

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ АЛГОРИТМИЧЕСКОЙ И АППАРАТНОЙ СОСТАВЛЯЮЩИХ КОМПЬЮТЕРНОГО АНАЛИЗА ФРАКЦИОННОГО СОСТАВА МЕТОДОМ МИНИ-ДИСТИЛЛЯЦИИ

Дубровский А. В.

Кафедра вычислительных систем и сетей,

Полоцкий государственный университет имени Евфросинии Полоцкой

Новополоцк, Республика Беларусь

E-mail: a-dubrovskij@yandex.ru

В работе представлен обзор трех поколений приборов мини-дистилляции. Рассмотрены особенности алгоритмов обработки результатов измерений с применением математического моделирования постепенной перегонки. Показана возможность использования приборов мини-дистилляции для анализа фракционного состава сложных смесевых жидкостей и жидкостей с узким диапазоном температур кипения. Предложены пути развития метода мини-дистилляции.

ВВЕДЕНИЕ

Развитие методов анализа фракционного состава идет в сторону автоматизации и минимизации затрат времени, при этом основа анализа остается той же – постепенная перегонка. Современные методы основаны на автоматизированных приборах, которые следуют международным стандартам (например, ASTM D86, ГОСТ Р ЕН ИСО 3405), повышая точность, воспроизводимость и скорость анализа по сравнению с ручными методами. Параллельно совершенствованию аппаратной части абсолютно естественным является развитие алгоритмов обработки результатов измерений, в т. ч. с использованием методов математического моделирования.

1. Приборы мини-дистилляции

Следующей ступенью развития методов анализа фракционного состава является мини-дистилляция, позволяющая в 5...10 раз сократить время анализа. При этом сочетание мини-дистилляции с алгоритмами математического моделирования и компьютерной обработки результатов измерений позволяет решать различные аналитические и технологические задачи. В основе этого подхода лежит математическая модель постепенной перегонки в дифференциальной форме: $dv/df = kv(1-v)/f$, в интегральной форме: $v = af^k/(1 + af^k)$, где v – доля отгона; $f = (T - T_{нк}) / (T - T_{кк})$ – безразмерная температура перегонки; T , $T_{нк}$, $T_{кк}$ – температура соответственно текущая, начала и конца кипения; k – коэффициент интенсивности перегонки при $T = T_{ср}$; a – коэффициент симметричности перегонки.

Работы по изучению закономерностей постепенной перегонки и детерминированных математических описаний этого процесса привели к созданию приборов трех поколений.

Поколение 1 – «Полоцк-1»: масса 7 кг, время анализа до 10 мин, объем пробы 10 мл, изготовлен в единственном экземпляре.

Поколение 2 – «РМД»: масса 14 кг, время анализа до 10 мин, объем пробы 10 мл, серийно выпускался компанией ISL (Франция) начиная с 2002 года.

Поколение 3 – «ТЭП-Полоцк»: Масса 8 кг, время анализа до 10 мин, объем пробы 10 мл, выпущена опытно-промышленная партия в 3 экземплярах, проведена метрологическая аттестация в ВНИИМ им. Д. И. Менделеева (г. Санкт-Петербург).



Рис. 1 – Прибор «ТЭП-Полоцк»

II. АНАЛИЗ ВЫЯВЛЕННЫХ ПРОБЛЕМ МЕТОДА МИНИ-ДИСТИЛЛЯЦИИ

Первое по значимости место в анализе фракционного состава по методу мини-дистилляции занимает определение начала $T_{нк}$ и конца $T_{кк}$ кипения. В приборе «ТЭП-Полоцк» для измерения температуры используется только один датчик – термopара типа ХК (хромель-копель) диаметром не более 2 мм. При этом алгоритм фиксации моментов $T_{нк}$ и $T_{кк}$ основан на поиске экстремумов второй производной температуры T'' , что, как видно из рис.2, является в определенных случаях недостаточным для надёжной идентификации этих точек. Второе по значимости место в определении фракционного состава занимает измерение избыточного давления (P) в колбе в процессе перегонки, дальнейшая обработка которого по определённым алгоритмам позволяет рассчитать расход паровой фазы продукта, произвести пересчёт паровой фазы в жидкую и далее найти

температуры, соответствующие определённой доле отгона. При этом отсутствие математической обработки кривой избыточного давления (P) снижает возможности прибора «ТЭП-Полоцк» в части точного определения $T_{нк}$ и $T_{кк}$, что так же проиллюстрировано на рис.2

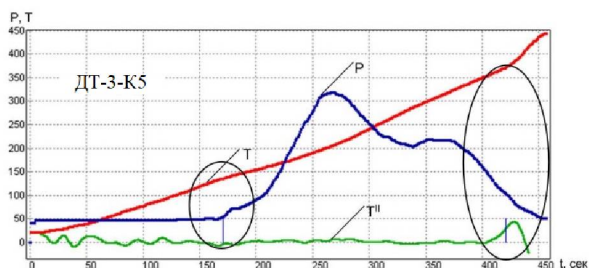


Рис. 2 – Диаграммы постепенной перегонки методом мини-дистилляции (– избыточное давление в колбе, Па; – температура жидкой фазы, °C; – вторая производная T')

Кроме того, в ходе проведения экспериментов выявлено, что постепенная перегонка смесевых жидкостей, например бензинов с добавлением октаноповышающих соединений (спиртов, эфиров и др.), модели постепенной перегонки не подчиняется.

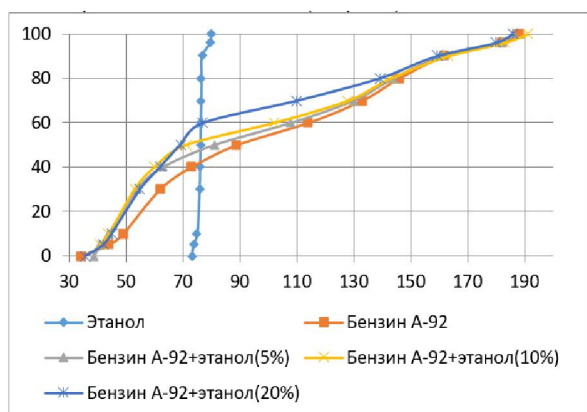


Рис. 3 – Кривые фракционного состава для смесей бензина и этанола

III. НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ МЕТОДА МИНИ-ДИСТИЛЛЯЦИИ

Основываясь на анализе выявленных проблем метода мини-дистилляции можно предложить следующие направления развития этого метода как в аппаратной, так и в алгоритмической части.

1) Измерение температуры перегонки в приборе «ТЭП-Полоцк» осуществляется только в одной точке – возле дна перегонной колбы и этого явно недостаточно для надёжной фиксации моментов $T_{нк}$ и $T_{кк}$. Поэтому представляется обоснованным использование ещё двух дополнительных точек измерения температуры: вторая точка в кипящем слое на расстоянии около 15мм от дна колбы, третья точка на выходе паровой

фазы из колбы. Такое решение потребует некоторого усложнения измерительной части прибора, но при этом обеспечит как надёжное определение температур $T_{нк}$ и $T_{кк}$, так и упростит структуру алгоритма пересчёта температуры жидкой фазы в температуру паровой фазы.

2) Введение дополнительных алгоритмов обработки кривой избыточного давления в колбе. В первую очередь такое решение позволит гибко и адаптивно управлять процессом перегонки любых жидкостей без необходимости предварительной настройки нагревательной системы прибора и регулировки температуры нагрева в процессе проведения анализа.

3) Причина частичной неработоспособности модели постепенной перегонки заключается не в существовании различных законов постепенной перегонки, а в том, что постоянное взаимодействие испаряющейся (v) и оставшейся ($1-v$) к определенному моменту времени жидкости не сохраняется до конца перегонки для смесевых и разделенных по физическим характеристикам жидкостей. Поэтому предлагается модифицировать модель постепенной перегонки путём введения в её структуру точки ТМ (точки немонотонности) с координатами $[v^*; T^*]$ и далее подходить к моделированию перегонки с использованием разных коэффициентов модели a и k для участков $T_{нк}$ и $T_{кк}$. Такой подход так же позволит применять моделирование в отношении жидкостей, у которых $T_{нк}=T_{кк}=const$.

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Прибор анализа фракционного состава методом мини-дистилляции «ТЭП-Полоцк», по существу, представляет из себя компьютерную систему. Поэтому дальнейшее развитие как в направлении совершенствования аппаратной части, так и работы по модификации математического описания постепенной перегонки и алгоритмов обработки результатов измерений позволят перейти к созданию приборов четвёртого поколения, а так же получить точные и надёжные результаты при анализе фракционного состава даже в самых сложных и трудоёмких случаях.

V. СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пашкович, Я. В., Троц, В. А. Определение фракционного состава углеводородов с кислотосодержащими высокооктановыми компонентами на приборе РМД-100 // Электронный сборник трудов молодых специалистов Полоцкого государственного университета. Выпуск 40. Промышленность. Химические технологии. – 2021. – с. 131–134.
2. Абаев, Г. Н. Математическое описание фракционной разгонки нефтепродуктов и современные методы её определения // Вестник Полоцкого государственного университета. Серия В. Промышленность. Прикладные науки. – 2013. – № 3. – с. 145–149.
3. Абаев, Г. Н., Дубровский А. В., Кушнер, Е. В. Развитие методов анализа фракционного состава нефтепродуктов // Промышленный сервис. – 2013. – № 3. – с. 15–21.