

《馏分油性质的快速测定 低频氢谱核磁
共振波谱法》

编制说明

（征求意见稿）

编制单位：北京泓泰天诚科技有限公司

编制日期：2022 年 4 月

《馏分油性质的快速测定 低频氢谱核磁共振波谱法》

编制说明

一. 任务来源

1. 1. 任务来源

本文件由中国化工学会提出并归口，由北京泓泰天诚科技有限公司牵头制定。

1. 2. 标准制定的目的和意义

我国炼厂主要采用色谱、质谱等传统的石油产品数据分析测定方法，具有周期长、成本高、有污染等特点，而基于低场核磁共振技术的快速分析方法可显著缩短分析周期、提高分析频次、减少耗材及采样量、提升 HSE。目前以中石油和中石化部分企业为代表的炼厂，通过采用低场核磁共振分析技术实现馏分油的快速评价，有力地支撑了加工排产方案的优化调整。相关炼厂发布了各自的低场核磁应用企业标准，但各炼厂间标准不一，整个分析操作规程的规范性亟需统一。众多的实践经验表明，基于低场核磁共振分析技术的物性快速评价过程涉及若干关键步骤和处理算法，使用者需按照操作规程规范操作，才能准确高效地建立物性关系和分析模型，实现馏分油的快速分析，非规范操作易产生较大偏差。

因此，建立基于低场核磁共振波谱法快速测定馏分油性质的标准方法，用来指导和规范炼厂馏分油性质的快速评价过程，提高我国炼厂的国际竞争力，就显得十分必要。同时，该标准的制定，将填补国内馏分油性质快速分析方面的行业标准空白，具有重要的科学意义和应用价值。

二. 起草工作简要过程

按照中国化工学会标准制修订程序的要求，《馏分油性质的快速测定 低频氢谱核磁共振波谱法》团体标准的编制完成了以下工作：

2. 1. 资料的收集

在标准编制过程中，起草工作组收集了以下资料：

- GB/T 1884 原油和液体石油产品密度实验室测定法
- GB/T 1914 化学分析滤纸
- GB/T 3358.1 统计学词汇及符号 第 1 部分：一般统计术语与用于概率的术语
- GB/T 4756 石油液体手工取样法
- GB/T 6682-2008 分析实验室用水规格和试验方法
- GB/T 8322 分子吸收光谱法 术语
- GB 10070-88 城市区域环境振动标准

- GB/T 29858-2013 分子光谱多元校正定量分析通则
- GB/T 261-2008 闪点的测定 宾斯基-马丁闭口杯法
- GBT 265-1988 石油产品运动粘度测定法和动力粘度计算法
- GB/T 510-2018 石油产品凝点测定法
- GB/T 1884-2000 原油和液体石油产品密度实验室测定法
- GB/T 5487-2015 汽油辛烷值的测定 研究法
- GB/T 6536-2010 石油产品常压蒸馏特性测定法
- GB/T 6683.1-2021 石油及相关产品 测量方法与结果精密度 第 1 部分：试验方法精密度数据的确定
- GBT 11139-1989 馏分燃料十六烷指数计算法
- GB/T 17040-2019 石油和石油产品中硫含量的测定能量色散 X 射线荧光光谱法
- GB/T 28768-2012 车用汽油烃类组成和含氧化合物的测定 多维气相色谱法
- 王惠文. 偏最小二乘回归方法及其应用. 北京：国防工业出版社. 1999.
- Edwards J. D.. A Review of Applications of NMR Spectroscopy in the Petroleum Industry. Spectroscopic Analysis of Petroleum Products and Lubricants. ASTM International, USA, 2011.
- Martin B., Philippe B., Ernö P.. Structure Determination of Organic Compounds (Fourth edition). Springer, 2009.

2.2. 标准的起草

1. 2021 年 6 月至 2021 年 11 月，项目组完成标准的前期预研工作，联系核磁应用油品分析的相关企业、科研单位以及相关分析仪器公司等，基于低频氢谱核磁共振波谱法对馏分油性质的快速测定标准化的有关问题进行调研和分析。

2. 2021 年 12 月，召开标准启动会，成立起草工作组，正式启动《馏分油性质的快速测定 低频氢谱核磁共振波谱法》的团体标准编制工作，根据启动会企业代表意见，修改完成《馏分油性质的快速测定 低频氢谱核磁共振波谱法》工作组初稿。

3. 2021 年 10 月至 2022 年 3 月，工作组成员根据启动会讨论内容和要求，开展验证试验，按照标准指标项要求，开展了产品指标数据验证试验，并在此基础上统一各方意见，形成标准工作组第二稿。

4. 2022 年 3 月至 2022 年 5 月，组织专家征求标准修改意见，工作组展开修改事宜。

2.3. 主要参加单位和工作组成员

标准起草单位为北京泓泰天诚科技有限公司、中国石油化工股份有限公司九江分公司、中国石油化工股份有限公司济南分公司、中国石油化工股份有限公司洛阳分公司、中国石油天然气股份有限公司长庆分公司、中国石油化工股份有限公司大连石油化工研究院。

具体情况如表 1 所示。

表 1 主要参加单位和工作组成员表

成员姓名	所在单位	专业方向	邮箱
谢道雄	中国石油化工股份有限公司九江分公司		

赵士鉴	北京泓泰天诚科技有限公司		
胡凡	北京泓泰天诚科技有限公司		
章连荣	中国石油化工股份有限公司九江分公司		
王琤	中国石油化工股份有限公司九江分公司		
侯宗玉	中国石油化工股份有限公司济南分公司		
李玉萍	中国石油化工股份有限公司洛阳分公司		
王燕舞	中国石油天然气股份有限公司长庆石化分公司		
杨涛	中国石油化工股份有限公司大连石油化工研究院		
肖丰斌	北京泓泰天诚科技有限公司		

三. 编写原则和确定标准主要内容的依据

3.1. 标准的编写原则

本文件编制遵循经济社会发展需求原则、技术先进和经济合理原则、适应贸易全球化需求原则、维护公众利益原则、协商一致原则、广泛参与和公开透明原则。

本文件的编制结合了炼厂馏分油分析技术和手段的调研情况，在借鉴已应用核磁共振分析技术案例的基础上，提出了基于低频氢谱核磁共振波谱法对馏分油性质的快速测定的标准方法。

3.2. 确定标准主要内容的依据

1. 检测对象的确定

中控物料性质是供应链优化与生产经营管理的重要基础数据，其时效性、准确性、完整性将直接关系到企业生产经营效益。我国是原油进口大国，所加工的原油品种多、性质复杂，采用传统实验测量方法对原油中控馏分的性质进行分析，所需分析仪器较多、分析时间较长、成本较高，很难及时满足生产加工、经营决策的需求。因此，如何快速、准确、全面掌握馏分油的性质，从而为制定最优的生产加工方案以及确保装置稳定高效运行提供数据支持是炼厂必须下大功夫解决的问题。

因此，本方法主要的分析对象为馏分油。

2. 试验方法的确定

低频氢谱核磁共振波谱法是将化学计量学方法与传统分析方法相结合，针对馏分油建立模型并用模型预测未知样品的性质来实现馏分物性快速测定的一种方法，统称为核磁共振波谱法（以下简称 NMR）。该方法是一种快速分析技术，具有样品用量少、分析速度快，可以用于测定馏分油的密度、馏程、研究法辛烷值、正构烷烃、异构烷烃、烯烃、环烷烃、芳烃、硫含量、闪点、凝点、十六烷指数和运动粘度等性质。

综合以上，本文件计划采用低频氢谱核磁共振波谱法（NMR），对馏分油的物性测定技术路线进行考察，并确定方法的定量范围和最低检测限。

3. 检测限的设定

本文件检测限的设定是综合行业实际情况和检测方法的检测限来设定。馏分油物性测定检

测限为 0.01。

四. 技术经济分析论证和预期的经济效益

本文件是在大量样品搜集、实验验证及参考相关国外标准的基础上建立的,方法科学可靠、精密度高、检测限低、适用范围广,对评价产品质量和规范市场具重大意义。有利于促进了本行业的技术进步,提高了相关检测水平,增强了国际市场竞争力。

五. 采用国际标准和国外先进标准情况及水平对比

未检索到国外相关标准。

六. 贯彻实施标准的措施和建议

标准正式发布后,将在有关标准监管部门指导下,拟采取借助网站新闻、行业展会、专业期刊等方式对本文件进行推广宣传,并对标准每一部分进行详细解释说明,形成标准宣传实施培训材料。

七. 其它应予以说明的事项

无。

附录 A 馏分油密度试验方法精密度数据确定实例

A.1 统计试验说明

按照核磁共振统一的试验方法执行采集分析。

按照 GB/T 6683-1997 要求, 设计参加的实验室数量有 5 个, 代表性样品有 9 个。

本编制说明以汽油馏分油的 20℃ 密度为例, 确定其精密度数据。

A.2 密度测定结果和统计表

实验室 A 代表中国石油化工股份有限公司济南分公司, B 代表中国石油天然气股份有限公司长庆分公司, C 代表中国石油化工股份有限公司洛阳分公司, D 代表中国石油化工股份有限公司大连石油化工研究院, E 代表中国石油化工股份有限公司九江分公司。

每个样品有两个重复试验结果。原始数据可见表 A.1, 每个样品在各实验室中两个重复试验结果均值见表 A.2。

表 A.1

实验室	样品								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	807.3	798.3	821.0	817.5	809.1	815.3	805.6	803.2	812.7
	808.0	798.4	821.8	817.5	809.3	815.6	806.4	803.3	813.0
B	808.3	799.3	822.5	818.5	809.9	816.7	806.9	804.1	813.8
	808.6	799.3	822.4	818.5	810.2	816.5	806.5	804.7	813.6
C	807.3	798.2	820.7	817.5	809.0	815.0	806.0	803.6	812.7
	807.4	798.3	820.9	817.3	808.8	815.0	805.5	802.8	812.9
D	807.9	798.5	821.7	818.0	809.2	816.0	806.2	804.0	813.4
	807.5	798.4	821.9	818.1	809.2	816.2	806.2	803.3	812.9
E	808.3	798.9	821.6	818.1	809.4	816.2	806.5	803.7	813.2
	807.6	799.2	822.0	818.3	809.6	816.1	806.4	804.4	813.2

表 A.2

实验室	样品								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	807.7	798.4	821.4	817.5	809.2	815.5	806.0	803.3	812.9
B	808.5	799.3	822.5	818.5	810.1	816.6	806.7	804.4	813.7
C	807.4	798.3	820.8	817.4	808.9	815.0	805.8	803.2	812.8
D	807.7	798.5	821.8	818.1	809.2	816.1	806.2	803.7	813.2
E	808.0	799.1	821.8	818.2	809.5	816.2	806.5	804.1	813.2

A.3 界外值的检验

A.3.1 样品重复性的检验

对全部样品在实验室的重复结果, 计算两个重复样结果的差, 将最大差值的平方除以全部

差值的平方和，按照公式：

$$C = \frac{e_{max}^2}{\sum_{i=1}^5 e_i^2}$$

将计算的 C 值与 1%显著水平的科克伦(Cochran)规则的相应值比较。见下表 A.3

表 A.3

实验室	样品								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	0.7	0.1	0.8	0.0	0.2	0.3	0.8	0.1	0.3
B	0.3	0.0	0.1	0.0	0.3	0.2	0.4	0.6	0.2
C	0.1	0.1	0.2	0.2	0.2	0.0	0.5	0.8	0.2
D	0.4	0.1	0.2	0.1	0.0	0.2	0.0	0.7	0.5
E	0.7	0.3	0.4	0.2	0.2	0.1	0.1	0.7	0.0

以样品 1 的测定结果计算 C 值：

$$C = \frac{e_{max}^2}{\sum_{i=1}^5 e_i^2} = \frac{0.7^2}{0.7^2 + 0.3^2 + 0.1^2 + 0.4^2 + 0.7^2} = 0.395$$

表 A.1 的实验室数 n=5，自由度v=1，查 Cochran 表对应的临界值为 0.7544，C 值 0.395 < 0.7544，故最大差值 1.0 不是界外值。根据该过程逐一计算见下表 A.4，样品均不是界外值。若某一样品存在界外值，可剔除该样品，用剩余样品进行相同计算步骤。

表 A.4

样品	1	2	3	4	5	6	7	8	9
C 值	0.395	0.750	0.719	0.444	0.429	0.500	0.604	0.322	0.595

A.3.2 样品再现性的检验

利用霍金斯(Hawkins)法检验某一样品或所有样品是否存在界外值。

计算样品在各实验室重复结果的平均值及总平均值，然后计算样品在各实验室的偏差绝对值。见表 A.5。

表 A.5

实验室	偏差								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	0.2	0.3	0.3	0.4	0.2	0.4	0.2	0.5	0.3
B	0.6	0.6	0.8	0.6	0.7	0.7	0.5	0.7	0.6
C	0.5	0.4	0.9	0.5	0.5	0.9	0.5	0.5	0.3
D	0.1	0.2	0.1	0.1	0.2	0.2	0.0	0.1	0.0
E	0.1	0.4	0.1	0.3	0.1	0.3	0.2	0.3	0.1

以样品 1 的偏差计算检验比值 B*：

$$B_1^* = \frac{0.6}{\sqrt{0.2^2 + 0.6^2 + 0.5^2 + 0.1^2 + 0.1^2}} = 0.765$$

表 A.5 的实验室数 $n=5$ ，自由度 $v=0$ ，查 Hawkins 表对应的临界值为 0.8439，检验比值 $0.765 < 0.8439$ ，故最大差值 0.6 不是界外值。根据该过程逐一计算见下表 A.6，所有样品均不是界外值。若某一样品存在界外值，可剔除该样品，用剩余样品进行相同计算步骤。

表 A.6

样品	1	2	3	4	5	6	7	8	9
B*值	0.765	0.665	0.701	0.608	0.781	0.681	0.645	0.668	0.779

A.4 标准偏差计算

A.4.1 重复标准偏差 d

样品的重复标准偏差 d 计算，样品 1 的 d_1 ：

$$d_1 = \sqrt{\frac{0.7^2 + 0.3^2 + 0.1^2 + 0.4^2 + 0.7^2}{2 * 5}} = 0.352$$

A.4.2 再现标准偏差 D

样品的再现标准偏差 d 计算，样品 1 的 D_1 ：

$$D_1 = \sqrt{\frac{807.7^2 + 808.5^2 + 807.4^2 + 807.7^2 + 808.0^2 - (807.7 + 808.5 + 807.4 + 807.7 + 808.0)^2 / 5}{5 - 1} + \frac{0.352^2}{2}} = 0.481$$

同理可对样品 2 到样品 9 进行相同的计算，分别得到标准偏差和平均值，见表 A.7。

表 A.7

样品号	2	8	7	1	5	9	6	4	3
总平均值	798.7	803.7	806.2	807.8	809.4	813.1	815.9	817.9	821.7
重复标准偏差 d	0.110	0.446	0.326	0.352	0.145	0.205	0.134	0.095	0.298
再现标准偏差 D	0.472	0.605	0.437	0.481	0.447	0.388	0.639	0.473	0.642

A.5 标准偏差计算

经分析可知，样品平均值与标准偏差并无线性关系，故表 A.7 的结果是稳定性方差，此表的样品数 S 为 9，总的标准偏差 d_t ：

$$d_t = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^8 d_i^2}{S}}$$

$$d_t = \sqrt{\frac{0.352^2 + 0.110^2 + 0.298^2 + 0.095^2 + 0.145^2 + 0.134^2 + 0.326^2 + 0.446^2 + 0.205^2}{9}} = 0.262$$

$$\text{重复性 } d_1 = 2.8 \times d_t = 0.735$$

$$D_t = \sqrt{\frac{0.472^2 + 0.605^2 + 0.437^2 + 0.481^2 + 0.447^2 + 0.388^2 + 0.639^2 + 0.473^2 + 0.642^2}{9}} = 0.517$$

$$\text{再现性 } D_1 = 2.8 \times D_t = 1.448$$

综上，馏分油的其他物性按照 GB/T 6683-1997 中处理过程进行检验和计算，此处不多叙述。

附录 B 参与试验的实验室数据

A.1 馏分油性质的快速测定试验

按照标准中给定的条件开展验证试验，得到以下馏分油谱图。以下不同炼厂的试验样品均为同一批馏分油样品，进行重复性实验的样品均为同一样品的两个平行样。

A.2 馏分油性质的快速测定定量试验

按照标准中给定的条件开展验证试验，采用不同物性的模型对样品进行预测。

A.3 汽油馏分模型预测数据

实验室 A 代表中国石油化工股份有限公司济南分公司，B 代表中国石油天然气股份有限公司长庆分公司，C 代表中国石油化工股份有限公司洛阳分公司，D 代表中国石油化工股份有限公司大连石油化工研究院，E 代表中国石油化工股份有限公司九江分公司。

实验室	汽油馏分样品								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20°C密度(kg/m ³)									
A	807.3	798.3	821.0	817.5	809.1	815.3	805.6	803.2	812.7
	808.0	798.4	821.8	817.5	809.3	815.6	806.4	803.3	813.0
B	808.3	799.3	822.5	818.5	809.9	816.7	806.9	804.1	813.8
	808.6	799.3	822.4	818.5	810.2	816.5	806.5	804.7	813.6
C	807.3	798.2	820.7	817.5	809.0	815.0	806.0	803.6	812.7
	807.4	798.3	820.9	817.3	808.8	815.0	805.5	802.8	812.9
D	807.9	798.5	821.7	818.0	809.2	816.0	806.2	804.0	813.4
	807.5	798.4	821.9	818.1	809.2	816.2	806.2	803.3	812.9
E	808.3	798.9	821.6	818.1	809.4	816.2	806.5	803.7	813.2
	807.6	799.2	822.0	818.3	809.6	816.1	806.4	804.4	813.2
研究法辛烷值									
A	97.3	96.9	98.2	99.2	98.4	98.1	97.8	98.6	98.1
	97.6	97.3	98.6	99.5	98.4	98.3	98.2	99.2	98.3
B	98.0	97.3	98.6	99.9	98.8	98.6	98.4	99.4	98.9
	97.9	97.4	98.6	99.8	99.0	99.0	98.4	99.0	98.8
C	97.2	96.7	98.4	99.0	98.1	98.5	97.8	98.9	98.4
	97.4	97.1	98.1	99.2	98.3	98.4	97.8	98.7	97.9
D	97.4	97.0	98.8	99.7	98.4	98.3	98.3	99.1	98.7
	97.5	97.2	98.7	99.3	98.8	98.1	98.3	99.2	98.2
E	97.8	97.4	98.6	99.9	98.9	98.6	98.4	99.0	98.7

	97.7	97.2	98.9	99.6	99.0	98.6	98.3	99.0	98.7
正构烷烃含量(体积分数)/%									
A	3.5	3.9	4.4	7.2	6.9	5.3	7.6	6.2	5.8
	4.0	4.0	4.7	7.3	7.1	5.8	7.7	6.7	6.3
B	4.2	4.3	5.0	7.7	7.6	5.8	8.3	6.6	6.5
	4.1	4.3	4.8	7.9	7.3	5.9	8.0	6.8	6.3
C	3.8	3.6	4.5	7.5	7.2	5.2	7.8	6.0	5.8
	3.9	4.0	4.2	6.9	6.7	5.4	7.9	6.2	5.6
D	3.6	4.1	4.5	7.3	7.5	5.8	7.6	6.7	6.4
	3.8	4.4	4.8	7.5	7.1	5.6	7.6	6.5	6.4
E	4.2	4.6	4.9	7.8	7.4	5.7	7.9	6.7	6.3
	4.3	4.3	5.1	7.6	7.4	5.6	8.0	6.5	6.3
异构烷烃含量(体积分数)/%									
A	12.4	16.2	13.8	21.4	19.8	17.5	14.3	15.9	18.1
	12.4	16.7	13.9	21.7	20.0	17.8	14.5	16.2	18.7
B	12.9	16.9	14.6	22.1	20.2	18.2	14.9	16.3	18.5
	12.8	16.6	14.6	21.9	20.6	18.3	14.9	16.8	18.9
C	12.0	16.5	14.2	21.0	19.5	17.6	14.4	16.3	17.9
	12.3	15.9	13.6	21.6	19.6	17.8	14.3	15.6	17.9
D	12.6	16.6	13.9	21.9	19.9	17.6	14.6	16.0	18.3
	12.9	16.5	13.9	21.9	20.1	17.7	14.7	16.0	18.1
E	13.1	16.6	14.3	21.9	20.3	17.8	14.8	16.2	18.6
	12.7	16.7	14.1	22.0	20.5	17.7	14.6	16.2	18.9
烯烃含量(体积分数)/%									
A	1.2	0.8	1.9	2.9	2.5	2.0	1.6	2.0	1.6
	1.7	0.9	2.1	3.1	3.0	2.6	2.2	2.2	1.8
B	1.7	1.6	2.4	3.6	3.1	2.7	2.4	2.7	2.1
	1.6	1.6	2.2	3.5	3.1	2.4	2.2	2.4	2.3
C	1.2	0.5	1.6	3.0	2.2	1.7	1.7	2.2	1.3
	1.4	1.1	1.7	2.5	2.6	1.7	1.8	2.1	1.6
D	1.6	1.3	2.1	3.2	2.8	2.5	1.9	2.5	2.1
	1.6	1.0	2.2	3.3	2.8	2.6	2.1	2.2	1.8
E	1.8	1.2	2.7	3.4	3.3	2.7	2.1	2.5	1.9
	1.9	1.5	2.2	3.6	2.9	2.4	1.9	2.6	2.0
环烷烃含量(体积分数)/%									
A	6.3	5.2	3.9	1.2	2.8	4.4	6.0	1.9	3.7
	6.4	5.5	4.3	1.7	3.4	4.6	6.2	2.3	4.2
B	6.9	6.1	4.2	2.0	3.4	5.2	6.4	2.6	4.4
	6.6	5.8	4.8	1.9	3.1	5.2	6.4	2.5	4.5
C	6.4	4.9	4.3	1.0	3.2	4.3	6.0	1.8	4.0
	6.4	5.1	4.1	1.3	3.0	4.8	6.1	2.1	4.0
D	6.5	5.2	4.1	1.5	3.0	4.6	6.3	2.4	4.1

	6.3	5.5	4.2	1.7	3.1	4.5	6.1	2.3	4.2
E	6.7	5.9	4.6	1.6	3.1	4.8	6.3	2.3	4.4
	7.1	5.4	4.6	1.7	3.3	5.1	6.2	2.3	4.4
芳烃含量(体积分数)/%									
A	71.6	63.8	65.2	68.7	75.8	72.0	73.0	69.7	66.5
	71.9	64.1	65.3	69.2	76.2	72.4	73.4	69.9	67.0
B	72.3	64.6	65.8	69.2	76.2	72.8	73.6	70.4	67.3
	72.0	64.6	66.0	69.5	76.4	72.7	73.5	70.1	67.3
C	71.5	64.2	65.2	68.6	75.7	71.9	72.9	69.5	66.6
	71.5	63.7	65.5	68.3	75.6	71.7	73.1	69.6	66.4
D	72.1	64.3	65.7	69.2	76.2	72.6	73.3	69.7	66.6
	72.0	64.0	65.4	68.8	76.2	72.1	73.1	70.2	66.5
E	71.8	64.5	65.9	69.2	76.4	72.8	73.4	70.1	67.2
	71.9	64.1	65.7	69.2	76.5	72.6	73.2	70.3	67.1
初馏点 (°C)									
A	63.5	62.6	65.1	64.8	66.4	61.0	67.3	68.1	69.3
	64.5	63.1	66.5	66.1	67.8	61.5	68.8	68.6	70.4
B	64.6	64.3	66.3	66.3	68.0	62.8	68.8	69.6	71.0
	63.3	62.7	64.7	64.5	66.6	61.2	67.1	68.4	69.2
C	63.2	62.5	65.2	64.7	66.2	60.6	67.3	68.1	69.4
	62.6	61.9	64.0	64.2	65.4	60.0	66.5	67.0	68.4
D	64.8	62.9	65.5	65.4	66.7	61.9	68.3	68.9	69.7
	64.8	64.1	66.8	66.6	68.4	62.4	69.1	69.9	70.8
E	65.1	63.8	66.2	66.6	68.0	61.8	68.6	69.1	70.5
	63.9	62.6	65.1	64.6	66.6	60.6	67.0	67.8	69.6
10%馏出温度 (°C)									
A	92.1	88.3	86.3	89.7	85.9	91.7	94.8	87.1	90.6
	93.2	89.1	86.9	90.8	87.0	92.8	95.3	88.5	91.8
B	94.1	89.4	87.3	90.8	87.0	93.6	96.1	88.6	92.2
	92.2	88.2	85.9	89.4	85.6	92.1	94.4	86.8	90.4
C	91.6	88.2	85.8	89.5	85.7	91.8	94.4	86.6	90.5
	91.0	87.4	85.3	88.8	84.9	91.0	94.2	86.4	89.8
D	92.4	88.5	86.5	90.5	86.4	91.9	95.6	87.4	90.8
	93.3	89.9	87.8	91.8	88.1	92.6	96.2	88.4	91.6
E	93.5	89.8	87.2	91.3	87.3	93.1	96.5	88.0	92.4
	92.0	88.3	86.2	89.8	85.5	91.4	94.4	87.4	90.4
50%馏出温度 (°C)									
A	118.7	117.2	121.5	117.6	119.6	126.5	121.3	123.1	120.4
	120.0	118.6	122.5	118.5	120.8	127.4	122.5	123.7	121.4
B	119.8	118.4	123.1	119.1	121.0	128.1	122.6	124.8	121.6
	118.8	117.6	121.4	117.7	119.7	126.2	121.1	122.9	120.4
C	118.2	116.8	121.0	117.7	119.5	125.9	121.0	122.6	120.2

	117.8	116.4	121.0	116.5	118.8	125.6	120.7	122.3	119.8
D	119.6	117.9	121.8	118.4	120.5	126.7	122.3	123.4	121.0
	119.7	118.9	122.7	119.0	121.8	127.5	123.0	125.2	121.7
E	119.9	118.6	122.8	118.9	121.1	127.6	122.5	124.7	121.9
	118.3	117.5	121.9	117.6	120.0	126.1	121.5	122.9	120.5
90%馏出温度 (°C)									
A	157.1	159.0	156.6	158.5	154.9	158.3	152.7	157.5	156.3
	157.9	159.9	158.1	159.0	156.3	159.5	153.9	158.1	156.8
B	158.4	160.6	158.1	159.8	156.5	159.5	154.4	159.1	157.7
	156.8	159.5	156.7	158.6	155.3	158.8	152.8	157.9	156.2
C	156.7	158.5	156.3	158.0	154.7	158.0	152.3	157.0	156.0
	156.4	158.0	156.1	157.6	153.7	157.5	151.6	156.5	155.5
D	157.4	159.3	157.0	158.6	156.1	158.9	153.5	158.5	156.9
	158.5	160.7	158.3	160.0	155.9	160.3	153.6	159.2	157.4
E	158.9	160.7	157.7	159.9	156.7	159.4	154.0	158.5	157.6
	156.8	159.1	156.1	158.5	155.2	158.4	152.3	157.1	155.9
终馏点 (°C)									
A	173.2	184.6	190.5	195.7	188.6	200.7	198.9	179.4	193.7
	175.1	186.0	192.6	197.3	190.0	202.2	201.0	180.9	195.7
B	174.5	185.7	192.0	197.0	189.4	201.7	200.1	180.7	195.0
	172.4	184.1	189.7	195.2	188.0	199.6	198.6	178.5	193.1
C	171.8	183.2	189.2	194.0	187.4	199.2	197.5	178.2	192.0
	172.1	183.2	189.2	194.7	187.5	199.5	197.8	177.9	192.2
D	174.1	185.6	191.5	196.2	189.0	201.6	199.0	179.9	194.7
	174.8	185.8	191.2	196.5	189.6	201.9	200.1	179.9	195.5
E	174.4	185.9	192.0	197.5	189.5	202.4	199.7	180.2	195.1
	171.9	184.0	189.6	195.0	187.9	199.5	198.3	178.3	192.6

A. 4 煤油馏分模型预测数据

实验室	煤油馏分样品								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20°C密度(kg/m ³)									
A	831.1	827.6	841.3	832.7	836.2	838.0	833.5	829.2	835.1
	831.2	828.2	841.9	832.9	836.9	838.0	834.2	830.2	835.3
B	832.7	828.9	842.8	834.2	837.4	839.5	834.4	830.3	836.2
	832.1	829.2	842.6	833.6	837.3	839.5	834.4	830.3	836.1
C	830.8	827.7	840.9	832.6	836.1	838.2	833.8	829.6	834.7
	831.0	827.9	841.2	832.7	835.8	837.8	833.8	829.3	835.2
D	831.7	828.3	842.2	833.4	836.6	838.5	834.3	829.9	835.7
	831.5	828.0	841.7	833.5	836.7	838.3	833.6	829.9	835.3
E	831.6	828.1	842.3	833.0	837.0	838.5	834.2	830.4	835.4
	831.6	828.0	841.7	833.0	836.9	839.1	834.1	830.2	835.6

硫含量 (mg/kg)									
A	0.70	1.18	1.08	0.83	0.96	1.93	0.58	1.52	1.38
	1.10	1.58	1.48	1.23	1.46	2.33	1.18	1.52	1.48
B	1.50	1.68	1.88	1.43	1.46	2.33	1.18	2.12	1.88
	1.60	1.68	1.68	1.43	1.56	2.73	1.08	2.42	2.28
C	0.70	1.28	1.48	1.23	0.66	1.53	0.28	1.52	1.08
	0.70	1.28	0.98	1.13	1.26	2.23	0.88	1.52	1.18
D	0.80	1.28	1.08	1.03	1.36	2.23	1.08	1.62	1.68
	1.00	1.68	1.48	1.33	1.36	2.53	1.08	1.82	1.38
E	1.40	1.88	1.38	1.43	1.46	2.63	0.88	2.02	1.88
	1.20	1.78	1.28	1.23	1.76	2.63	1.28	1.82	1.68
闪点 (°C)									
A	65.0	64.0	66.0	60.0	63.0	61.0	67.0	64.0	62.0
	65.0	64.2	66.5	60.3	63.6	61.6	67.2	64.2	62.1
B	65.4	64.9	66.5	60.6	63.4	61.3	67.5	64.3	62.5
	65.8	64.6	66.6	60.9	63.6	61.7	67.3	64.4	62.5
C	64.9	64.2	65.8	59.8	63.1	60.6	66.8	63.9	61.8
	65.1	63.7	66.1	60.2	62.9	60.7	66.8	63.8	61.8
D	65.2	64.4	66.0	60.3	63.6	61.1	67.3	64.4	62.2
	65.2	64.1	66.5	60.1	63.4	61.1	67.1	64.5	62.5
E	65.6	64.5	66.5	60.4	63.3	61.3	67.4	64.4	62.4
	65.7	64.2	66.3	60.3	63.2	61.5	67.5	64.5	62.6
十六烷指数									
A	51.1	49.8	50.3	49.6	50.6	50.4	52.2	47.2	48.4
	51.2	50.0	50.5	49.9	50.7	50.8	52.7	47.4	48.7
B	51.8	50.4	51.1	50.2	51.4	50.7	52.8	48.0	49.1
	51.8	50.2	51.1	50.4	51.4	51.3	52.9	48.0	49.1
C	51.0	49.8	50.5	49.3	50.7	50.6	52.3	47.4	48.7
	51.1	50.0	50.2	49.6	50.5	50.7	52.6	46.8	48.5
D	51.4	49.9	50.3	50.0	51.1	50.5	52.5	47.6	48.8
	51.7	50.1	50.6	50.1	50.7	50.7	52.2	47.8	48.7
E	51.5	50.2	50.6	50.1	51.1	50.8	52.6	47.8	48.9
	51.3	50.4	50.7	49.9	51.2	51.0	52.7	47.8	48.9
初馏点 (°C)									
A	179.4	178.3	171.4	170.6	176.9	177.6	173.2	175.7	174.0
	180.1	179.3	172.4	171.4	177.6	178.5	173.8	177.2	174.8
B	181.3	179.4	172.7	172.0	178.1	178.9	174.4	176.7	175.6
	179.6	178.0	171.1	170.7	176.5	177.6	172.7	176.1	174.2
C	179.3	178.4	171.2	170.4	176.8	177.7	172.8	175.1	174.0
	178.6	177.6	170.7	169.8	176.0	177.0	172.3	175.0	173.0
D	179.7	179.0	172.4	170.9	178.2	178.4	174.0	176.1	174.3
	180.2	179.8	172.8	171.5	178.5	179.7	175.3	176.8	176.2

E	180.4	179.8	173.0	171.6	178.3	178.8	174.5	177.4	175.7
	179.0	178.6	171.3	170.9	177.2	177.9	172.9	175.9	174.3
10%馏出温度 (°C)									
A	202.7	200.2	201.1	196.0	198.0	205.7	200.1	206.0	204.3
	203.8	200.9	202.2	196.9	198.8	206.5	200.7	206.7	204.9
B	203.8	202.0	202.4	197.9	199.1	207.2	201.5	207.7	206.3
	202.3	200.6	200.8	195.7	197.9	206.0	200.2	206.5	204.6
C	202.4	200.1	200.8	195.4	197.5	205.6	199.7	205.5	203.9
	201.8	199.4	200.0	195.2	197.3	204.7	199.6	204.9	203.3
D	203.5	201.4	201.6	197.3	198.6	207.1	201.4	207.1	205.0
	204.4	201.1	202.4	197.4	200.1	206.5	201.7	208.0	205.4
E	204.2	201.3	202.8	197.0	199.5	207.5	200.9	207.8	205.9
	202.5	200.1	201.3	195.8	198.3	205.9	199.7	205.7	204.3
50%馏出温度 (°C)									
A	263.4	259.7	257.1	260.8	262.9	263.1	270.6	261.0	260.0
	264.4	261.2	257.7	261.9	263.5	263.9	271.7	262.3	261.3
B	264.6	261.1	258.1	262.1	264.1	264.6	272.4	262.5	261.9
	263.2	259.3	256.7	260.6	262.5	263.1	270.6	260.6	260.2
C	262.9	259.3	257.0	260.6	262.8	263.0	270.5	261.0	259.4
	262.6	258.5	256.5	259.8	262.0	262.0	269.9	260.3	258.8
D	263.9	260.3	258.0	262.2	263.3	264.5	271.9	261.6	260.0
	265.1	261.7	259.1	262.1	264.7	264.1	271.6	262.3	261.1
E	264.8	261.0	258.6	262.1	263.8	264.1	271.7	262.5	261.0
	263.6	259.8	257.4	260.8	262.5	262.7	270.4	261.0	260.3
90%馏出温度 (°C)									
A	352.0	348.5	356.1	349.9	342.7	352.6	337.0	346.0	350.0
	353.0	349.5	357.5	351.3	343.8	354.1	338.3	347.5	351.1
B	353.4	349.7	357.9	351.5	344.3	354.2	338.8	347.2	351.6
	352.2	348.2	355.9	350.3	342.6	352.7	337.0	346.1	350.4
C	352.0	347.9	355.5	349.4	342.1	352.4	336.5	345.8	349.7
	351.2	347.7	355.1	349.0	341.8	351.8	336.2	345.3	349.0
D	353.3	349.7	357.4	350.0	343.8	353.8	337.8	346.4	350.1
	353.7	350.0	357.2	350.9	344.6	354.2	338.1	347.2	351.4
E	353.4	350.1	357.7	350.9	344.0	353.5	338.0	347.6	351.3
	351.7	348.7	355.7	349.8	342.3	352.5	337.1	346.0	349.5
95%馏出温度 (°C)									
A	359.7	360.5	365.1	355.1	356.5	364.5	348.5	362.2	360.8
	360.4	361.4	365.8	356.3	357.5	365.8	349.4	363.5	361.4
B	360.8	362.1	366.2	356.7	357.8	365.9	349.6	364.0	362.2
	359.7	360.1	365.5	355.0	356.6	364.4	348.9	362.3	361.3
C	359.7	360.2	364.5	354.6	356.0	364.0	347.9	362.0	360.7
	358.5	359.6	364.5	354.4	355.5	363.8	348.0	361.7	360.1

A	21.7	22.4	17.7	23.4	19.3	24.1	18.6	16.7	20.6
	22.0	22.9	17.8	23.5	19.8	24.5	19.0	16.8	21.1
B	22.1	23.0	18.5	24.2	19.8	24.9	19.2	17.1	21.0
	22.4	23.1	18.1	24.2	20.2	24.6	19.0	17.2	21.2
C	22.0	22.8	17.7	23.5	19.5	24.2	18.3	16.5	20.5
	21.5	22.2	17.7	23.7	18.9	23.9	18.9	16.3	20.3
D	21.8	22.8	18.3	23.6	19.8	24.5	19.0	16.9	20.7
	22.1	22.7	18.3	23.6	19.5	24.3	19.1	17.3	20.6
E	22.1	23.1	18.0	23.7	20.0	24.5	19.1	17.4	20.8
	22.2	22.7	18.2	24.0	20.0	24.6	18.9	17.5	20.9
初馏点 (°C)									
A	178.0	174.0	183.5	159.0	167.0	175.0	180.0	169.0	186.2
	178.6	175.1	184.7	159.9	168.4	175.6	180.7	170.5	187.5
B	179.0	175.9	185.1	160.1	169.0	176.3	181.6	170.3	187.7
	178.3	174.4	183.0	158.9	166.8	174.7	179.9	169.3	186.7
C	178.1	173.4	183.0	158.5	166.4	174.6	179.4	168.5	186.1
	176.9	173.4	182.7	157.8	166.1	173.9	179.0	168.4	185.2
D	178.4	174.6	183.6	159.4	167.2	175.0	181.2	169.6	187.4
	179.2	176.0	184.3	160.9	168.3	176.7	180.9	170.5	187.8
E	179.2	175.1	185.0	160.5	167.9	176.3	181.6	170.4	187.6
	178.2	174.1	183.7	159.2	167.1	174.9	180.1	168.7	186.5
10%回收温度 (°C)									
A	205.0	202.5	203.0	204.0	205.0	209.5	207.0	205.5	203.7
	205.7	203.2	204.0	205.5	205.8	210.7	207.7	206.9	205.1
B	206.4	204.1	204.4	205.6	206.4	211.4	208.2	207.4	205.0
	204.7	202.8	203.3	204.2	204.5	209.9	206.9	205.8	204.0
C	204.6	202.3	202.8	204.1	204.4	209.6	206.8	205.5	203.2
	204.0	201.8	201.9	203.1	203.9	208.5	206.3	204.7	202.5
D	205.9	203.8	203.8	205.1	205.6	210.7	207.7	206.6	203.9
	206.3	204.2	204.2	205.1	206.1	210.8	208.5	206.7	205.1
E	206.7	203.3	204.7	205.1	206.7	210.8	208.3	207.2	205.4
	205.3	202.7	203.3	204.0	204.9	209.6	206.6	205.2	203.5
50%回收温度 (°C)									
A	255.0	266.5	251.0	283.0	272.0	263.5	270.0	264.5	268.5
	256.4	267.6	251.7	283.9	272.7	264.0	271.2	265.2	269.1
B	256.5	268.4	252.3	284.2	273.1	264.6	271.9	266.0	270.1
	255.1	266.8	251.3	282.7	272.0	263.4	270.1	264.0	268.9
C	254.7	266.2	251.0	282.5	272.0	263.4	270.1	264.2	268.4
	254.2	265.6	249.9	281.9	271.0	263.0	269.3	263.4	267.4
D	256.3	267.1	251.3	283.0	273.0	264.1	270.6	265.4	268.9
	256.9	267.5	252.8	285.0	274.1	265.0	271.3	265.6	270.1
E	256.4	268.2	252.4	284.8	273.7	265.3	271.1	266.2	269.8

	255.2	266.9	251.0	283.2	272.2	263.8	270.0	264.3	268.2
90%回收温度 (°C)									
A	342.0	352.0	349.0	354.0	321.5	336.0	317.6	324.5	330.0
	342.9	353.1	349.8	355.4	322.0	337.5	318.5	325.1	330.6
B	343.7	353.1	350.9	355.3	322.8	337.9	319.0	326.3	331.9
	341.8	352.2	349.4	353.6	321.5	335.7	317.9	324.6	329.6
C	341.8	352.0	349.0	353.9	321.2	335.8	317.4	324.3	329.8
	341.0	351.3	348.4	352.9	320.8	334.8	316.8	323.4	329.4
D	342.4	353.2	350.3	354.0	321.6	337.1	318.5	324.8	331.3
	342.9	354.2	350.3	355.8	322.6	337.0	319.0	326.3	331.8
E	343.1	352.9	350.5	355.4	323.3	336.9	318.8	325.4	331.4
	342.3	351.5	349.3	354.4	321.5	335.8	317.2	324.5	329.6
95%回收温度 (°C)									
A	345.5	358.0	354.4	363.5	341.0	346.0	334.5	344.0	340.5
	346.1	358.8	355.4	364.2	341.6	346.7	335.2	345.2	341.9
B	347.1	359.8	356.0	364.9	342.1	347.5	336.0	345.3	342.4
	345.7	357.6	354.3	363.9	341.1	345.7	334.8	343.6	340.5
C	344.9	357.5	353.9	363.6	341.0	345.8	334.5	343.7	340.1
	344.6	357.3	353.7	362.8	340.4	345.2	333.8	343.4	339.9
D	346.6	358.1	355.6	364.5	342.4	346.3	335.6	344.4	341.6
	347.6	359.7	356.4	365.3	342.4	348.0	335.5	345.1	341.9
E	346.8	359.4	355.5	364.5	342.5	347.0	336.2	345.7	342.0
	345.2	358.2	354.0	364.0	341.4	345.9	335.0	343.7	340.8

A.6 蜡油馏分模型预测数据

实验室	蜡油馏分样品								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20°C密度(kg/m ³)									
A	852.2	851.9	854.2	855.7	863.6	859.4	861.0	859.7	858.2
	853.3	852.4	855.0	856.4	864.5	859.6	861.1	860.3	858.4
B	853.1	852.9	855.5	857.1	865.1	860.5	862.2	861.1	859.2
	853.5	853.1	855.4	856.7	864.9	860.4	862.4	860.6	859.5
C	851.9	851.6	854.0	855.4	863.8	859.2	860.7	859.9	858.4
	852.0	851.7	854.3	855.6	863.9	859.2	861.1	859.4	858.3
D	852.5	852.7	854.4	856.4	864.1	859.8	861.5	860.0	858.5
	852.4	852.3	854.4	856.5	864.1	859.5	861.3	860.5	859.2
E	852.6	852.4	855.0	856.6	864.5	859.9	861.7	859.9	859.2
	853.3	852.4	855.2	856.6	864.8	859.9	861.4	860.4	859.4
80°C运动粘度 (mm ² /s)									
A	13.81	12.80	15.93	14.20	10.60	11.60	12.50	15.18	13.20
	14.31	13.00	16.43	14.30	10.70	12.20	12.70	15.28	13.80
B	14.21	13.60	16.63	15.00	11.40	12.50	13.20	15.78	13.70

	14.61	13.20	16.43	14.70	11.20	12.40	12.80	15.68	14.00
C	13.41	12.60	16.03	14.20	10.40	11.90	12.20	15.38	13.10
	13.61	13.00	16.33	14.40	10.20	11.50	12.30	14.98	13.00
D	14.11	13.20	16.03	14.20	10.90	11.60	12.60	15.28	13.70
	14.31	13.00	16.33	14.80	10.60	11.60	12.80	15.28	13.20
E	14.11	13.30	16.33	14.70	11.30	12.00	13.10	15.58	13.50
	14.41	13.10	16.23	14.90	11.00	12.20	12.90	15.88	13.90
100°C运动粘度 (mm ² /s)									
A	8.23	7.96	9.26	7.56	8.67	6.85	8.01	6.93	7.24
	8.83	8.26	9.46	8.06	8.77	7.15	8.61	6.93	7.44
B	8.53	8.36	10.06	8.36	8.97	7.55	8.91	7.53	7.64
	8.73	8.66	9.86	8.26	9.27	7.45	8.41	7.73	7.74
C	8.33	7.96	9.36	7.86	8.57	6.55	7.71	6.73	7.54
	7.93	7.86	9.56	7.56	8.37	6.75	8.21	7.13	6.94
D	8.43	8.36	9.46	7.86	8.97	7.45	8.41	7.43	7.74
	8.33	8.26	9.76	7.66	9.17	7.15	8.61	7.03	7.74
E	8.53	8.66	9.76	7.76	9.47	7.15	8.61	7.33	7.94
	8.93	8.76	9.76	8.26	9.07	7.25	8.51	7.63	7.94
凝点 (°C)									
A	270.0	260.0	248.0	254.0	265.0	262.0	268.0	264.0	251.0
	270.1	260.7	248.2	254.0	266.0	262.5	268.2	264.7	251.7
B	271.0	261.0	249.1	255.3	266.3	263.3	269.4	264.8	251.9
	271.0	261.2	249.2	255.4	266.1	263.0	268.9	265.0	251.8
C	269.8	259.8	248.2	254.1	265.0	261.6	268.2	264.0	250.6
	269.9	260.0	248.2	254.1	265.2	262.3	268.4	264.2	251.3
D	270.4	260.9	248.0	254.1	265.5	263.0	269.0	264.6	251.4
	270.8	260.8	248.2	254.7	265.6	262.1	268.5	264.7	251.7
E	270.6	260.8	249.1	255.0	266.2	262.7	269.2	265.1	251.9
	270.4	260.3	248.4	255.2	265.5	262.7	268.2	264.6	252.1
闪点 (°C)									
A	44.6	50.3	51.9	49.3	43.5	48.6	52.7	48.1	53.0
	44.9	50.5	52.3	49.6	43.9	48.9	53.2	48.4	53.2
B	45.3	51.0	52.5	49.8	44.3	49.3	53.6	48.8	53.8
	45.2	50.9	52.3	49.7	44.1	49.4	53.1	49.0	53.4
C	44.4	50.1	52.3	49.3	43.8	48.6	52.4	48.3	53.0
	45.0	50.6	52.3	49.0	43.6	48.2	53.0	48.0	52.9
D	45.1	50.5	52.4	49.8	43.5	48.9	53.2	48.7	53.1
	44.7	50.8	52.0	49.4	44.0	48.7	53.0	48.4	53.2
E	45.4	51.0	52.7	49.7	43.9	48.9	53.4	48.8	53.7
	44.9	50.6	52.1	49.6	44.0	49.4	53.3	48.7	53.7