

УДК 665.733.5:519.237:004.942

О.В. Тертишна ^а, Б.В. Лисенко ^а, О.О. Тертишний ^б**ОПТИМІЗАЦІЯ КОМПАУНДУВАННЯ АВТОМОБІЛЬНИХ БЕНЗИНІВ НА ОСНОВІ АНАЛІЗУ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК БЕНЗИНОВИХ ПОТОКІВ**^а Український державний університет науки і технологій, м. Дніпро, Україна^б Дніпровський державний аграрно-економічний університет, м. Дніпро, Україна

У роботі застосовано методи кластерного аналізу для оптимізації процесу компаундування автомобільних бензинів А-95 екологічного класу Євро-5. Проведено комплексний аналіз фізико-хімічних характеристик бензинових потоків різного походження, зокрема густини, тиску насичених парів, фракційного та групового складу, вмісту сірки, бензолу й ароматичних вуглеводнів. Кластеризацію виконано методом ієрархічного агломеративного аналізу із застосуванням евклідової метрики та критерію Варда у програмному середовищі STATISTICA 10. Показано, що кластеризація дозволяє зменшити розмірність задачі оптимізації рецептури шляхом переходу від аналізу окремих потоків до аналізу функціональних груп компонентів. На основі результатів кластерного аналізу сформовано прогнозні рецептури бензинів А-95 Євро-5 із різним співвідношенням базових, високооктанових та коригуючих компонентів. Для перевірки прогностичної здатності методу розроблено чотири рецептури товарних бензинів та експериментально визначено їх фізико-хімічні показники. Встановлено, що октанове число дослідних зразків становило 94,5–95,2 од., тиск насичених парів – 62–71,6 кПа, вміст сірки – 3,58–10 ppm, бензолу – 0,23–0,85 об.%, ароматичних вуглеводнів – 5,35–35 мас.%, що відповідає вимогам стандарту EN 228 та екологічного класу Євро-5. Показано, що використання кластерного аналізу дозволяє прогнозувати сумісність компонентів, оптимізувати рецептурний склад і зменшити кількість експериментальних змішувань під час виробництва товарних бензинів.

Ключові слова: автомобільний бензин, компаундування, кластерний аналіз, бензинові фракції, фізико-хімічні властивості, оптимізація рецептур.

DOI: 10.32434/0321-4095-2026-167-4-137-150

Вступ

Сучасний нафтопереробний завод незалежно від глибини переробки нафти та конфігурації технологічних установок обов'язково включає стадію компаундування товарних бензинів як завершальний етап формування готової продукції. У цьому процесі відбувається цілеспрямоване поєднання різнорідних бензинових компонентів

— прямогонних, реформатних, ізомеризатних, алкілатних, крекінгових фракцій та кисневмісних добавок — у чітко визначених співвідношеннях з метою отримання палива, що відповідає встановленим нормативним вимогам щодо октанового числа, фракційного складу, леткості, вмісту сірки, ароматичних та ненасичених вуглеводнів, бензолу та інших регламентованих показників

© О.В. Тертишна, Б.В. Лисенко, О.О. Тертишний, 2026



This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Optimization of automotive gasoline blending based on the analysis of physicochemical characteristics of gasoline streams

(стандарти EN 228 та екологічні вимоги Євро 5) [1].

Процес компаундування не обмежується простим механічним змішуванням компонентів; він включає складні фізико-хімічні взаємодії, що визначають кінцеві властивості паливної суміші. Деякі властивості, зокрема октанове число, проявляють нелінійну поведінку під час змішування компонентів, що ускладнює їх прогнозування та розрахунок рецептур [2]. Так, апроксимації властивостей бензину в лінійних моделях можуть бути недостатньо точними, особливо коли враховуються синергетичні та антисинергетичні ефекти різних класів вуглеводнів та кисневмісних компонентів (наприклад, ізобутанол) [3–5].

Підвищення октанового числа зазвичай пов'язане зі збільшенням частки ароматичних або ізопарафінових структур, що може впливати на густину, теплотворну здатність та екологічні показники. Наприклад, результати дослідження показали, що логіка моделювання октанового числа в процесі додавання ізобутанолу у складі бензину вимагає врахування як молярних, так і об'ємних моделей змішування, а додавання нелінійних складових значно підвищує точність прогнозу октанового числа [3].

Зниження вмісту сірки до сучасних нормативів потребує глибокого гідроочищення, що змінює груповий склад фракцій і може знижувати їх октановий потенціал. Це підкреслюється у дослідженнях, де наголошується на важливості оптимізації попередньої підготовки компонентів перед змішуванням для мінімізації втрат октанового числа та одночасного витримання стандартів за сіркою [6–8].

Оптимізація леткості та кривої розгонки вимагає точного балансування легких і важких компонентів з урахуванням сезонних вимог до тиску насиченої пари і характеристик випаровуваності. У цьому контексті роль оксигенатів і кисневмісних домішок розглядається не лише з точки зору підвищення антидетонаційної стабільності, а й як чинник впливу на інші регламентовані властивості сумішей, що потребує комплексних моделей оцінювання поведінки сумішей [9,10].

Проблема вдосконалення процесу компаундування товарних бензинів набуває комплексного характеру, поєднуючи фізико-хімічні, технологічні, економічні та екологічні аспекти. Актуальність досліджень у цьому напрямку зумовлена необхідністю підвищення ефективності використання нафтосировинних ресурсів, забезпечення стабільної якості палива та дотримання жорстких

екологічних нормативів. Саме тому поглиблений аналіз властивостей вихідних компонентів, встановлення закономірностей їх взаємодії під час змішування та розроблення науково обґрунтованих методів прогнозування параметрів готового бензину є ключовими завданнями сучасної теорії та практики нафтопереробки. У подібних ситуаціях, рішення приймаються на підставі аналізу стохастичної, неповної інформації, використання методів багатовимірної статистичного аналізу є не тільки виправданим, але і істотно необхідним. Ці методи скорочують чисельність і час проведення лабораторних аналізів вхідного контролю на нафтопереробних підприємствах. Таким ефективним інструментом структурування експериментальної інформації є метод кластерного аналізу. Він дозволяє здійснювати групування об'єктів на основі одночасного врахування всіх змінних та виділяти відносно однорідні групи компонентів без попереднього задання кількості кластерів або чітких меж між ними [11–14].

Методика експерименту

Аналіз експериментальних даних щодо компонентного складу та фізико-хімічних характеристик наступних вуглеводневих потоків VALOR Tank-5001/5003, UE TK-311, Naphtha TK-108, TK-3007, Oasis TK-08, TK-5007, ME TK-2201 дозволив сформувати науково обґрунтовану концепцію їх використання у виробництві автомобільних бензинів класу Євро-5 відповідно до вимог EN 228 (сірка ≤ 10 ppm, бензол ≤ 1 об.%, ароматичні ≤ 35 об.%, ненасичені ≤ 18 об.%, тиск насиченої пари у встановленому сезонному діапазоні, кінцева температура кипіння $\leq 210^\circ\text{C}$). Визначення густини проводили з використанням денситометра Densito (MettlerToledo) за ASTM D4052; фракційний склад вихідних потоків оцінювали на апараті для розгонки світлих нафтопродуктів APHC-1M у відповідності до вимог ASTM D86; визначення тиску насиченої пари по методу Рейда (Метод В) проводили за ASTM D323 напівавтоматичним апаратом OilLab 715 (Linetronics); визначення октанового числа за дослідницьким методом проводили на установці Sinpar FTC-M2 за ASTM D2699; груповий склад бензинових фракцій визначали з використанням газового хроматографа Shimadzu Nexis GC 2030, обладнаного капілярною колонкою (100 м) та полум'яно-іонізаційним детектором дотримуючись вимог ASTM D6729; виміри вмісту сірки проводили на аналізаторі Xplorer TN/TS (TE Instruments) за стандартом ASTM D5453.

Кластерний аналіз реалізували на основі

ієрархічної агломеративної процедури із застосуванням евклідової метрики та критерію Варда у застосунку STATISTICA 10. Інтерпретацію отриманих результатів проводили формалізацією за формулою (1), як відстаней між об'єктами, так і функціоналу, що мінімізувалася під час об'єднання кластерів.

$$x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip}), \quad (1)$$

де p – кількість фізико-хімічних показників (густина, тиск насиченої пари, вміст сірки, бензолу тощо); $i=1, \dots, n$ – номер потоку.

Попередньо перед кластеризацією стандартизували змінні за формулою:

$$z_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j}, \quad (2)$$

де $\bar{x}_j$ – середнє значення j -ї ознаки; s_j – її стандартне відхилення.

Під час стандартизації припускали, що кожний вуглеводневий потік описується вектором ознак і це забезпечувало рівнозначність внеску показників різної розмірності (кг/м³, кПа, ppm, %).

Як правило об'єднання обрано метод повного зв'язку, в якості міри близькості – Евклідова відстань. Метод повного зв'язку визначав відстань між кластерами як найбільша відстань між будь-якими двома об'єктами в різних кластерах. Міра близькості визначалась евклідовою відстанню d в n -мірному просторі і обчислювалась за формулою:

$$d(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}, \quad (3)$$

де x, y – змінні; n – мірність простору.

За фізичним змістом малі значення $d(x, y)$ означали подібність потоків за сукупністю властивостей, великі значення – принципову відмінність технологічної поведінки.

Мінімізацію внутрішньокластерної дисперсії проводили за критерієм Варда згідно з формулами:

$$\Delta E = E_{(A \cup B)} - (E_A + E_B), \quad (4)$$

$$E_C = \sum_{i \in C} \|z_i - \bar{z}_C\|^2, \quad (5)$$

де E – внутрішньокластерна дисперсія; A, B – пара кластерів для яких приріст сумарної дисперсії мінімальний; $\bar{z}_C$ – середній вектор кла-

стера C .

Інтерпретаційно це означало, що формуються максимально однорідні групи і внутрішня варіабельність властивостей сировинних потоків мінімізується, а міжкластерні відмінності зростають. Саме різке зростання ΔE на фінальних етапах агломерації свідчило про природну наявність необхідної кількості кластерів.

З математичної точки зору задачу формування бензину А-95 ЄВРО-5 надавали як багатокритеріальну оптимізацію.

Результати та їх обговорення

Досліджені потоки характеризуються суттєвою диференціацією за густиною (648–752 кг/м³), тиском насичених парів (42–102 кПа) (рис. 1), фракційним (рис. 2) та груповим складом (рис. 3), вмістом сірки (1,5–1613 ppm) та бензолу (рис. 4), що визначає їх різну функціональну роль у структурі майбутньої суміші товарного бензину.

Компонент VALOR Tank-5001/5003 ($\rho \approx 648$ кг/м³, тиск насиченої пари (ТНП) ≈ 102 кПа, парафіни 94%, $S \approx 11$ ppm) є легкою газо-конденсатною фракцією з високою леткістю. Високий вміст парафінів, імовірно із переважанням нормальних парафінів, обумовлює порівняно низький октановий потенціал. Разом з тим низький вміст сірки робить його екологічно прийнятним. Прогнозована поведінка під час змішування – адитивне зниження густини суміші, значне підвищення ТНП, покращення пускових властивостей у холодний період. Тому VALOR Tank-5001/5003 доцільно використовувати виключно як легкий коригуючий компонент у межах до 40% та для компенсації низької леткості ароматичних потоків.

Компонент UE ТК-311 ($\rho \approx 677$ кг/м³, ДНП ≈ 68 кПа, парафіни 82,7%, $S \approx 1,5$ ppm) є гідроочищеною нафтовою фракцією з низьким вмістом сірки та помірною леткістю. Високий парафіново-нафтовий характер свідчить про прийнятну хімічну стабільність і низький рівень ароматичних сполук. З наукової точки зору саме UE ТК-311 може виконувати функцію базового каркасу бензину, формуючи 50–60% рецептури. Він забезпечить відповідність екологічним нормативам за сіркою, стабілізує густину суміші та сформує основну частину фракційного складу.

Вуглеводнева складова майбутнього товарного бензину Naphtha ТК-108 ($\rho \approx 726$ кг/м³, ДНП ≈ 59 кПа, $S \approx 45$ ppm) займає проміжне положення між парафіновими та ароматичними потоками.

Вміст сірки знаходиться на високому рівні

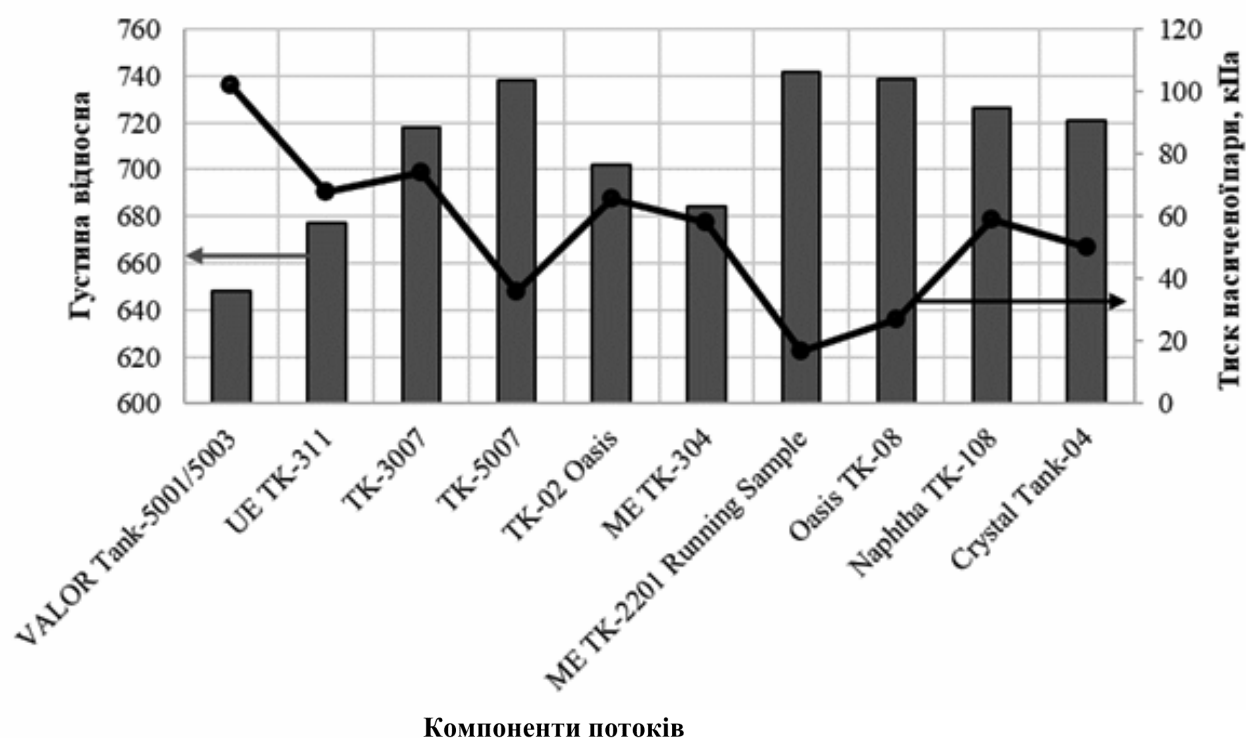


Рис. 1. Показники густини та тиску насиченої пари компонентів бензину

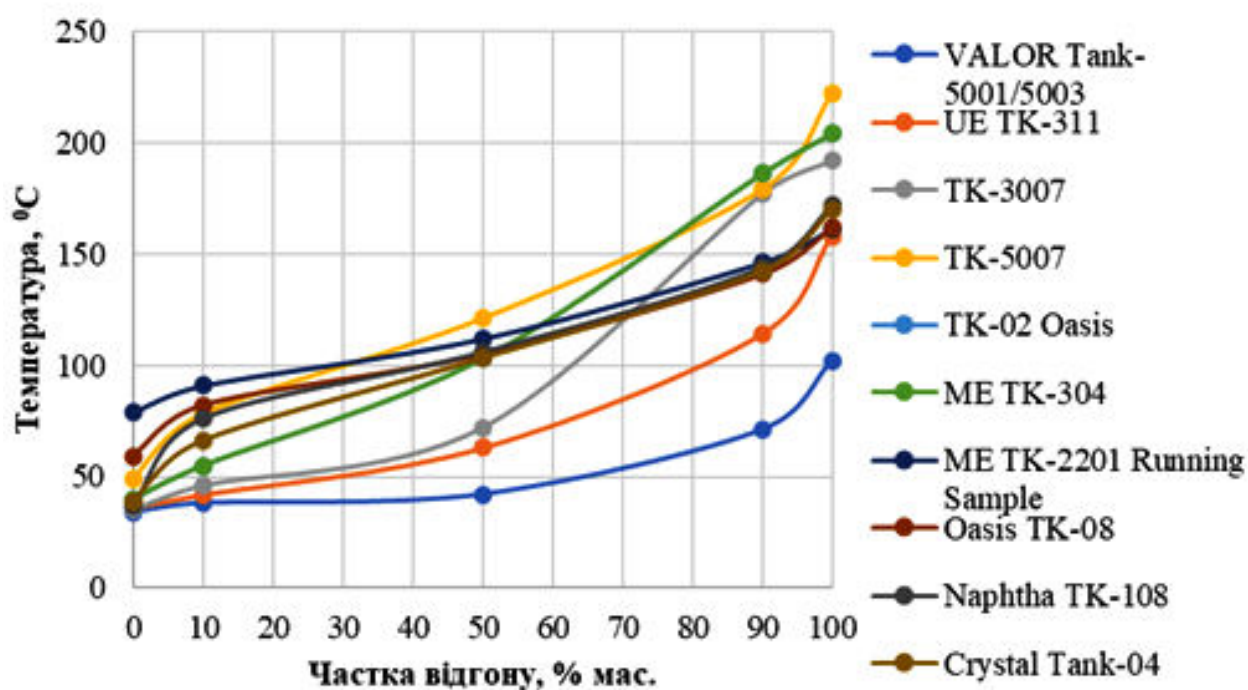


Рис. 2. Фракційний склад компонентів потоків

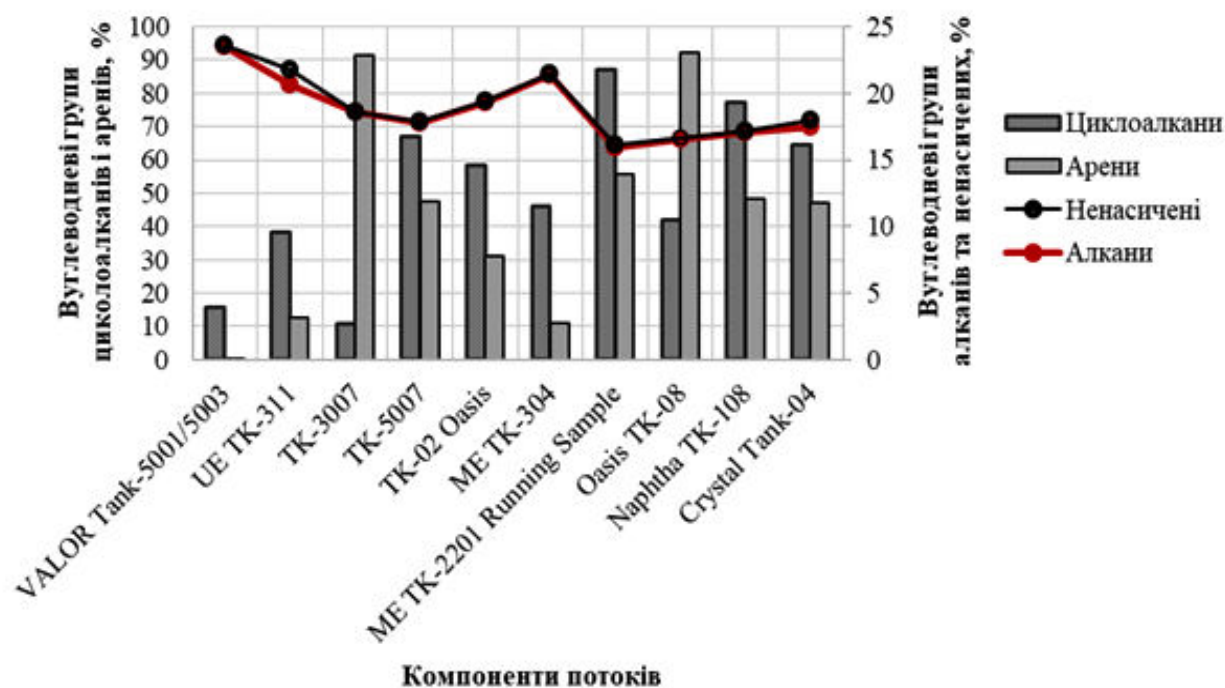


Рис. 3. Груповий склад компонентів потоків

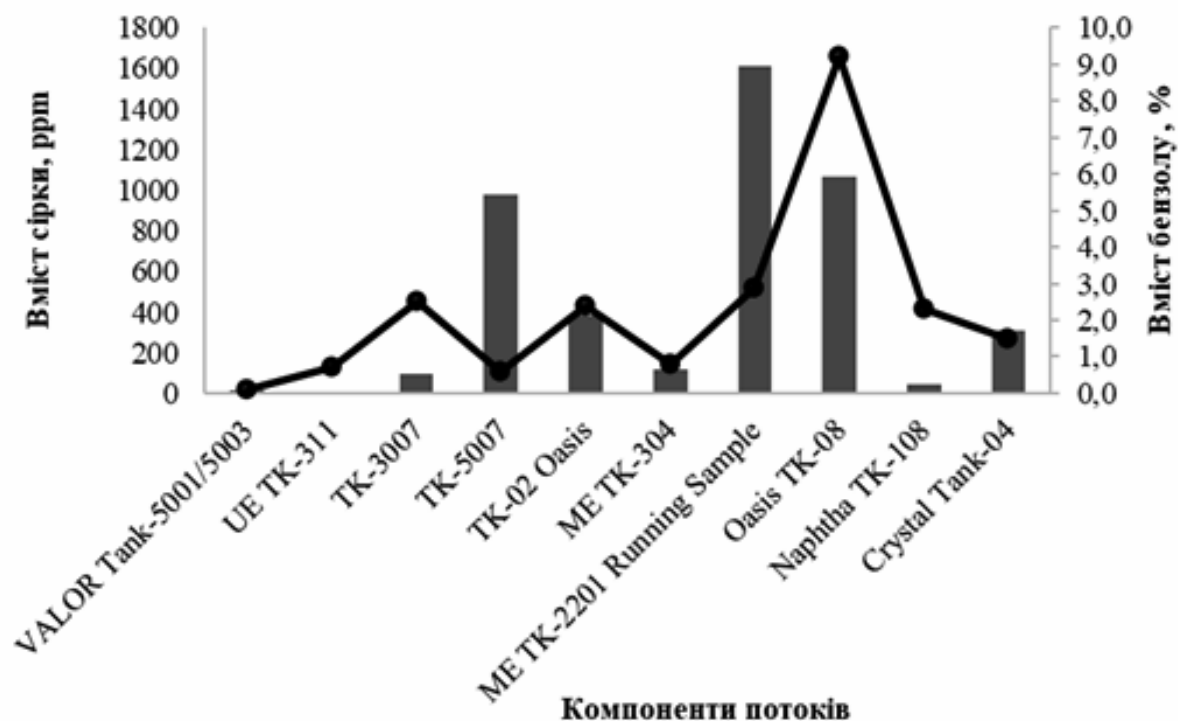


Рис. 4. Вміст сірки та бензолу у фракціях компонентів потоків

для ЄВРО-5, що свідчить про необхідність додаткового гідроочищення або обмеження його частки в суміші. Завдяки більш високій густині та імовірно підвищеному вмісту циклічних структур він здатний підвищити октанове число порівняно з UE TK-311. Прогнозовано може використовуватися у складі базового блоку в кількості 15–25%.

Компонент TK-3007 ($\rho \approx 718$ кг/мі, ароматичні 22,8%, бензол 2,5%, $S \approx 49$ ppm) є типовим риформатом або ароматичним потоком з високим октанопідвищуючим потенціалом. Однак перевищення нормативу по бензолу та сірці потребує обов'язкового гідроочищення та селективної гідродеароматизації. Після очищення TK-3007 може виступати основним октанопідвищуючим компонентом у межах 15–20%. Його введення забезпечить підвищення октанового числа за рахунок ароматичних структур, однак потребує контролю сумарної ароматичності ($\leq 35\%$).

Компонент Oasis TK-08 (ароматичні 23,1%, бензол 9,2%, $S \approx 1064$ ppm) характеризується високим вмістом сірки та бензолу. У поточному стані він непридатний для використання у бензині ЄВРО-5. Теоретично можливе застосування лише після глибокого гідроочищення з десульфуризацією та зниженням вмісту бензолу. Без відповідної підготовки його введення призведе до перевищення нормативів та зниження екологічних характеристик.

Прямогонна складова суміші TK-5007 ($S \approx 98$ ppm, меркаптани ≈ 134 ppm) містить підвищену кількість реакційноздатних сірковмісних сполук, що негативно впливають на корозійну активність та екологічні показники. Його використання можливе лише після очищення від меркаптанової сірки та глибокого гідроочищення. Навіть після обробки доцільна частка цього компонента не повинна перевищувати 5%.

Компонент ME TK-2201 ($S \approx 1613$ ppm) є найбільш проблемним через екстремально високий вміст сірки. У рамках виробництва бензину ЄВРО-5 доцільніше його повністю виключити або направити на окреме гідроочищення з подальшим використанням у паливних сегментах з менш жорсткими вимогами до показників якості.

Формування основи для математичного моделювання керованого оперативного та результативного змішування досліджених компонентів провели із залученням кластерного аналізу. Він дозволив об'єктивно розподілити 10 типів сировини за функціональною роллю, виявити технологічно сумісні групи-складові прогнозованих рецептур, визначити компоненти-обмежувачі.

Ієрархічна кластеризація та таблиця агломерації (рис. 5 а,б,в) продемонстрували чітке формування трьох стійких кластерів, які статистично відокремлюються за сукупністю показників: густина, тиск насиченої пари, груповий вуглеводневий склад, вміст ароматичних та ненасичених сполук, концентрація бензолу, загальний вміст сірки, наявність меркаптанів.

Так, до першого кластера віднесено потоки Naphtha TK-108 та Crystal Tank-04, їх відстань складає 1,503 (рис. 5 в). Об'єднання на ранньому етапі агломерації підтверджує високу подібність за такими ознаками як достатньо низький вміст сірки (≤ 20 ppm), переважання алканових структур, невисока густина, помірна леткість, низький вміст ароматичних вуглеводнів.

З технологічної точки зору, цей кластер може формувати базову матрицю бензину ЄВРО-5, забезпечуючи ключові властивості такі як, відповідність екологічним нормативам по сірці, формування основної частини фракційного складу, стабілізація густини суміші, мінімальний ризик перевищення нормативів по бензолу та ароматичних. Проте через домінування нормальних алканів створюють обмежений октановий потенціал, але виконують роль структуроутворюючого каркасу, з подальшим октанопідвищуючим підсиленням. Рекомендована частка складових у рецептурі бензину на рівні 35–50%.

На наступному етапі до сформованого кластеру приєднується TK-02 Oasis на відстані 1,561, після чого до групи входить ME TK-304 при 1,669. Таким чином формується відносно однорідний кластер із чотирьох потоків, який можна інтерпретувати як базову групу прямогонних бензинових фракцій. Технологічна подібність цих компонентів, імовірно, пов'язана зі схожим груповим вуглеводневим складом, де переважають алканові та циклоалканові структури, що формують подібні значення густини та температур кипіння. У практиці нафтопереробки такі фракції виконують роль основи бензинового пулу, забезпечуючи значну частину об'єму суміші, але мають відносно обмежений внесок у підвищення октанового числа.

Формування другого кластеру починається за більшої відстані (2,006), коли об'єднуються TK-5007 та ME TK-2201. Вищий рівень евклідової відстані свідчить про відмінність цих потоків від базових бензинових фракцій, але водночас підтверджує їх взаємну подібність. Такі характеристики пов'язані з підвищеним вмістом ароматичних вуглеводнів, що зазвичай зумовлює збільшене значення октанового числа за дослі-

дницьким методом ($\text{ОЧД} > 90$) та вищу густину ($745\text{--}760 \text{ кг/м}^3$). Також для таких потоків характерна дещо нижча леткість порівняно з легкими бензиновими фракціями, що пов'язано з більш високими температурами кипіння.

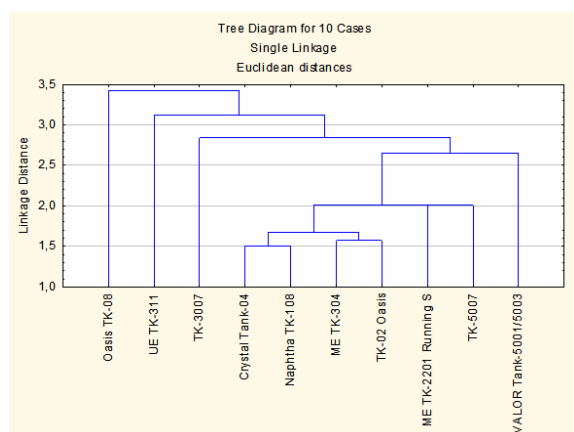
Подальше об'єднання відбувається за включенням VALOR Tank-500 на відстані 2,654, що формує стабільний другий кластер високооктанових бензинових компонентів. З технологічної точки зору цей кластер можна розглядати як групу потоків, які здатні підвищувати детонаційну стійкість бензинової суміші. Підвищений вміст ароматичних та розгалужених вуглеводнів сприяє формуванню необхідного рівня октанового числа для виробництва автомобільних бензинів класу А-95 відповідно до вимог ЄВРО-5.

На більших відстанях об'єднання (понад 3,0) до загальної структури кластерів приєднуються потоки ТК-3007, UE ТК-311 та Oasis ТК-08. Їх пізніше включення у кластерну структуру свідчить про істотні відмінності у фізико-хімічних характеристиках порівняно з попередніми групами. Такі відмінності найімовірніше зумовлені більш високою леткістю та нижчою густиною, що ха-

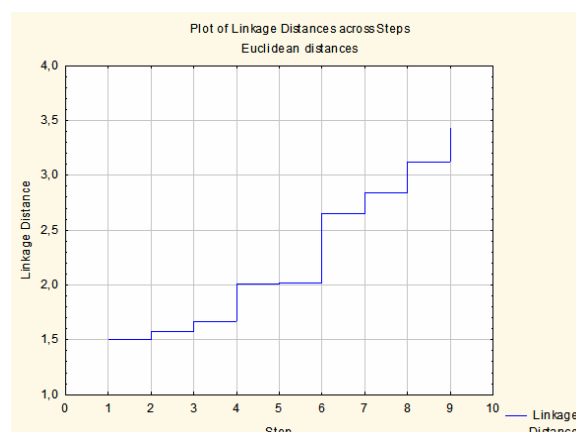
рактерно для легких бензинових фракцій. Подібні потоки зазвичай мають підвищений тиск насиченої пари ($>75 \text{ кПа}$) та нижчі температури початку кипіння ($<40^\circ\text{C}$), що забезпечує їх роль у регулюванні пускових властивостей бензину та показників випаровуваності.

З практичної точки зору результати кластерного аналізу дозволили сформувати уявлення про структуру бензинового компаундувального пулу. Базовий кластер прямогонних фракцій може формувати приблизно 40–50% рецептури бензину. Компоненти другого кластеру, високооктанові фракції, можуть становити 30–35% суміші, забезпечуючи досягнення необхідного рівня $\text{ОЧД} \geq 95$. Третій кластер легких летких компонентів доцільно використовувати у межах 10–15%, оскільки їх надлишок може призвести до перевищення допустимих значень тиску насиченої пари.

Отже, проведений перший тип кластерного аналізу демонструє чітку технологічну диференціацію досліджуваних потоків бензинових фракцій. Отримані кластери відображають не лише статистичну подібність даних, але й функціональну роль кожного потоку у формуванні рецептури



а



б

Amalgamation Schedule (Spreadsheet1.sta)										
Single Linkage Euclidean distances										
linkage distance	Obj. No. 1	Obj. No. 2	Obj. No. 3	Obj. No. 4	Obj. No. 5	Obj. No. 6	Obj. No. 7	Obj. No. 8	Obj. No. 9	Obj. No. 10
1.505333	Naphtha TK-108	Crystal Tank-04								
1.571213	TK-02 Oasis	ME TK-304								
1.668784	TK-02 Oasis	ME TK-304	Naphtha TK-108	Crystal Tank-04						
2.005742	TK-5007	ME TK-2201 Running Sample								
2.016694	TK-5007	ME TK-2201 Ru	TK-02 Oasis	ME TK-304	Naphtha TK-108	Crystal Tank-04				
2.653896	VALOR Tank-500 TK-5007	ME TK-2201 Ru	TK-02 Oasis	ME TK-304	Naphtha TK-108	Crystal Tank-04				
2.842067	VALOR Tank-500 TK-5007	ME TK-2201 Ru	TK-02 Oasis	ME TK-304	Naphtha TK-108	Crystal Tank-04	TK-3007			
3.124058	VALOR Tank-500 TK-5007	ME TK-2201 Ru	TK-02 Oasis	ME TK-304	Naphtha TK-108	Crystal Tank-04	TK-3007	UE TK-311		
3.426189	VALOR Tank-500 TK-5007	ME TK-2201 Ru	TK-02 Oasis	ME TK-304	Naphtha TK-108	Crystal Tank-04	TK-3007	UE TK-311	TK-08	

в

Рис. 5. Результати кластерного аналізу: а – дендрограма взаємозв'язку властивостей 10 компонентів сумішей; б – графік зв'язків через ступені; в – таблиця агломерації

бензину. Кластеризація фактично виконала попередню декомпозицію простору змінних, зменшуючи розмірність задачі: замість 10 незалежних потоків формується 3 функціональні групи.

Наступним етапом виконали перехід від формальної класифікації об'єктів до функціонально-технологічної інтерпретації їх ролі у процесі компаундування. Для цього використовували поглиблений аналіз результатів другого типу кластерного аналізу для прогнозування рецептур бензину А-95 ЄВРО-5, результат якого представлено у вигляді графіка середніх стандартизованих значень показників для кожного кластеру (рис. 6). Використання стандартизації (z-перетворення) забезпечило коректність порівняння різномірних фізико-хімічних параметрів та дозволило ідентифікувати відносні відхилення кожного показника від загальної середньої сукупності, сформувати основу для подальшого регресійного прогнозування, зменшити розмірність задачі оптимізації рецептури, а найголовніше – мінімізувати експериментальні витрати під час розробки

товарних бензинів.

Аналіз графіка свідчить про формування двох статистично відмінних кластерів, профілі яких мають дзеркально-протилежний характер за низкою ключових параметрів.

З боку структурно-функціональної характеристика першого кластеру – характерні від'ємні відхилення за частиною легких або низькооктанових фракцій, позитивні пікові значення в зоні компонентів, які за своєю природою пов'язані з підвищеною ароматичністю або більшою густиною, виражені позитивні відхилення для окремих потоків (зокрема, в області МЕ ТК-22, Oasis ТК), що свідчить про їх домінуючий вплив у формуванні кластеру.

З технологічної точки зору це дозволяє інтерпретувати кластер 1 як групу бензинових фракцій із підвищеним октанопотенціалом, з більшим вмістом ароматичних або циклічних структур. Відомо, що ароматичні вуглеводні мають високі значення октанового числа, однак їх участь у компаундуванні супроводжується не-

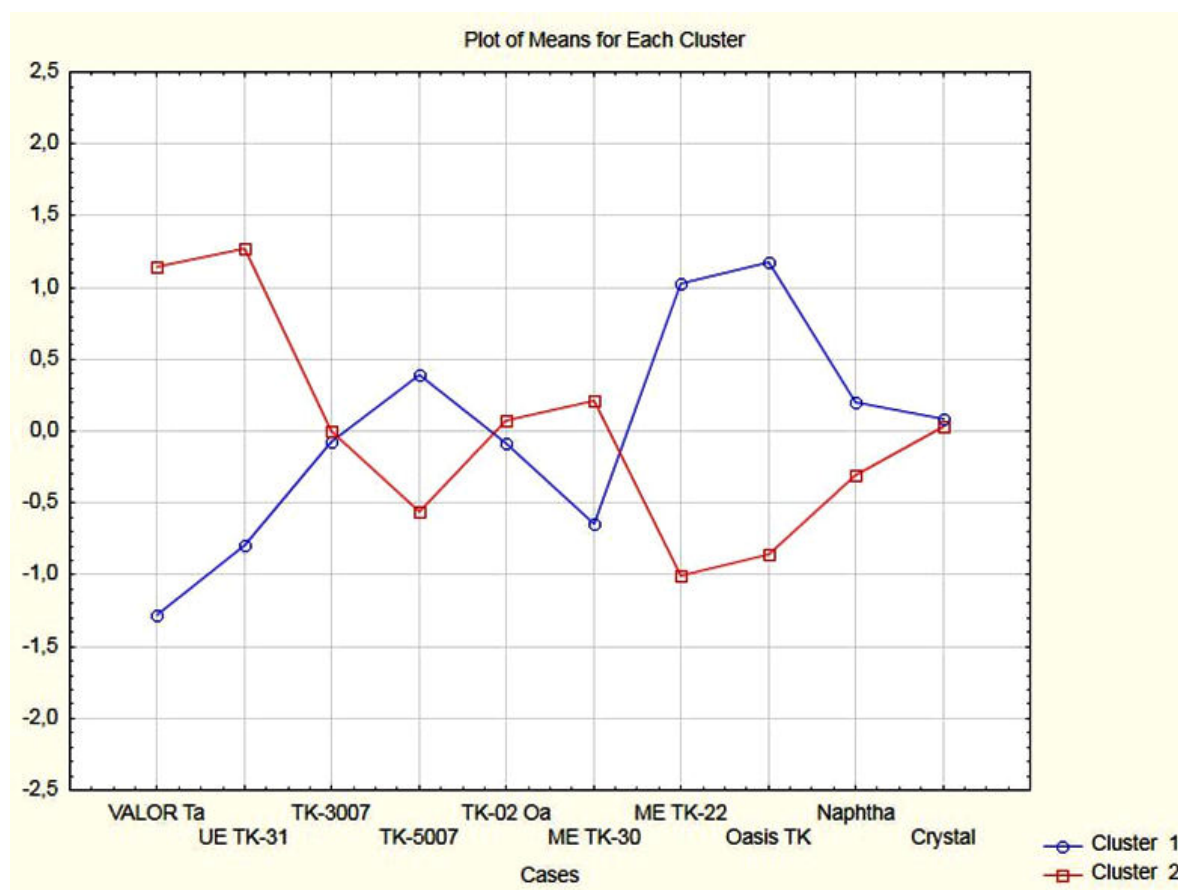


Рис. 6. Графічна інтерпретація середніх стандартизованих значень фізико-хімічних показників бензинових потоків для кожного кластеру

лінійними ефектами та можливими екологічними обмеженнями (вміст бензолу, сумарні ароматичні). Крім того, ароматичні системи демонструють відхилення від ідеальної адитивності під час прогнозування октанового числа, що підтверджено експериментальними дослідженнями з використанням багатофакторних моделей [13,14].

Другий кластер демонструє позитивні відхилення для потоків, що відносяться до більш легких або парафінових фракцій, спостерігається більш згладжений профіль без різко виражених піків. Це дозволяє трактувати кластер 2 як групу відносно однорідних прямогонних фракцій із переважанням парафіново-нафтових структур. Такі фракції мають нижчий октановий рівень, характеризуються кращою прогнозованістю густини та тиску насиченої пари та забезпечують стабільність показників леткості.

Така контрастність профілів дозволила виділити ключові зони технологічної взаємодії – так, октанопотенціал та можливі екологічні ризики (бензол, ароматичні, сірка) потенційно асоційовані з компонентами зосереджених переважно у кластері 1. Стабільність леткості та густини забезпечується кластером 2.

Міжкластерні відмінності було покладено в основу прогнозування змішування наявних

бензинових фракцій за трьома варіантами-напрямами. Варіант А – збалансований, який включає 60–70% фракцій, які увійшли до кластера 2, 20–30% фракцій кластера 1 і 5–10% оксигенатів (МТБЕ або етанол). За такої пропорції є можливість досягти ОЧД зі збереженням контрольованого рівня ароматичних. Варіант В – екологічно орієнтований, з вмістом $\geq 75\%$ кластера 2, $\leq 15\%$ кластера 1 і 8–10 % ізомеризату або оксигенату. Цей варіант спрямований на мінімізацію бензолу та сумарних ароматичних відповідно до вимог EN 228. Варіант С – економічно максимізований, який включає 50–55% бензинових фракцій, включених до кластеру 2, і 30–35% до кластеру 1. З урахуванням мінімальної корекції обраними присадками, результати аналізу яких зведено до табл. 2 і 3, останній варіант забезпечує підвищений вихід товарного бензину, але потребує математичного прогнозування детонаційної стійкості з урахуванням нелінійності змішування.

З точки зору термодинаміки та фізико-хімії компаундування слід враховувати адитивність густини, часткову адитивність тиску насичених парів та нелінійну поведінку октанового числа. Октановий ефект ароматичних і ізопарафінових компонентів має синергетичний характер, тоді як нормальні парафіни знижують детонаційну

Таблиця 1

Фізико-хімічні показники метил-трет-бутилового ефіру (МТБЕ)

Показник	Одиниця вимірювання	Значення	Показник	Одиниця вимірювання	Значення
Вміст:	мас. %		Густина	відносна	746
МТБЕ		99,148	Фракційний склад	$^{\circ}\text{C}$	54–56
метанол		0,343	ОЧД	од.	117
трет-бутанол		0,114	Тиск насиченої пари	кПа	48
C ₄		0,075	Механічні домішки	мас. %	0,023
C ₅		0,023	Вологість	мг/кг	142
C ₅₊		0,255	Корозійна стійкість на мідній пластинці	50 $^{\circ}\text{C}$, 3 год	витримує
МСБЕ		0,003	Водорозчинні кислоти та луги		немає
сірка		1,83			

Таблиця 2

Результати аналізу (вибірково) толуол-ксилольної фракції

Концентрація складових, %					Густина	Фракційний склад, °С	ОЧД
парафіни	ізопарафіни	циклоалкани	ароматичні				
0,001	0,032	0,012	99,954		862	110–143	115
бензол	толуол	м-ксилол	п-ксилол	о-ксилол			
2,833	96,298	0,353	0,153	0,108			
етилбензол	1-метил-3-етилбензол	1,2,4-триметилбензол	метилциклогексан	1,3,5-триметилбензол			
0,150	0,014	0,020	0,012	0,007			

стійкість. Тому оптимальна рецептура повинна базуватися на поєднанні UE TK-311 як базового парафінового каркасу, Naphtha TK-108 як стабілізуючого середньодистильного компонента, очищеного TK-3007 як джерела октану та VALOR Tank-5001/5003 як регулятора леткості.

Доведення суміші до необхідного октанового числа доцільно здійснювати шляхом введення високооктанових кисеньвмісних добавок (МТБЕ, толуолксилольну фракцію, метанол) у межах 5–10%, що забезпечить підвищення октанового числа без надмірного зростання ароматичності. При цьому необхідний контроль тиску насиченої пари, оскільки метанол підвищує леткість суміші.

Для перевірки ефективності застосування методів кластерного аналізу було складено та перевірено показники за чотирма рецептурами зразків товарного бензину. Результати зведено до табл. 5. Для додаткового корегування октанового числа бензинів використовували додатково при-

садки, характеристика яких надана у табл. 1–4, та метанол (ДСТУ 3057-95).

Для перевірки прогностичної здатності методів кластерного аналізу сформовано чотири рецептури товарних бензинів та проведено перевірку відповідності їх фізико-хімічних показників заданим критеріям якості. Результати зведено до табл. 5.

Аналіз результатів, наведених у табл. 5, свідчить про достатню ефективність застосування методів кластерного аналізу при формуванні рецептур товарних бензинів А-95. Для всіх чотирьох розроблених композицій досягнуто відповідності основним фізико-хімічним показникам вимогам до автомобільних бензинів екологічного класу Євро-5.

Встановлено, що отримані бензини характеризуються октановим числом за дослідним методом у межах 94,5–95,2 од., що підтверджує коректність підбору високооктанових компонентів

Таблиця 3

Результати аналізу октанпідвищуючої присадки ФЕРОЦЕН

Показник	Одиниця вимірювання	Значення	Показник	Одиниця вимірювання	Норма	Значення
Густина	відносна	984	Зовнішній вигляд		Жовтуватий порошок	в межах норми
Фракційний склад	°C	198–200	Вміст основної речовини (без урахування Fe)	%	≥99	99,08
ОЧД	од.	500	Вільне залізо, ppm	ppm	≤150	в межах норми
Нерозчинні речовини в толуолі	–	відсутні	Температура плавлення	°C	172–174	172,3

Таблиця 4

Результати аналізу октанпідвищуючої присадки н-метиланілін

Показник	Одиниця вимірювання	Значення	Показник	Одиниця вимірювання	Значення
Зовнішній вигляд/колір	Візуально	Блідо-жовта прозора рідина	Вміст води	об. %	0,07
Вміст н-етиланіліну	мас. %	99,04	Відносна густина	за 15,56°C	0,9915
Вміст аніліну	мас. %	0,17	Стабільність до окислення	–	випробування витримує
Інші домішки	мас. %	0,79	Вміст марганцю	ppm	<1,0
ОЧД	од.	486	Вміст заліза	ppm	<1,0
ТНП	кПа	0,3	Фракційний склад	°C	184,0–195,0

та ефективність прогнозування експлуатаційних властивостей паливних композицій. При цьому необхідний рівень антидетонаційних властивостей забезпечувався різними комбінаціями ароматичних вуглеводнів, оксигенатів та високооктанових базових компонентів.

Аналіз фракційного складу показав, що всі рецептури характеризуються прийнятними температурними межами випаровування. Значення температури перегонки 10%, 50% та 90% об'єму знаходяться у діапазонах, характерних для товарних бензинів А-95, що свідчить про забезпечення необхідних пускових та експлуатаційних властивостей палив. Найбільш вузький інтервал кипіння спостерігався для бензину № 1, тоді як бензин № 4 характеризувався найбільш розширеним фракційним складом за рахунок високого вмісту компоненту UE TK-311 та наявності важчих фракцій.

Тиск насичених парів для досліджених зразків становив 62–716 кПа, що відповідає нормативним вимогам та забезпечує належний баланс між випаровуваністю і безпечністю зберігання палив. Найвище значення ТНП зафіксовано для бензину № 3, що може бути пов'язано з підвищеним

вмістом легкокиплячих компонентів у складі композиції.

Вміст сірки у всіх зразках не перевищував 10 ppm, що підтверджує відповідність екологічним вимогам Євро-5. Одночасно встановлено суттєву варіативність вмісту ароматичних сполук – від 5,35 до 35%, що свідчить про можливість цілеспрямованого регулювання групового вуглеводневого складу залежно від доступної сировинної бази та необхідних експлуатаційних характеристик бензину.

Мінімальний вміст ароматичних сполук характерний для бензину № 4, що було досягнуто за рахунок використання значної частки компонента UE TK-311 та введення кисневмісних добавок. Водночас бензин № 2 містив максимальну кількість ароматичних вуглеводнів унаслідок високої концентрації толуол-ксилольної фракції, однак навіть за таких умов показники бензолу не перевищили допустимих значень.

Отримані результати підтверджують, що використання методів кластерного аналізу є доцільним інструментом під час компаундування товарних бензинів, оскільки дозволяє прогнозувати сумісність компонентів, оптимізувати рецепту-

Таблиця 5

Результати фізико-хімічних характеристик отриманих товарних бензинів

Компоненти	Вміст, % об.	Густи- на	Фракційний склад, °C						ТНП, кПа	ОЧД	Вміст		
			п.к.	10%	50%	90%	к.к.	зал., мг			сір- ки, ppm	арома- тичних спол- ук, %	бен- зо- лу, % об.
Бензин № 1													
VALOR Tank-5001/5003	37	729,6	37	50	77	128	159	0,6	64	94,5	9,45	29,59	0,31
Naphtha TK-108	10												
TK-3007	10												
Толуол-ксилольна фракція	28												
Метил-трет-бутиловий ефір	15												
Бензин № 2													
VALOR Tank-5001/5003	25,9	759,4	36	53	101	135	164	1,0	62	95,1	10	35	0,85
TK-3007	14,7												
Толуол-ксилольна фракція	59,4												
Бензин № 3													
VALOR Tank-5001/5003	23,3	703,9	41	56	103	134	157	1,5	71,6	95,2	3.58	12.54	0,23
UE TK-311	50,9												
Бензин № 4													
UE TK-311	81	741,2	39	59	97	157	190	0,8	63,6	95,1	9,87	5,35	0,84
TK-5007	3,51												
TK-3007	10,31												
Метанол	0,25												
HMA	5,39												
Ферроцен, мг/кг	70												

рний склад та забезпечувати відповідність палив нормативним вимогам без проведення надмірної кількості експериментальних змішувань.

Висновки

Проведено комплексний аналіз фізико-хімічних характеристик бензинових потоків різного технологічного походження, які суттєво відрізнялися за густиною (648–752 кг/м³), тиском насичених парів (42–102 кПа), вмістом сірки (1,5–1613 ppm), бензолу та ароматичних вуглеводнів. Встановлено, що зазначені відмінності визначають функціональну роль компонентів у процесі компаундування товарних бензинів А-95 Євро-5.

Ієрархічний кластерний аналіз із використанням евклідової метрики та критерію Варда дозволив статистично обґрунтовано розподілити 10 досліджених потоків на три функціональні кластери: базові прямогонні компоненти, високооктанові ароматичні фракції та легкі леткі коригуючі компоненти. Встановлено, що найбільш близькими за сукупністю фізико-хімічних властивостей є потоки Naphtha TK-108 та Crystal Tank-04, для яких відстань агломерації становила 1,503.

Встановлено, що компоненти базового кластеру можуть формувати 40–50% рецептури бензину, високооктанові компоненти 30–35%, леткі коригуючі фракції 10–15%. Такий підхід забезпечує досягнення необхідного рівня детонаційної стійкості зі збереженням нормативних показників леткості та екологічних характеристик палива.

За результатами другого типу кластерного аналізу встановлено формування двох статистично контрастних груп бензинових компонентів: кластеру високооктанових ароматичних фракцій та кластеру парафіново-нафтових компонентів. Показано, що октанопідвищуючий ефект ароматичних систем має нелінійний характер, що потребує застосування багатофакторного моделювання під час прогнозування рецептур товарних бензинів.

Для перевірки прогностичної здатності кластерного аналізу сформовано чотири рецептури бензинів А-95 Євро-5 та визначено їх фізико-хімічні показники. Встановлено, що октанове число отриманих композицій становило 94,5–95,2 од., густина 703,9–759,4 кг/м³, тиск насичених парів 62–71,6 кПа, вміст сірки 3,58–10 ppm, бензолу 0,23–0,85 об.%, ароматичних вуглеводнів 5,35–35 об.%. Усі дослідні композиції відповідали вимогам EN 228 та екологічного класу Євро-5.

Встановлено, що найбільш екологічно зба-

лансованою є рецептура бензину № 4, яка характеризувалася мінімальним вмістом ароматичних вуглеводнів 5,35 об.% із забезпеченням октанового числа 95,1 од. Водночас бензин № 2 забезпечив максимальний октановий потенціал за рахунок високого вмісту толуол-ксилольної фракції, однак характеризувався граничним вмістом ароматичних сполук 35 об.%.

Показано, що використання методів кластерного аналізу дозволяє мінімізувати кількість експериментальних змішувань, скоротити обсяг лабораторних досліджень та підвищити ефективність прогнозування рецептур товарних бензинів. Запропонований підхід може бути використаний як інструмент оперативної оптимізації бензинових компаундувальних систем на нафтопереробних підприємствах.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Reinforcement learning based gasoline blending optimization: achieving more efficient nonlinear online blending of fuels* / Huang M., He R., Dai X., Du W., Qian F. // *Chem. Eng. Sci.* – 2024. – Vol.300. – Art. No. 120574.
2. *Experimental and modelling study of the blending properties of e-Gasolines and oxygenate components for market compliance* / Khaled F., Alnatour T., Gail S., Saihati Z., Qahtani S., Javed T. // *Fuel*. – 2026. – Vol.406. – Part B. – Art. No. 136980.
3. *Octane modeling of isobutanol blending into gasoline* / Alleman T.L., Singh A., Christensen E.D., Simmons E., Johnston G. // *Energy Fuels*. – 2020. – Vol.34. – No. 7. – P.8424–8431.
4. *Olson A.L., Tuner M., Verhelst S. A review of isobutanol as a fuel for internal combustion engines* // *Energies*. – 2023. – Vol.16. – No. 22. – Art. No. 7470.
5. *Effects of different additives on physicochemical properties of gasoline and vehicle performance* / Zhang X., Zhang S., Zhao Y., Liu J., Kong X., Zhang S., Wen M., Liu H. // *Fuel Process. Technol.* – 2023. – Vol.242. – Art. No. 107668.
6. *Hydroprocessing of gasoline on modified alumina catalysts* / Tuktin B., Saidilda G., Nurzhanova S., Ongarbayev Y. // *Catalysts*. – 2024. – Vol.14. – No. 7. – Art. No. 404.
7. *Reactive adsorption desulfurization coupling olefin conversion in fluid catalytic cracking gasoline upgrading process* / Yang H., Wang G., Luo F., Xu S., Zhang Z., Wu P. // *ACS Omega*. – 2023. – Vol.8. – P.13265–13274.
8. *Deep hydrodesulfurization of FCC gasoline and gas oil cuts: comparison of CO effect, a by-product from biomass* / Pelardy F., Philippe M., Richard F., Daudin A., Devers E., Hudebine D., Brunet S. // *C. R. Chim.* – 2016. – Vol.19. – No. 10. – P.1266–1275.

9. Olson A.L., Tuner M., Verhelst S. Experimental investigation of glycerol derivatives and C1 – C4 alcohols as gasoline oxygenates // *Energies*. – 2024. – Vol.17. – No. 7. – Art. No. 1701.

10. *Measuring and predicting the vapor pressure of gasoline containing oxygenates* / Gaspar D.J., Phillips S.D., Polikarpov E., Albrecht K.O., Albrecht K.O., Jones S.B., George A., Landera A., Santosa D.M., Howe D.T., Baldwin A.G., Bays J.T. // *Fuel*. – 2019. – Vol.243. – P.630-644.

11. Ahmednooh M., Menezes B. Blend scheduling solutions in petroleum refineries towards automated decision-making in industrial-like blend-shops // *Processes*. – 2024. – Vol.12. – No. 3. – Art. No. 561.

12. Al-Esawi N., Al Qubeissi M. A new approach to formulation of complex fuel surrogates // *Fuel*. – 2021. – Vol.283. – Art. No. 118923.

13. Wani A.A. Comprehensive analysis of clustering algorithms: exploring limitations and innovative solutions // *PeerJ. Comput. Sci.* – 2024. – Vol.10. – Art. No. e2286.

14. *Understanding of the octane response of gasoline/MTBE blends* / Badra J., Alowaid F., Alhussaini A., Alnakhli A., AlRamadan A.S. // *Fuel*. – 2022. – Vol.318. – No. 12. – Art. No. 123647.

Надійшла до редакції 25.03.2026

Надійшла після виправлення 14.07.2026

Прийнята до публікації 16.06.2026

Опублікована 10.08.2026

OPTIMIZATION OF AUTOMOTIVE GASOLINE BLENDING BASED ON THE ANALYSIS OF PHYSICOCHEMICAL CHARACTERISTICS OF GASOLINE STREAMS

O.V. Tertyshna ^{a,*}, B.V. Lysenko ^a, O.O. Tertyshnyi ^b

^a Ukrainian State University of Science and Technologies, Dnipro, Ukraine

^b Dnipro State Agrarian and Economic University, Dnipro, Ukraine

* e-mail: o.v.tertyshna@ust.edu.ua

The study adopts the cluster analysis methods for optimizing the blending process of Euro-5 grade A-95 automotive gasoline. A comprehensive analysis of the physicochemical characteristics of gasoline streams of different origins was carried out, including density, vapor pressure, fractional and group composition, sulfur content, benzene content, and aromatic hydrocarbon content. Clustering was performed using hierarchical cluster analysis with Euclidean distance and Ward's method in the STATISTICA 10 software environment. It was demonstrated that clustering makes it possible to reduce the dimensionality of the formulation optimization problem by shifting from the analysis of individual streams to the analysis of functional groups of components. Based on the results of cluster analysis, predictive formulations of Euro-5 A-95 gasoline with different ratios of base, high-octane, and corrective components were developed. To verify the predictive capability of the proposed approach, four commercial gasoline formulations were prepared and their physicochemical properties were experimentally determined. The research established that the research octane number of the developed gasoline samples ranged from 94.5 to 95.2, vapor pressure from 62 to 71.6 kPa, sulfur content from 3.58 to 10 ppm, benzene content from 0.23 to 0.85 vol.%, and aromatic hydrocarbon content from 5.35 to 35 vol.%, which complies with the requirements of EN 228 and the Euro-5 environmental standard. The obtained results confirm that the application of cluster analysis allows prediction of component compatibility, optimization of gasoline formulations, and reduction in the number of experimental blending procedures during the production of commercial automotive gasoline.

Keywords: automotive gasoline; blending; cluster analysis; gasoline fractions; physicochemical properties; formulation optimization.

REFERENCES

1. Huang M, He R, Dai X, Du W, Qian F. Reinforcement learning based gasoline blending optimization: achieving more efficient nonlinear online blending of fuels. *Chem Eng Sci*. 2024; 300: 120574. doi: 10.1016/j.ces.2024.120574.
2. Khaled F, Alnatour T, Gail S, Saihati Z, Qahtani S, Javed T. Experimental and modelling study of the blending properties of e-Gasolines and oxygenate components for market compliance. *Fuel*. 2026; 406: 136980. doi: 10.1016/j.fuel.2025.136980.
3. Alleman LT, Singh A, Christensen ED, Simmons E, Johnston G. Octane modeling of isobutanol blending into gasoline. *Energy Fuels*. 2020; 34(7): 8424–8431. doi: 10.1021/acs.energyfuels.0c00911.
4. Olson AL, Tuner M, Verhelst S. A review of isobutanol as a fuel for internal combustion engines. *Energies*. 2023; 16: 7470. doi: 10.3390/en16227470.

5. Zhang X, Zhang S, Zhao Y, Liu J, Kong X, Zhang S, et al. Effects of different additives on physicochemical properties of gasoline and vehicle performance. *Fuel Process Technol.* 2023; 242: 107668. doi: 10.1016/j.fuproc.2023.107668.
6. Tuktin B, Saidilda G, Nurzhanova S, Ongarbayev Y. Hydroprocessing of gasoline on modified alumina catalysts. *Catalysts.* 2024; 14: 404. doi: 10.3390/catal14070404.
7. Yang H, Wang G, Luo F, Xu S., Zhang Z, Wu P. Reactive adsorption desulfurization coupling olefin conversion in fluid catalytic cracking gasoline upgrading process. *ACS Omega.* 2023; 8(14): 13265-13274. doi: 10.1021/acsomega.3c00535.
8. Pelardy F, Philippe M, Richard F, Daudin A, Devers E, Hudebine D, et al. Deep hydrodesulfurization of FCC gasoline and gas oil cuts: comparison of CO effect, a by-product from biomass. *C R Chim.* 2016; 19: 1266-1275. doi: 10.1016/j.crci.2015.12.006.
9. Olson AL, Tuner M, Verhelst S. Experimental investigation of glycerol derivatives and C1–C4 alcohols as gasoline oxygenates. *Energies.* 2024; 17: 1701. doi: 10.3390/en17071701.
10. Gaspar D, Phillips SD, Polikarpov E, Albrecht KO, Jones SB, George A, et al. Measuring and predicting the vapor pressure of gasoline containing oxygenates. *Fuel.* 2019; 243: 630-644. doi: 10.1016/j.fuel.2019.01.137.
11. Ahmednooh M, Menezes B. Blend scheduling solutions in petroleum refineries towards automated decision-making in industrial-like blend-shops. *Processes.* 2024; 12: 561. doi: 10.3390/pr12030561.
12. Al-Esawi N, Al Qubeissi M. A new approach to formulation of complex fuel surrogates. *Fuel.* 2021; 283: 118923. doi: 10.1016/j.fuel.2020.118923.
13. Wani AA Comprehensive analysis of clustering algorithms: exploring limitations and innovative solutions. *PeerJ Comput Sci.* 2024; 10: e2286.45. doi: 10.7717/peerj-cs.2286.
14. Badra J, Alowaid F, Alhussaini A, Alnakhli A, AlRamadan AS. Understanding of the octane response of gasoline/MTBE blends. *Fuel.* 2022; 318: 123647. doi: 10.1016/j.fuel.2022.123647.