



(12)发明专利

(10)授权公告号 CN 108956814 B

(45)授权公告日 2020.07.03

(21)申请号 201810717484.X

(22)申请日 2018.07.03

(65)同一申请的已公布的文献号

申请公布号 CN 108956814 A

(43)申请公布日 2018.12.07

(73)专利权人 中国石油大学(北京)

地址 102249 北京市昌平区府学路18号

(72)发明人 张霖宙 崔晨 史权 赵锁奇

徐春明

(74)专利代理机构 北京三友知识产权代理有限公司

公司 11127

代理人 闫加贺 姚亮

(51)Int.Cl.

G01N 30/02(2006.01)

G01N 30/68(2006.01)

(56)对比文件

CN 101876648 A,2010.11.03,

CN 107817302 A,2018.03.20,

CN 101685087 A,2010.03.31,

CN 107704720 A,2018.02.16,

JP H07253425 A,1995.10.03,

崔晨 等.汽油分子组成模型构建.《石油化工高等学校学报》.2018,第31卷(第3期),

审查员 董春艳

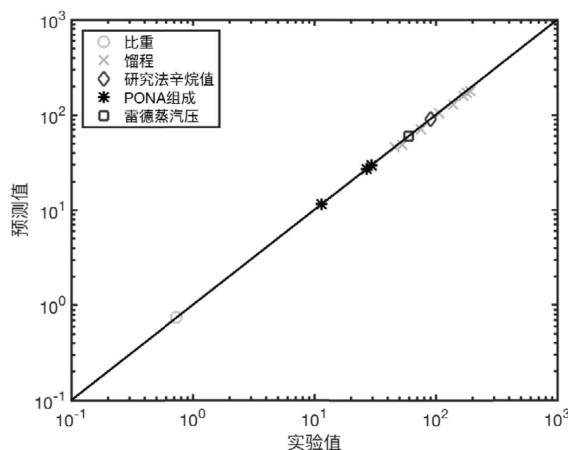
权利要求书2页 说明书7页 附图7页

(54)发明名称

一种直接构建汽油分子组成模型的方法以及性质预测方法

(57)摘要

本发明提供了一种直接构建汽油分子组成模型的方法以及性质预测方法,构建方法包括以下步骤:(1)对汽油样品的气相色谱检测结果进行单体烃分析,以鉴定气相色谱图中各峰可能包含的分子,并计算各峰的相对分率;(2)根据单体烃分析结果,并按色谱峰类型将色谱峰归类;(3)对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析,得到完整的单体烃分子组成结果;(4)由所述完整的单体烃分子组成结果直接生成汽油分子的组成模型。本发明所提供的该方法以气相色谱检测结果为基础,用基于统计分布的峰调节算法重建分子组成,然后建立汽油分子组成模型并预测汽油的宏观性质,该方法可以为汽油加工及调和提供准确的数据支持。



1. 一种直接构建汽油分子组成模型的方法,其特征在于,所述方法包括以下步骤:

(1) 对汽油样品的气相色谱检测结果进行单体烃分析,以鉴定气相色谱图中各峰可能包含的分子,并计算各峰的相对分率;

(2) 根据单体烃分析结果,并按色谱峰类型将色谱峰归类;所述色谱峰类型包括已知峰、共逸出峰及未鉴定峰;

(3) 对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析,得到完整的单体烃分子组成结果;

步骤(3)中所述分析为采用基于统计分布的峰调节算法对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析;

所述基于统计分布的峰调节算法具体包括以下步骤:

拟合已知峰的分布:将已知峰按分子类型和碳数归类,对归类后的各系列数据按统计分布拟合;

共逸出峰的拆分:将共逸出峰进行拆分,假设共逸出峰中各组分的相对含量,并依次检验所有假设,选取合适的假设接受;不断重复以上过程,直到所有的共逸出峰都拆分完成;

推断未鉴定峰:假设未鉴定峰中所包含组分的分子类型和碳数,并依次检验所有假设,选取合适的假设接受;不断重复以上过程,直到所有的未鉴定峰都推断完成;

(4) 由所述完整的单体烃分子组成结果直接生成汽油分子的组成模型;步骤(4)中所述的直接生成汽油分子组成模型,包括:得到所述完整的单体烃分子组成结果后,为其中每个分子分别建立一个分子对象,该分子对象用于执行查询分子性质和分子含量操作;

再建立汽油对象,该汽油对象包括所述分子对象,所述汽油对象用于执行计算汽油宏观性质操作。

2. 根据权利要求1所述的方法,其特征在于,所述汽油样品包括催化裂化汽油、催化重整汽油、直馏汽油、催化裂解汽油、加氢汽油或焦化汽油。

3. 根据权利要求1或2所述的方法,其特征在于,所述统计分布包括伽马分布。

4. 根据权利要求1或2所述的方法,其特征在于,步骤(3)中所述分子类型包括正构烷烃、异构烷烃、烯烃、环烷烃及芳烃。

5. 根据权利要求3所述的方法,其特征在于,步骤(3)中所述分子类型包括正构烷烃、异构烷烃、烯烃、环烷烃及芳烃。

6. 一种直接构建汽油分子组成模型的系统,其特征在于,所述系统包括:

第一单元,所述第一单元用于对汽油样品的气相色谱检测结果进行单体烃分析,以鉴定气相色谱图中各峰可能包含的分子,并计算各峰的相对分率;

第二单元,所述第二单元用于根据单体烃分析结果,并按色谱峰类型将色谱峰归类;所述色谱峰类型包括已知峰、共逸出峰及未鉴定峰;

第三单元,所述第三单元用于对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析,得到完整的单体烃分子组成结果;第三单元中,所述分析为采用基于统计分布的峰调节模块对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析;

所述基于统计分布的峰调节模块具体包括:

第一模块,所述第一模块用于拟合已知峰的分布:将已知峰按分子类型和碳数归类,对归类后的各系列数据按统计分布拟合;

第二模块,所述第二模块用于共逸出峰的拆分:将共逸出峰进行拆分,假设共逸出峰中各组分的相对含量,并依次检验所有假设,选取合适的假设接受;不断重复以上过程,直到所有的共逸出峰都拆分完成;

第三模块,所述第三模块用于推断未鉴定峰:假设未鉴定峰中所包含组分的分子类型和碳数,并依次检验所有假设,选取合适的假设接受;不断重复以上过程,直到所有的未鉴定峰都推断完成;

第四单元,所述第四单元用于由所述完整的单体烃分子组成结果直接生成汽油分子的组成模型;所述第四单元具体用于:得到所述完整的单体烃分子组成结果后,为其中每个分子分别建立一个分子对象,该分子对象用于执行查询分子性质和分子含量操作;

再建立汽油对象,该汽油对象包括所述分子对象,所述汽油对象用于执行计算汽油宏观性质操作。

7. 一种预测汽油宏观性质的方法,其特征在于,所述方法包括以下步骤:

根据权利要求1-5任一项所述的直接构建汽油分子组成模型的方法构建汽油分子的组成模型,以获得汽油的分子组成及各个分子的性质;

根据汽油的分子组成及各个分子的性质通过相应的宏观性质混合规则对汽油的宏观性质进行预测。

8. 根据权利要求7所述的方法,其特征在于,所述宏观性质包括密度、馏程、辛烷值、折射率、分子量及雷德蒸汽压。

9. 一种预测汽油宏观性质的系统,其特征在于,所述系统包括:

第一单元,所述第一单元用于根据权利要求1-5任一项所述的直接构建汽油分子组成模型的方法构建汽油分子的组成模型,以获得汽油的分子组成及各个分子的性质;

第二单元,所述第二单元用于根据汽油的分子组成及各个分子的性质通过相应的宏观性质混合规则对汽油的宏观性质进行预测。

一种直接构建汽油分子组成模型的方法以及性质预测方法

技术领域

[0001] 本发明涉及一种直接构建汽油分子组成模型的方法以及性质预测方法,具体涉及一种由气相色谱结果直接构建汽油分子组成模型的方法以及性质预测方法,属于油品组成分析技术领域。

背景技术

[0002] 汽油的加工及调和对其质量和组成的要求十分苛刻,传统的集总模型已经越来越无法满足一个现代化炼厂的需求。为了提高炼厂的效益并提高产品质量标准,开发分子级模型,对轻质油品的加工和调和过程实施分子级别的管理就变得越来越重要。而建立分子级模型首先需要解决的问题即是获取油品的分子组成。

[0003] 现有的获取汽油分子组成的方法主要可分为实验法和用计算机辅助重建分子组成的方法。传统的分析仪器如气相色谱-氢火焰离子检测器 (GC-FID),其分析结果中包含较多的共逸出峰及无法鉴定的峰。现有的计算机辅助重建汽油分子组成的方法通常是由汽油样品的宏观性质反推得到其分子组成,其计算结果不会有共逸出和结果缺失的问题。但这类方法会存在不确定性的问题,对后续的加工和调和模拟过程造成影响。此外这种方法得到的汽油性质预测值受输入的实验值影响很大,而且这类方法中的部分方法还严重依赖分子组成数据库的质量和训练数据的方法。

[0004] 因此,提供一种直接构建汽油分子组成模型的方法以及性质预测方法已经成为本领域亟需解决的技术问题。

发明内容

[0005] 为了解决上述的缺点和不足,本发明的目的在于提供一种直接构建汽油分子组成模型的方法。

[0006] 本发明的目的还在于提供一种直接构建汽油分子组成模型的系统。

[0007] 本发明的目的还在于提供一种预测汽油宏观性质的方法及系统。本发明所提供的技术方案采用基于统计分布的峰调节算法重建了气相色谱所得的分子结果,得到完整的分子组成,用于建立汽油分子组成模型,并预测其性质。该方法结合了实验方法与计算机重建的方法,根据一定的统计分布拆分或推测了气相色谱结果中的共逸出峰和未鉴定峰,提供了准确,稳定的分子组成结果,不需要建立分子组成数据库并关联训练,克服了现有方法的缺陷。基于该方法所得分子组成预测的宏观性质,不受实验值的影响,更有参考价值。

[0008] 为达到上述目的,一方面,本发明提供一种直接构建汽油分子组成模型的方法,其中,所述方法包括以下步骤:

[0009] (1) 对汽油样品的气相色谱检测结果进行单体烃分析,以鉴定气相色谱图中各峰可能包含的分子,并计算各峰的相对分率;

[0010] (2) 根据单体烃分析结果,并按色谱峰类型将色谱峰归类;

[0011] (3) 对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析,得到完整的单体烃

分子组成结果；

[0012] (4) 由所述完整的单体烃分子组成结果直接生成汽油分子的组成模型。

[0013] 根据本发明所述的方法,优选地,所述汽油样品包括催化裂化汽油、催化重整汽油、直馏汽油、催化裂解汽油、加氢汽油或焦化汽油。

[0014] 根据本发明所述的方法,优选地,所述色谱峰类型包括已知峰、共逸出峰及未鉴定峰。

[0015] 根据本发明所述的方法,优选地,步骤(3)中所述分析为采用基于统计分布的峰调节算法对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析。

[0016] 根据本发明所述的方法,优选地,所述基于统计分布的峰调节算法具体包括以下步骤:

[0017] 拟合已知峰的分布:将已知峰按分子类型和碳数归类,对归类后的各系列数据按统计分布拟合;

[0018] 共逸出峰的拆分:将共逸出峰进行拆分,假设共逸出峰中各组分的相对含量,并依次检验所有假设,选取合适的假设接受;不断重复以上过程,直到所有的共逸出峰都拆分完成;

[0019] 推断未鉴定峰:假设未鉴定峰中所包含组分的分子类型和碳数,并依次检验所有假设,选取合适的假设接受;不断重复以上过程,直到所有的未鉴定峰峰都推断完成。

[0020] 根据本发明所述的方法,其中,拟合已知峰的分布具体包括以下步骤:将已知峰按分子类型和碳数归类,并对相同分子类型及碳数的所有分子的含量分率进行求和,得到一个数据矩阵;再对数据矩阵中各分子系列相对于碳数的数据按统计分布拟合。

[0021] 根据本发明所述的方法,优选地,所述统计分布包括伽马分布。

[0022] 根据本发明所述的方法,优选地,步骤(3)中所述分子类型包括正构烷烃(NP)、异构烷烃(IP)、烯烃(O)、环烷烃(NC)及芳烃(A)。其中,所述异构烷烃还包括单支链异构烷烃(MP),双支链异构烷烃(DP),三支链异构烷烃(TP);所述烯烃还包括直链烯烃(NO),异构烯烃(BO)。

[0023] 根据本发明所述的方法,优选地,步骤(4)中所述的直接生成汽油分子组成模型,包括:得到所述完整的单体烃分子组成结果后,为其中每个分子分别建立一个分子对象,该分子对象用于执行查询分子性质和分子含量操作;

[0024] 再建立汽油对象,该汽油对象包括所述分子对象,所述汽油对象用于执行计算汽油宏观性质操作。

[0025] 另一方面,本发明还提供了一种直接构建汽油分子组成模型的系统,其中,所述系统包括:

[0026] 第一单元,所述第一单元用于对汽油样品的气相色谱检测结果进行单体烃分析,以鉴定气相色谱图中各峰可能包含的分子,并计算各峰的相对分率;

[0027] 第二单元,所述第二单元用于根据单体烃分析结果,并按色谱峰类型将色谱峰归类;

[0028] 第三单元,所述第三单元用于对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析,得到完整的单体烃分子组成结果;

[0029] 第四单元,所述第四单元用于由所述完整的单体烃分子组成结果直接生成汽油分

子的组成模型。

[0030] 根据本发明所述的系统,优选地,第三单元中,所述分析为采用基于统计分布的峰调节模块对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析。

[0031] 根据本发明所述的系统,优选地,所述基于统计分布的峰调节模块具体包括:

[0032] 第一模块,所述第一模块用于拟合已知峰分布:将已知峰按分子类型和碳数归类,对归类后的各系列数据按统计分布拟合;

[0033] 第二模块,所述第二模块用于共逸出峰的拆分:将共逸出峰进行拆分,假设共逸出峰中各组分的相对含量,并依次检验所有假设,选取合适的假设接受;不断重复以上过程,直到所有的共逸出峰都拆分完成;

[0034] 第三模块,所述第三模块用于推断未鉴定峰:假设未鉴定峰中所包含组分的分子类型和碳数,并依次检验所有假设,选取合适的假设接受;不断重复以上过程,直到所有的未鉴定峰都推断完成。

[0035] 又一方面,本发明还提供了一种预测汽油宏观性质的方法,其中,所述方法包括以下步骤:

[0036] 根据所述的直接构建汽油分子组成模型的方法构建汽油分子的组成模型,以获得汽油的分子组成及各个分子的性质;

[0037] 根据汽油的分子组成及各个分子的性质通过相应的宏观性质混合规则对汽油的宏观性质进行预测。

[0038] 根据本发明所述的预测汽油宏观性质的方法,优选地,所述宏观性质包括密度、馏程、辛烷值、折射率、分子量及雷德蒸汽压。

[0039] 再一方面,本发明还提供了一种预测汽油宏观性质的系统,其中,所述系统包括:

[0040] 第一单元,所述第一单元用于根据所述的直接构建汽油分子组成模型的方法构建汽油分子的组成模型,以获得汽油的分子组成及各个分子的性质;

[0041] 第二单元,所述第二单元用于根据汽油的分子组成及各个分子的性质通过相应的宏观性质混合规则对汽油的宏观性质进行预测。

[0042] 本发明所提供的该方法以气相色谱检测结果为基础,用基于统计分布的峰调节算法(SPT算法)重建分子组成,然后建立汽油分子组成模型并预测汽油的宏观性质,该方法可以为汽油加工及调和提供准确的数据支持。

[0043] 本发明所提供的该方法与现有方法相比,具有以下优点:

[0044] 1、本发明所提供的该方法结合了实验方法和计算机重建方法的优点,提供了完整,稳定的分子组成结果;

[0045] 2、该方法不需要测定大量样本的波谱及物理性质进行关联训练,工作量小、成本低廉,节省人力物力;

[0046] 3、该方法可以从分子组成直接预测汽油的性质,不受宏观性质实验值的影响,更有参考价值;

[0047] 4、该方法提供的谱图微调算法直接基于统计学分布,不需要宏观性质参与修正,仅需使用气相色谱结果即可实现。

附图说明

[0048] 图1为本发明实施例1所提供的直接构建汽油分子组成模型的方法以及性质预测方法的流程示意图；

[0049] 图2为本发明实施例1中汽油的气相色谱图及三种类型峰(已知峰、共逸出峰及未鉴定峰)的示例；

[0050] 图3为SPT算法步骤一的流程图；

[0051] 图4为SPT算法步骤二的流程图；

[0052] 图5为SPT算法步骤三的流程图；

[0053] 图6为本发明实施例1中正构烷烃系列(NP)分子含量SPT算法处理结果示例图；

[0054] 图7为本发明实施例1中单支链烷烃系列(MP)分子含量SPT算法处理结果示例图；

[0055] 图8为本发明实施例1中双支链烷烃系列(DP)分子含量SPT算法处理结果示例图；

[0056] 图9为本发明实施例1中三支链烷烃系列(TP)分子含量SPT算法处理结果示例图；

[0057] 图10为本发明实施例1中直链烯烃系列(N0)分子含量SPT算法处理结果示例图；

[0058] 图11为本发明实施例1中支链烯烃系列(B0)分子含量SPT算法处理结果示例图；

[0059] 图12为本发明实施例1中环烷烃系列(NC)分子含量SPT算法处理结果示例图；

[0060] 图13为本发明实施例1中芳烃系列(A)分子含量SPT算法处理结果示例图；

[0061] 图14为本发明实施例1中所得汽油样品的性质预测值与汽油样品性质的实验值之间的对比图。

具体实施方式

[0062] 为了对本发明的技术特征、目的和有益效果有更加清楚的理解,现结合以下具体实施例对本发明的技术方案进行以下详细说明,但不能理解为对本发明的可实施范围的限定。

[0063] 实施例1

[0064] 本实施例提供了一种由气相色谱结果直接构建汽油分子组成模型的方法以及汽油宏观性质的预测方法,该方法的流程示意图如图1所示,从图1中可以看出,其包括以下步骤:

[0065] 对催化裂化汽油样品进行气相色谱检测,再对所得检测结果进行单体烃分析(中华人民共和国石油化工行业标准SH/T 0714-2002),以鉴定气相色谱图中各峰可能包含的分子,并计算各峰的相对分率;

[0066] 其中,本实施例中所述气相色谱检测采用美国Agilent公司的Agilent 7890B气相色谱仪进行,该气相色谱仪配备氢火焰离子化检测器(FID)。其中,色谱柱为PONA分析专用的弹性石英毛细管柱,固定相为100%甲基硅酮,柱长为50m,内径为0.2mm,液膜厚度为0.2 μ m;柱前压为86KPa;色谱升温程序的初始温度为35 $^{\circ}$ C,保持5分钟,升温速率为2 $^{\circ}$ C/min,最终温度为200 $^{\circ}$ C,终温停留时间为10分钟;进样器温度为250 $^{\circ}$ C,分流比为150:1,进样量为0.5 μ L;检测器温度为250 $^{\circ}$ C,燃气为氢气,流速为35mL/min,助燃气为空气,流速为350mL/min,补偿气为氮气,流速为35mL/min;载气为氮气,平均线速为12cm/s,该催化裂化汽油样品的气相色谱图如图2所示。

[0067] (2) 根据单体烃分析结果,并按色谱峰类型将色谱峰归类,分为已知峰、共逸出峰

及未鉴定峰;各类型色谱峰的示例见图2所示。

[0068] (3) 采用基于伽马分布的峰调节算法 (SPT) 对归类后的色谱峰,按照色谱峰类型和分子类型进行分析,得到完整的单体烃分子组成结果,其中,基于伽马分布的峰调节算法的具体流程图如图3-5所示,所述完整的单体烃分子组成结果如图6-13所示;

[0069] 步骤(3)中,所述分子类型包括正构烷烃(NP)、异构烷烃、烯烃、环烷烃(NC)及芳烃(A);其中,所述异构烷烃包括单支链异构烷烃(MP),双支链异构烷烃(DP),三支链异构烷烃(TP);所述烯烃还包括直链烯烃(NO),异构烯烃(支链烯烃,BO)。

[0070] 按图3步骤1处理分类后的单体烃(已知峰),得到数据矩阵。数据矩阵中各系列的碳数及相应碳数下的含量分率,是用于拟合的数据。本例中按伽马分布分别对各系列的数据进行拟合,可得到各系列分子含量分布的参数及均方根误差。

[0071] 按图4步骤2拆分共逸出峰:首先假设共逸出峰所包含分子的相对含量。例如共逸出峰中包含分子A和分子B两种组分,不妨假设在该共逸出峰中分子A的相对含量为1,分子B的相对含量为0。这种假设可以有很多个,我们可以建立一个假设列表,并分别检验假设。

[0072] 检验完所有假设后,选取合适的假设,接受此假设中共逸出组分的相对含量,归类并更新数据矩阵。用更新后的数据进行伽马拟合,获取新的参数及均方根误差。

[0073] 按图5步骤3推断未鉴定峰:首先假设未鉴定峰仅包含一种组分。然后假设该组分可能的碳数,以及可能的分子类型。例如,不妨假设某未鉴定峰中包含的分子其类型为芳烃,碳数为10。同样,我们将各种假设集合在一起,建立假设列表,并分别检验假设。检验完所有假设后,选取合适的假设,接受此假设中的分子类型和碳数,归类并更新数据矩阵。用更新后的数据进行伽马拟合,获取新的参数及均方根误差。

[0074] 图6-图13分别展示了各分子系列的含量分布数据经峰调节算法步骤1到步骤3处理后的变化示意图。在本实施例中,分子类型将被划分为8个类别,分别为NP,MP,DP,TP,NO,BO,NC,A。这8个类型的处理结果分别与图6-图13相对应。每个图中包含三个子图步骤1-步骤3,分别与峰调节算法的三个步骤相对应。这些子图的横坐标都为碳数,纵坐标都为质量分率。

[0075] 现以对应双支链烷烃数据的图8为例,介绍峰调节算法三个步骤的结果。为了表述方便,此处将图8的三个子图分别记作图8-1,图8-2和图8-3。图8-1中的散点为峰调节算法的步骤1完成后所得数据矩阵中双支链烷烃系列的分子含量;虚线为步骤1拟合所得的参数 $Parameters_{1,DP}$ 代表的伽马分布。与图8-1类似,图8-2及图8-3中散点分别为峰调节算法中步骤2和步骤3完成后所得数据矩阵中双支链烷烃系列的分子含量,蓝色虚线分别为 $Parameters_{2,DP}$ 及 $Parameters_{3,DP}$ 所代表的伽马分布。从中可以看出,图8-1中散点与虚线的偏离程度较大,尤其是位于C7处的散点显著低于虚线。这是因为一些双支链烷烃分子是以共逸出峰或未鉴定峰的形式存在,因此这部分分子的含量并未统计进入步骤1的数据矩阵中。从图8-2中可以看出,当峰调节算法的步骤2,即共逸出峰拆分完成后,散点的分布已经与虚线接近了许多。

[0076] 图8-3相对于图8-2并没有明显改善,其原因可能有两方面。一是,未鉴定峰的含量分率过低,使其变化不明显;另一方面是存在其他的分子类型的含量分布偏离伽马分布更远,从而让峰调节算法在步骤3的计算过程中,更倾向将未鉴定峰推断为该类型的分子。这种情况可以在图9中看出。图9-2展示了,即使完成了共逸出峰的拆分,三支链烷烃的含量分

布与理想的伽马分布仍然相距较远。因此,算法会更倾向步骤3时将未鉴定峰推断为类型为三支链烷烃的分子。于是图9-3中散点的分布就有了明显改善。

[0077] 再观察对应芳烃数据的图13。图13-1显示C7处的芳烃含量为0。这是因为在GC-FID实验环境中,甲苯总是与2,3,3-三甲基戊烷共流出。经过峰调节算法的处理,即能得到一个相对合理的甲苯含量。另外,值得一提的是,分子库中所有的11个正构烷烃通常能全部被GC-FID鉴定出,且没有共流出现象。因此,对应正构烷烃数据的图6中所有图像都是一样的。

[0078] 由此可见,经过峰调节算法重建后的汽油分子组成的分布曲线显得更加合理。

[0079] (4) 由所述完整的单体烃分子组成结果采用软件(性质预测模块,更具体地为分子组成模型)直接生成汽油分子的组成模型,其具体包括:读取分子组成信息,实例化汽油对象,分子组成中每个分子都被实例化为分子对象包含于汽油对象中;

[0080] (5) 根据所述汽油分子的组成模型获得汽油的分子组成及各个分子的性质,再由该获得汽油的分子组成及各个分子的性质通过混合规则对汽油的宏观性质进行预测;其具体包括:汽油分子组成模型即通过分子组成建立汽油对象,对象中包含了由各个分子建立的分子对象,分子对象可以执行查询分子性质,分子在汽油中的相对含量等一系列操作。各分子的性质来源于NIST数据库。汽油对象可以执行计算汽油宏观性质等一系列操作。宏观性质是通过各分子的分子性质,相对含量,以及相应的宏观性质混合规则计算得到的。

[0081] 其中,预测值见表1所示。汽油样品的性质预测值与汽油样品性质的实验值(采用本领域常规方法测得)之间的对比图如图14所示。

[0082] 表1

[0083]

性质	预测值	性质	预测值
比重	0.7402	临界温度 (°C)	268.8
初馏点(°C)	28.5	临界压力 (KPa)	3338.1
5%馏出温度 (°C)	45.9	临界体积(m ³ /kmol)	0.3754
10%馏出温度 (°C)	48.3	临界压缩因子 r	0.2696
30%馏出温度 (°C)	70.1	偏心因子	0.2926
50%馏出温度 (°C)	103.7	折射率	1.4148

[0084]

70%馏出温度 (°C)	127.9	特性因数	11.77
90%馏出温度 (°C)	156.8	表面张力(dyne/cm)	22.04
95%馏出温度 (°C)	170.6	苯胺点 (°C)	55.9
终馏点(°C)	178.1	浊点 (°C)	-77.1
研究法辛烷值	91.9	马达法辛烷值	79.3
烯烃含量 (volume%)	32.1	碳氢质量比	6.60
环烷烃含量 (volume%)	10.8	蒸发热 (kJ/kg)	325.4
芳烃含量 (volume%)	23.1	分子量 (g/mol)	94.4
雷德蒸汽压 (KPa)	62.5		

[0085] 注：表1中催化裂化汽油样品的各项宏观性质的实验值均为采用本领域常规方法测得的，具体而言，其中，比重是根据GBT 1884-2000测得，馏程是根据GBT 6536-2010测得，研究法辛烷值是根据GBT 5487-1995测得，烃类含量是根据GBT 11132-2008测得，雷德蒸汽压 (KPa) 是根据GBT 8017-2012测得。

[0086] 目前，本领域现有的汽油分子层次组成模型通常是宏观性质的实验值来调节组成，再由所得的组成去预测汽油的宏观性质。因此，该模型受输入的宏观性质实验值影响非常大，如果汽油的宏观性质的实验误差较大，那么这种模型的预测值也会有较大误差。与这种模型不同，本申请所提供的该模型在预测汽油性质时只依据GC-FID分析和峰调节算法处理后所得的结果，因此，其不受汽油性质实验值的影响，从而更有参考价值。

[0087] 目前ASTM D86蒸馏曲线的初馏点和终馏点的预测通常比较困难，从表1中可以看出，在本申请所提供的模型中其也能得到不错的结果；现有烯烃，环烷烃，芳烃的体积分数实验值是由荧光法测得的，但这种方法的误差较大，且重现性不好，而本申请模型预测所得体积分数是基于GC-FID分析所得的单体烃质量分数获得的，其结果更准确，且重现性好。因此，本申请该模型预测所得的体积分数应该更可信；此外，从表1中还可以看出，采用本发明所提供的方法得到的辛烷值和雷德蒸汽压等重要性质，也具有有良好的预测效果。

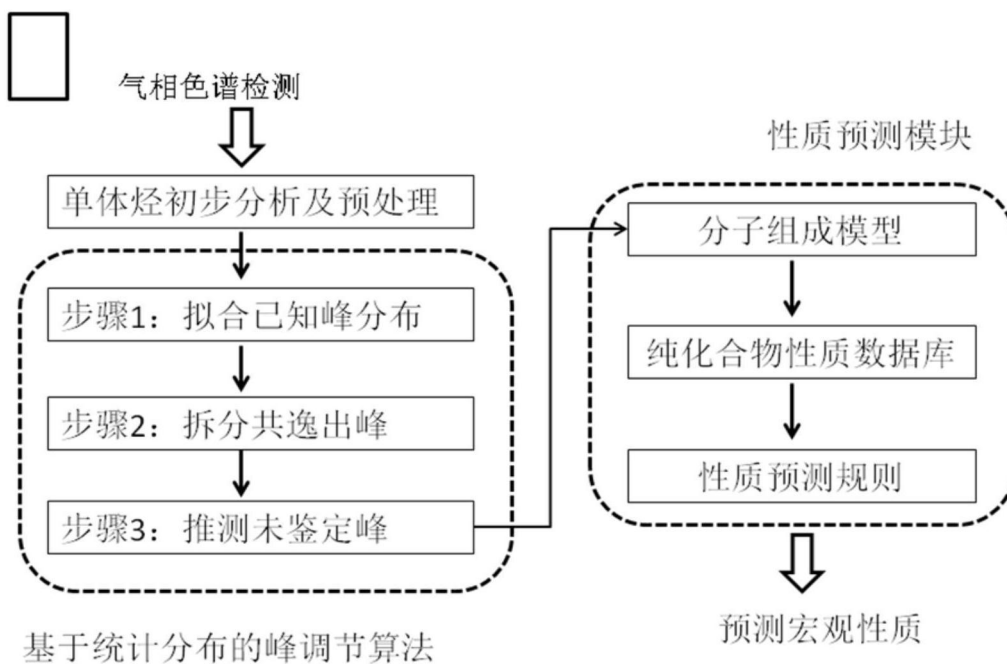


图1

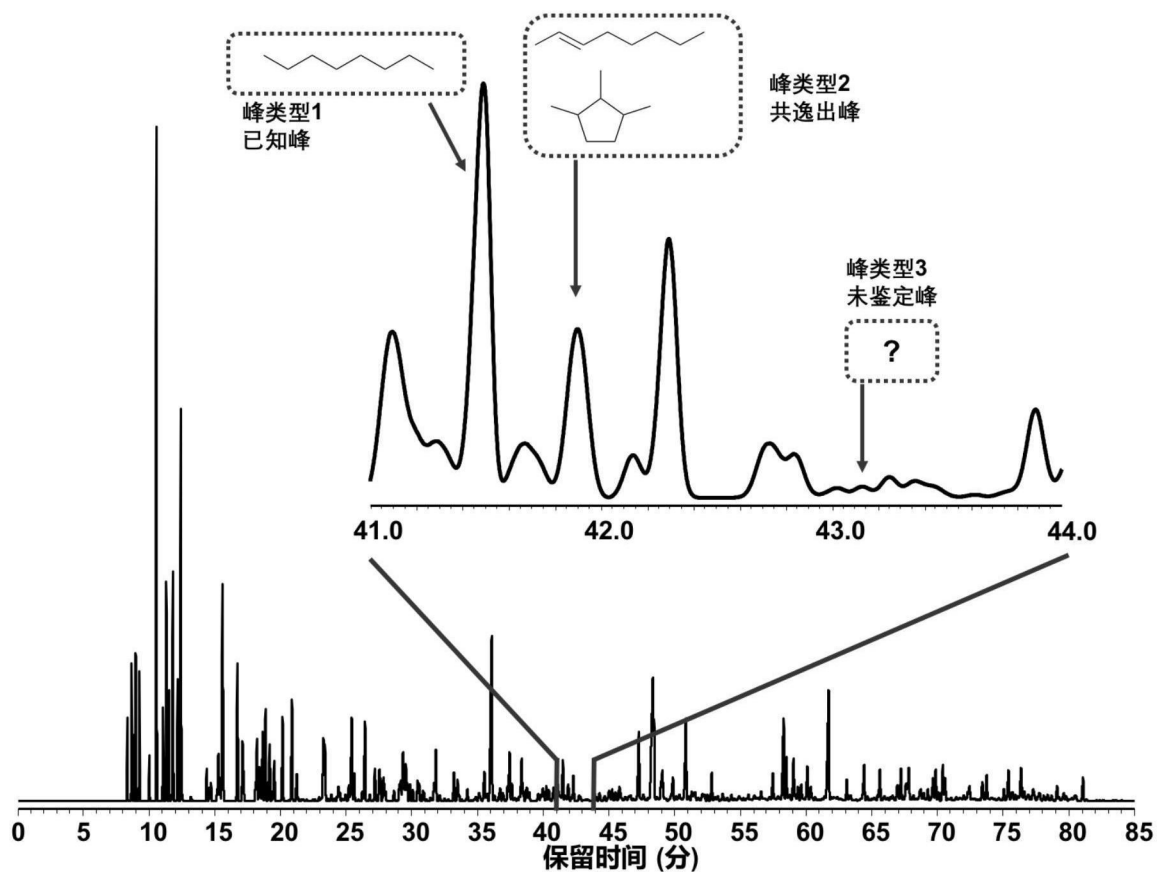


图2

步骤1:

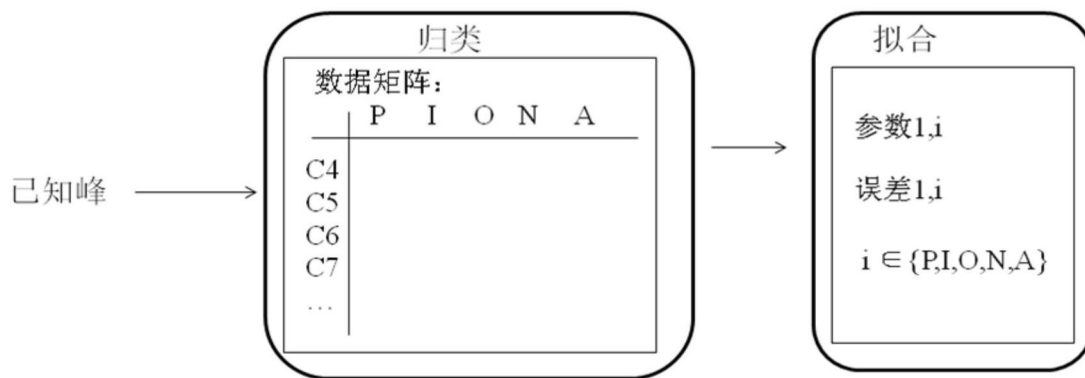


图3

步骤2:

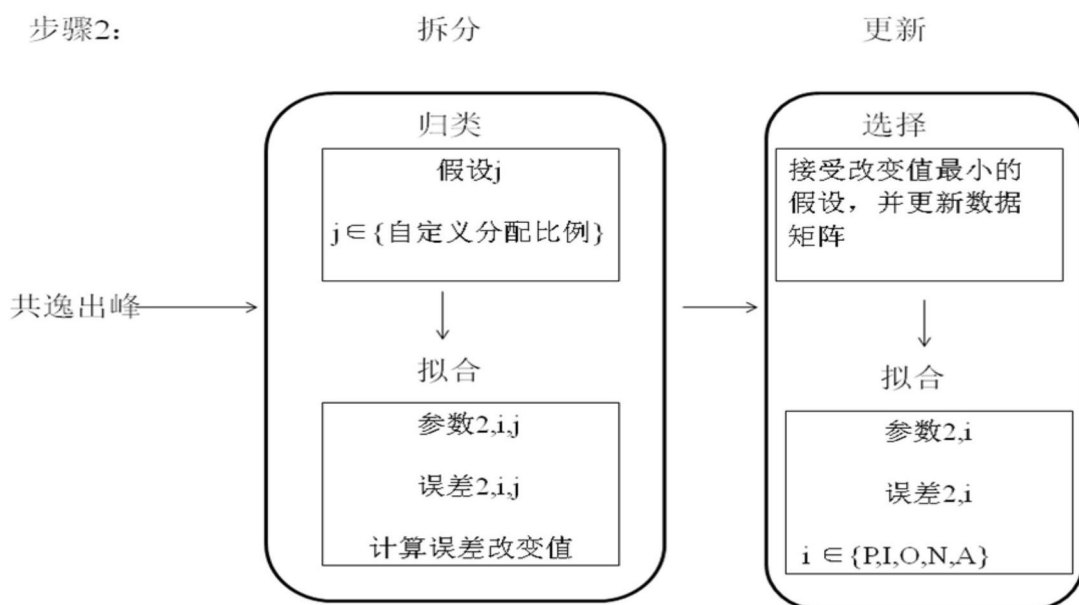


图4

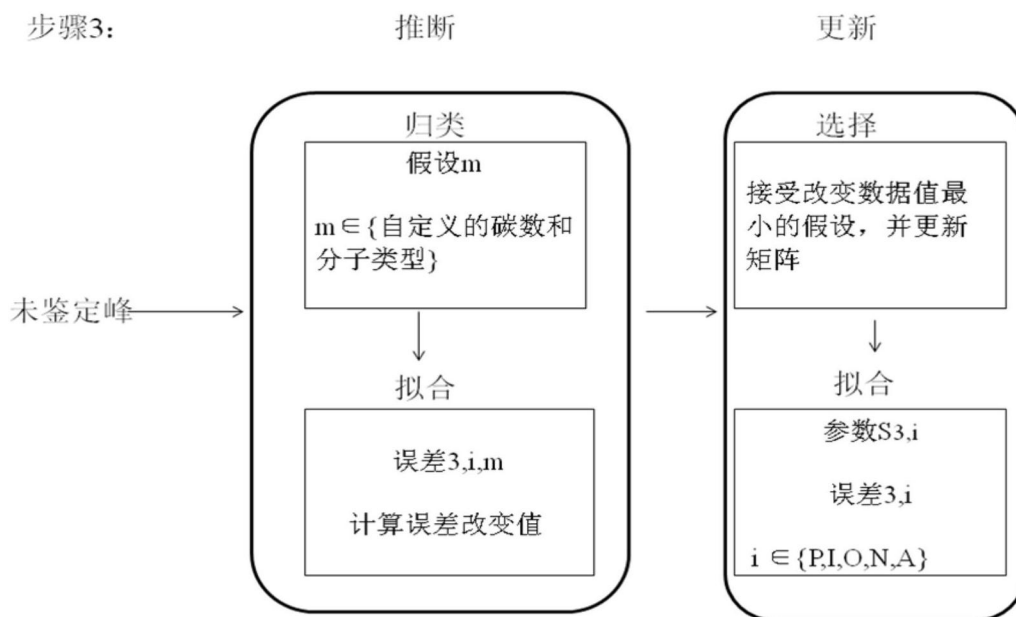


图5

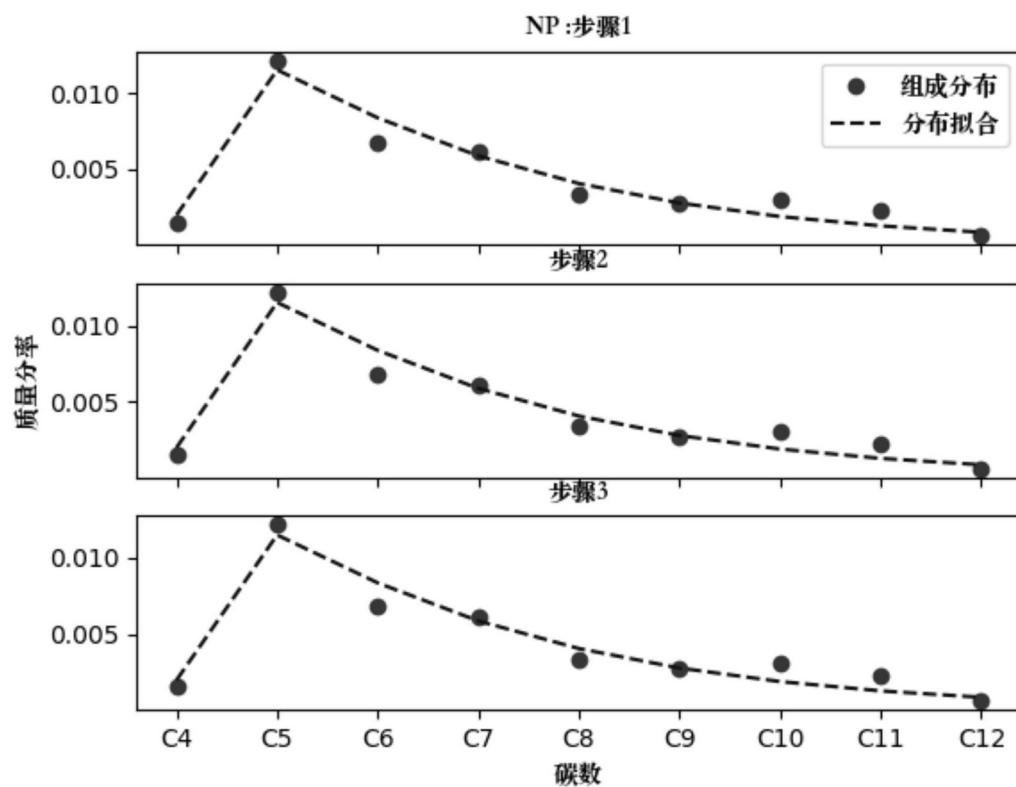


图6

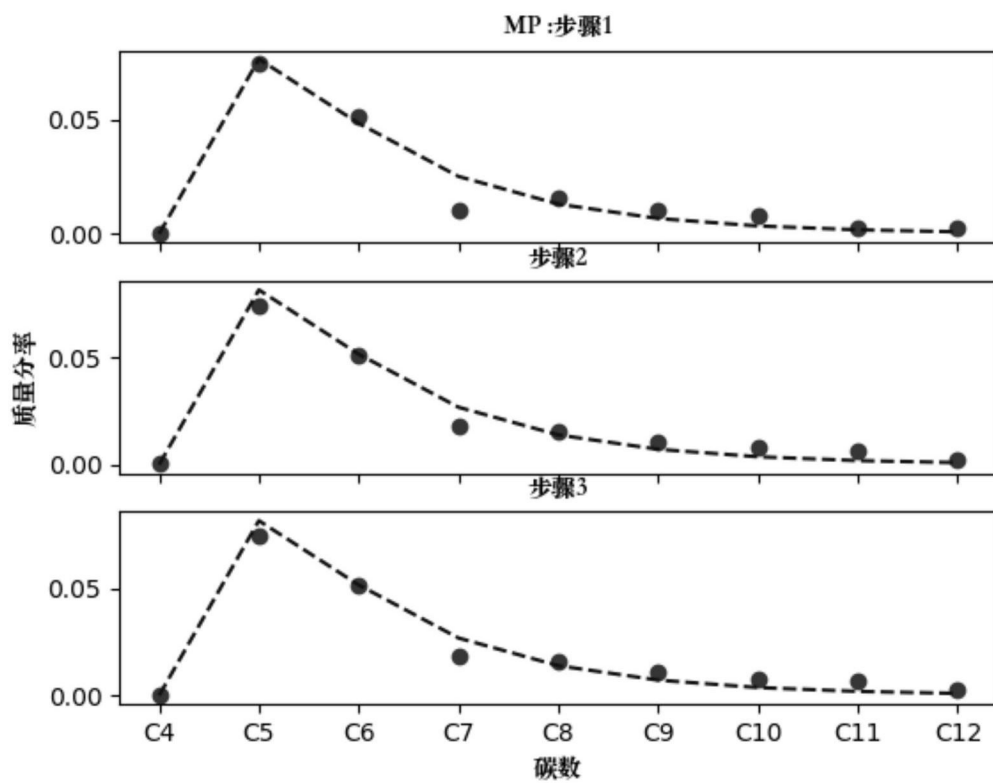


图7

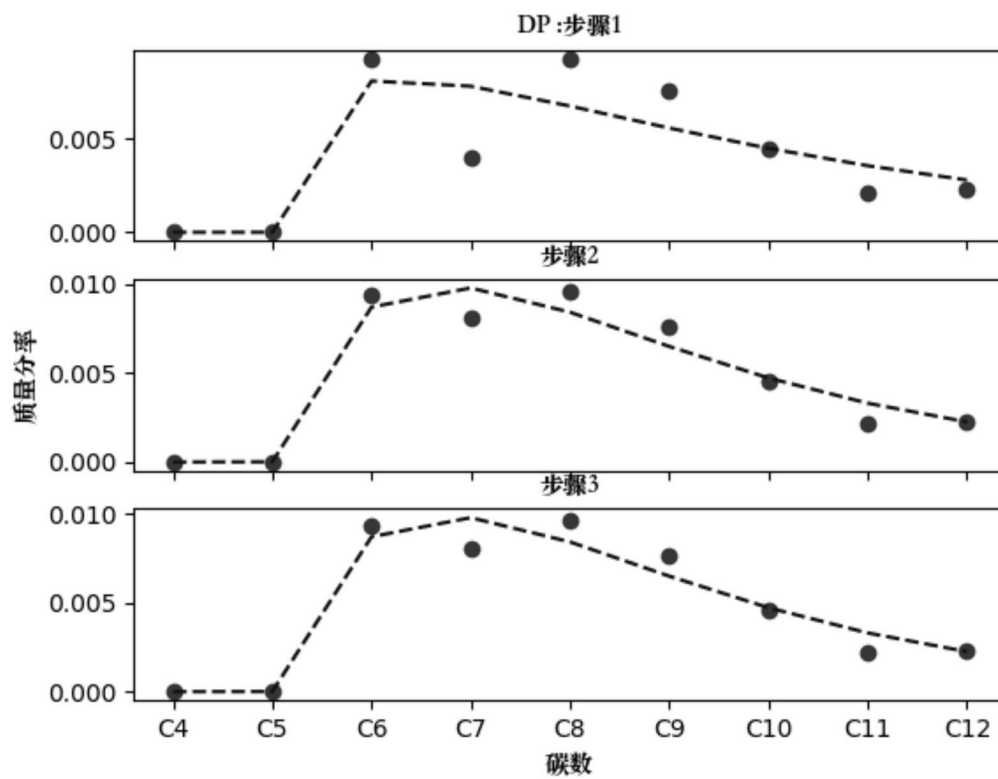


图8

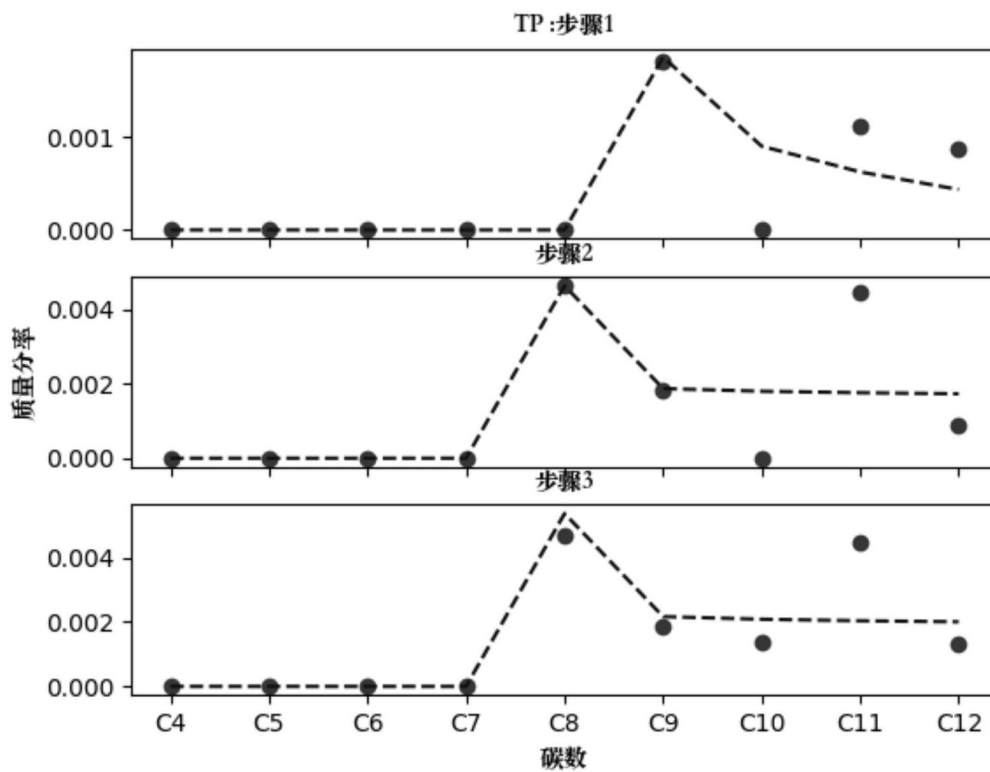


图9

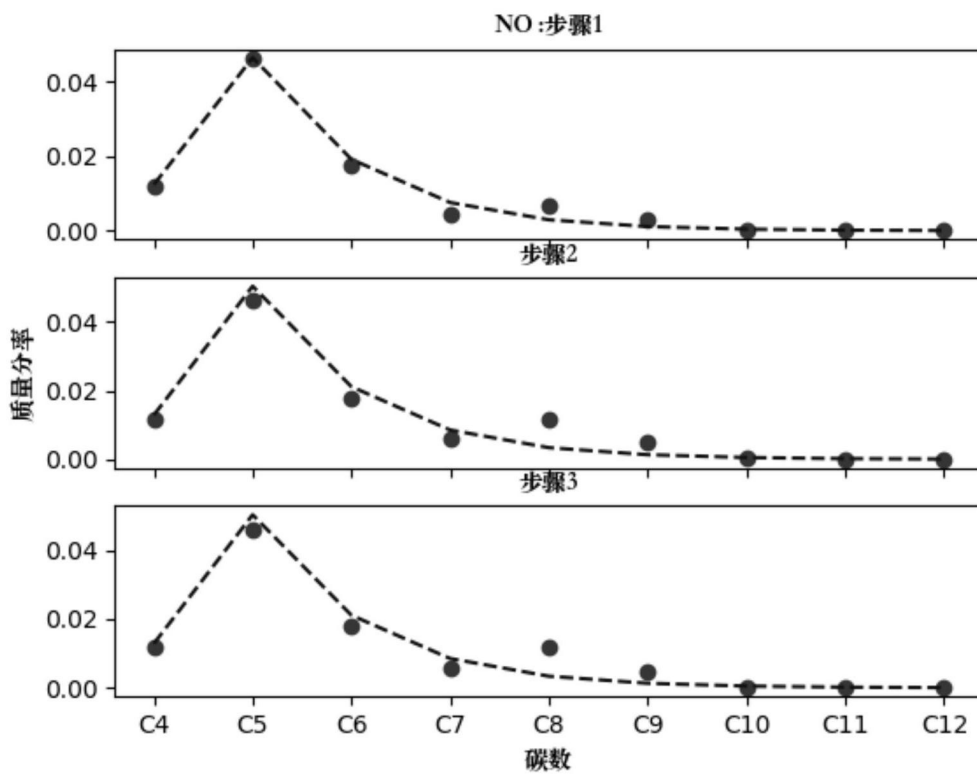


图10

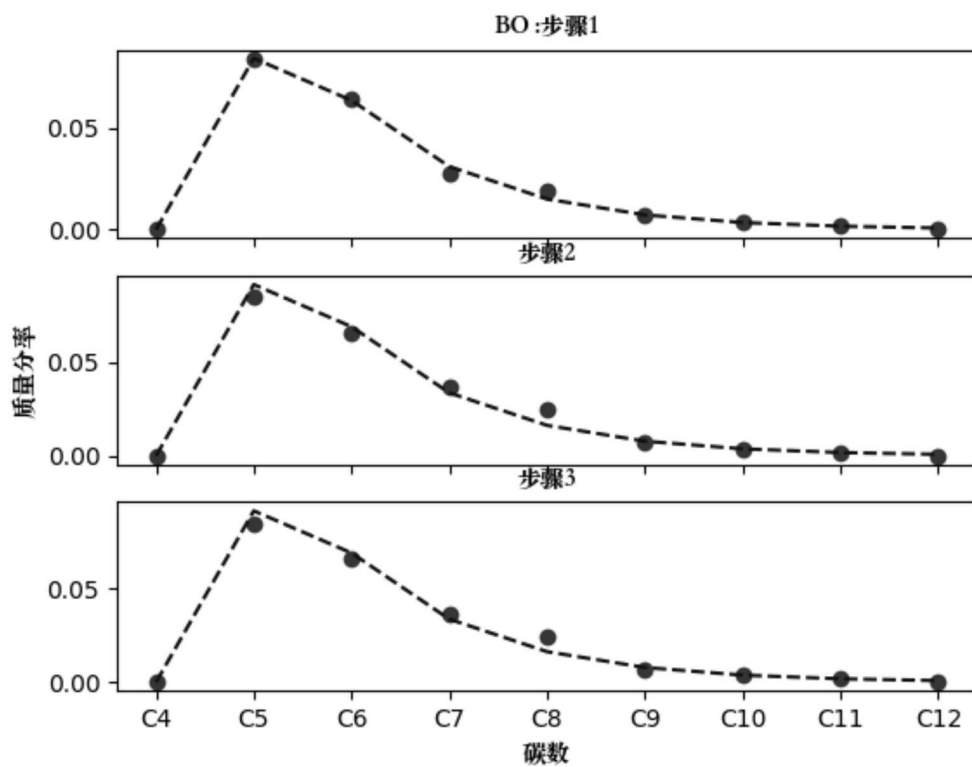


图11

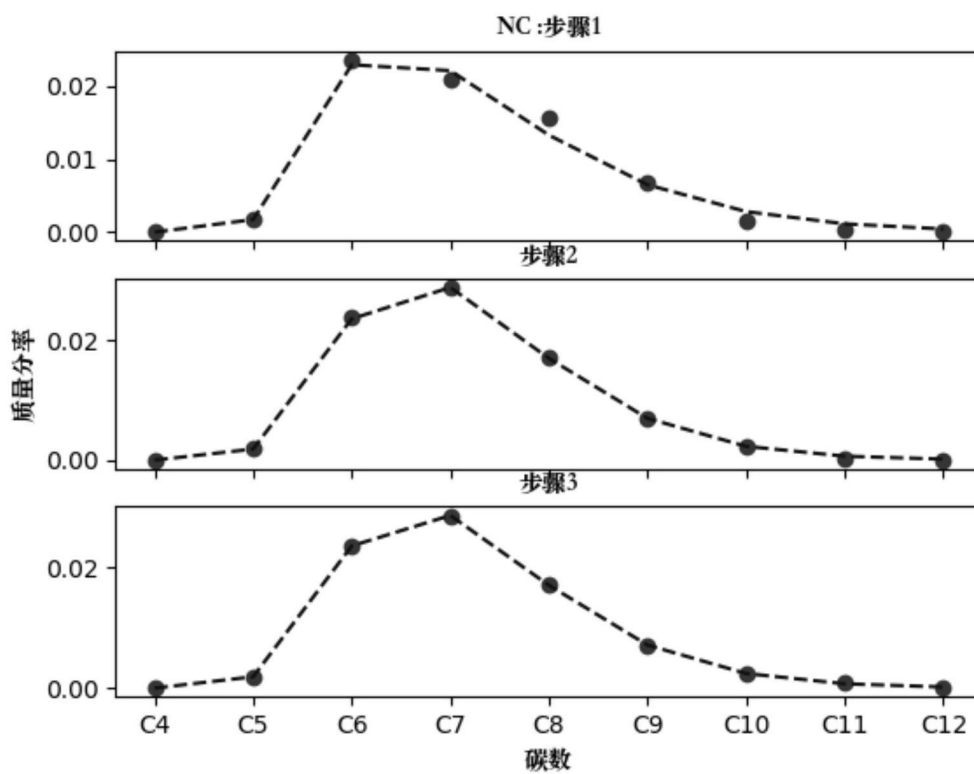


图12

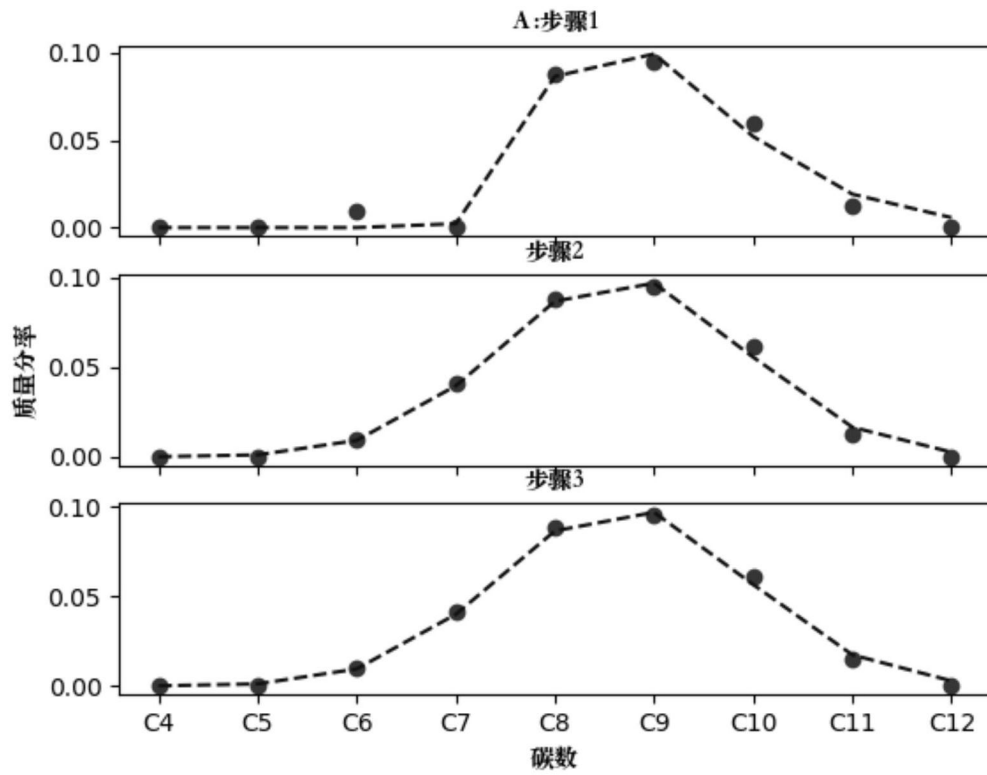


图13

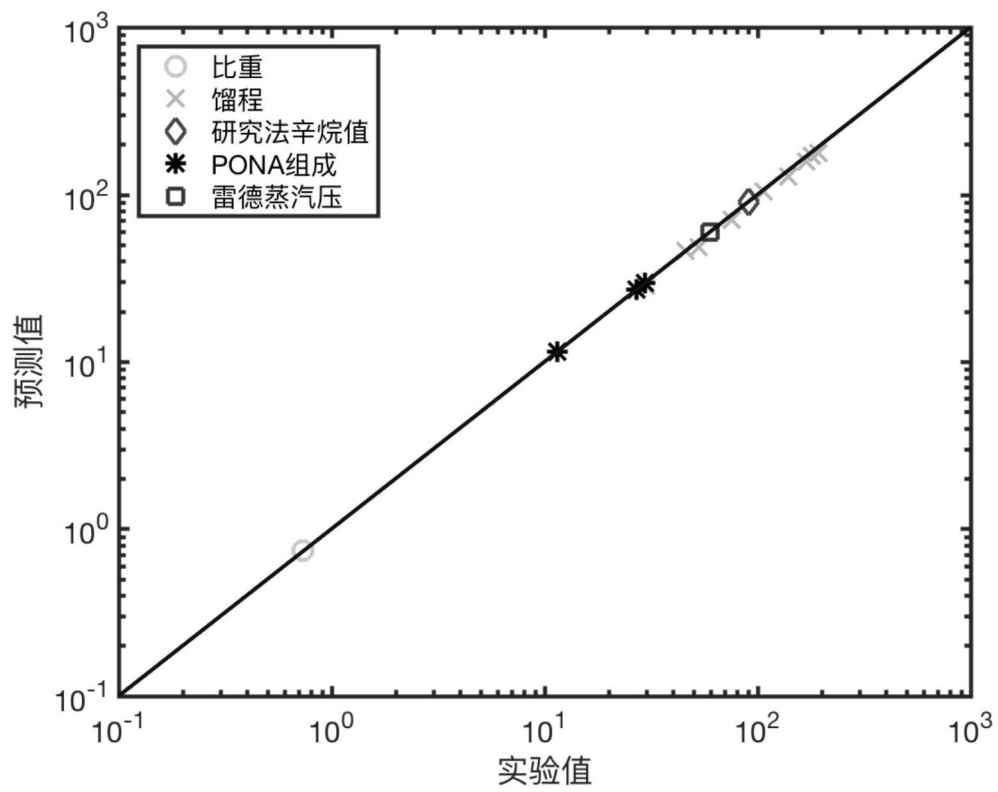


图14