

**Список літератури: 1.** Производство технологического газа для синтеза аммиака и метанола из углеводородных газов. / [А.Г. Лейбуш, В.П. Семенов, Казарновский Я.С. и др.]. – М.: Химия, 1971. – 288 с. **2.** Веселов В.В. Состав газа конверсии углеводородов. / В.В. Веселов, А.Н. Рафал. [Справочник]. – К.: Наукова думка, 1976. – 188 с. **3.** Методи розрахунків у технології неорганічних виробництв (ч.1. Зв'язаний азот): [Підручник] / [О.Я. Лобойко, Л.Л. ТОВАЖНЯНСЬКИЙ, І.О. Слабун та ін.]. – Харків: НТУ «ХП», 2001. – 512с.

Надійшла до редколегії 02.04.09

УДК 665.7

**Ю.В. КРАВЦОВА**, ОАО «УкрНИИХиммаш»;

**Ю.А. ЯРОШОК**, канд. техн. наук, Украинская государственная академия железнодорожного транспорта

## **АНАЛИЗ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЫСОКООКТАНОВЫХ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ (ВКС) – КОМПОНЕНТОВ АВТОБЕНЗИНА**

У статті наведено результати обробки даних планування пасивного експерименту. Аналізуються взаємозв'язки між окремими параметрами ВКС із метою виявлення закономірностей. Наведено ряд апроксимацій, які можуть бути використані для прогнозування параметрів ВКС. Аналітичні залежності надані у вигляді рівнянь регресійних прямих. Фізичний зв'язок параметрів підтверджено наданим кореляційним аналізом та високим коефіцієнтом кореляції.

The article presents the results of data processing planning passive experiment. Interconnections between separate parameters VKS with the purpose of detection of regularity are analyzed. Series of approximations which can be used for forecasting parameters VKS is resulted. Analytical dependences are resulted in the form of the equations regression straight lines. Physical communication of parameters is confirmed by the resulted correlation analysis and high correlation coefficient.

Использование высокооктановых кислородосодержащих компонентов автобензина улучшает состав суммарного бензинового фонда (в октанокубометрах) и повышает рентабельность производства [1]. Поэтому ученые будут и в дальнейшем разрабатывать добавки и присадки к моторному топливу. При этом выбор стратегии эксперимента и его реализация, как правило, определяется опытом и интуицией исследователей. А после каждой серии опытов по результатам обработки экспериментальных данных делаются

обоснованные выводы и намечаются следующие мероприятия для достижения поставленной цели исследования.

Рассмотрены свойства основных кислородсодержащих высокооктановых компонентов автобензина: метанола, этанола, изопропилового, изобутилового, третичного бутилового, изоамилового, изогексилового спиртов, метилтетрабутилового и метилтретамилового эфира.

**Постановка задачи.** По имеющимся данным [1], касающимся физико-химических характеристик ВКС, авторы попытались установить взаимные зависимости между параметрами, приведенным в таблице.

Таблица

Свойства высокооктановых кислородсодержащих соединений

Показатели	Метанол	Этанол	Изопропиловый спирт	Изобутиловый спирт	Третичный бутиловый спирт	Изоамиловый спирт	Изогексиловый спирт	Метилтретбутиловый эфир	Метилтретамиловый эфир
$T_k$	64,8	78,5	82,4	99,5	82,6	132	157	55,4	86,3
$\rho$	780	790	780	800	780	750	760	740	770
$M$	32,04	46,07	60,06	74,12	74,12	88,07	102,1	88,15	102,2
$P$	12,6	17	18,4	20,8	19,4	29,2	37,8	30,4	39,5
$q_c$	22707	26945	33300	35690	35590	36905	38148	38220	39392
$q_{и}$	1104	839	666	562	536	436	381	337	326
$ОЧ_{мм}$	98	97	96	91	94	91	92	97	96
$ОЧ_{им}$	122	120	117	108	106	104	111	115	108
ОИ	110	108,5	106,5	99,5	100	97,5	101,5	106	102

Условные обозначения в таблице:  $T_k$  – температура кипения, °С;  $\rho$  – молекулярная масса, кг/м<sup>3</sup>;  $M$  – молекулярная масса, кг/кмоль;  $P$  – давление насыщенных паров, кПа;  $q_c$ ,  $q_{и}$  – удельная теплота сгорания и испарения соответственно, кДж/кг;  $ОЧ_{мм}$ ,  $ОЧ_{им}$  – октановое число по моторному и исследовательскому методу соответственно;  $ОИ = (ОЧ_{мм} + ОЧ_{им})/2$  – октановый индекс.

Построим графики для отдельных параметров и их взаимосвязей.

Сравнение октановых чисел на рис. 1 свидетельствует, что минимальное различие между исследовательским и моторным методами составляет 12 %, а максимальное – 22 %.

Из рис. 2 следует, что простой и физически объяснимой связи октанового числа с приведенными параметрами нет, во всяком случае, она не очевид-

на. Некое подобие расположения точек на рисунках скорее всего говорит о взаимной связи параметров  $q_c$ ,  $q_{и}$ ,  $M$ ,  $P$  между собой.



Рис. 1. Сравнение октановых чисел

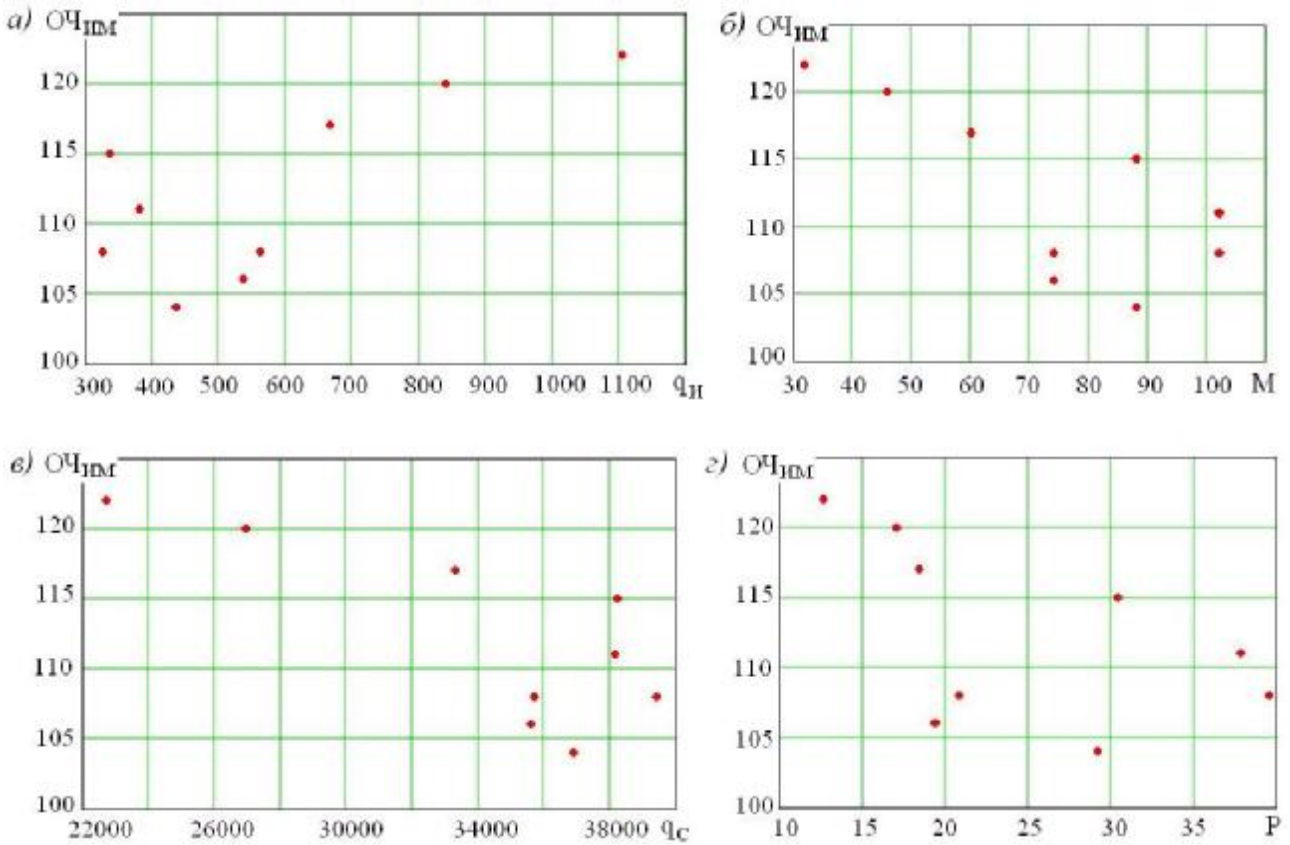


Рис. 2. Связь октанового числа и параметров ВКС:

- а) – удельной теплоты испарения; б) – молекулярной массы;
- в) – удельной теплоты сгорания; г) – давления насыщенных паров.

Современные математические компьютерные системы типа MathCAD существенно облегчают задачи аналитической аппроксимации, статистического анализа данных. В качестве примера рассмотрим связь между удельной теплотой испарения  $q_{и}$  и сгорания  $q_c$  для приведенных в таблице ВКС (рис. 3).

Для этих параметров получено уравнение регрессионной прямой  $q_{и} = 2116 - 0,045 \cdot q_{с}$  и значение коэффициента корреляции  $k(q_{и}, q_{с}) = -0.9868$ . Близость абсолютной величины коэффициента корреляции к 1 подтверждает правильность выбора в качестве аппроксимирующей зависимости прямой линии.

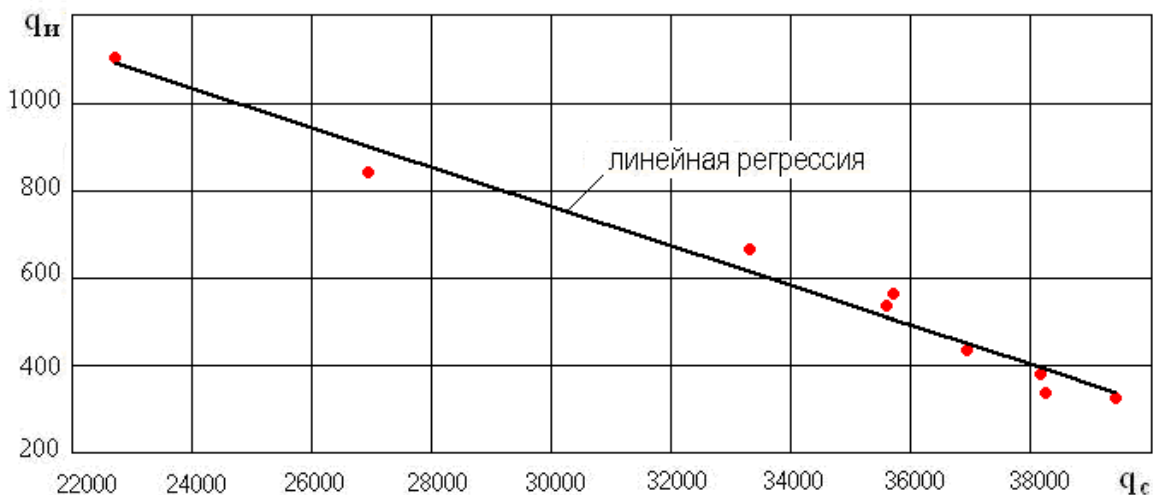


Рис. 3. Связь между удельной теплотой испарения и сгорания

Зависимость  $q_{и}(q_{с})$  носит обратный (убывающий) характер, а отношение количества энергии, необходимое для испарения единицы массы вещества, к количеству энергии, которое выделяется при сгорании единицы массы этого вещества, близко к постоянному значению:  $q_{и}/q_{с} \approx \text{const}$ .

На рисунках 4 – 6 представлены аппроксимации соответствующих зависимостей.

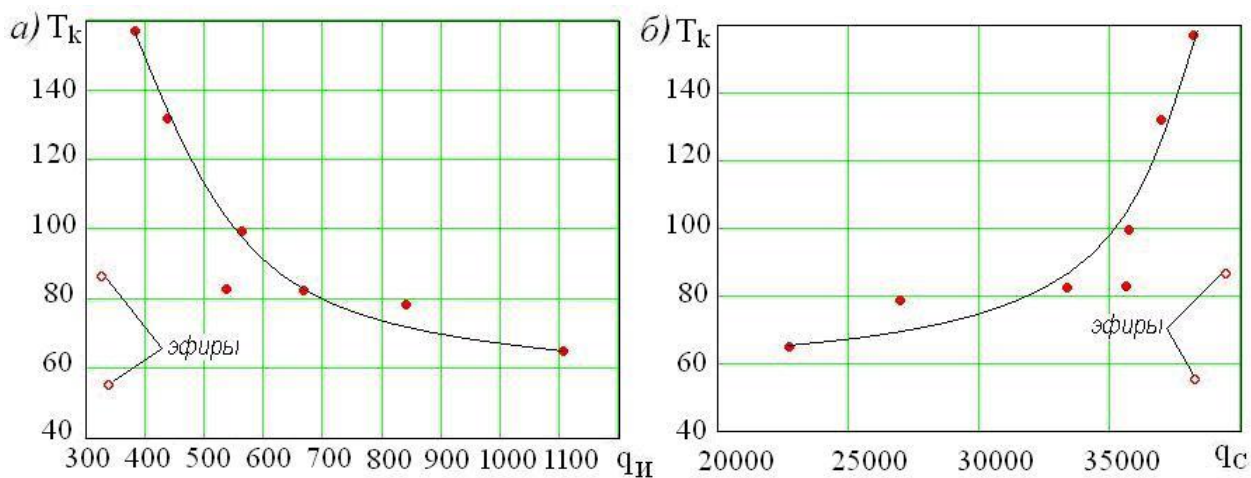


Рис. 4. Зависимость температуры кипения:

а) – от удельной теплоты испарения; б) – от удельной теплоты сгорания

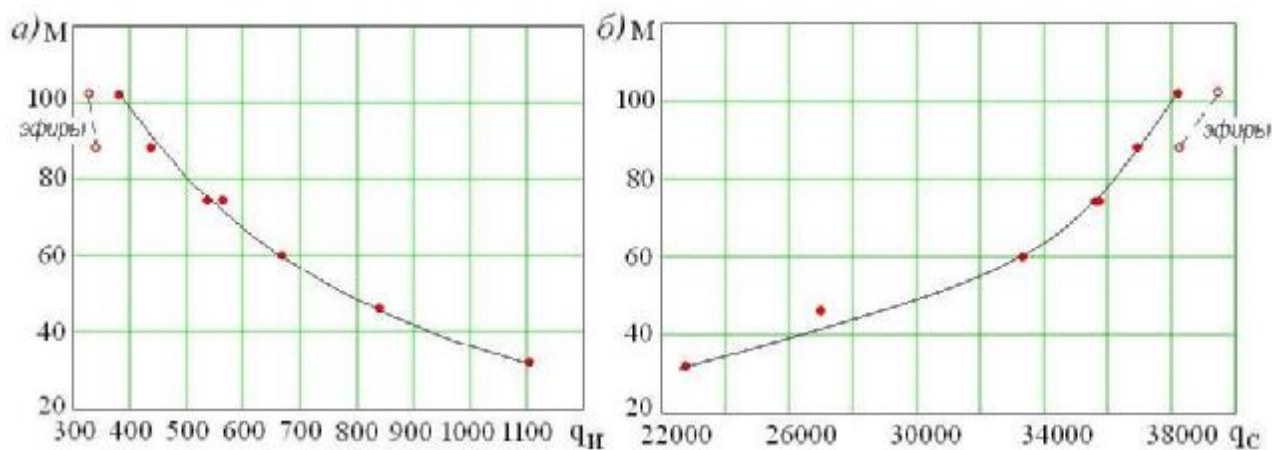


Рис. 5. Зависимость молекулярной массы:

а) – от удельной теплоты испарения; б) – от удельной теплоты сгорания

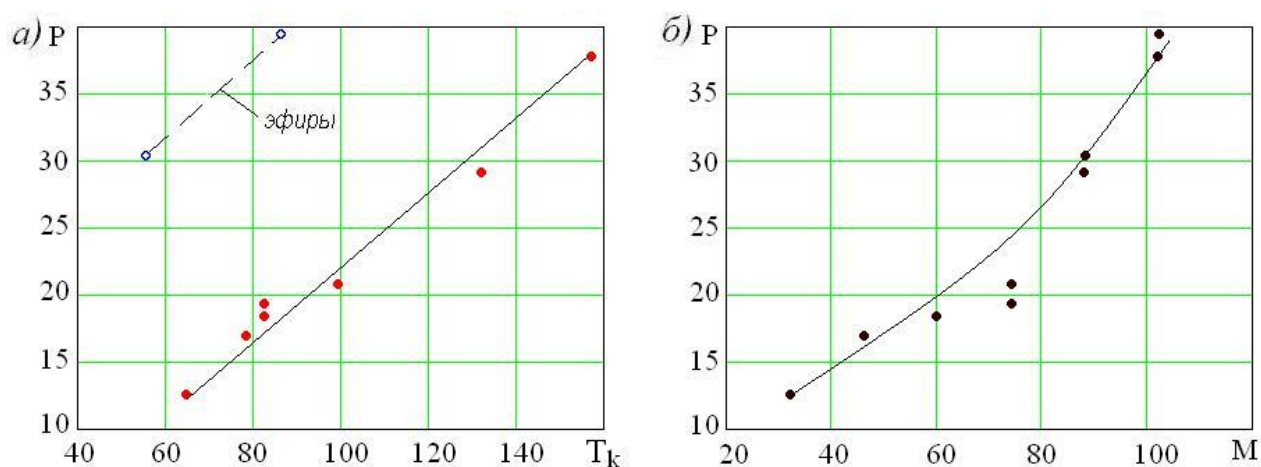


Рис. 6. Зависимость давления насыщенных паров:

а) – от температуры кипения; б) – от молекулярной массы

Коэффициент корреляции параметров  $P$  и  $T_k$  (рис. 6, а) равен 0.9912. Это служит основанием для построения уравнения регрессионной прямой, которое имеет вид  $P = 0.255 - 3.209 \cdot T_k$ . Таким образом, экспериментальные данные свидетельствуют о том, что пары ВКС ведут себя подобно газам и приближенно подчиняются закону Шарля ( $P/T_k \approx \text{const}$ ).

**Выводы.** Анализ и визуализация данных таблице позволили получить аналитические или графические зависимости между параметрами ВКС. Аппроксимирующие кривые на рисунках 4 – 6 подобраны приближенно. Но любые, даже не очень точные аппроксимирующие зависимости (графические, аналитические) полезны тем, что облегчают прогнозирование, интерполяцию – оценивание промежуточных значений параметров. Такая задача может возникнуть, когда рассматриваются новые или мало изученные соединения.

**Список литературы: 1.** Презели М. Высокооктановые кислородсодержащие компоненты автобензина // Нефть, газ за рубежом. – 1994. – № 9. – С. 94-97.

*Поступила в редколлегию 31.05.09*

УДК 661.556

**О.Н. БЛИЗНЮК**, канд. техн. наук, НТУ «ХПИ»

**А.С. САВЕНКОВ**, докт. техн. наук, НТУ «ХПИ»

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РЕАКЦИОННОЙ СРЕДЫ ОКИСЛЕНИЯ АММИАКА НА ФОРМИРОВАНИЕ АКТИВНОЙ СТРУКТУРЫ ЦИРКОНИЙСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ**

Досліджена кінетика реакції окиснення аміаку та механізм адсорбції реагентів на поверхні оксидних цирконій-залізних каталізаторів із різним вмістом оксиду цирконію. Запропоновано оптимальний склад каталізатору.

The kinetics of the ammonia oxidation and the mechanism of absorption on the oxide catalyst surface with different amount of  $ZrO_2$  were studied. Optimal oxide catalyst composition was proposed.

Предыдущими исследованиями было установлено [1 – 4], что в процессе эксплуатации железооксидного катализатора для окисления аммиака под воздействием реакционной среды и технологических условий происходит его деструкция, которая обусловлена, главным образом, выходом оксида алюминия на поверхность контакта, блокировка им активных раскисленных участков оксида железа и уменьшение его удельной поверхности. Эти нежелательные диффузионные процессы ухудшают как эксплуатационные, так и каталитические свойства катализатора. При длительной эксплуатации катализатора влияние реакционной среды обуславливает перераспределение компонентов, вследствие чего снижается активность и селективность по оксиду азота (II). Срок эффективной работы катализатора можно существенно продлить введением промоторов, тормозящих диффузионные процессы. Для