной маркой «ЭКО-CO₂».

Необходимо добавить, что в области декарбонизации электроэнергетики при купле-продаже «зеленой» энергии (электроэнергии, произведенной на возобновляемых и низкоуглеродных источниках энергии) используют особый метод. Низкоуглеродный генерирующий объект фиксирует факт выработки электроэнергии счетчиками и на этот объем энергии выпускается соответствующий документ (сертификат или договор), подтверждающий факт выдачи в сеть этим генератором. Далее заинтересованный потребитель может приобрести этот документ у данного генератора в качестве дополнительного атрибута, помимо энергии, который он покупает в общей системе. Соответственно потребитель выражает поддержку продвижения низкоуглеродных технологий, и, тем самым, стимулирует ее дальнейшее развитие [92].

Как известно, электроэнергия — это особый вид товара, которая отпускается в общую сеть, её нельзя складировать в больших объемах и невозможно отдельно пометить в «зеленый» цвет электроэнергию (электроны), которая была произведена на низкоуглеродных объектах, но энергетикам удалось сделать метод продажи «зеленой» энергии доступным для любого потребителя. В случае купле-

продажи экологичного топлива всё гораздо проще, так как топливо можно разделить и хранить в отдельных резервуарах.

Подобный метод можно использовать при купле-продаже низкоуглеродного товарного бензина под отдельной маркой «ЭКО-СО₂», например, с массовым коэффициентом удельных выбросов СО₂ не более 3,100 т СО₂/т. Для внедрения данного проекта требуется:

- произвести товарный бензин с характеристиками, отвечающими требованиям современных стандартов на бензины и имеющий заниженные значения по выбросам диоксида углерода;
- установить на автозаправочных станциях отдельную категорию марки «ЭКО-СО₂»;
- внедрить программу популяризации низкоуглеродного бензина (рекламные кампании, программа лояльности, система поощрений и прочее);
- внести изменения в нормативно-правовую базу для стимулирования производства низкоуглеродного топлива.

Переход на новый бренд «ЭКО-СО₂» поможет нефтяным компаниям взамен получить: позитивный имидж «экологичной компании», удовлетворение потребностей клиентов, сохранение клиентской базы, повышение конкурентоспособности, а также стать возможным источником дополнительного дохода. Инвестирование со стороны потребителей в будущем даст возможность развивать новые низкоуглеродные технологии при производстве товарного бензина.

Выводы к главе 4

В качестве инструмента компаундирования разработана «ИВАС регулирования состава бензина с учётом минимальных выбросов СО₂». Целевая функция содержит в себе комплексный показатель качества компаундирования бензина, минимальную стоимость смеси и учет минимальных выбросов. Разработка программы выполнялась в среде программирования Python с

применением методов и алгоритмов нелинейного программирования. Для решения задач с нелинейными зависимостями применялся метод множителей Лагранжа.

Разработка нового ИВАС позволяет ускорить и автоматизировать расчеты и регулирование состава компонентов в смеси с учетом соответствий стандартов качества и минимальных выбросов CO_2 в атмосферу.

Принимая во внимание полученные данные о зависимости удельных выбросов углекислого газа от компонентного и индивидуального химического состава бензинов, предложены следующие основные технологические направления снижения выбросов от автомобильных топлив.

1. Сохранение нативного водорода, в составе компонентов товарных бензинов. Наглядными примерами данного направления могут служить: максимальное вовлечение бутанов в состав товарных бензинов, увеличение доли изомеризата в бензиновом пуле НПЗ и др.

2. Перераспределение нативного водорода, поступившего на НПЗ в составе нефти, в пользу моторных топлив, в том числе и бензина. Примером направления может служить селективный каталитический крекинг, настроенный на максимальный выход ББФ – аналог варианта каталитического крекинга, используемый с целью получения сырья для нефтехимии. На НПЗ топливного профиля - производство на основе ППФ и ББФ высокооктановых компонентов товарных бензинов с низкими удельными выбросами CO_2 .

3. Введение водорода в состав товарных бензинов извне (полученного всеми известными в настоящее время методами – зеленого, голубого, серого). Примерами данного направления могут служить такие процессы, как гидрирование олефинов, входящих в состав компонентов товарных бензинов, РЕГИЗ и его аналоги, и другие.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Показано, что действующие в настоящее время методы оценки удельных выбросов углекислого газа в атмосферу от автомобильных бензинов не дают объективной картины о зависимости данного показателя от химического состава топлив.

2. Проведена количественная оценка и ранжирование основных высокооктановых компонентов товарных бензинов и индивидуальных соединений по удельным выбросам диоксида углерода. Показано, что разница массовых коэффициентов удельных выбросов отдельных компонентов может составить 143 % (толуол и метанол - 3,348 и 1,375 т CO_2 /т соответственно), а по коэффициенту на единицу получаемой энергии – 22,3 % (толуол и бутаны - 82113 и 67151 кг/ТДж) соответственно.

3. Для производства бензинов со сниженными выбросами CO_2 , разработана база данных основных углеводородов и оксигенатов, входящих в состав товарных бензинов, состоящая из 150 соединений и охватывающая не менее 92 % масс. состава товарных автомобильных бензинов. БД защищена свидетельством о государственной регистрации базы данных (№ 2025620533 РФ). Для процесса компаундирования бензинов с известным химическим составом разработана «Информационно-вычислительная аналитическая система оптимизации состава бензина с учетом минимальных выбросов CO_2 », которая защищена свидетельством о государственной регистрации программ для ЭВМ (№ 2025615693 РФ).

4. Предложены основные направления технического и технологического решения задачи снижения выбросов диоксида углерода в атмосферу автотранспортом с бензиновыми двигателями: сохранение нативного водорода в бензиновых фракциях, перераспределение нативного водорода в пользу бензинов, введение водорода извне. На примерах известных технологических решений показана степень их эффективности в части сокращения выбросов в атмосферу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аликберова, Т.Т. Адаптация транспортного сектора к процессам декарбонизации в России / Т.Т. Аликберова, И.С. Белик, Н.В. Стародубец // Международный научно-исследовательский журнал. – 2023. – № 8.
2. Алтынкович, Е.О. Крекинг бутан-бутиленовой фракции на модифицированном цеолите ZSM-5 / Е.О. Алтынкович, О.В. Потапенко, Т.П. Сорокина [и др.] // Нефтехимия. – 2017. – Т. 57, № 2. – С. 156-162.
3. Андрющенко, Н.К. Снижение содержания сернистых соединений в автомобильных бензинах. Химия и химическая технология / Н.К. Андрющенко // Известия Высших Технических Учебных Заведений Азербайджана ISSN 1609-1620. – 2018. – Т. 20, № 6. – С.45-50.
4. Аносов, А.А. Оптимальное управление компаундированием топлив - задачи, решения, опыт в России / А.А. Аносов, Г.Л. Ефитов // Автоматизация в промышленности. – 2015. – № 4. – С. 15-21.
5. Арсаханов, А.М. Влияние добавок оксигенатов на октановую характеристику моторных топлив / А.М. Арсаханов, Х.Х. Ахмадова, М.Х. Магомадова, Т.Р. Дудукова // Миллионщиков-2019 : Материалы II Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 100-летию ГГНТУ, Грозный, 30–31 мая 2019 года. Том 1. – Грозный: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Грозненский государственный нефтяной технический университет имени академика М.Д. Миллионщикова», 2019. – С. 283-290.
6. Артамонова, К.В. Пропан-пропиленовая фракция каталитического крекинга как дополнительный источник сырья для получения пропилена / К.В. Артамонова, О.Б. Прозорова, Н.А. Лихачева, С.Ю. Прозорова // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2021. – № 3. – С. 93-109.
7. Архитектура PyQt5. [Электронный ресурс]. URL: <https://blog.skillfactory.ru/glossary/pyqt/> (дата обращения 10.06.2025).

8. Ахмадияров, Р.Р. Программное обеспечение процесса компаундирования автомобильных бензинов / Р.Р. Ахмадияров, М.М. Якупов, И.М. Губайдуллин, М.Н. Рахимов, К.И. Саранцева // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2025. – № 4. – С. 182-200.

9. Ахмадова, Х.Х. Алкилат - основной компонент высокооктановых бензинов / Х.Х. Ахмадова, М.Х. Магомадова, А.Р. Ахмадова // Вестник ГГНТУ. Технические науки. – 2019. – Т. 15, № 4(18). – С. 49-59.

10. Ахметов, А.Ф. Получение высокооктановых бензинов гидроизомеризацией катализаторов риформинга / А.Ф. Ахметов, А.Ф. Танатаров, В.Ю. Георгиевский // Химия и технология топлив и масел. - 1984. - №10. - С. 10-12.

11. Ахметов, А.Ф. Разработка комбинированной технологии производства высокооктановых неэтилированных бензинов и ароматических углеводородов: дис. докт. техн. наук. / Ахметов А.Ф. - Уфа 1986. - 335 с.

12. Ахметов, Т.В. Комбинированная технология гидрирования и изомеризации легких бензиновых фракций: дис. канд. техн. наук. / Ахметов Т.В. – Уфа 2011. - 162 с.

13. Багирян, Б.А. Оксигенаты как экологически безопасные присадки к автомобильным топливам / Б.А. Багирян, Р.А. Куликенов, О.Н. Беспалова // Прикаспийский международный молодежный научный форум агропромтехнологий и продовольственной безопасности 2017: Сборник научных статей, Астрахань, 20–21 апреля 2017 года / Составители А.Р. Лозовский, О.Н. Беспалова, А.А. Айтпаева, Ю.И. Шахмедова. – Астрахань: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Астраханский государственный университет», 2017. – С. 3-5.

14. Бадикова, А.Д. Возможности метода пассивной адсорбции для проведения геохимической оценки нефтегазоносности пласта / А.Д. Бадикова, А.В. Рулло, Е.А. Парамонов, Р.И. Аблеев, Т.Р. Просочкина // Доклады башкирского университета. - 2018. - Т. 3, № 1 - С. 27-31.

15. Балмукан, А.С. Научно-технологические аспекты получения высокооктановых компонентов бензина / А.С. Балмукан // Современная наука: актуальные вопросы, достижения и инновации: сборник статей XIX Международной научно-практической конференции: в 2 ч., Пенза, 05 мая 2021 года. Том Часть 1. – Пенза: Общество с ограниченной ответственностью «Наука и Просвещение», 2021. – С. 97-101.

16. Бозоров, Г.Р. Соответствие качества отечественных и зарубежных моторных топлив требованиям европейских стандартов / Г.Р. Бозоров, Б.Б. Тухтаев // Теория и практика современной науки. – 2019. – № 3(45). – С. 78-82.

17. Букин, К.А. Исследование двухступенчатого каталитического крекинга: остатка гидрокрекинга и тяжелого бензина / К.А. Букин, А.Л. Григорьева, В.П. Доронин [и др.] // Молодёжь третьего тысячелетия: Сборник научных статей, Омск, 08–30 апреля 2016 года. – Омск: Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 2016. – С. 27-29.

18. Булатов, Р.Р. Пути расширения сырьевой базы процесса изомеризации / Р.Р. Булатов, Н.А. Пивоварова. – Петрозаводск: МЦНП «Новая наука», 2021. – Изомалк-4 технология изомеризации гептановой фракции. – ООО «НПП Нефтехим», 2024. – [Электронный ресурс]. URL: <https://nefthim.ru/razrabotki/izomalk-4/> (дата обращения 10.06.2025).

19. Ванчухина, Л.И. Оперативное планирование на основе информационных технологий (на примере ООО «Газпром нефтехим Салават») / Л.И. Ванчухина, М.Э. Лунева, У.М. Мухаметдинова // Энергия молодежи для нефтегазовой индустрии: Сборник материалов V Международной научно-практической конференции молодых ученых, Альметьевск, 13 ноября 2020 года. – Альметьевск: Альметьевский государственный нефтяной институт, 2020. – С. 848-852.

20. Волков, А.Р. Проблемы и перспективы водородной энергетики через призму "зеленой" экономики / А.Р. Волков, Е.Д. Макаренко, А.А. Ким, М.А. Селезнева // Экономика устойчивого развития. – 2022. – № 4(52). – С. 30-34.

21. Ворохобин, А.В. Влияние октанового числа топлива на количество и состав выхлопных газов / А.В. Ворохобин, С.З. Манойлина, А.Р. Воробьев // Тенденции развития технических средств и технологий в АПК: Материалы международной научно-практической конференции, Воронеж, 20 февраля 2023 года. – Воронеж: Воронежский государственный аграрный университет им. Императора Петра I, 2023. – С. 171-176.

22. Выбросы парниковых газов по секторам (Greenhouse gas emissions by sector). [Электронный ресурс]. URL: <https://ourworldindata.org/grapher/ghg-emissions-by-sector> (дата обращения: 30.09.2025).

23. Газизянов, А.И. Современные стратегии декарбонизации: успешные практики крупных компаний / А.И. Газизянов, И.В. Ульянкина, И.А. Бородин, С. Дрожжин // Экологический Вестник Северного Кавказа. – 2025. – Т. 21, № 2. – С. 10-18.

24. Гладилович, В.Д. Возможности применения метода ГХ-МС (обзор) / В.Д. Гладилович, Е.П. Подольская // Научное приборостроение. – 2010. – Т. 20, №4. – С. 36-49.

25. Головина, Е.С. Разработка и применение имитационной модели цеха компаундирования автомобильных бензинов / Е.С. Головина, И.Н. Хаймович // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2023. – Т. 25, № 3(113). – С. 35-42.

26. Головина, Е.С. Разработка моделей и методики оптимизационной работы цеха компаундирования бензинов с использованием комплексного показателя качества: дис. канд. техн. наук. / Головина Е.С. - Самара 2023 – 146 с.

27. Головина, Е.С. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022680985 от 09.11.2022. Имитационная модель цеха компаундирования бензина.

28. Горбунов, С.С. Комплексная система планирования и оптимизации рецептур смешения бензинов / С.С. Горбунов, А.В. Костандян, А.А. Алексанян, А.Ф. Егоров // Математические методы в технике и технологиях - ММТТ. – 2019. – Т. 4. – С. 91-94.

29. Горбунов, С.С. Программный комплекс оптимального планирования и оптимизации рецептур смешения бензинов и мазутов / С.С. Горбунов, А.А. Алексанян, В.А. Костандян, А.Ф. Егоров // Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. – 2019. – № 1. – С. 13-19.

30. ГОСТ 1756-2000 Нефтепродукты. Определение давления насыщенных паров. Межгосударственный совет по стандартизации, метрологии и сертификации, 2001. - 16 с.

31. ГОСТ 2177-99 Нефтепродукты. Методы определения фракционного состава. Мн.: Межгосударственный совет по стандартизации, метрологии и сертификации, 2001. - 23 с.

32. ГОСТ 3900-2022 Нефть и нефтепродукты. Методы определения плотности. М.: Стандартиформ, 2023. - 133 с.

33. ГОСТ 511-2015 Топливо для двигателей. Моторный метод определения октанового числа. Технические условия. М.: Стандартиформ, 2016. - 17 с.

34. ГОСТ 8226-2022 Топливо для двигателей. Исследовательский метод определения октанового числа. Технические условия. М.: Стандартиформ, 2023. - 17 с.

35. ГОСТ EN 13016-1-2013. Нефтепродукты жидкие. Часть 1. Определение давления насыщенных паров, содержащих воздух (ASVP), и расчет эквивалентного давления сухих паров (DVPE). М.: Стандартиформ, 2014. - 12 с.

36. ГОСТ ISO 20884-2016. Нефтепродукты жидкие. Определение содержания серы в автомобильных топливах. Метод рентгенофлуоресцентной спектроскопии с дисперсией по длине волны. М.: Стандартиформ, 2019. - 12 с.

37. ГОСТ Р 51866-2002. Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия. М.: Стандартиформ, 2009. - 27 с.

38. ГОСТ Р 52087-2018 Газы углеводородные сжиженные топливные. М.: Стандартиформ, 2018. - 18 с.

39. Гришко, Б.М. Практикум по расчету горения топлива: Учеб. пособие / Б. М. Гришко, П. А. Трубаев. – Белгород: Изд-во БГТУ, 2020. – 70 с.

40. Декарбонизация в нефтегазовой отрасли: международный опыт и приоритеты России. [Электронный ресурс]. URL: https://energy.skolkovo.ru/downloads/documents/SEneC/Research/SKOLKOVO_EneC_Decarbonization_of_oil_and_gas_RU_22032021.pdf (дата обращения: 10.06.2025).

41. Демин, А.П. Этанол как экологичное топливо / А.П. Демин // Приоритетные направления развития науки и технологий: сборник научных трудов по материалам Международной научно-практической конференции, Москва, 30 декабря 2021 года. – Москва: Индивидуальный предприниматель Туголуков Александр Валерьевич, 2021. – С. 271-272.

42. Демина, К.Д. Производство автомобильных бензинов с улучшенными экологическими свойствами / К.Д. Демина, А.А. Сафина, Ю.В. Кузьмина, Е.Ю. Круглякова // Фундаментальные и прикладные аспекты развития современной науки: Сборник научных статей по материалам VII Международной научно-практической конференции, Уфа, 30 декабря 2021 года. – Уфа: Общество с ограниченной ответственностью «Научно-издательский центр «Вестник науки», 2021. – С. 33-43.

43. Дехнич, В.С. Расчет выбросов парниковых газов коммунальным сектором г. Астана / В.С. Дехнич, Н.М. Дронин // Вестник Московского университета. Серия 5: География. – 2015. – № 3. – С. 35-40.

44. Евдокимова, Н.Г. Совершенствование внутрифирменного планирования на нефтеперерабатывающих и нефтехимических предприятиях на основе информационных технологий / Н.Г. Евдокимова, Н.Н. Лунева, Т.М. Левина, М.Э. Лунева // Вестник УГНТУ. Наука, образование, экономика. Серия: Экономика. – 2020. – № 2(32). – С. 56-67.

45. Ермак, А.А. Изменение углеводородного состава бензина каталитического крекинга MSCC в результате его гидрооблагораживания по технологии Prime G+ / А.А. Ермак, О.Г. Бугаевич // Вестник Полоцкого государственного университета. Серия В. Промышленность. Прикладные науки. – 2015. – № 11. – С. 127-132.

46. Ершов, М.А. Обзор современных многофункциональных присадок к бензину. Рынок, ключевые компоненты и методы оценки их эффективности / М.А. Ершов, В.С. Савеленко, Н.С. Шведова [и др.] // Мир нефтепродуктов. – 2021. – №4. – С. 42-53.
47. Жирнов Б.С., Евдокимова Н.Г. Первичная переработка нефти: учеб. пособие для вузов. – Уфа: УГНТУ, 2005. – 167 с.
48. Жуков, К.Г. Экологические аспекты применения бензина каталитического крекинга и методы улучшения его качества / К.Г. Жуков, Э.И. Акбарова, К.В. Иванова // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2019. – № 1. – С. 218-233.
49. Импортозамещение высокотехнологичных решений автоматизации в нефтехимическом комплексе. [Электронный ресурс]. URL: https://www.researchgate.net/publication/369663081_IMPORTOZAMESENIJE_VYSOKOTEHNOLOGICNYH_RESENIJ_AVTOMATIZACII_V_NEFTEGAZOHIMICESKOM_KOMPLEKSE (дата обращения 10.06.2025).
50. Кабо, Г.Я. Энергоемкость углеводородов в жидком и твердом состояниях / Г.Я. Кабо, Л.А. Кабо, Л.С. Карпушенкова, А.В. Блохин // Тонкие химические технологии. – 2021. – Т. 16, № 4. – С. 273-286.
51. Капустин, В.М. Технология производства автомобильных бензинов / В.М. Капустин. – М.: Химия, 2015. – 256 с.
52. Капустин, В.М. Справочник нефтепереработчика / В.М. Капустин, М.Г. Рудин, С.Г. Кукес - М.: Химия, 2018. - 416 с.
53. Карапетянц, М.Х. Химическая термодинамика / М. Х. Карапетянц -М.: Химия, 1975. – 584 с.
54. Карасек, Ф. Введение в хромато-масс-спектрометрию: Пер. с англ. / Ф. Карасек, Р. Клемент -М.: Мир, 1993. - 237 с.
55. Киргина, М.В. Повышение ресурсоэффективности процессов производства моторных топлив методом математического моделирования / М.В. Киргина, Н.В. Чеканцев, Э.Д. Иванчина [и др.] // Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. – 2013. – № 10. – С. 28-33.

56. Ключева, В.П. Изомеризация бензиновых фракций / В.П. Ключева // Инновационные научные исследования: сборник статей Международной научно-практической конференции, Пенза, 07 июня 2023 года. – Пенза: Наука и Просвещение (ИП Гуляев Г.Ю.), 2023. – С. 11-13.

57. Коледин, О.С. Прогнозирование характеристик детонации углеводородов моторных топлив: дис. канд. техн. наук. / Коледин, О.С. - Уфа., 2023. – 205 с.

58. Коробова, О.С. Инвентаризация выбросов парниковых газов при производстве цемента / О.С. Коробова, Т.В. Михина // Горный информационно-аналитический бюллетень. – 2008. – № S3. – С. 253-265.

59. Кувыкин, В.И. Согласование баланса при смешении бензинов / В.И. Кувыкин // Инновации в науке. – 2016. – № 8(57). – С. 22-27.

60. Куданова, А.И. Экологизация автомобильного транспорта: преимущества и сложности перехода на альтернативные автомобили / А.И. Куданова, Е.Ю. Яковлева // Вестник Московского университета. Серия 6: Экономика. – 2021. – № 2. – С. 176-198.

61. Кузора, И.Е. Повышение доли бензина каталитического крекинга в производстве автомобильных бензинов высоких экологических классов / И.Е. Кузора, Д.А. Дубровский, Р.Р. Галимуллин [и др.] // Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт. – 2016. – № 10. – С. 3-8.

62. Кучаев, Э.Р. Газовая хроматография в нефтехимической отрасли: применение и перспективы развития / Э.Р. Кучаев, М.П. Миронов // Булатовские чтения. – 2024. – Т. 2. – С. 75-76.

63. Литвиненко, А.Н. Эксплуатационные материалы / А.Н. Литвиненко, В.Ф. Данилов, В.В. Епанешников - Елабуга: Изд-во Центр оперативной печати «АБАК», 2019. – 315 с.

64. Лифанов, А.Д. Прогнозирование октановых чисел органических соединений с использованием методов машинного обучения / А.Д. Лифанов, К.Ю.

Никитина, Е.Г. Лифанова // Вестник Технологического университета. – 2025. – Т. 28, № 2. – С. 66-69.

65. Ляшенко, М.В. Применение PIMS-анализа в маркетинговой деятельности компании / М.В. Ляшенко // Практический маркетинг: Материалы IV международной студенческой научно-практической конференции, Москва, 24 апреля 2019 года / Ответственный редактор И.Л. Сурат. – Москва: Негосударственное образовательное частное учреждение высшего образования «Московский экономический институт», 2019. – С. 52-54.

66. Мансуров, Ш.У. Получение бензина путем смешения в потоке / Ш. У. у. Мансуров // Инновации. Наука. Образование. – 2021. – № 34. – С. 1099-1103.

67. Матузов, Г.Л. Пути производства автомобильных бензинов с улучшенными экологическими свойствами / Г.Л. Матузов, А.Ф. Ахметов // Башкирский химический журнал. – 2007. – Т. 14, № 2. – С. 121-125.

68. Мокеева, В.Н. Применение отечественного катализатора в процессе изомеризации / В.Н. Мокеева, А.В. Мальцева // Молодежная наука: вызовы и перспективы : Материалы V Всероссийской научно-практической конференции студентов и молодых ученых, Самара, 18–29 апреля 2022 года / Отв. редактор О.В. Карсунцева – Самара: Самарский государственный технический университет, 2022. – С. 311-315.

69. Мочалин, Д.С. Обработка данных, математическая статистика. Расчет парниковых газов от энергетической деятельности предприятий / Д.С. Мочалин, М.М. Ищенко, С.В. Смирнов // Национальная Ассоциация Ученых. – 2023. – № 87-1. – С. 32-40.

70. Надеина, К.А. Катализатор для селективной гидроочистки бензина каталитического крекинга без предварительного фракционирования / К.А. Надеина, В.Ю. Перейма, О.В. Климов [и др.] // Катализ в промышленности. – 2016. – № 6. – С. 57-64.

71. Научно обоснованный прогноз адаптаций сектора автомобильного транспорта к вероятным последствиям изменения климата и возможные сценарии его декарбонизации в Российской

федерации. [Электронный ресурс]. URL: https://esg-library.mgimo.ru/upload/iblock/51d/fij7e385h3mi8eur6dg5si1hbolq9aeq/SKOLKOVO_EneC_RU_Transport.pdf?utm_source=yandex.ru&utm_medium=organic&utm_campaign=yandex.ru&utm_referrer=yandex.ru (дата обращения: 10.06.2025).

72. Научно-производственная фирма «Мета-хром» — разработчик и изготовитель газовых хроматографов. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.meta-chrom.ru/company/articles/khromato-mass-spektrometriya/> (дата обращения 10.06.2025).

73. Национальный доклад о кадастре антропогенных выбросов из источников и абсорбции поглотителями парниковых газов, не регулируемых Монреальским протоколом / Институт глобального климата и экологии им. акад. Ю.А. Израэля. [Электронный ресурс]. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=49919111> (дата обращения: 10.06.2025).

74. Недельченко, С.И. Система глобальной динамической оптимизации и система оптимизации в реальном времени: критерии выбора системы управления технологическими процессами / С.И. Недельченко, М.С. Гайфуллин, Е.С. Головина [и др.] // Территория Нефтегаз. – 2019. – № 12. – С. 12-17.

75. Новожилова, А.И. Перспектива перехода на новые виды оксигенатных присадок к бензинам / А.И. Новожилова, Р.О. Бабенцева, Т.А. Булатова // Научно-исследовательские публикации. – 2023. – № 1. – С. 75-77.

76. Носков, А.С. Катализаторы и процессы селективной гидроочистки бензина каталитического крекинга / А.С. Носков, О.В. Климов, К.А. Надеина, В.Ю. Перейма // Экология и промышленность России. – 2016. – Т. 20, № 5. – С. 40-46.

77. Нурмухаметова, Э.Р. Исследование бензина каталитического крекинга / Э.Р. Нурмухаметова, А.Ф. Ахметов, А.Р. Рахматуллин // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2014. – № 2. – С. 181-193.

78. О мерах по обеспечению технологической независимости и безопасности критической информационной: Указ Президента РФ от 30 марта 2022 г. №166.

79. О принятии Парижского соглашения: Постановление Правительства Российской Федерации от 21 сентября 2019 г. № 1228.

80. О сокращении выбросов парниковых газов: Указ Президента Российской Федерации от 04 ноября 2020 г. № 666.

81. Об утверждении Климатической доктрины Российской Федерации: Указ Президента Российской Федерации от 26 октября 2023 г. № 812.

82. Об утверждении методик количественного определения объемов выбросов парниковых газов и поглощений парниковых газов: Утв. Приказом Минприроды РФ от 27 мая 2022 г. №371.

83. Остриков, В.В. Топливо, смазочные материалы и технические жидкости: учебное пособие / В.В. Остриков, А.И. Петрашев, С.Н. Сазонов, А.В. Забродская.- М.; Вологда: Инфра-Инженерия, 2019. - 244 с.

84. Официальный сайт ООО «Центр цифровых технологий». [Электронный ресурс]. URL: <https://mipt-cdt.ru/sm-mix> (дата обращения 10.06.2025).

85. Парижское соглашение (Парижское соглашение к Рамочной конвенции ООН об изменении климата (Париж, 12 декабря 2015г.)). [Электронный ресурс]. URL:http://unfccc.int/files/essential_background/convention/application/pdf/russian_paris_agreement.pdf (дата обращения: 10.06.2025).

86. Пат. 2408659 Российская Федерация, МПК C10G 65/02, C07C 5/22. Способ изомеризации легких бензиновых фракций, содержащих C₇-C₈ парафиновые углеводороды [Текст] / Шакун А.Н., Федорова М.Л.; заявитель и патентообладатель ОАО «НПП Нефтехим». – № 2009127923/04 заявл. 20.07.2009; опубл. 20.07.2011, Бюл. № 1. – 22 с.

87. Патент № 2644781 C2 Российская Федерация, МПК C10G 50/00, B01J 29/40, C01B 39/38. Способ получения бензиновых фракций углеводородов из олефинов: № 2016129706: заявл. 20.07.2016: опубл. 14.02.2018 / А.Г. Попов, А.В. Ефимов, Е.Е. Князева [и др.]; заявитель Акционерное общество «Газпромнефть - Московский НПЗ" (АО «Газпромнефть-МНПЗ»).

88. Патент на изобретение №583634. Способ получения высокооктанового бензина / М.А. Танатаров, А.Ф. Ахметов, З.И. Сюняев, Д.И. Кондаков, Т.З. Хурамшин.

89. Плотникова, И.Н. Актуальные вопросы декарбонизации. Часть 1 / И.Н. Плотникова, С.А. Володин, Ю.Ю. Кочнева, А.Р. Саяхова // Под научной редакцией М.Х. Салахова и М.С. Тагирова – Казань: Изд-во «ФЭН» Академии наук РТ, 2021. – 56 с.

90. Портола, В.А. Расчет процессов горения и взрыва: учебное пособие / В.А. Портола, Н.Ю. Луговцова, Е.С. Торосян; Юргинский технологический институт. –Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2012. – 108 с.

91. Прозорова, О.Б. Вовлечение пропан-пропиленовой фракции установки каталитического крекинга в сырье блока газоразделения производства этилена и пропилена / О.Б. Прозорова, Л.Б. Бурханова, Р.Р. Музирев, Г.А. Худайгулова // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2019. – № 6. – С. 134-149.

92. Путь зелёной энергии. ООО «Центр энергосертификации». [Электронный ресурс]. URL: https://green-e-track.ru/green_idea/ (дата обращения 10.06.2025).

93. Развернутое описание программного комплекса планирования и оптимизации рецептур бензинов. Официальный сайт ООО «МЦЭ-Инжиниринг». [Электронный ресурс]. URL: <https://mcee.ru/programmnyij-kompleks-planirovaniya-i-optimizaczii-reczeptur-benzinov> (дата обращения 10.06.2025).

94. Рахимов, М.Н. Анализ теплотворной способности высокооктановых компонентов автомобильных бензинов / М.Н. Рахимов, Ф.Ш. Вильданов, С.В. Фаррахов, М.М. Якупов // Башкирский химический журнал. – 2023. – Т. 30, № 3. – С. 91-96.

95. Рахимов, М.Н. Исследование зависимости удельных выбросов диоксида углерода от химического состава высокооктановых компонентов автомобильных бензинов / М.Н. Рахимов, И.М. Губайдуллин, Ф.Ш. Вильданов, М.М. Якупов // Химия в интересах устойчивого развития. – 2025. – Т. 33, № 1. – С. 59-66.

96. Рахимов, М.Н. Компонентный состав высокооктановых автомобильных бензинов / М.Н. Рахимов, М.Э. Лунева // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2022. – № 4. – С. 171-192.

97. Редникова, Т.В. Меры адаптации к климатическим изменениям: совершенствование экологического законодательства Российской Федерации в свете присоединения к Парижскому соглашению по климату / Т.В. Редникова // Союз криминалистов и криминологов. – 2020. – № 4. – С. 122-127.

98. Рындин, Д.А. Исследование процесса приобретения и подбора катализаторов для установки «Гидрокрекинг» с помощью программы оптимизационного планирования Aspen PIMS / Д.А. Рындин, О.Ю. Белоусова, Р.Ш. Япаев // Башкирский химический журнал. – 2016. – Т. 23, № 1. – С. 83-87.

99. Рынок КПП: мировой опыт развития и уроки для России. [Электронный ресурс]. URL: https://www.hse.ru/data/2020/01/29/1569353767/EY_%D0%A0%D1%8B%D0%BD%D0%BE%D0%BA%20%D0%9A%D0%9F%D0%93_%D0%9C%D0%B8%D1%80%D0%BE%D0%B2%D0%BE%D0%B9%20%D0%BE%D0%BF%D1%8B%D1%82%20%D0%B8%20%D1%83%D1%80%D0%BE%D0%BA%D0%B8%20%D0%B4%D0%BB%D1%8F%20%D0%A0%D0%BE%D1%81%D1%81%D0%B8%D0%B8.pdf (дата обращения: 10.06.2025).

100. Самсонов, М.В. Влияние количества легкого газойля каталитического крекинга в смешенном сырье гидроочистки на содержание серы и цетановое число / М.В. Самсонов, А.А. Роганов, А.В. Моисеев [и др.] // Ашировские чтения. – 2016. – Т. 2, № 3(8). – С. 252-254.

101. Сафина, Д.Н. Традиционные и альтернативные источники сырья для получения моторных топлив / Д.Н. Сафина, И.Ш. Хуснутдинов, А.Г. Сафиулина [и др.] // Вестник Технологического университета. – 2021. – Т. 24, № 6. – С. 26-40.

102. Смоликов, М.Д. Интегрированные процессы риформинга и изомеризации бензиновых фракций для производства экологически чистых автобензинов / М.Д. Смоликов, Д.И. Кирьянов, В.А. Шкуренок [и др.] // Катализ в промышленности. – 2022. – Т. 22, № 1. – С. 40-56.

103. СМПР - система моделирования производства нефтепереработки и нефтехимии. [Электронный ресурс]. URL: <https://k-mod.ru/smpr> (дата обращения 10.06.2025).

104. Смышляева, Ю.А. Разработка базы данных по октановым числам для математической модели процесса компаундирования товарных бензинов / Ю.А. Смышляева, Э.Д. Иванчина, А.В. Кравцов, Ч.Т. Зыонг, Ф. Фан // Известия Томского политехнического университета. - 2011. - Т. 318, №3. - С.75-80.

105. Смягчение последствий изменения климата в сфере внутреннего транспорта на переломном этапе: последующие действия. [Электронный ресурс]. URL: https://unece.org/sites/default/files/2023-02/ECE_TRANS_2023_21R.pdf (дата обращения: 10.06.2025).

106. Стратегия социально-экономического развития Российской Федерации с низким уровнем выбросов парниковых газов до 2050 года: Распоряжение Правительства РФ от 29 октября 2021 г. №3052-р.

107. Студенческий форум: научный журнал. – № 13(149). Часть 2. М., Изд. «МЦНО», 2021. -108 с. [Электронный ресурс]. URL: https://nauchforum.ru/archive/studjournal/13%28149_2%29.pdf (дата обращения: 10.06.2025).

108. Сундуrow, А.В. Применение оксигенатов для повышения октанового числа топлив / А.В. Сундуrow, Э.Ю. Георгиева // World science problems and innovations: сборник статей XX Международной научно-практической конференции: в 2 ч., Пенза, 30 апреля 2018 года. Том Часть 1. – Пенза: «Наука и Просвещение» (ИП Гуляев Г.Ю.), 2018. – С. 55-58.

109. Темерева, И.В. Модификация рецептуры автомобильного бензина методом компаундирования / И.В. Темерева, Т.Б. Смирнова // Электронный научно-методический журнал Омского ГАУ. – 2020. – № 1(20). – С. 3.

110. Технология Industrial IT позволяет оптимизировать смешение бензинов на нефтеперерабатывающем заводе Preem. [Электронный ресурс]. URL: https://library.e.abb.com/public/fe2e62031ccbe307c1256e68002793af/p15_20.pdf?xsig

n=1Zsm/7iesnqRTYjcou4Y9sL5LwXe6+THuci4E8fF/d06iE8cuLos4b3vR55eTNT7

(дата обращения 10.06.2025).

111. Топливо ЭКТО. [Электронный ресурс]. URL: <https://lukoil.ru/Products/brands/ectofuel?ysclid=matbnp6oi0863919798> (дата обращения 10.06.2025).

112. Транспортная стратегия Российской Федерации на период до 2030 года: Распоряжение Правительства РФ от 27 ноября 2021 г. №3363-р.

113. Федоринов, И.А. Совершенствование бензинового производства Волгоградского НПЗ: дис. канд. техн. наук. / Федоринов И.А. – Уфа 2004. -162 с.

114. Хайрулин, С.Р. Экзотермические каталитические процессы глубокого и парциального окисления для защиты окружающей среды и очистки углеводородного сырья/ С.Р. Хайрулин, М.А. Керженцев, А.В. Сальников, З.Р. Исмагилов // Глава монографии Химическая физика процессов горения и катализа. –Дарын., 2024. – С. 98-126.

115. Хафизов, Ф.Ш. Давление насыщенных паров для нефтепродуктов / Ф.Ш. Хафизов, А.В. Краснов // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2012. – № 3. – С. 406-412.

116. Хитрых, Д.П. Электромобили: мировые тренды, проблемы и перспективы / Д.П. Хитрых // Энергетическая политика. Энергопереход – Москва: 2021, - № 1 (155). - С. 22-33.

117. Хохлов, А.С. Реализация систем класса APS для НПЗ/НХК и их объединений / А.С. Хохлов, Д.Ю. Мишутин, Е.С. Баулин // Управление развитием крупномасштабных систем (MLSD'2023) : Труды Шестнадцатой международной конференции, Москва, 26–28 сентября 2023 года. – Москва: Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, 2023. – С. 94-103.

118. Чернышева, Е.А. Переход процесса переработки нефтяных фракций Изомалк-2 на Изомалк-4 на Орском НПЗ / Е.А. Чернышева, К.П. Узун, Е.В. Тюрина // Нефтегазовый комплекс: проблемы и инновации: Тезисы III научно-практической конференции с международным участием, Самара, 23-25 октября 2018 года – Самара: СГТУ, 2018. – С. 85.

119. Чернышева, Е.А. Повышение эффективности процесса перегонки нефти на НПЗ путем предварительного оптимального смешения сырья (обзор) / Е.А. Чернышева, И.В. Пискунов, В.М. Капустин // Нефтехимия. – 2020. – Т. 60, №1. – С. 3-19.

120. Чернышева, Е.А. Аспекты использования биокomпонентов в топливных смесях для автомобильного транспорта / Е.А. Чернышева, Ю.В. Кожевникова, Е.Ю. Сердюкова, В.Е. Моисеенко // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2020. – №1. – С. 23-30.

121. Чиркова, Ю.Н. Современные требования к автомобильному бензину / Ю.Н. Чиркова, И.В. Архипов // Аллея науки. – 2018. – Т. 7, № 5(21). – С. 401-407.

122. Шакун, А.Н «Изомалк-4» Перспективная технология изомеризации С₇-фракции для производства высококачественных автобензинов / А.Н. Шакун, М.Л. Федорова, Т. Карпенко, Е. Демидова // Технополис XXI. – 2016. – №33. – С. 24-26.

123. Шакун, А.Н. Развитие процессов изомеризации парафиновых углеводородов / А.Н. Шакун, М.Л. Федорова, Т.В. Карпенко, Е.В. Демидова // Мир нефтепродуктов. – 2020. – №6. – С. 6-14.

124. Шевляков, Ф.Б. Проведение процесса олигомеризации бутан-бутиленовой фракции, содержащей бутадиен / Ф.Б. Шевляков, Г.Ш. Тимербулатова // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2022. – №2. – С. 155-173.

125. Шишов, Р.И. Оптимизация выбора рецептуры компонент для процесса компаундирования при производстве товарных бензинов / Р.И. Шишов, Я.Ю. Григорьев // Научно-техническое творчество аспирантов и студентов: Материалы всероссийской научно-технической конференции студентов и аспирантов: в 2 частях, Комсомольск-на-Амуре, 09–20 апреля 2018 года. Том Часть 2. – Комсомольск-на-Амуре: Комсомольский-на-Амуре государственный технический университет, 2018. – С. 260-262.

126. Эдер, Л.В. Прогнозирование энерго-и нефтепотребления автомобильным транспортом в регионах Российской Федерации // Экономика региона. – 2017. – Т. 13, № 3. – С. 859-870.

127. Якупов М.М. Исследование удельных выбросов диоксида углерода от индивидуальных соединений и высокооктановых компонентов автомобильных бензинов / М.М. Якупов, М.Н. Рахимов, И.М. Губайдуллин // Булатовские чтения. – 2024. – Т. 2. – С. 138-141.

128. Якупов, М.М. Углеводородный состав и теплотворная способность бензинов каталитического крекинга / М.М. Якупов, Р.Р. Ахмадияров, М.Н. Рахимов, Ф.Ш. Вильданов, И.М. Губайдуллин, М.Н. Рахимов // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2024. – № 6. – С. 112-134.

129. Якупов, М.М. Удельные выбросы диоксида углерода индивидуальных углеводородов в составе моторных топлив / М.М. Якупов, Р.Р. Азнабаев, Е.В. Симонова, Ф.Ш. Вильданов, И.М. Губайдуллин, М.Н. Рахимов // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2024. – №3. – С. 191-205.

130. Якупов, Н.В. Исследование закономерностей процесса изомеризации н-пентана с использованием различных каталитических систем / Н.В. Якупов, А.Р. Давлетшин, Ю.А. Хамзин, А.Т. Гильмутдинов // Электронный научный журнал Нефтегазовое дело. – 2021. – № 4. – С. 32-48.

131. Яруллин, Р.С. Перспективы водородных технологий в энергетике и в химической промышленности / Р. С. Яруллин, И. З. Салихов, Д. З. Черезов, А. Р. Нурисламова // Известия высших учебных заведений. Проблемы энергетики. – 2021. – Т. 23, № 2. – С. 70-83.

132. Abdellatief, T.M.M. Uniqueness technique for introducing high octane environmental gasoline using renewable oxygenates and its formulation on fuzzy modeling / T.M.M. Abdellatief, M.A. Ershov, V.M. Kapustin, E.A. Chernysheva, V.D. Savelenko, M.A. Abdelkareem, T. Salameh, A.G. Olabi // The science of the total environment. – 2022. – Vol. 802. – P. 149863.

133. Aldhanhani, T. Future Trends in Smart Green IoV: Vehicle-to-Everything in the Era of Electric Vehicles / T. Aldhanhani, A. Abraham, W. Hamidouche, M. Shaaban // IEEE Open Journal of Vehicular Technology – 2024. – Vol. 5. – P. 278-297.

134. Berezin, A. Prospects for Energy Transition to Hydrogen Fuel: Analysis of World Experience and Russian Practice / A. Berezin, N. Gorodnova, B.S. Sergi, C. T.

Handoko, C.T. Permana // International Journal of Energy Economics and Policy – 2023. - Vol.13(4). - P. 641-653.

135. Climate change 2022 Mitigation of Climate Change. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.energy.gov/sites/default/files/2024-06/093.%20IPCC%2C%20Climate%20Change%202022%2C%20Mitigation%20of%20Climate%20Change%2C%20Summary%20for%20Policy%20Makers%2C.pdf> (дата обращения: 10.06.2025).

136. Cumhuriyet, M. Biodiesel as an alternative motor fuel Production and policies in the European Union / M. Cumhuriyet, S. Hamam // Renewable and Sustainable Energy Reviews. - 2005. - №1. - P. 1-12.

137. DeWitt, C.W. et al. OMEGA: An improved gasoline blending system for Texaco //Interfaces. – 1989. – Vol. 19. – №. 1. – P. 85-101.

138. Geng, T. Relation between the group hydrocarbon composition and octane characteristics of narrow fractions of catalytically cracked hydrotreated gasoline / T. Geng, E.A. Chernysheva // Chemistry and Technology of Fuels and Oils. – 2022. – №58(4). – P. 637–641.

139. Heli J. Lugo, Correlations between Octane Numbers and Catalytic Cracking Naphtha Composition / Heli J. Lugo, G. Ragone, J. Zambrano // Ind. Eng. Chem. Res. - 1999. - №38. - P. 2171-2176.

140. Hydrogen Fuel Cell Vehicles, Current Status and Future Prospect. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.mdpi.com/2076-3417/9/11/2296> (дата обращения: 10.06.2025).

141. Khairulin, S.R. Ozone-Catalytic Treatment of Automotive Exhaust / S.R. Khairulin, D.V. Maksudov, M.A. Kerzhentsev [et al.] // Eurasian Chemico-Technological Journal. – 2024. – Vol. 26, № 3. – P. 141-153.

142. Maylin, M.V. Calculation of gasoline octane numbers taking into account the reaction interaction of blend components / M.V. Maylin, M.V. Kirgina, E.V. Sviridova, B.V. Sakhnevitch, E.D. Ivanchina // Procedia chemistry -2014. -№10 - P. 477-484.

143. Millman, K.J. Python for Scientists and Engineers / K.J. Millman, M. Aivazis // Computing in Science & Engineering. - 2011. - Vol. 13, № 2. - P. 9-12.

144. Naman, B.T. Linear models help refiners develop RFG recipes / B.T. Naman // Oil & Gas J. – 1999. - Vol. 97, Issue 8. - P. 64-66.
145. Singh, A. Model-based real-time optimization of automotive gasoline blending operations / A. Singh et al. //Journal of process control. – 2000. – Vol. 10, №1. – P. 43-58.
146. White, J. Gasoline blending optimization cuts use of expensive components/ J. White, F. Hall // Oil & Gas J. - 1992. - Vol. 90, Issue 44. – P. 81-84.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение А Справка о внедрении

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

 ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«УФИМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НЕФТЯНОЙ
ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ» (ФГБОУ ВО «УГНТУ»)

ул. Космонавтов, 1, г. Уфа, Республика Башкортостан, 450064. Тел.: (347) 242-03-70, <http://www.rusoil.net>, E-mail: info@rusoil.net
ИНН 0277006179, ОГРН 1020203079016, ОКПО 02069450, КПП 027701001

03.09.2025 № 063-99/31

На № _____ от _____

СПРАВКА

о внедрении результатов диссертационной работы Якупова М.М. на тему «Регулирование химического состава автомобильных бензинов с целью уменьшения выбросов диоксида углерода в атмосферу».

Разработанные с участием Якупова М.М., методические руководства «Определение группового углеводородного состава автомобильного бензина на НПЗ топливного профиля» и «База данных основных углеводородов и оксигенатов, входящих в состав автомобильных бензинов для оценки удельных выбросов CO₂» применяются при выполнении практических работ по дисциплине «Инновационные технологии глубокой переработки углеводородного сырья» и при курсовом и дипломном проектировании студентами направления подготовки 18.04.01 «Химическая технология переработки нефти и газа».

Проректор по учебной работе



А.И. Могучев

Приложение Б База данных основных углеводородов и оксигенатов

Таблица 1 - База данных основных углеводородов и оксигенатов, входящих в состав автомобильных бензинов для оценки удельных выбросов CO₂ и основным физико-химическим свойствам

№ п/п	Группа углеводорода	Название углеводорода	Формула	Теплотворная способность, МДж/кг	Коэффициент выбросов, т CO ₂ /т	Коэффициент выбросов, кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7
1	Парафины	бутан	C ₄ H ₁₀	45,19	3,034	67 151
2	Парафины	пентан	C ₅ H ₁₂	44,89	3,056	68 065
3	Парафины	гексан	C ₆ H ₁₄	44,69	3,070	68 688
4	Парафины	гептан	C ₇ H ₁₆	44,55	3,080	69 140
5	Парафины	октан	C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
6	Парафины	нонан	C ₉ H ₂₀	44,35	3,094	69 752
7	Парафины	декан	C ₁₀ H ₂₂	44,29	3,099	69 969
8	Парафины	ундекан	C ₁₁ H ₂₄	44,23	3,103	70 147
9	Изо-парафины	изо-бутан	i-C ₄ H ₁₀	45,19	3,034	67 151

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
10	Изо-парафины	изо-пентан	i-C ₅ H ₁₂	44,89	3,056	68 065
11	Изо-парафины	2,2-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	44,69	3,070	68 688
12	Изо-парафины	2,3-диметилбутан	i-C ₆ H ₁₄	44,69	3,070	68 688
13	Изо-парафины	2-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	44,69	3,070	68 688
14	Изо-парафины	3-метилпентан	i-C ₆ H ₁₄	44,69	3,070	68 688
15	Изо-парафины	2-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	44,55	3,080	69 140
16	Изо-парафины	2,4-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	44,55	3,080	69 140
17	Изо-парафины	2,3-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	44,55	3,080	69 140
18	Изо-парафины	3-метилгексан	i-C ₇ H ₁₆	44,55	3,080	69 140
19	Изо-парафины	3-этилпентан	i-C ₇ H ₁₆	44,55	3,080	69 140
20	Изо-парафины	3,3-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	44,55	3,080	69 140

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
21	Изо-парафины	2,2-диметилпентан	i-C ₇ H ₁₆	44,55	3,080	69 140
22	Изо-парафины	3-метил-3-этилпентан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
23	Изо-парафины	2-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
24	Изо-парафины	3-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
25	Изо-парафины	2,2,4-триметилпентан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
26	Изо-парафины	2,5-диметилгексан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
27	Изо-парафины	2,4-диметилгексан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
28	Изо-парафины	2,3,4-триметилпентан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
29	Изо-парафины	2,3,3-триметилпентан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
30	Изо-парафины	2,3-диметилгексан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
31	Изо-парафины	4-метилгептан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
32	Изо-парафины	3-этилгексан	i-C ₈ H ₁₈	44,44	3,088	69 483
33	Изо-парафины	3-метилоктан	i-C ₉ H ₂₀	44,35	3,094	69 752
34	Изо-парафины	2-метилоктан	i-C ₉ H ₂₀	44,35	3,094	69 752
35	Изо-парафины	4-этилгептан	i-C ₉ H ₂₀	44,35	3,094	69 752
36	Изо-парафины	4-метилоктан	i-C ₉ H ₂₀	44,35	3,094	69 752
37	Изо-парафины	2,5-диметилгептан	i-C ₉ H ₂₀	44,35	3,094	69 752
38	Изо-парафины	3,5-диметилгептан	i-C ₉ H ₂₀	44,35	3,094	69 752
39	Изо-парафины	2,4-диметилгептан	i-C ₉ H ₂₀	44,35	3,094	69 752
40	Изо-парафины	3-этилгептан	i-C ₉ H ₂₀	44,35	3,094	69 752
41	Изо-парафины	3-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	44,29	3,099	69 969
42	Изо-парафины	4-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	44,29	3,099	69 969

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
43	Изо-парафины	2-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	44,29	3,099	69 969
44	Изо-парафины	5-метилнонан	i-C ₁₀ H ₂₂	44,29	3,099	69 969
45	Изо-парафины	3,6-диметилоктан	i-C ₁₀ H ₂₂	44,29	3,099	69 969
46	Изо-парафины	2,5-диметилоктан	i-C ₁₀ H ₂₂	44,29	3,099	69 969
47	Нафтенy	циклопентан	C ₅ H ₁₀	43,66	3,143	71 983
48	Нафтенy	циклогексан	C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
49	Нафтенy	метилциклопентан	C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
50	Нафтенy	1-метилциклопентен	C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
51	Нафтенy	циклогептан	C ₇ H ₁₄	43,66	3,143	71 983
52	Нафтенy	1,1-диметилциклопентан	C ₇ H ₁₄	43,66	3,143	71 983
53	Нафтенy	цис-1,3-диметилциклопентан	C ₇ H ₁₄	43,66	3,143	71 983

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
54	Нафтенy	транс-1,3-диметилциклопентан	C7H14	43,66	3,143	71 983
55	Нафтенy	транс-1-диметилциклопентан-2	C7H14	43,66	3,143	71 983
56	Нафтенy	метилциклогексан	C7H14	43,66	3,143	71 983
57	Нафтенy	этилциклопентан	C7H14	43,66	3,143	71 983
58	Нафтенy	3-транс-этил-метилциклопентан	C8H16	43,66	3,143	71 983
59	Нафтенy	этилциклогексан	C8H16	43,66	3,143	71 983
60	Нафтенy	1-цикло-3-диметилциклогексан	C8H16	43,66	3,143	71 983
61	Нафтенy	1-цикло-4-диметилциклогексан	C8H16	43,66	3,143	71 983
62	Нафтенy	ментан	C10H20	43,66	3,143	71 983
63	Олефины	бутен-1	C4H8	43,66	3,143	71 983
64	Олефины	транс-2-бутен	C4H8	43,66	3,143	71 983

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
65	Олефины	цикло-бутен-2	C ₄ H ₈	43,66	3,143	71 983
66	Олефины	1,2-бутадиен	C ₄ H ₆	42,02	3,259	77 565
67	Олефины	изо-бутилен	i-C ₄ H ₈	43,66	3,143	71 983
68	Олефины	транс-пентен-2	C ₅ H ₁₀	43,66	3,143	71 983
69	Олефины	пентен-1	C ₅ H ₁₀	43,66	3,143	71 983
70	Олефины	циклопентен	C ₅ H ₁₀	43,66	3,143	71 983
71	Олефины	3-метил-1-бутен-1	C ₅ H ₁₀	43,66	3,143	71 983
72	Олефины	2-метил-бутен-2	i-C ₅ H ₁₀	43,66	3,143	71 983
73	Олефины	транс-2-пентен	i-C ₅ H ₁₀	43,66	3,143	71 983
74	Олефины	цис-2-пентен	i-C ₅ H ₁₀	43,66	3,143	71 983
75	Олефины	2-метил-бутен-1	i-C ₅ H ₁₀	43,66	3,143	71 983

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
76	Олефины	гексен-1	C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
77	Олефины	цис-гексен-3	C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
78	Олефины	цис-гексен-2	C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
79	Олефины	3-метил-транс-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
80	Олефины	транс-2-гексен	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
81	Олефины	2-метил-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
82	Олефины	2-метил-пентен-1	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
83	Олефины	3-метил-цис-2-пентен	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
84	Олефины	2-метилциклопентен	i-C ₆ H ₁₀	42,58	3,220	75 611
85	Олефины	2-этил-бутен-1	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
86	Олефины	3-метил-пентен-1	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
87	Олефины	3,3-диметил-бутен-1	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
88	Олефины	3-метил-цикло-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
89	Олефины	4-метил-цис-пентен-2	i-C ₆ H ₁₂	43,66	3,143	71 983
90	Олефины	транс-гептен-3	C ₇ H ₁₄	43,66	3,143	71 983
91	Олефины	цис-гептен-3	C ₇ H ₁₄	43,66	3,143	71 983
92	Олефины	3-этил-цис-пентен-2	i-C ₇ H ₁₄	43,66	3,143	71 983
93	Олефины	3-этил-пентен-1	i-C ₇ H ₁₄	43,66	3,143	71 983
94	Олефины	3-метил-гексен-2	i-C ₇ H ₁₄	43,66	3,143	71 983
95	Олефины	3-метил-цис-гексен-3	i-C ₇ H ₁₄	43,66	3,143	71 983
96	Олефины	2,4-диметил-гексен-2	i-C ₈ H ₁₆	43,66	3,143	71 983
97	Олефины	триизобутилен	C ₁₂ H ₂₄	43,66	3,143	71 983

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
98	Ароматика	бензол	C ₆ H ₆	40,25	3,385	84 085
99	Ароматика	толуол	C ₇ H ₈	40,77	3,348	82 113
100	Ароматика	м-ксилол	C ₈ H ₁₀	41,15	3,321	80 694
101	Ароматика	о-ксилол	C ₈ H ₁₀	41,15	3,321	80 694
102	Ароматика	п-ксилол	C ₈ H ₁₀	41,15	3,321	80 694
103	Ароматика	этилбензол	C ₈ H ₁₀	41,15	3,321	80 694
104	Ароматика	1,3-диметилбензол	C ₈ H ₁₀	41,15	3,321	80 694
105	Ароматика	1,2-диметилбензол	C ₈ H ₁₀	41,15	3,321	80 694
106	Ароматика	1,4-диметилбензол	C ₈ H ₁₀	41,15	3,321	80 694
107	Ароматика	2,3-дигидроинден	C ₉ H ₁₀	40,66	3,356	82 544
108	Ароматика	н-пропилбензол	C ₉ H ₁₂	41,45	3,300	79 623

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
109	Ароматика	1-метил-3-этилбензол	C ₉ H ₁₂	41,45	3,300	79 623
110	Ароматика	1,2,3-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	41,45	3,300	79 623
111	Ароматика	1,3,5-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	41,45	3,300	79 623
112	Ароматика	1-метил-4-этилбензол	C ₉ H ₁₂	41,45	3,300	79 623
113	Ароматика	1-метил-2-этилбензол	C ₉ H ₁₂	41,45	3,300	79 623
114	Ароматика	1,2,4-триметилбензол	C ₉ H ₁₂	41,45	3,300	79 623
115	Ароматика	изо-пропилбензол	C ₉ H ₁₂	41,45	3,300	79 623
116	Ароматика	1,4-диметил-2-этилбензол	C ₉ H ₁₄	42,21	3,246	76 902
117	Ароматика	нафталин	C ₁₀ H ₈	39,51	3,438	87 011
118	Ароматика	5-метилиндан	C ₁₀ H ₁₂	40,98	3,333	81 350
119	Ароматика	4-метилиндан	C ₁₀ H ₁₂	40,98	3,333	81 350

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
120	Ароматика	тетрагидронафталин	C ₁₀ H ₁₂	40,98	3,333	81 350
121	Ароматика	цимол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
122	Ароматика	1,2-диметил-4-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
123	Ароматика	1,3,5-диметилэтилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
124	Ароматика	1-метил-3-н-пропилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
125	Ароматика	1,3-диметил-4-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
126	Ароматика	1,3-диметил-2-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
127	Ароматика	1,3-метил-н-пропилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
128	Ароматика	1,2,3,5-тетраметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
129	Ароматика	1,3-диметил-5-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
130	Ароматика	1-этил-2,4-диметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
131	Ароматика	1,2,4,5-тетраметилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
132	Ароматика	1,4-метил-н-пропилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
133	Ароматика	1,3-диэтилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
134	Ароматика	1,2-метил-н-пропилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
135	Ароматика	1,2-диметил-3-этилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
136	Ароматика	1,2-диэтилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
137	Ароматика	1,2-ди-и-пропилбензол	C ₁₀ H ₁₄	41,68	3,284	78 787
138	Ароматика	амилбензол	C ₁₁ H ₁₆	41,86	3,270	78 116
139	Ароматика	s-пентилбензол	C ₁₁ H ₁₆	41,86	3,270	78 116
140	Ароматика	1,1-этил-н-пропилбензол	C ₁₁ H ₁₆	41,86	3,270	78 116
141	Ароматика	1,3-ди-и-пропилбензол	C ₁₂ H ₁₈	42,02	3,259	77 565

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
142	Оксигенаты	этанол	C_2H_6O	27,37	1,913	69 898
143	Оксигенаты	н-бутанол	$C_4H_{10}O$	33,59	2,378	70 797
144	Оксигенаты	изо-бутанол	$C_4H_{10}O$	33,59	2,378	70 797
145	Оксигенаты	метил-трет-бутиловый эфир	$C_5H_{12}O$	35,22	2,500	70 980
146	Оксигенаты	этил-трет-бутиловый эфир	$C_6H_{14}O$	36,40	2,588	71 102
147	Оксигенаты	трет-амилметиловый эфир	$C_6H_{14}O$	36,40	2,588	71 102
148	Оксигенаты	метанол	CH_3OH	20,17	1,375	68 166
149	Оксигенаты	диизопропиловый эфир	$C_6H_{14}O$	36,40	2,588	71 102
150	Оксигенаты	пропанол-1	C_3H_7OH	31,21	2,200	70 495

**Приложение В Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода БКК MSCC
(UOP) до и после его гидрооблагораживания по технологии Prime G+**

Таблица 1 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода БКК MSCC (сырьё)

Группа углеводорода	Название углеводорода	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot$ МДж	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
					т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Парафины	бутан	0,41	45,19	19	3,034	67 151	0,012	276
Парафины	пентан	1,17	44,89	52	3,056	68 065	0,036	793
Парафины	гексан	0,94	44,69	42	3,070	68 688	0,029	645
Парафины	гептан	0,62	44,55	28	3,080	69 140	0,019	432
Парафины	октан	0,40	44,44	18	3,088	69 483	0,012	276
Парафины	нонан	0,20	44,35	9	3,094	69 752	0,006	142
Парафины	декан	0,15	44,29	7	3,099	69 969	0,005	108
Парафины	ундекан	0,13	44,23	6	3,103	70 147	0,004	94
Парафины	додекан	0,18	44,18	8	3,106	70 297	0,006	130
Парафины	тридекан	0,02	44,14	1	3,109	70 424	0,001	12
Изо-парафины	изо-бутан	0,09	45,19	4	3,034	67 151	0,003	62
Изо-парафины	изо-пентан	9,09	44,89	408	3,056	68 065	0,278	6 187
Изо-парафины	2,2-диметилбутан	0,09	44,69	4	3,070	68 688	0,003	64
Изо-парафины	2,3-диметилбутан	1,29	44,69	57	3,070	68 688	0,039	883
Изо-парафины	2,2-диметилпропан	0,000	44,89	0	3,056	68 065	0,000	0
Изо-парафины	метилпентан	6,51	44,69	291	3,070	68 688	0,200	4 468
Изо-парафины	метилгексан	3,20	44,55	143	3,080	69 140	0,099	2 214
Изо-парафины	диметилпентан	1,08	44,55	48	3,080	69 140	0,033	747
Изо-парафины	2,2,3-триметилбутан	0,04	44,98	2	3,050	67 801	0,001	25
Изо-парафины	метилгептан	2,08	44,44	93	3,088	69 483	0,064	1 448
Изо-парафины	диметилгексан	0,91	44,44	41	3,088	69 483	0,028	634

Продолжение Таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Изо-парафины	триметилпентан	0,23	44,44	10	3,088	69 483	0,007	157
Изо-парафины	изо-С9	2,38	44,35	105	3,094	69 752	0,073	1 657
Изо-парафины	изо-С10	0,92	44,29	41	3,099	69 969	0,028	642
Изо-парафины	изо-С11	0,17	44,23	7	3,103	70 147	0,005	118
Изо-парафины	изо-С12	0,40	44,18	17	3,106	70 297	0,012	278
Изо-парафины	изо-С13	0,000	44,14	0	3,109	70 424	0,000	0
Изо-парафины	изо-С14	0,000	44,11	0	3,111	70 533	0,000	0
Нафтенy	циклопентан	0,000	43,66	0	3,143	71 983	0,000	0
Нафтенy	циклогексан	0,15	43,66	7	3,143	71 983	0,005	107
Нафтенy	метилциклопентан	1,55	43,66	68	3,143	71 983	0,049	1 116
Нафтенy	С7	2,18	43,66	95	3,143	71 983	0,068	1 569
Нафтенy	С8	2,14	43,66	93	3,143	71 983	0,067	1 537
Нафтенy	С9	1,12	43,66	49	3,143	71 983	0,035	806
Нафтенy	С10	0,67	43,66	29	3,143	71 983	0,021	485
Нафтенy	С11	0,18	43,66	8	3,143	71 983	0,006	127
Ароматика	бензол	1,14	40,25	46	3,385	84 085	0,039	958
Ароматика	толуол	4,17	40,77	170	3,348	82 113	0,140	3 428
Ароматика	С8	7,87	41,15	324	3,321	80 694	0,261	6 354
Ароматика	С9	5,40	41,45	224	3,300	79 623	0,178	4 303
Ароматика	С10	9,55	41,68	398	3,284	78 787	0,314	7 525
Ароматика	С11	3,02	41,86	126	3,270	78 116	0,099	2 360
Ароматика	С12	1,58	42,02	66	3,259	77 565	0,051	1 225
Итого 50	-	100,00	-	4 324	-	-	3,173	73 523

Таблица 2 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода БКК MSCC (продукт)

Группа углеводорода	Название углеводорода	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot \text{МДж}$	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
					т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Парафины	бутан	0,29	45,19	13	3,034	67 151	0,009	192
Парафины	пентан	1,12	44,89	50	3,056	68 065	0,034	766
Парафины	гексан	1,20	44,69	54	3,070	68 688	0,037	825
Парафины	гептан	0,88	44,55	39	3,080	69 140	0,027	608
Парафины	октан	0,57	44,44	25	3,088	69 483	0,018	397
Парафины	нонан	0,29	44,35	13	3,094	69 752	0,009	202
Парафины	декан	0,26	44,29	12	3,099	69 969	0,008	183
Парафины	ундекан	0,18	44,23	8	3,103	70 147	0,006	125
Парафины	додекан	0,08	44,18	4	3,106	70 297	0,003	59
Парафины	тридекан	0,07	44,14	3	3,109	70 424	0,002	46
Изо-парафины	изо-бутан	0,03	45,19	1	3,034	67 151	0,001	18
Изо-парафины	изо-пентан	10,82	44,89	486	3,056	68 065	0,331	7 366
Изо-парафины	2,2-диметилбутан	0,02	44,69	1	3,070	68 688	0,001	15
Изо-парафины	2,3-диметилбутан	1,06	44,69	48	3,070	68 688	0,033	731
Изо-парафины	2,2-диметилпропан	0,01	44,89	0	3,056	68 065	0,000	7
Изо-парафины	метилпентан	6,49	44,69	290	3,070	68 688	0,199	4 459
Изо-парафины	метилгексан	3,37	44,55	150	3,080	69 140	0,104	2 330
Изо-парафины	диметилпентан	0,94	44,55	42	3,080	69 140	0,029	653
Изо-парафины	2,2,3-триметилбутан	0,02	44,98	1	3,050	67 801	0,001	12
Изо-парафины	метилгептан	1,92	44,44	85	3,088	69 483	0,059	1 334
Изо-парафины	диметилгексан	0,74	44,44	33	3,088	69 483	0,023	517
Изо-парафины	триметилпентан	0,59	44,44	26	3,088	69 483	0,018	411

Продолжение Таблицы 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Изо-парафины	изо-С9	2,25	44,35	100	3,094	69 752	0,070	1 572
Изо-парафины	изо-С10	1,97	44,29	87	3,099	69 969	0,061	1 377
Изо-парафины	изо-С11	1,04	44,23	46	3,103	70 147	0,032	728
Изо-парафины	изо-С12	1,66	44,18	73	3,106	70 297	0,051	1 165
Изо-парафины	изо-С13	1,44	44,14	63	3,109	70 424	0,045	1 012
Изо-парафины	изо-С14	0,10	44,11	4	3,111	70 533	0,003	72
Нафтенy	циклопентан	0,11	43,66	5	3,143	71 983	0,003	79
Нафтенy	циклогексан	0,12	43,66	5	3,143	71 983	0,004	84
Нафтенy	метилциклопентан	1,66	43,66	72	3,143	71 983	0,052	1 192
Нафтенy	С7	2,51	43,66	109	3,143	71 983	0,079	1 805
Нафтенy	С8	2,41	43,66	105	3,143	71 983	0,076	1 735
Нафтенy	С9	1,47	43,66	64	3,143	71 983	0,046	1 059
Нафтенy	С10	0,31	43,66	13	3,143	71 983	0,010	222
Нафтенy	С11	0,03	43,66	1	3,143	71 983	0,001	23
Ароматика	бензол	0,95	40,25	38	3,385	84 085	0,032	799
Ароматика	толуол	4,15	40,77	169	3,348	82 113	0,139	3 411
Ароматика	С8	7,82	41,15	322	3,321	80 694	0,260	6 311
Ароматика	С9	5,36	41,45	222	3,300	79 623	0,177	4 267
Ароматика	С10	9,40	41,68	392	3,284	78 787	0,309	7 405
Ароматика	С11	0,95	41,86	40	3,270	78 116	0,031	743
Ароматика	С12	1,67	42,02	70	3,259	77 565	0,054	1 293
Итого 55	-	100,00	-	4 334	-	-	3,166	73 205

Таблица 3 – Углеводородный состав, теплотворная способность и выбросы диоксида углерода БКК MSCC после гидроочистки

Группа углеводорода	Название углеводорода	Содержание, % масс.	Теплотворная способность, МДж/кг	Количество теплоты, $10^2 \cdot \text{МДж}$	Коэффициент выбросов		Удельные выбросы	
					т CO ₂ /т	кг/ТДж	т CO ₂ /т	кг/ТДж
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Парафины	бутан	3,02	45,19	136	3,034	67 151	0,092	2 028
Парафины	пентан	13,50	44,89	606	3,056	68 065	0,412	9 189
Парафины	гексан	8,55	44,69	382	3,070	68 688	0,263	5 875
Парафины	гептан	3,35	44,55	149	3,080	69 140	0,103	2 315
Парафины	октан	1,23	44,44	55	3,088	69 483	0,038	856
Парафины	нонан	1,00	44,35	44	3,094	69 752	0,031	699
Парафины	декан	0,19	44,29	8	3,099	69 969	0,006	134
Парафины	ундекан	0,19	44,23	8	3,103	70 147	0,006	134
Парафины	додекан	0,20	44,18	9	3,106	70 297	0,006	142
Парафины	тридекан	0,05	44,14	2	3,109	70 424	0,002	35
Изо-парафины	изо-бутан	0,09	45,19	4	3,034	67 151	0,003	62
Изо-парафины	изо-пентан	9,03	44,89	405	3,056	68 065	0,276	6 144
Изо-парафины	2,2-диметилбутан	0,09	44,69	4	3,070	68 688	0,003	63
Изо-парафины	2,3-диметилбутан	1,28	44,69	57	3,070	68 688	0,039	876
Изо-парафины	метилпентан	6,46	44,69	289	3,070	68 688	0,198	4 437
Изо-парафины	метилгексан	3,18	44,55	142	3,080	69 140	0,098	2 199
Изо-парафины	диметилпентан	1,07	44,55	48	3,080	69 140	0,033	741
Изо-парафины	2,2,3-триметилбутан	0,04	44,98	2	3,050	67 801	0,001	25
Изо-парафины	метилгептан	2,07	44,44	92	3,088	69 483	0,064	1 437
Изо-парафины	диметилгексан	0,91	44,44	40	3,088	69 483	0,028	630
Изо-парафины	триметилпентан	0,22	44,44	10	3,088	69 483	0,007	156
Изо-парафины	изо-С9	2,36	44,35	105	3,094	69 752	0,073	1 645
Изо-парафины	изо-С10	0,91	44,29	40	3,099	69 969	0,028	637

Продолжение Таблицы 3

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Изо-парафины	изо-С11	0,17	44,23	7	3,103	70 147	0,005	118
Изо-парафины	изо-С12	0,39	44,18	17	3,106	70 297	0,012	276
Нафтены	циклогексан	0,15	43,66	6	3,143	71 983	0,005	107
Нафтены	метилциклопентан	1,54	43,66	67	3,143	71 983	0,048	1 108
Нафтены	С7	2,16	43,66	94	3,143	71 983	0,068	1 558
Нафтены	С8	2,12	43,66	93	3,143	71 983	0,067	1 526
Нафтены	С9	1,11	43,66	49	3,143	71 983	0,035	801
Нафтены	С10	0,67	43,66	29	3,143	71 983	0,021	481
Нафтены	С11	0,17	43,66	8	3,143	71 983	0,005	126
Ароматика	бензол	1,13	40,25	46	3,385	84 085	0,038	951
Ароматика	толуол	4,15	40,77	169	3,348	82 113	0,139	3 404
Ароматика	С8	7,82	41,15	322	3,321	80 694	0,260	6 309
Ароматика	С9	5,37	41,45	222	3,300	79 623	0,177	4 272
Ароматика	С10	9,48	41,68	395	3,284	78 787	0,311	7 472
Ароматика	С11	3,00	41,86	126	3,270	78 116	0,098	2 344
Ароматика	С12	1,57	42,02	66	3,259	77 565	0,051	1 217
Итого 39	-	100,00	-	4 355	-	-	3,151	72 529