



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 114509524 B

(45) 授权公告日 2023. 03. 31

(21) 申请号 202210099931.6

审查员 洪川

(22) 申请日 2022.01.27

(65) 同一申请的已公布的文献号

申请公布号 CN 114509524 A

(43) 申请公布日 2022.05.17

(73) 专利权人 西南交通大学

地址 610031 四川省成都市二环路北一段

(72) 发明人 丁海波 张弘 邱延峻

(74) 专利代理机构 北京正华智诚专利代理事务

所(普通合伙) 11870

专利代理师 杨浩林

(51) Int. Cl.

G01N 30/86 (2006.01)

G06F 17/10 (2006.01)

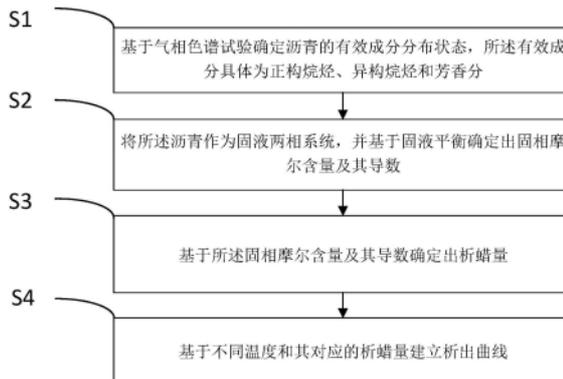
权利要求书2页 说明书11页 附图1页

(54) 发明名称

一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法

(57) 摘要

本发明公开了一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法,先通过基于气相色谱试验确定沥青的有效成分分布状态,所述有效成分具体为正构烷烃、异构烷烃和芳香分;然后将所述沥青作为固液两相系统,并基于固液平衡确定出固相摩尔含量的方程及其导数;然后基于所述求解固相摩尔含量的方程及其导数确定出析蜡量;然后基于不同温度和其对应的析蜡量建立析出曲线。



1. 一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法,其特征在于,所述方法包括以下步骤:

S1、基于气相色谱试验确定沥青的有效成分分布状态,所述有效成分具体为正构烷烃、异构烷烃和芳香分;

S2、将所述沥青作为固液两相系统,并基于固液平衡确定出固相摩尔含量及其导数;

S3、基于所述固相摩尔含量及其导数确定出析蜡量;

所述步骤S3具体包括以下分步骤:

S31、确定固相摩尔含量 $F(S)$ 和固液平衡常数 K_i^{SL} 的初值;

S32、根据所述固相摩尔含量 $F(S)$ 和固液平衡常数 K_i^{SL} 的初值建立牛顿迭代式,计算下一次迭代的相关参数,直到 $|F(S)| \leq 1 \times 10^{-5}$ 时停止迭代,且此时的零点的值为固相的摩尔分数;

S33、基于所述固相的摩尔分数确定当前温度下的析蜡量;

具体的,步骤一,确定 S 和 K_i^{SL} 的初值; S 初值取为0.5, K_i^{SL} 由上述可得到其计算公式如下:

$$K_i^{SL} = \text{EXP} \left\{ \frac{\Delta H_i}{RT_i} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) - \frac{\Delta C_i}{R} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) + \frac{\Delta C_i}{R} \ln \frac{T_i}{T} \right. \\ \left. + \frac{V_i}{RT} \left[(\delta_m^l - \delta_i^l)^2 - (\delta_m^s - \delta_i^s)^2 \right] \right\}$$

在取初值时,假设 $\gamma_i^s = \gamma_i^l = 1$,即 K_i^{SL} 的初值为:

$$K_i^{SL(0)} = \text{EXP} \left[\frac{\Delta H_i}{RT_i} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) - \frac{\Delta C_i}{R} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) + \frac{\Delta C_i}{R} \ln \frac{T_i}{T} \right]$$

步骤二:确定迭代公式,对 $F(S)$ 求导可得:

$$F'(S) = - \sum \frac{Z_i(K_i^{SL} - 1)^2}{1 + S(K_i^{SL} - 1)^2}$$

根据牛顿迭代公式,则有

$$S^{i+1} = S^i - \frac{F(S^i)}{F'(S^i)}$$

其中 S^{i+1} 为第 $i+1$ 次迭代的 S 值,按照此迭代法,重新计算 S 值;

步骤三:根据重新得到的 S 值,根据下式计算 x_i^s 、 x_i^l ;

$$x_i^s = \frac{Z_i K_i^{SL}}{1 + S(K_i^{SL} - 1)}$$

$$x_i^l = \frac{Z_i}{1 + S(K_i^{SL} - 1)}$$

步骤四:由 x_i^s 、 x_i^l 计算 δ_m^s 、 δ_m^l ,并由 δ_m^s 、 δ_m^l 更新 K_i^{SL} 、 $F(S)$ 和 $F'(S)$ 的值;

步骤五:检查是否 $|F(S)| \leq 1 \times 10^{-5}$,若满足条件,则此时的 S 值即为所求固相的摩尔分

数,若不满足条件,则重复步骤二、步骤三、步骤四直至满足条件;

S4、基于不同温度和其对应的析蜡量建立析出曲线。

2.如权利要求1所述的确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法,其特征在于,所述固液平衡具体包括相平衡、质量平衡和归一化。

3.如权利要求2所述的确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法,其特征在于,所述相平衡具体通过如下公式表示:

$$f_i^s = f_i^l$$

式中, f_i^s 表示组分i在固相中的逸度, f_i^l 表示组分i在液相中的逸度。

4.如权利要求2所述的确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法,其特征在于,所述质量平衡和归一化具体通过如下公式表示:

$$L+S=1$$

$$Lx_i^l + Sx_i^s = Z_i$$

$$\sum x_i^l = \sum x_i^s = \sum Z_i = 1$$

式中,S、L分别为平衡时固相、液相中的摩尔的量, Z_i 为组分i的摩尔含量, x_i^s 、 x_i^l 分别是组分i在固相、液相中的物质的量组分。

5.如权利要求1所述的确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法,其特征在于,具体通过如下公式确定出固相摩尔含量:

$$F(S) = \sum x_i^s - \sum x_i^l = \sum \frac{Z_i(K_i^{SL} - 1)}{1 + S(K_i^{SL} - 1)} = 0$$

式中, $F(S)$ 为固相摩尔含量, K_i^{SL} 为固液平衡常数,S为公式的零点,也即平衡时固相的摩尔含量, Z_i 为组分i的摩尔含量, x_i^s 、 x_i^l 分别是组分i在固相、液相中的物质的量组分。

一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法

技术领域

[0001] 本发明属于沥青技术领域,具体涉及一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法。

背景技术

[0002] 沥青中蜡含量是影响起路用性能的重要因素,一方面,沥青中蜡的存在会降低沥青胶结料与集料之间的粘附性,从而导致沥青路面容易产生水损害,另一方面,沥青中的蜡在低温下的持续析出会导致沥青劲度的提高,从而使沥青路面容易产生低温开裂现象,为了避免蜡引起的沥青路面病害,现有相关规范规定了高等级沥青路面蜡含量不超过3%的要求。

[0003] 传统沥青混合料拌合及摊铺过程中,由于沥青的粘度较高,需要将混合料加热到较高的温度,而较高的温度会导致温室气体的大量排放与沥青的氧化老化,因此温拌剂得到较为广泛的应用,但蜡基温拌剂成本较低,受到了越来越多业主与承包商的青睐。但是添加的温拌剂在低温下的析出会导致沥青路面耐久性的降低,人们关注蜡基添加剂功能性的同时,并未较多地关注其对路面耐久性的影响。

发明内容

[0004] 本发明提出了一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法,成功实现为准确分析与预测沥青中蜡随温度的变化提供了一种重要的分析手段,为进一步研发沥青中蜡析出抑制剂、降低蜡含量和蜡析出温度提供了理论基础。

[0005] 本发明的技术方案为:一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法,包括以下步骤:

[0006] S1、基于气相色谱试验确定沥青的有效成分分布状态,所述有效成分具体为正构烷烃、异构烷烃和芳香分;

[0007] S2、将所述沥青作为固液两相系统,并基于固液平衡确定出固相摩尔含量及其导数;

[0008] S3、基于所述固相摩尔含量及其导数确定出析蜡量;

[0009] S4、基于不同温度和其对应的析蜡量建立析出曲线。

[0010] 进一步地,所述固液平衡具体包括相平衡、质量平衡和归一化。

[0011] 进一步地,所述相平衡具体通过如下公式表示:

$$[0012] f_i^s = f_i^l$$

[0013] 式中, f_i^s 表示组分*i*在固相中的逸度, f_i^l 表示组分*i*在液相中的逸度。

[0014] 进一步地,所述质量平衡和归一化具体通过如下公式表示:

$$[0015] L+S=1$$

$$[0016] Lx_i^l + Sx_i^s = Z_i$$

$$[0017] \quad \sum x_i^l = \sum x_i^s = \sum Z_i = 1$$

[0018] 式中,S、L分别为平衡时固相、液相中的摩尔的量, Z_i 为组分i的摩尔含量, x_i^s 、 x_i^l 分别是组分i在固相、液相中的物质的量组分。

[0019] 进一步地,具体通过如下公式确定出固相摩尔含量:

$$[0020] \quad F(S) = \sum x_i^s - \sum x_i^l = \sum \frac{Z_i(K_i^{SL} - 1)}{1 + S(K_i^{SL} - 1)} = 0$$

[0021] 式中,F(S)为固相摩尔含量, K_i^{SL} 为固液平衡常数,S为公式的零点,也即平衡时固相的摩尔含量, Z_i 为组分i的摩尔含量, x_i^s 、 x_i^l 分别是组分i在固相、液相中的物质的量组分。

[0022] 进一步地,所述步骤S3具体包括以下分步骤:

[0023] S31、确定固相摩尔含量F(S)和固液平衡常数 K_i^{SL} 的初值;

[0024] S32、根据所述固相摩尔含量F(S)和固液平衡常数 K_i^{SL} 的初值建立牛顿迭代式,计算下一次迭代的相关参数,直到 $|F(S)| \leq 1 \times 10^{-5}$ 时停止迭代,且此时的零点的值为固相的摩尔分数;

[0025] S33、基于所述固相的摩尔分数确定当前温度下的析蜡量。

[0026] 与现有技术相比,本发明具备以下有益效果:

[0027] 本发明先通过基于气相色谱试验确定沥青的有效成分分布状态,所述有效成分具体为正构烷烃、异构烷烃和芳香分;然后将所述沥青作为固液两相系统,并基于固液平衡确定出求解固相摩尔含量的方程及其导数;然后基于所述求解固相摩尔含量的方程及其导数确定出析蜡量;然后基于不同温度和其对应的析蜡量建立析出曲线,本发明提出了一种沥青中蜡析出温度与析出曲线的理论模型及其数值实现方法,本发明的成功实现为准确分析与预测沥青中蜡随温度的变化提供了一种重要的分析手段。为进一步研发沥青中蜡析出抑制剂、降低蜡含量和蜡析出温度提供了理论基础。

附图说明

[0028] 图1所示为本发明实施例提供的一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法的流程示意图;

[0029] 图2所示为本发明实施例中析出曲线的示意图。

具体实施方式

[0030] 下面将结合本申请实施例中的附图,对本申请实施例中的技术方案进行清楚、完整地描述,显然,所描述的实施例仅仅是本申请一部分实施例,而不是全部的实施例。基于本申请中的实施例,本领域普通技术人员在没有作出创造性劳动前提下所获得的所有其他实施例,都属于本申请保护的范围。

[0031] 本申请提出了一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法,如图1所示为本申请实施例提出的一种确定沥青蜡析出温度与析蜡量之间析出曲线的方法的流程

示意图,该方法包括以下步骤:

[0032] 步骤S1、基于气相色谱试验确定沥青的有效成分分布状态,所述有效成分具体为正构烷烃、异构烷烃和芳香分。

[0033] 具体的,以某沥青A为例,该沥青A的相关信息如下表1:

[0034] 表1

样品名称	原油来源	PG分级	蜡含量
A	Redwater	58-16	5.06

[0036] 通过气相色谱试验确定沥青的有效成分分布状态,有效成分具体为正构烷烃P、异构烷烃N和芳香分A,其分布状态如下表2所示:

[0037] 表2

碳数	P	N	A
5	0.000588	0	0.001152
6	0.000613	0	0.001152
7	0.000349	6.91E-05	0.001382
8	0.000381	0.000251	0.001958
9	0.000568	0.000234	0.002534
10	0.000358	0.000307	0.002995
11	0.000475	0.000222	0.00357
[0038] 12	0.000527	0.000373	0.003916
13	0.000611	0.000151	0.004607
14	0.001546	3.33E-05	0.005068
15	0.001216	0.000193	0.005874
16	0.004296	0.000607	0.006335
17	0.006273	0.000271	0.007029
18	0.002366	0.000522	0.00756
19	0.003636	0.000322	0.007947
20	0.00512	0.000299	0.010942
21	0.002026	0.000182	0.011172

[0039]

22	0.004421	0.000527	0.01336
23	0.003311	0.000621	0.017161
24	0.002319	0.000329	0.019695
25	0.001997	0.000229	0.018198
26	0.001379	0.000118	0.01958
27	0.000862	0.000102	0.022344
28	0.000856	6.25E-05	0.023611
29	0.000768	7.92E-05	0.021538
30	0.000516	9.81E-05	0.022114
31	0.000554	7.68E-05	0.022344
32	0.000423	6.3E-05	0.022459
33	0.000379	5.57E-05	0.018499
34	0.000327	4.06E-05	0.012593
35	0.000401	7.33E-05	0.009664
36	0.000516	5.05E-05	0.007827
37	0.000301	3.92E-05	0.005644
38	0.000189	3.1E-05	0.004037
39	0.000131	4.06E-05	0.003746
40	0	0	0.001394

[0040] 将PNA分布按照溶解温度 T_i 进行从小到大排序,将所有的PNA划分成90个虚组分,并根据不同组分建立热力学等式,如下表3所示:

[0041] 表3

[0042]

序号	Z_i	命名	MW_i	d_i^L	V_i	T_i	ΔH_i	ΔC_i	δ_i^L	δ_i^S
1	0.001152	A6	65.09	0.894727	72.74846	93.2832 1	2258.57 3	9.66527 9	7.45349 7	9.30596 3
2	0.000588	P5	72.146	0.634431	113.7177	97.4121	515.847 3	10.7130 3	7.33224 1	7.63531
3	0.001152	A7	78.108	0.889257	87.8351	118.581 8	2871.10 2	11.5983 4	7.59138 6	9.50350 3
4	0.001382	A8	91.126	0.884633	103.01	141.215 6	3419.11 2	13.5313 9	7.70209 4	9.61843 5
5	0.000613	P6	86.172	0.663983	129.7804	143.187 4	905.663 7	12.7957 7	7.46258 8	7.91635 3
6	6.91E-05	N5	96.7708	0.730649	132.445	150.273 6	1657.79 9	14.3695 9	7.64374 7	8.42281 1
7	0.001958	A9	104.144	0.880627	118.2612	161.465 3	3909.39 8	15.4644 5	7.79346 1	9.68479 9
8	0.000251	N6	110.595 2	0.747605	147.9326	170.695 3	2152.10 1	16.4223 9	7.73317 7	8.62263 7
9	0.000349	P7	100.198	0.685287	146.2133	176.249 9	1296.23 6	14.8785	7.56747 2	8.13215 9

[0043]

1						179.582	4348.04		7.87045	9.72081
0	0.002534	A10	117.162	0.877093	133.5799	1	1	17.3975	9	5
1			124.419			188.840		18.4751	7.80842	8.79489
1	0.000234	N7	6	0.760813	163.5351	3	2678.48	9	9	6
1						195.790		19.3305	7.93642	9.73709
2	0.002995	A11	130.18	0.873932	148.9589	5	4740.48	6	6	1
1						201.282	1687.56	16.9612	7.65414	8.30350
3	0.000381	P8	114.224	0.70138	162.8562	8	4	4	5	7
1						204.962	3230.17	20.5279		8.94457
4	0.000307	N8	138.244	0.771396	179.2127	6	3	9	7.87281	3
1						210.291	5091.58	21.2636		9.74019
5	0.00357	A12	143.198	0.871073	164.3926	7	2	1	7.9937	1
1			152.068			219.287	3801.52	22.5807	7.92863	9.07546
6	0.000222	N9	4	0.780071	194.9417	6	5	9	5	6
1						220.920	2079.64	19.0439	7.72724	8.44320
7	0.000568	P9	128.25	0.713972	179.6289	6	7	7	3	7
1						223.265	5405.70	23.1966	8.04397	9.73436
8	0.003916	A13	156.216	0.868463	179.8764	4	2	7	8	6
1			165.892			232.015	4387.82	24.6335	7.97758	9.19054
9	0.000373	N10	8	0.787315	210.707	6	7	9	1	4
2						234.872	5686.73	25.1297	8.08852	9.72246
0	0.004607	A14	169.234	0.866062	195.4064	5	4	3	6	5
2						236.758	2472.48	21.1267	7.78989	8.55954
1	0.000358	P10	142.276	0.724099	196.487	9	7	1	1	8
2			179.717			243.324	4985.17	26.6863		9.29217
2	0.000151	N11	2	0.793457	226.4988	6	7	9	8.0209	7
2						245.257	5938.16	27.0627	8.12831	9.70644
3	0.005068	A15	182.252	0.863838	210.9793	1	4	8	1	9
2						249.820	2866.08	23.2094		
4	0.000475	P11	156.302	0.732424	213.4037	5	2	4	7.84429	8.65813
2			193.541				5590.35	28.7391	8.05954	9.38228
5	3.33E-05	N12	6	0.798735	242.3102	253.373	6	9	5	9
2						254.547		28.9958	8.16408	9.68769
6	0.005874	A16	195.27	0.861769	226.5922	8	6163.11	4	7	6
2						260.791	3260.43	25.2921	7.89204	8.74287
7	0.000527	P12	170.328	0.739393	230.362	4	3	8	1	3
2						262.301	6200.72	30.7919	8.09426	9.46246
8	0.000193	N13	207.366	0.80332	258.1362	1	5	8	1	3
2						262.859	6364.36	30.9288	8.19645	9.66718
9	0.006335	A17	208.288	0.859832	242.2426	8	2	9	2	7
3						270.148		27.3749	7.93434	8.81660
0	0.000611	P13	184.354	0.745314	247.3507	7	3655.54	1	2	7
3			221.190			270.233	6814.13	32.8447	8.12563	9.53401
1	0.000607	N14	4	0.807343	273.9732	9	9	8	7	9
3						270.296	6544.41	32.8619	8.22588	9.64563
2	0.007029	A18	221.306	0.858014	257.9283	4	6	5	6	2

[0044]

3						276.949	6705.50	34.7950	8.25278	9.62354
3	0.00756	A19	234.324	0.856299	273.6475	6	4	1	2	3
3			235.014			277.282	7428.86	34.8975	8.15414	9.59806
4	0.000271	N15	8	0.810903	289.8186	4	3	8	4	6
3						278.234	4051.40	29.4576		8.88142
5	0.001546	P14	198.38	0.750411	264.3618	8	3	4	7.97211	7
3							6849.62	36.7280	8.27746	9.60129
6	0.007947	A20	247.342	0.854677	289.3983	282.902	4	6	1	5
3			248.839			283.545	8043.51	36.9503		9.65554
7	0.000522	N16	2	0.814077	305.6703	1	3	8	8.18017	3
3						285.301	4448.02	31.5403		8.93892
8	0.001216	P15	212.406	0.754846	281.3898	5	1	8	8.00606	2
3						288.227	6978.56	38.6611	8.30019	
9	0.010942	A21	260.36	0.853138	305.1792	5	3	2	3	9.57916
4			262.663			289.109	8656.99	39.0031	8.20403	9.70725
0	0.000322	N17	6	0.816926	321.5268	6	8	8	1	4
4						291.538	4845.39	33.6231		8.99031
1	0.004296	P16	226.432	0.758743	298.4305	1	5	1	8.03676	6
4						292.991	7093.92	40.5941	8.32120	9.55733
2	0.011172	A22	273.378	0.851674	320.9889	9	1	7	4	5
4						294.053	9268.46	41.0559	8.22599	9.75388
3	0.000299	N18	276.488	0.819499	337.3867	8	9	8	1	5
4							5243.52	35.7058	8.06466	9.03657
4	0.006273	P17	240.458	0.762195	315.4809	297.09	5	5	9	1
4						297.254	7197.12	42.5272	8.34068	9.53595
5	0.01336	A23	286.396	0.850279	336.826	6	8	3	5	9
4			290.312			298.446	9877.28	43.1087	8.24627	9.79603
6	0.000182	N19	4	0.821835	353.2491	8	2	8	2	2
4						301.068	7289.46	44.4602		9.51513
7	0.017161	A24	299.414	0.848945	352.6894	2	3	8	8.3588	3
4						302.070	5642.41	37.7885	8.09015	9.07845
8	0.002366	P18	254.484	0.765277	332.5386	4	1	8	8	5
4			304.136			302.350	10482.9	45.1615	8.26506	9.83420
9	0.000527	N20	8	0.823966	369.1131	1	6	8	2	8
5						304.480	7372.07	46.3933	8.37568	9.49492
0	0.019695	A25	312.432	0.847668	368.5781	1	3	4	8	2
5			317.961			305.818	11085.1	47.2143	8.28252	9.86886
1	0.000621	N21	2	0.82592	384.9782	3	7	8	1	2
5						306.568	6042.05	39.8713	8.11353	9.11658
2	0.003636	P19	268.51	0.768045	349.6018	8	2	2	6	6
5						307.532	7445.98		8.39147	9.47536
3	0.018198	A26	325.45	0.846444	384.491	7	1	48.3264	2	9
5			331.785			308.899	11683.6	49.2671	8.29878	9.90038
4	0.000329	N22	6	0.827718	400.8437	8	9	8	6	4
5						310.263	7512.10	50.2594	8.40625	9.45649
5	0.01958	A27	338.468	0.845267	400.4273	7	4	5	7	9

[0045]

5								41.9540	8.13505	9.15146
6	0.00512	P20	282.536	0.770548	366.669	310.657	6442.45	5	8	9
5						311.637	12278.3	51.3199	8.31397	9.92911
7	0.000229	N23	345.61	0.829379	416.7092	8	8	7	7	5
5							7571.26	52.1925	8.42013	9.43832
8	0.022344	A28	351.486	0.844135	416.3861	312.707	3	1	4	3
5			359.434			314.070		53.3727	8.32819	9.95535
9	0.000118	N24	4	0.83092	432.5743	5	12869.2	7	7	7
6						314.393	6843.60	44.0367	8.15494	9.18352
0	0.002026	P21	296.562	0.772822	383.7391	3	3	9	1	1
6							7624.18	54.1255	8.43318	9.42084
1	0.023611	A29	364.504	0.843044	432.3666	314.893	9	6	6	1
6			373.258			316.232	13456.1	55.4255	8.34153	9.97937
2	0.000102	N25	8	0.832352	448.4387	1	5	7	5	3
6						317.825	7245.51	46.1195	8.17336	
3	0.004421	P22	310.588	0.774899	400.8111	2	2	2	6	9.21309
6			387.083			318.152	14039.2	57.4783	8.35407	10.0013
4	6.25E-05	N26	2	0.833688	464.3021	6	8	7	2	9
6						318.598	7713.90	57.9916		9.38792
5	0.065996	A31	390.54	0.840974	464.3901	4	6	8	8.45709	8
6			400.907			319.859	14618.6	59.5311	8.36587	10.0216
6	7.92E-05	N27	6	0.834938	480.1643	1	7	7	6	3
6						320.992	7648.17	48.2022		9.24046
7	0.003311	P23	324.614	0.776804	417.8843	3	6	6	8.19049	9
6						321.375	15194.4	61.5839		10.0402
8	9.81E-05	N29	414.732	0.836111	496.0251	3	5	7	8.37701	6
6						322.817	7816.05	63.7908	8.48829	
9	0.053551	A34	429.594	0.838115	512.5718	4	5	4	6	9.34344
7			442.380			323.919	16335.7	65.6895	8.39748	10.0733
0	0.000195	N32	8	0.838253	527.7417	6	2	7	2	2
7						323.927	8051.59	50.2849	8.20644	9.26590
1	0.002319	P24	338.64	0.778558	434.958	4	7	9	6	3
7						325.838	7889.20	69.5900	8.51498	9.30429
2	0.023135	A37	468.648	0.835504	560.9162	6	5	1	7	2
7						326.658	8455.77	52.3677		9.28960
3	0.001997	P25	352.666	0.78018	452.0317	3	3	3	8.22135	4
7						326.767		71.8479	8.42436	10.1143
4	0.000164	N36	483.854	0.841043	575.3023	8	18024.3	6	1	5
7						327.359	7926.03	73.4561	8.53072	9.28084
5	0.000111	A5	494.684	0.833882	593.2299	6	2	2	9	8
7						328.002		75.3891	8.53806	9.26985
6	0.009177	A42	507.702	0.833103	609.4107	2	7941.59	8	5	2
7						329.208	8860.70	54.4504	8.23530	9.31175
7	0.001379	P26	366.692	0.781684	469.1051	3	5	6	4	4
7						331.597	9266.39		8.24839	9.33250
8	0.000862	P27	380.718	0.783084	486.1776	5	3	56.5332	4	8

	7						9672.83	58.6159	8.26069	9.35200	
	9	0.000856	P28	394.744	0.784391	503.249	333.843	6	3	9	2
	8						335.959	10080.0	60.6986	8.27228	9.37035
	0	0.000768	P29	408.77	0.785614	520.3189	6	4	7	7	4
	8						337.960	10487.9		8.28321	9.38766
	1	0.000516	P30	422.796	0.786762	537.3873	1	9	62.7814	8	9
	8						339.699	11241.4	66.9468	8.30331	9.41352
	2	0.000423	P32	450.848	0.78886	571.5183	6	2	7	8	6
	8						339.855		64.8641	8.29354	9.40403
	3	0.000554	P31	436.822	0.787842	554.4538	7	10896.7	4	5	8
	8						341.862	11664.9	69.0296	8.31257	9.42962
[0046]	4	0.000379	P33	464.874	0.789822	588.5807	9	6	1	8	1
	8						343.899		71.1123	8.32136	9.44483
	5	0.000327	P34	478.9	0.790733	605.6407	5	12088.5	4	4	7
	8						345.820	12512.0	73.1950	8.32971	9.45924
	6	0.000401	P35	492.926	0.791597	622.6983	2	4	7	2	7
	8						347.634	12935.5	75.2778	8.33765	9.47291
	7	0.000516	P36	506.952	0.792418	639.7534	6	8	1	2	2
	8						349.351	13359.1	77.3605	8.34521	
	8	0.000301	P37	520.978	0.793199	656.8059	3	2	4	3	9.48589
	8						13782.6	79.4432	8.35242		
	9	0.000189	P38	535.004	0.793945	673.8557	350.978	6	8	1	9.49823
	9						352.521		81.5260		9.50997
	0	0.000131	P39	549.03	0.794656	690.9026	6	14206.2	1	8.3593	8

[0047] 步骤S2、将所述沥青作为固液两相系统，并基于固液平衡确定出固相摩尔含量及其导数。

[0048] 在本申请实施例中，所述固液平衡具体包括相平衡、质量平衡和归一化。

[0049] 在本申请实施例中，所述相平衡具体通过如下公式表示：

$$[0050] \quad f_i^s = f_i^l$$

[0051] 式中， f_i^s 表示组分i在固相中的逸度， f_i^l 表示组分i在液相中的逸度。

[0052] 其中 γ_i^s 、 γ_i^l 分别是组分i在固相、液相中的活度系数， x_i^s 、 x_i^l 分别是组分i在固相、液相中的物质的量组分， $f_{i,pure}^s$ 、 $f_{i,pure}^l$ 分别是纯固体和纯液体的逸度，他们之间有如下关系：

$$[0053] \quad \ln \frac{f_{i,pure}^l}{f_{i,pure}^s} = \frac{\Delta H_i}{RT_i} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) - \frac{\Delta C_i}{R} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) + \frac{\Delta C_i}{R} \ln \frac{T_i}{T}$$

[0054] 式中， ΔH_i 为组分i的熔化焓， T_i 为组分i的熔点， ΔC_i 为组分i的固液相热容差，R为普适气体常数，T为实际温度，这个等式省略了外界压强的那一部分，在沥青的运用环境下这个影响可以忽略不计。

[0055] 活度系数 γ_i^s 、 γ_i^l 采用以下公式进行计算。

$$[0056] \quad \ln \gamma_i^s = \frac{V_i^s (\delta_m^s - \delta_i^s)^2}{RT}$$

$$[0057] \quad \ln \gamma_i^l = \frac{V_i^l (\delta_m^l - \delta_i^l)^2}{RT}$$

[0058] 其中,

$$[0059] \quad \delta_m^s = \sum \phi_i^s \delta_i^s$$

$$[0060] \quad \delta_m^l = \sum \phi_i^l \delta_i^l$$

$$[0061] \quad \phi_i^s = x_i^s V_i^s (\sum x_i^s V_i^s)^{-1}$$

$$[0062] \quad \phi_i^l = x_i^l V_i^l (\sum x_i^l V_i^l)^{-1}$$

[0063] 式中, δ_i^s, δ_i^l 表示组分 i 的固、液相溶解度参数, δ_m^s, δ_m^l 表示固、液相混合物的平均溶解度参数, ϕ_i^s, ϕ_i^l 表示组分 i 在固、液相的体积分数, V_i^s, V_i^l 表示组分 i 的固、液相摩尔体积。

[0064] 在本申请实施例中, 所述质量平衡和归一化具体通过如下公式表示:

$$[0065] \quad L+S=1$$

$$[0066] \quad Lx_i^l + Sx_i^s = Z_i$$

$$[0067] \quad \sum x_i^l = \sum x_i^s = \sum Z_i = 1$$

[0068] 式中, S、L 分别为平衡时固相、液相中的摩尔的量, Z_i 为组分 i 的摩尔含量, x_i^s, x_i^l 分别是组分 i 在固相、液相中的物质的量组分。

[0069] 固液平衡常数的定义为,

$$[0070] \quad K_i^{SL} = \frac{x_i^s}{x_i^l}$$

[0071] 所以上等式可以变形为,

$$[0072] \quad F(S) = \sum x_i^s - \sum x_i^l = \sum \frac{Z_i(K_i^{SL} - 1)}{1 + S(K_i^{SL} - 1)} = 0$$

[0073] 在本申请实施例中, 具体通过如下公式确定出固相摩尔含量:

$$[0074] \quad F(S) = \sum x_i^s - \sum x_i^l = \sum \frac{Z_i(K_i^{SL} - 1)}{1 + S(K_i^{SL} - 1)} = 0$$

[0075] 式中, $F(S)$ 为固相摩尔含量, K_i^{SL} 为固液平衡常数, S 为公式的零点, 也即平衡时固相的摩尔含量, Z_i 为组分 i 的摩尔含量, x_i^s, x_i^l 分别是组分 i 在固相、液相中的物质的量组分。

[0076] 步骤 S3、基于所述固相摩尔含量及其导数确定出析蜡量。

[0077] 在本申请实施例中, 所述步骤 S3 具体包括以下分步骤:

[0078] S31、确定固相摩尔含量 $F(S)$ 和固液平衡常数 K_i^{SL} 的初值;

[0079] S32、根据所述固相摩尔含量 $F(S)$ 和固液平衡常数 K_i^{SL} 的初值建立牛顿迭代式, 计

算下一次迭代的相关参数,直到 $|F(S)| \leq 1 \times 10^{-5}$ 时停止迭代,且此时的零点的值为固相的摩尔分数;

[0080] S33、基于所述固相的摩尔分数确定当前温度下的析蜡量。

[0081] 具体的,步骤一,确定S和 K_i^{SL} 的初值。S初值取为0.5, K_i^{SL} 由上述可得到其计算公式如下。

$$[0082] \quad K_i^{SL} = \text{EXP} \left\{ \frac{\Delta H_i}{RT_i} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) - \frac{\Delta C_i}{R} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) + \frac{\Delta C_i}{R} \ln \frac{T_i}{T} + \frac{V_i}{RT} [(\delta_m^l - \delta_i^l)^2 - (\delta_m^s - \delta_i^s)^2] \right\}$$

[0083] 在取初值时,假设 $\gamma_i^s = \gamma_i^l = 1$,即 K_i^{SL} 的初值为:

$$[0084] \quad K_i^{SL(0)} = \text{EXP} \left[\frac{\Delta H_i}{RT_i} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) - \frac{\Delta C_i}{R} \left(\frac{T_i}{T} - 1 \right) + \frac{\Delta C_i}{R} \ln \frac{T_i}{T} \right]$$

[0085] 步骤二:确定迭代公式,对F(S)求导可得:

$$[0086] \quad F'(S) = - \sum \frac{Z_i (K_i^{SL} - 1)^2}{1 + S(K_i^{SL} - 1)^2}$$

[0087] 根据牛顿迭代公式,则有

$$[0088] \quad S^{i+1} = S^i - \frac{F(S^i)}{F'(S^i)}$$

[0089] 其中 S^{i+1} 为第i+1次迭代的S值,按照此迭代法,重新计算S值。

[0090] 步骤三:根据重新得到的S值,根据下式计算 x_i^s 、 x_i^l 。

$$[0091] \quad x_i^s = \frac{Z_i K_i^{SL}}{1 + S(K_i^{SL} - 1)}$$

$$[0092] \quad x_i^l = \frac{Z_i}{1 + S(K_i^{SL} - 1)}$$

[0093] 步骤四:由 x_i^s 、 x_i^l 计算 δ_m^s 、 δ_m^l ,并由 δ_m^s 、 δ_m^l 更新 K_i^{SL} 、F(S)和F'(S)的值。

[0094] 步骤五:检查是否 $|F(S)| \leq 1 \times 10^{-5}$,若满足条件,则此时的S值即为所求固相的摩尔分数,若不满足条件,则重复步骤(二)(三)(四)直至满足条件。

[0095] 步骤S4、基于不同温度和其对应的析蜡量建立析出曲线。

[0096] 基于上述具体应用场景,F(S)和其导数F'(S)的迭代结果如下表4:

[0097] 表4

迭代次数	S	FS	FS'
1	0.5	0.266624	-1.2214
2	0.718294	-0.00743	-1.55811
3	0.713528	-7.4E-05	-1.52837
4	0.71348	-3.6E-08	-1.52808
5	0.71348	-7.3E-11	-1.52808
6	0.71348	-1.8E-13	-1.52808

[0098]

[0099]	7	0.71348	-3.5E-16	-1.52808
	8	0.71348	-1.7E-17	-1.52808
	9	0.71348	-2.3E-17	-1.52808
	10	0.71348	-2.3E-17	-1.52808
	11	0.71348	-2.3E-17	-1.52808
	12	0.71348	-2.3E-17	-1.52808
	13	0.71348	-2.3E-17	-1.52808

[0100] 字母E表示10的次方,如-2.3E-17表示 -2.3×10^{-17} 。在该温度下固相的摩尔含量为0.71348,即在该温度下固相的摩尔含量为0.71348,再将该结果乘以正构烷烃组分占固相百分数的总和0.043547,即可得到蜡析出的量为0.03107。通过改变温度值,即可求得该沥青在任意温度下的蜡析出量,最终的蜡析出曲线如图2所示,由计算可知,沥青A的蜡析出温度为80°C。

[0101] 本领域的普通技术人员将会意识到,这里所述的实施例是为了帮助读者理解本发明的原理,应被理解为本发明的保护范围并不局限于这样的特别陈述和实施例。本领域的普通技术人员可以根据本发明公开的这些技术启示做出各种不脱离本发明实质的其它各种具体变形和组合,这些变形和组合仍然在本发明的保护范围内。

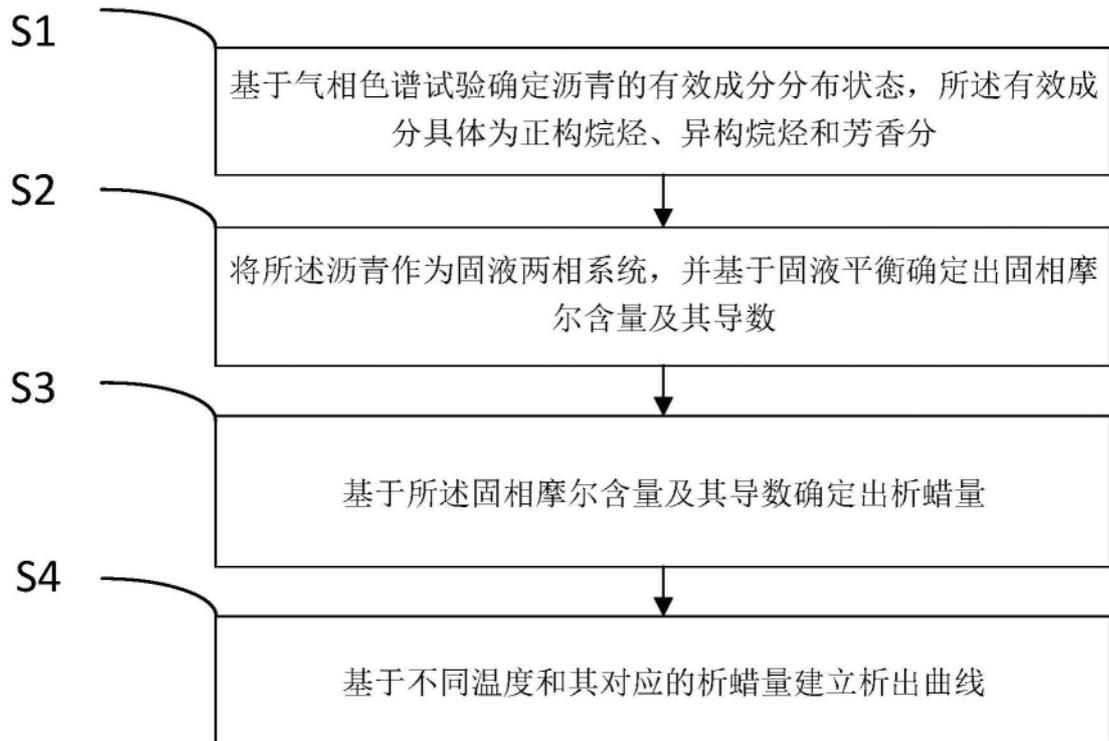


图1

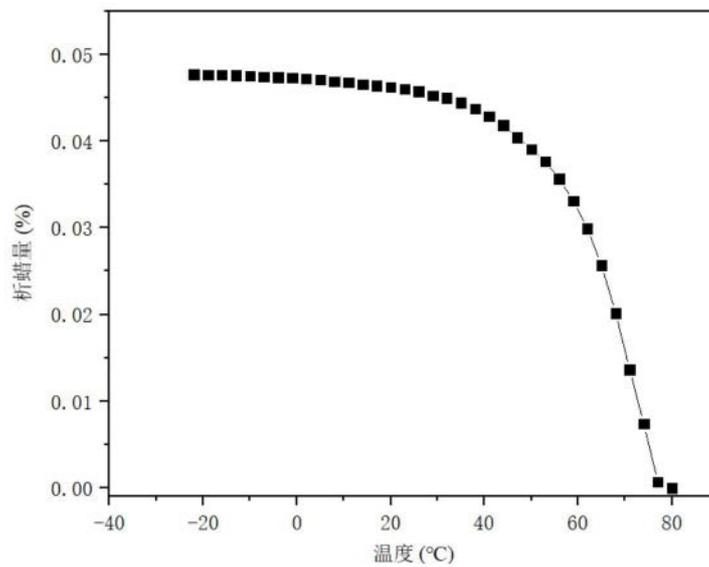


图2