

М. М. Доломатова (асп.), Р. С. Манапов (асп.), Г. М. Сидоров (д.т.н., проф.),  
М. Ю. Доломатов (д.х.н., проф.), А. Л. Бадертдинов (магистрант)

## ВЗАИМОСВЯЗЬ ТЕМПЕРАТУРЫ НАЧАЛА КИПЕНИЯ И ИНТЕГРАЛЬНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ СПЕКТРОВ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ФРАКЦИЙ ГАЗОКОНДЕНСАТА

Уфимский государственный нефтяной технический университет  
кафедра технологии нефти и газа  
450062, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1; e-mail: milana.1992@mail.ru

M. M. Dolomatova, R. S. Manapov, G. M. Sidorov, M. Yu. Dolomatov, A. L. Badertdinov

## THE RELATIONSHIP OF INITIAL BOILING POINT AND INTEGRAL OPTICAL ELECTRON SPECTRAL CHARACTERISTICS FOR FRACTIONS OF GAS CONDENSATES

Ufa State Petroleum Technological University  
1, Kosmonavtov Str., 450062, Ufa, Russia; e-mail: milana.1992@mail.ru

Для углеводородных фракций газоконденсата Западно-Сибирского месторождения исследована взаимосвязь интегральной характеристики электронных спектров поглощения (интегральной силы осциллятора) с температурой начала кипения. Установлена линейная зависимость этих характеристик в интервале от 280 до 480 нм для фракций с температурами начала кипения от 300 до 390 °С. По полученной методом наименьших квадратов линейной зависимости между температурой начала кипения и интегральной силой осциллятора определены температуры кипения фракций. Адекватность определения температуры начала кипения подтверждена статистической обработкой данных. Среднее абсолютное отклонение составляет 4.17 °С, средняя относительная погрешность – 1.25%. Коэффициент корреляции составляет 0.97. Установленные закономерности могут быть использованы для экспрессной оценки температур кипений узких фракций газоконденсатов в нефтепереработке и нефтехимии.

**Ключевые слова:** абсолютная и относительная погрешность; интегральная сила осциллятора; коэффициенты зависимости; линейная зависимость; метод наименьших квадратов; спектральный диапазон; статистическая обработка данных; температура начала кипения; углеводородные фракции газоконденсата; электронный спектр поглощения.

The relationship between integral characteristic of electron spectrums of absorption (the integral strength of oscillator) for hydrocarbon fraction of West-Siberian gas condensate deposit are researched. The line dependence of this characteristics in range from 280 nm to 480 nm for fraction with initial boiling point from 300 to 390 °C is established. The initial boiling point of fractions are determined according to the obtained line dependence between initial boiling point and integral strength of oscillator by method of least-square method. The adequacy of value for initial boiling point confirmed results of statistical processing data. The average absolute error of initial boiling point is 4.17 °C. The average relative error amount 1.25%. The determination coefficients equal 0.97. The established this relationship can be use in petrochemical engineering.

**Key words:** absolute and relative error; determination coefficients; electron spectrum of absorption; gas condensate; integral oscillation strength; initial boiling point; least-square method; line dependence; spectral range; statistical processing data.

---

Дата поступления 15.05.18

Исследование фракционного состава газоконденсатов имеет важное значение для технологии их переработки в атмосферно-вакуумных колоннах и в последующих процессах переработки <sup>1</sup>. В лабораторных условиях исследование стандартной температуры кипения требует сложной аппаратуры, длительного времени и использования значительного объема образца. Поэтому представляют интерес методики, основанные на феноменологической электронной спектроскопии <sup>2</sup>, исследующей связи физико-химических свойств объектов и интегральных характеристик поглощения излучения в видимом и УФ диапазонах, так называемые закономерности «спектр–свойства» <sup>3–5</sup>.

Цель данной работы заключалась в исследовании возможности оценки температуры начала кипения по интегральному параметру спектра углеводородных дистиллятов газоконденсатов.

## Материалы и методы

Объектами исследования являлись углеводородные фракции газоконденсата Западно-Сибирского месторождения, разгонку которых проводили на аппарате «I-FisherDISTD-2892/5236 CC» согласно стандартам ASTM D2892 и ASTM D5236.

Свойства углеводородных фракций газоконденсатов приведены в табл. 1.

Спектры регистрировали на спектрофотометре СФ-2000 в диапазоне 280–480 нм с шагом 1 нм (рис. 1). В качестве растворителя использовали толуол.

## Обсуждение результатов

От 200 до 335 нм для всех фракций характерны негладкие спектры со множеством экстремумов без разделения на группы. В диапазоне от 335 до 370 нм наблюдается разделение спектров фракций, причем с увеличением температуры кипения коэффициенты поглоще-

ния увеличиваются. В диапазоне от 280 до 300 нм наблюдается разделение спектров на две группы по поглощению излучения. Первая группа, характерная для фракций с температурами кипения 300–340 °С, имеет максимальные коэффициенты поглощения от 0.54 до 0.57 г/(л·см). Вторая группа фракций, с температурами кипения от 340 до 400 °С, имеет максимальный коэффициент поглощения около 0.64 г/(л·см). В диапазоне от 370 и 410 нм происходит слияние спектров.

Исследованы взаимосвязи температуры начала кипения ( $T_{нк}$ ) газоконденсата с интегральными параметрами их спектров – интегральной силой осциллятора (ИСО), в диапазоне от 280 до 480 нм:

$$\theta_k = \int_{280}^{480} k(\lambda) d\lambda, \quad (1)$$

где  $\theta_k$  – интегральная сила осциллятора, определенная в диапазоне 280–480 нм, гонм/(л·см);

$k$  – коэффициент поглощения, г/(л·см);

$\lambda$  – длина волны, нм.

Обработкой данных методом наименьших квадратов установлена линейная зависимость между температурой начала кипения и ИСО (2):

$$T_{нк} = \alpha_1 \cdot \theta_k + \alpha_2, \quad (2)$$

где  $T_{нк}$  – температура начала кипения, °С;

$\alpha_1, \alpha_2$  – постоянные коэффициенты для фракций одной природы.

Также были исследованы линейные зависимости между температурами кипения и интегральной силой осциллятора в спектральном диапазоне 300–420 нм и 280–420 нм. В табл. 2 приведено сравнение основных результатов.

По данным из табл. 2 можно заключить, что лучшие результаты по оценке  $T_{нк}$  по ИСО существуют в диапазоне 280–480 нм. Соответствующие значения коэффициентов  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  приведены в табл. 2.

Таблица 1

### Фракционный состав газоконденсатов

№	Газоконденсат Западно-Сибирского месторождения	Температура начала кипения, °С	Температура конца кипения, °С	Средняя температура кипения, °С
1	300–310 °С	300	310	305
2	310–320 °С	310	320	315
3	320–330 °С	320	330	325
4	330–340 °С	330	340	335
5	340–350 °С	340	350	345
6	350–360 °С	350	360	355
7	360–370 °С	360	370	365
8	370–380 °С	370	380	375
9	380–390 °С	380	390	385
10	390–400 °С	390	400	395

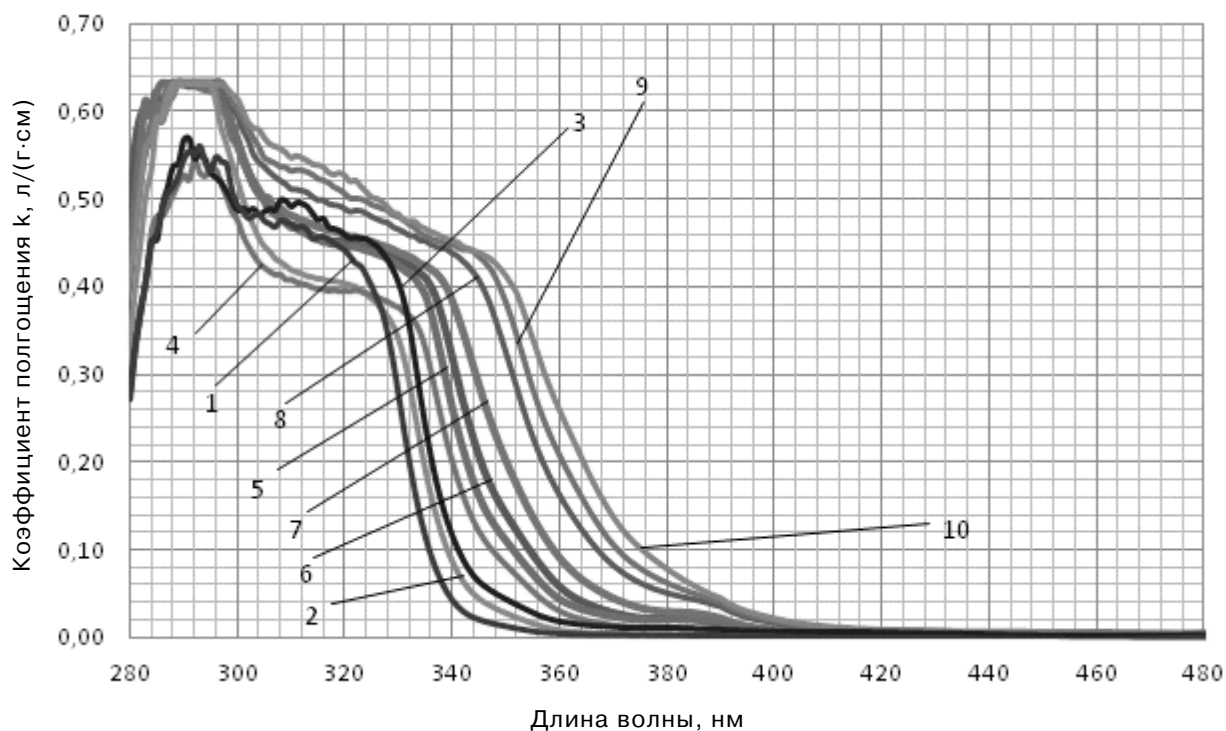


Рис. 1. Электронный абсорбционный спектр поглощения газоконденсата с интервалом температуры кипения: 1 – (300–310) °С; 2 – (310–320) °С; 3 – (320–330) °С; 4 – (330–340) °С; 5 – (340–350) °С; 6 – (350–360) °С; 7 – (360–370) °С; 8 – (370–380) °С; 9 – (380–390) °С; 10 – (390–400) °С.

Таблица 2

Сравнение результатов исследования линейной зависимости температуры начала кипения от интегральной силы осциллятора в разных спектральных диапазонах

№ п/п	Диапазон определения ИСО, нм	Коэффициенты		Коэффициент корреляции, R	Средняя погрешность	
		A <sub>1</sub>	A <sub>0</sub>		абс.	отн., %
1	280-480	4.05	206.76	0.97	4.17	1.25
2	280-420	-1.57	428.25	0.79	8.89	2.53
3	300-420	-1.20	405.873	0.64	12.91	3.69

Таблица 3

Сопоставление адекватности оценок температуры начала кипения фракций газоконденсатов Западно-Сибирского месторождения стандартному методу

№	Температурный интервал кипения газоконденсата, °С	Температура начала кипения, °С		Погрешность	
		На установке «I-FisherDISTD-2892/5236 CC»	Расчитанная по ИСО (k) 280–480 нм	Абсолютная, °С	Относительная, %
1	300-310	300	306	6.19	2.06
2	310-320	310	315	5.40	1.74
3	320-330	320	320	0.50	0.15
4	330-340	330	318	12.30	3.73
5	340-350	340	344	3.56	1.05
6	350-360	350	348	2.40	0.69
7	360-370	360	355	5.38	1.49
8	370-380	370	372	2.40	0.65
9	380-390	380	382	2.21	0.58
10	390-400	390	390	0.18	0.05
Среднее значение				4.17	1.25

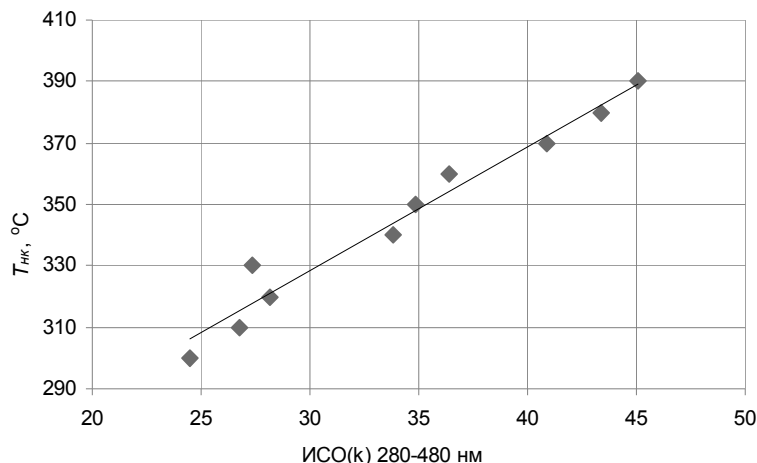


Рис. 2. Зависимость ИСО от  $T_{нк}$  в диапазоне 280–480 нм

На рис. 2 показаны соответствующие зависимости  $T_{нк}$  от ИСО. Оценка значений температуры начала кипения по ИСО приведены в табл. 3.

Из рис. 2 видно, что существует линейная зависимость, связывающая интегральную силу осциллятора и температуру начала кипения фракций газоконденсата. По результатам статистической обработки данных среднее абсолютное отклонение для температуры начала кипения составляет 4.17 °C. средняя относительная погрешность для температуры – 1.25%. Коэффициент корреляции составляет 0.97.

Таким образом, установлена зависимость температуры начала кипения и интегральной силы осциллятора электронных спектров. Полученные результаты имеют адекватные значения, что подтверждается статистической обработкой данных.

Данные зависимости могут быть применены для экспрессной оценки температур кипений узких фракций газоконденсатов в нефтепереработке и нефтехимии.

### Литература

1. Ахметов С.А. Технологии глубокой переработки нефти и газа. – Уфа: Гилем, 2002. – 672 с.
2. Долوماتов М. Ю. Фрагменты теории реального вещества. – М.: Химия, 2005. – 205 с.
3. Dolomatov M.Yu., Mukaeva G.R., Shulyakovskaya D.O. Electron phenomenological Spectroscopy and Its Application in Investigating Complex Substances in Chemistry. *Nanotechnology and Medicine // Journal of Materials Science and Engineering*. – 2013. – V.3, №3. – Pp.183-199.
4. Долوماتов. М.Ю.. Шуляковская Д.О. Оценка физико-химических свойств многокомпонентных углеводородных систем по интегральным характеристикам электронных спектров поглощения // *Химия и технология топлив и масел*. – 2013. – №2. – С.49-52.
5. Долوماتов. М.Ю. Исследование сложных углеводородных систем. Новые оптические методы // *Neftegaz.ru*. – 2018. – №3. – С.26-32.

### References

1. Akhmetov S.A. *Tekhnologii glubokoy pererabotki nefti i gaza* [Technologies for deep oil and gas processing]. Ufa, Gilem Publ., 2002, 672 p.
2. Dolomatov M.Yu. *Fragmenty teorii real'nogo veshchestva* [Fragments of the theory for real matter]. Moscow, Khimiya Publ., 2005, 205 p.
3. Dolomatov M.Yu., Mukaeva G.R., Shulyakovskaya D.O. [Electron phenomenological Spectroscopy and Its Application in Investigating Complex Substances in Chemistry. *Nanotechnology and Medicine*]. *Journal of Materials Science and Engineering*, 2013, vol.3, no.3, pp.183-199.
4. Dolomatov. M.Yu., Shulyakovskaya D.O. *Otsenka fiziko-khimicheskikh svoystv mnogokomponentnykh uglevodorodnykh sistem po integral'nykh kharakteristikam elektronnykh spektrov pogloshcheniya* [Evaluation of physicochemical properties of multicomponent hydrocarbon systems based on integral characteristics of electronic absorption spectra]. *Khimiya i tekhnologiya topliv i masel* [Chemistry and Technology of Fuels and Oils], 2013, no.2, pp.49-52.
5. Dolomatov. M.Yu. *Issledovaniye slozhnykh uglevodorodnykh sistem. Novyye opticheskiye metody* [Investigation of complex hydrocarbon systems. New optical methods]. *Neftegaz.ru*, 2018, no.3, pp.26-32.