

ICS 73.040

D 20

NB

中华人民共和国能源行业标准

NB/T XXXXX—XXXX

煤液化调和馏分燃料十六烷指数计算法 四变量公式法

Standard test method for calculated cetane index of distillate fuels from coal
liquefaction—Four variable equation

(征求意见稿)

XXXX - XX - XX 发布

XXXX - XX - XX 实施

国家能源局 发布

煤液化调和馏分燃料十六烷指数计算法 四变量公式法

1 范围

1.1 本标准规定了煤液化调和馏分燃料十六烷指数的计算方法。本标准以术语“十六烷指数”表示“四变量公式法十六烷指数”。

1.2 本标准适用于通过调和得到的煤液化馏分燃料。

1.3 对于在推荐范围内的十六烷值（40~70），已验证过的90%的煤液化调和馏分燃料经四变量十六烷指数计算公式计算得到的结果，其误差不大于±3个十六烷值。在推荐范围内，煤液化调和燃料的十六烷指数计算结果与十六烷值的误差会较大。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件，仅所注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 1884 原油和液化石油产品密度实验室测定法（密度法）

GB/T 6536 石油产品蒸馏测定法

3 方法原理

按照标准试验方法测定式样的15℃密度以及10%、50%和90%回收温度。利用所测得的试验数据，依据给出的公式，计算式样的十六烷指数。

4 试验步骤

4.1 按照GB/T 1884的操作步骤，测定得到试样的15℃密度，精确至0.0005g/mL。

4.2 按照GB/T 6536的操作步骤，测定得到试样在标准大气压下的10%、50%和90%回收温度，精确至1℃。

5 计算方法和结果表达

5.1 计算方法

将由4.1和4.2得到的试验数据代入式（1）中，计算试样的十六烷指数CI。

$$CI = -334.57 * D + 0.344 * T_{10} + 0.0703 * T_{50} - 0.02232 * T_{90} + 251.29 \quad \dots \quad (1)$$

式中：

D ——试样在 15℃的密度 (g/mL) 的值;
T₁₀ ——试样在 10%回收温度 (℃) 的值;
T₅₀ ——试样在 50%回收温度 (℃) 的值;
T₉₀ ——试样在 90%回收温度 (℃) 的值;

5.2 结果表达

报告试样的十六烷指数计算结果，精确至0.1。

6 精密度

6.1 十六烷指数计算法的精密度取决于参与计算的试样 15℃密度及 10%、50%和 90%回收温度的精度。

6.2 试样 15℃密度及 10%、50%和 90%回收温度的精密度计算按照 GB/T 6536 的规定进行。

行业标准
《煤液化调和馏分燃料十六烷指数计算
法 四变量公式法》
编制说明

标准编制组
2019 年 8 月

目 录

1 工作简况	3
1.1 任务来源	3
1.2 编制单位	3
1.3 主要工作过程	3
2 标准编制原则	3
3 标准主要内容的说明	3
3.1 “1 范围”	3
3.2 “2 规范性引用文件”	4
3.3 “3 方法原理”	4
3.4 “5 计算方法和结果表达”	4
3.5 “6 精密度”	9

1 工作简况

1.1 任务来源

我国现有的车用柴油十六烷值指数的经验公式都是利用一定范围石油基柴油的物理参数拟合得到，仅适用于石油基柴油。由于煤液化柴油的物性和组成与石油基柴油有一定差别，并不能适用此方法。

国家能源局《关于下达 2019 年能源领域行业标准制修订计划及外文版翻译计划的通知》（国能综通科技[2019]58 号）下达了能源行业标准计划项目《煤液化调和馏分燃料十六烷指数计算法 四变量公式法》，计划编号：能源 20190198。

1.2 编制单位

本标准由能源行业煤制燃料标准化技术委员会技术归口，标准起草单位为中国神华煤制油化工有限公司。

1.3 主要工作过程

2018.01—2013.03 成立标准科研项目工作小组，并组织调研和资料搜集，确定本项目涉及分析方法详细试验方案，包括人力安排、试验进度及试验仪器。

2018.04—2018.11 调和煤液化馏分燃料，分析式样的十六烷值、15℃密度以及 10%、50% 和 90%回收温度

2018.12—2019.01 整理数据，编写公式。

2019.01—2019.03 起草标准，编制标准、编写说明。

2 标准编制原则

本标准所列的计算公式要能快速并准确的计算出煤液化调和馏分燃料的十六烷指数，可用来预测煤液化调和馏分燃料的十六烷值，对控制生产起到准确、及时和经济作用。

编写规则是按照GB/T 1.1-2009 《标准化工作导则 第一部分：标准的结果和编写规则》的要求进行。

3 标准主要内容的说明

3.1 “1 范围”

本标准规定了煤经直接液化和间接液化工艺制取的柴油馏分经调和而成的煤液化调和

馏分燃料十六烷指数的计算方法，适用于通过调和得到的煤液化馏分燃料。

3.2 “2 规范性引用文件”

本标准主要引用了如下标准：

GB/T 1884 原油和液化石油产品密度实验室测定法（密度法）

GB/T 6536 石油产品蒸馏测定法。

3.3 “3 方法原理”

按照标准试验方法测定式样的 15℃ 密度以及 10%、50% 和 90% 回收温度。利用所测得的试验数据，依据给出的公式，计算式样的十六烷指数。

3.4 “5 计算方法和结果表达”

3.4.1 “5.1 计算方法”

将 85 个煤液化调和馏分燃料样品，按照 GB/T 1884 标准试验方法测定得到样品的 15℃ 密度（精确至 0.0005g/mL），按照 GB/T 6536 标准试验方法测定得到样品在标准大气压下的 10%、50% 和 90% 回收温度（精确至 1℃），数据具体见表 1。

表 1 煤液化调和馏分燃料的密度、10%、50% 和 90% 回收温度

样品编号	密度 (15℃), g/mL	回收温度, ℃			十六烷值
		10%	50%	90%	
YP-1	0.8401	186.9	204.0	238.2	42.7
YP-2	0.8333	186.6	204.3	239.8	47.1
YP-3	0.8268	186.6	204.4	241.8	50.5
YP-4	0.8202	185.4	204.1	242.5	53.7
YP-5	0.8139	184.7	204.1	243.3	56.9
YP-6	0.8073	184.2	204.3	245.8	61.3
YP-7	0.8012	183.6	204.3	246.4	62.7
YP-8	0.7876	181.7	204.6	249.6	69.9
YP-9	0.7609	179.9	204.8	255.4	70.5
YP-10	0.8371	187.6	205.1	242.5	42.7
YP-11	0.8276	186.9	206.4	248.0	50.1
YP-12	0.8184	187.4	208.4	253.1	52.3
YP-13	0.8092	186.7	209.4	256.3	54.2
YP-14	0.8003	187.3	211.9	262.0	57.1
YP-15	0.7914	187.4	213.5	264.8	59.3
YP-16	0.7828	187.4	215.5	267.1	60.8
YP-17	0.7740	187.6	217.8	269.8	66.3
YP-18	0.7658	187.2	220.1	272.8	69.0
YP-19	0.8374	187.1	205.7	248.0	42.2
YP-20	0.8286	186.2	207.3	257.8	43.8
YP-21	0.8197	184.3	208.4	266.0	47.1
YP-22	0.8110	183.7	210.5	274.2	52.3

YP-23	0.8025	184.6	213.9	285.3	54.8
YP-24	0.7940	183.5	216.9	294.3	61.9
YP-25	0.7858	182.9	219.9	297.9	65.1
YP-26	0.7771	182.6	224.1	299.0	69.3
YP-27	0.7695	182.8	228	303.9	72.8
YP-28	0.8244	202.2	217.7	269.4	58.9
YP-29	0.8345	203.1	217.2	261.2	54.0
YP-30	0.8259	207.5	221.8	265.8	54.8
YP-31	0.8276	212.9	225.8	271.8	54.7
YP-32	0.8362	210	222.4	261.4	53.7
YP-33	0.8019	175	199.2	245.8	52.7
YP-34	0.8107	174.3	198.6	246.1	48.5
YP-35	0.8199	175.1	197.6	239.5	43.6
YP-36	0.8291	173.2	196.3	235.8	39.9
YP-37	0.8045	180.1	201.4	247.8	53.1
YP-38	0.8138	179.7	200.8	245.7	48.3
YP-39	0.8304	181.0	200.1	238.6	43.5
YP-40	0.8367	181.5	199.9	236.4	42.6
YP-41	0.8173	187.3	206.1	247	50.7
YP-42	0.8274	188.0	206.1	247.1	51.1
YP-43	0.8183	190.2	208.1	249.0	49.6
YP-44	0.8190	192.2	210.1	249.6	51.1
YP-45	0.8217	198.6	212.9	248.8	54.7
YP-46	0.8321	199.4	212.9	250.0	53.1
YP-47	0.8321	199.7	213.1	247.1	53.2
YP-48	0.8327	200.5	213.7	250.6	53.1
YP-49	0.8242	205.2	219.5	255.5	54.1
YP-50	0.8252	204.8	220.9	265.2	54.2
YP-51	0.8250	207.7	220.7	257.5	53.2
YP-52	0.8345	207.2	219.5	252.7	51.9
YP-53	0.8260	207.9	222.2	267.6	52.6
YP-54	0.8347	202.2	217.3	267.8	51.3
YP-55	0.8202	184.6	206.0	265.5	52.4
YP-56	0.8207	186.3	208.2	268.7	51.7
YP-57	0.837	200.2	216	266.2	50.1
YP-58	0.8204	196.7	211.1	271.8	53.8
YP-59	0.8306	191.9	211.2	262.9	51.0
YP-60	0.8317	195.5	213.6	269.7	53.1
YP-61	0.8507	194.7	208.4	245.7	51.7
YP-62	0.8274	201.9	220.8	276.2	51.9
YP-63	0.8362	205.2	220.6	266.7	53.3
YP-64	0.8258	197.8	217.1	280.4	51.6
YP-65	0.8025	178.5	193.4	226.7	49.3

YP-66	0.8104	177.6	191.6	222.5	46.8
YP-67	0.8184	177.6	190.2	219.0	42.6
YP-68	0.8280	177.3	189.5	225.5	40.0
YP-69	0.8212	178.0	192.2	248.4	44.1
YP-70	0.8145	180.7	197.8	277.4	48.6
YP-71	0.8079	181.0	202.4	292.4	50.4
YP-72	0.8013	179.9	204.3	298.4	52.8
YP-73	0.7949	185.0	215.6	312.0	55.0
YP-74	0.7886	186.9	222.6	316.1	59.6
YP-75	0.7826	185.1	226	315.6	62.8
YP-76	0.7768	191.3	240.2	319.8	64.6
YP-77	0.8385	187.8	206.2	249.6	44.0
YP-78	0.8304	189.0	208.8	263.1	46.7
YP-79	0.8224	187.2	210.7	276.0	49.0
YP-80	0.8146	189.8	215.5	293.7	50.0
YP-81	0.8069	187.0	217.6	298.4	55.4
YP-82	0.7993	191.0	224.3	307.6	56.2
YP-83	0.7918	187.9	226	309.5	57.1
YP-84	0.7847	191.7	235.9	318.1	59.4
YP-85	0.7780	189.0	238.8	317.4	65.1

利用 origin 软件将煤液化调和馏分燃料 10%、50% 和 90% 回收温度这四个变量和十六烷值进行拟合，得到十六烷指数计算公式：

$$CI = -357.68*D + 0.3269*T_{10} + 0.1046*T_{50} - 0.04681*T_{90} + 273.01 \quad (1)$$

其中：

D：15℃时密度，单位 g/mL

T₁₀：试样 10%回收温度，单位℃

T₅₀：试样 50%回收温度，单位℃

T₉₀：试样 90%回收温度，单位℃

该公式适用于，十六烷值 40~70 的数据，因此要求煤液化调和馏分燃料的十六烷值指数计算范围需符合十六烷值要求。

将上述公式代入 85 个煤液化调和馏分燃料样品，计算公式(1)得到的十六烷指数(CI)，并计算十六烷值与十六烷指数的差值，数据具体见表 2。

表 2 煤液化调和馏分燃料十六烷指数公式 (1) 计算结果

样品编 号	密度 (15℃)， g/mL	回收温度，℃			十六烷 值 CN	十六烷指数 CI (公式 1)	CN-CI
		10%	50%	90%			
YP-1	0.8401	186.9	204	238.2	42.7	43.81	-1.11
YP-2	0.8333	186.6	204.3	239.8	47.1	46.10	1.00
YP-3	0.8268	186.6	204.4	241.8	50.5	48.34	2.16
YP-4	0.8202	185.4	204.1	242.5	53.7	50.25	3.45
YP-5	0.8139	184.7	204.1	243.3	56.9	52.23	4.67

YP-6	0.8073	184.2	204.3	245.8	61.3	54.33	6.97
YP-7	0.8012	183.6	204.3	246.4	62.7	56.29	6.41
YP-8	0.7876	181.7	204.6	249.6	69.9	60.42	9.48
YP-9	0.7609	179.9	204.8	255.4	70.5	69.13	1.37
YP-10	0.8371	187.6	205.1	242.5	42.7	45.02	-2.32
YP-11	0.8276	186.9	206.4	248	50.1	48.07	2.03
YP-12	0.8184	187.4	208.4	253.1	52.3	51.50	0.80
YP-13	0.8092	186.7	209.4	256.3	54.2	54.51	-0.31
YP-14	0.8003	187.3	211.9	262	57.1	57.89	-0.79
YP-15	0.7914	187.4	213.5	264.8	59.3	61.14	-1.84
YP-16	0.7828	187.4	215.5	267.1	60.8	64.32	-3.52
YP-17	0.774	187.6	217.8	269.8	66.3	67.64	-1.34
YP-18	0.7658	187.2	220.1	272.8	69	70.55	-1.55
YP-19	0.8374	187.1	205.7	248	42.2	44.56	-2.36
YP-20	0.8286	186.2	207.3	257.8	43.8	47.12	-3.32
YP-21	0.8197	184.3	208.4	266	47.1	49.41	-2.31
YP-22	0.811	183.7	210.5	274.2	52.3	52.17	0.13
YP-23	0.8025	184.6	213.9	285.3	54.8	55.34	-0.54
YP-24	0.794	183.5	216.9	294.3	61.9	57.91	3.99
YP-25	0.7858	182.9	219.9	297.9	65.1	60.79	4.31
YP-26	0.7771	182.6	224.1	299	69.3	64.19	5.11
YP-27	0.7695	182.8	228	303.9	72.8	67.16	5.64
YP-28	0.8244	202.2	217.7	269.4	58.9	54.40	4.50
YP-29	0.8345	203.1	217.2	261.2	54	51.41	2.59
YP-30	0.8259	207.5	221.8	265.8	54.8	56.19	-1.39
YP-31	0.8276	212.9	225.8	271.8	54.7	57.49	-2.79
YP-32	0.8362	210	222.4	261.4	53.7	53.59	0.11
YP-33	0.8019	175	199.2	245.8	52.7	52.72	-0.02
YP-34	0.8107	174.3	198.6	246.1	48.5	49.27	-0.77
YP-35	0.8199	175.1	197.6	239.5	43.6	46.45	-2.85
YP-36	0.8291	173.2	196.3	235.8	39.9	42.57	-2.67
YP-37	0.8045	180.1	201.4	247.8	53.1	53.60	-0.50
YP-38	0.8138	179.7	200.8	245.7	48.3	50.18	-1.88
YP-39	0.8304	181	200.1	238.6	43.5	44.92	-1.42
YP-40	0.8367	181.5	199.9	236.4	42.6	42.92	-0.32
YP-41	0.8173	187.3	206.1	247	50.7	51.90	-1.20
YP-42	0.8274	188	206.1	247.1	51.1	48.51	2.59
YP-43	0.8183	190.2	208.1	249	49.6	52.61	-3.01
YP-44	0.819	192.2	210.1	249.6	51.1	53.19	-2.09
YP-45	0.8217	198.6	212.9	248.8	54.7	54.65	0.05
YP-46	0.8321	199.4	212.9	250	53.1	51.14	1.96

YP-47	0.8321	199.7	213.1	247.1	53.2	51.39	1.81
YP-48	0.8327	200.5	213.7	250.6	53.1	51.34	1.76
YP-49	0.8242	205.2	219.5	255.5	54.1	56.29	-2.19
YP-50	0.8252	204.8	220.9	265.2	54.2	55.49	-1.29
YP-51	0.825	207.7	220.7	257.5	53.2	56.85	-3.65
YP-52	0.8345	207.2	219.5	252.7	51.9	53.39	-1.49
YP-53	0.826	207.9	222.2	267.6	52.6	56.24	-3.64
YP-54	0.8347	202.2	217.3	267.8	51.3	50.75	0.55
YP-55	0.8202	184.6	206	265.5	52.4	49.11	3.29
YP-56	0.8207	186.3	208.2	268.7	51.7	49.56	2.14
YP-57	0.837	200.2	216	266.2	50.1	49.21	0.89
YP-58	0.8204	196.7	211.1	271.8	53.8	53.23	0.57
YP-59	0.8306	191.9	211.2	262.9	51	48.44	2.56
YP-60	0.8317	195.5	213.6	269.7	53.1	49.15	3.95
YP-61	0.8507	194.7	208.4	245.7	51.7	42.68	9.02
YP-62	0.8274	201.9	220.8	276.2	51.9	53.23	-1.33
YP-63	0.8362	205.2	220.6	266.7	53.3	51.59	1.71
YP-64	0.8258	197.8	217.1	280.4	51.6	51.88	-0.28
YP-65	0.8025	178.5	193.4	226.7	49.3	53.94	-4.64
YP-66	0.8104	177.6	191.6	222.5	46.8	50.83	-4.03
YP-67	0.8184	177.6	190.2	219	42.6	47.99	-5.39
YP-68	0.828	177.3	189.5	225.5	40	44.08	-4.08
YP-69	0.8212	178	192.2	248.4	44.1	45.95	-1.85
YP-70	0.8145	180.7	197.8	277.4	48.6	48.46	0.14
YP-71	0.8079	181	202.4	292.4	50.4	50.69	-0.29
YP-72	0.8013	179.9	204.3	298.4	52.8	52.61	0.19
YP-73	0.7949	185	215.6	312	55	57.11	-2.11
YP-74	0.7886	186.9	222.6	316.1	59.6	60.53	-0.93
YP-75	0.7826	185.1	226	315.6	62.8	62.47	0.33
YP-76	0.7768	191.3	240.2	319.8	64.6	67.86	-3.26
YP-77	0.8385	187.8	206.2	249.6	44	44.37	-0.37
YP-78	0.8304	189	208.8	263.1	46.7	47.30	-0.60
YP-79	0.8224	187.2	210.7	276	49	49.17	-0.17
YP-80	0.8146	189.8	215.5	293.7	50	52.48	-2.48
YP-81	0.8069	187	217.6	298.4	55.4	54.32	1.08
YP-82	0.7993	191	224.3	307.6	56.2	58.62	-2.42
YP-83	0.7918	187.9	226	309.5	57.1	60.38	-3.28
YP-84	0.7847	191.7	235.9	318.1	59.4	64.79	-5.39
YP-85	0.778	189	238.8	317.4	65.1	66.64	-1.54

通过表 2 十六烷值与十六烷指数的差值可以看出, YP6、YP7、YP8、YP26、YP27、YP28、YP61 和 YP84 的十六烷值与公式 (1) 计算得到的十六烷指数相差 $>\pm 5$, 故将这 8 个

数据舍去后，将剩下的 77 个煤液化调和馏分燃料的 10%、50% 和 90% 回收温度这四个变量和十六烷值进行拟合，得到十六烷指数计算公式：

$$CI = -334.57*D + 0.344*T_{10} + 0.0703*T_{50} - 0.02232*T_{90} + 251.29 \quad (2)$$

其中：

D：15℃时密度，单位 g/mL

T_{10} ：试样 10%回收温度，单位℃

T_{50} ：试样 50%回收温度，单位℃

T_{90} ：试样 90%回收温度，单位℃

该公式适用于，十六烷值 40~70 的数据，因此要求煤液化调和馏分燃料的十六烷值指数计算范围需符合十六烷值要求。

用另外 22 个样品的四变量数据对上述十六烷指数计算公式进行了验证，具体见表 3。由表 3 中数据可见，除 2 组数据外，其余 20 组数据中由拟合公式计算得到的十六烷指数与实测十六烷值差值均在±3 范围内，精度满足要求。

表 3 煤液化调和馏分燃料十六烷指数公式验证

样品编号	密度 (15℃) g/mL	回收温度, ℃			十六烷值 CN	十六烷指数 CI(公式 2)	CN-CI
		10%	50%	90%			
YP-86	0.8432	194.8	210.3	254.9	47.5	45.29	2.21
YP-87	0.8346	194.0	212.6	268.2	50.9	47.75	3.15
YP-88	0.8262	193.2	214.7	278.9	53.0	50.20	2.80
YP-89	0.8179	192.7	217.6	290.4	55.0	52.75	2.25
YP-90	0.8098	194.6	223.2	306.9	58.6	56.14	2.46
YP-91	0.8018	193.7	226.3	308.1	59.7	58.70	1.00
YP-92	0.7940	192.2	229.8	315.0	62.0	60.88	1.12
YP-93	0.7864	190.0	235.0	316.8	63.8	62.99	0.81
YP-94	0.7802	189.8	239.0	320.0	64.1	65.21	-1.11
YP-95	0.8123	176.9	194.6	258.4	48.9	48.29	0.61
YP-96	0.8052	176.7	197.6	274.4	52.1	50.45	1.65
YP-97	0.7977	176.8	201.2	283.8	55.9	53.03	2.87
YP-98	0.8142	189.8	215.5	293.7	54.9	52.77	2.13
YP-99	0.8066	187.0	217.6	298.4	56.2	54.39	1.81
YP-100	0.8223	187.2	210.7	276.0	51.3	49.22	2.08
YP-101	0.8193	194.0	219.3	291.2	52.6	52.83	-0.23
YP-102	0.8093	193.2	223.1	299.9	57.0	55.97	1.03
YP-103	0.8260	194.3	216.9	282.9	48.9	50.71	-1.81
YP-104	0.8345	194.0	213.3	267.7	46.4	47.85	-1.45
YP-105	0.8143	185.5	211.9	290.3	52.5	51.08	1.42
YP-106	0.8175	194.9	219.9	293.9	52.8	53.72	-0.92
YP-107	0.8106	179.6	192.3	234.6	45.6	50.15	-4.55

3.5 “6 精密度”

由测得的试样 15℃密度及 10%、50% 和 90% 回收温度，计算所得的十六烷指数是精确的。

十六烷指数计算法的精密度取决于参与计算的密度和回收百分数对应温度测定结果的精密度。

这些测定结果的精密度已在方法GB/T 1884，SH/T 0604和GB/T 6536中予以规定。