

基于逐步回归的生物航煤属性鉴别

夏莹^{1,2}, 段逸品¹, 张子豪¹, 蔡国田², 肖前^{1*}

(1. 广州海关技术中心, 广东 广州 510623; 2. 中国科学院广州能源研究所, 广东 广州 510640)

摘要: 针对现行航空喷气燃料标准仅规定常规指标, 无法鉴别来源(石油基、生物基或混合), 存在监管盲区的实际情况, 该文提出逐级鉴别策略(主要成分初筛-理化性质定性-生物基碳含量确证), 用于酯和脂肪酸加氢改质合成煤油(HEFA-SPK)的属性鉴别。首先, 基于气相色谱-质谱(GC-MS)分析, 排除碳数分布不在C6~C17的燃料; 其次依据密度及芳烃含量快速定性, 辅以馏程、闪点综合评判; 最后以生物基碳含量确证, 高于97.0%时判定为纯生物基燃料, 低于0.5%检出限时认定为石油基燃料。掺混比例在1%~30%范围时, 采用逐步回归构建基于闪点、馏程宽度及生物基碳含量的掺混比例预测模型, 并经配对 t 检验验证。结果表明, 模型可准确预测HEFA-SPK掺混比例($R^2>0.99$), 为生物航煤监管与来源识别提供技术支撑。

关键词: 酯和脂肪酸加氢改质合成煤油(HEFA-SPK); 属性鉴别; 生物基碳含量; 掺混比例

中图分类号: O657; U473.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-4957(2026)10-0001-08

Attribute Identification of Bio-aviation Jet Fuel via Stepwise Regression

XIA Ying^{1,2}, DUAN Yi-pin¹, ZHANG Zi-hao¹, CAI Guo-tian², XIAO Qian^{1*}

(1. Guangzhou Customs Technology Center, Guangzhou 510623, China; 2. Guangzhou Institute of Energy Conversion, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, China)

Abstract: Current aviation jet fuel specifications only prescribe basic technical indicators, thus creating a regulatory gap because they cannot effectively distinguish between conventional petroleum-derived sources, bio-based sources, or their blends. To address this issue, a stepwise identification strategy comprising component screening, rapid physicochemical qualitative analysis, and bio-based carbon content confirmation is proposed for the attribute identification of hydroprocessed esters and fatty acids synthetic paraffinic kerosene (HEFA-SPK). First, gas chromatography-mass spectrometry is performed to screen the carbon number distribution; samples outside the typical aviation fuel range (C6-C17) are excluded. Subsequently, rapid qualitative discrimination is achieved based on density and aromatic content, supplemented by distillation range and flash point as auxiliary parameters for a comprehensive evaluation. Finally, bio-based carbon content serves as the key evidence: a measured content above 97.0% identifies HEFA-SPK, while a value below the detection limit of 0.5% indicates petroleum-based jet fuel. For intermediate blending ratios (1%-30%), a stepwise regression approach is employed to develop a predictive model for the blending ratio of bio-based fuel, and the model is validated via a paired t -test. Results show that the linear regression model based on flash point, distillation range, and biogenic carbon content accurately predicts the blending ratio ($R^2>0.99$), thus providing reliable technical support for the quality supervision and source identification of bio-based aviation fuel.

Key words: hydroprocessed esters and fatty acids synthetic paraffinic kerosene (HEFA-SPK); attribute identification; biogenic carbon content; blending ratio

在“双碳”战略的目标驱动下, 生物航空煤油(以下简称“生物航煤”)由于其显著的全生命周期碳减排优势, 已成为航空业深度脱碳的关键技术路径^[1-2]。然而, 生物航煤的主要化学成分(C6~C17烷烃类混合物)与传统石油基航空燃料高度一致^[3], 成分的相似性导致现有产品标准无法有效鉴别燃料来源属性(石油基、纯生物基或二者掺混调和), 由此催生了建立精准属性鉴别方法的现实技术需求。

收稿日期: 2026-07-16; 修回日期: 2026-08-13

基金项目: 广州海关科研项目(2025GZCK08); 海关总署科研项目(2025HK243)

* 通讯作者: 肖前, 硕士, 研究员, 研究方向: 再生资源环境风险识别与碳排放评估研究, E-mail: xiaq@iqtcnet.cn

现行航空燃料产品标准(如 GB 6537-2025《3号喷气燃料》, MH/T 6106-2014《含合成烃航空喷气燃料技术要求》和 SN/T 2045-2022《进出口燃料油产品技术规范》^[4-6])仅规定了合格性技术指标,未涉及燃料来源与属性的鉴别。上述标准虽给出了完全由酯及脂肪酸加氢改质工艺生产的生物航煤(HEFA-SPK)及其掺混传统石油基航空燃料后的生物航煤规格参数,但对石油基和生物基燃料的区分能力,无法回答燃料原始来源归属这一关键问题^[4-6]。这一局限性制约了海关及市场监管部门对生物航煤来源属性的精准识别,也阻碍了对国产生物燃料国际贸易流向的有效追踪。因此,建立科学可靠、适用于进出口生物航煤的产品属性鉴别方法,具有迫切的现实需求和重要的创新意义。

针对上述问题,国内外学者已开展相关探索。在燃烧性能方面,刘文杰等^[7]通过调节 HEFA-SPK 掺混比例,发现中低掺混比(体积比低于 50%)下生物燃料可实现与传统喷气燃料相当的燃烧性能,且污染物排放水平显著降低,环境效益明显。在化学组成层面,马晨菲等^[8]采用全二维气相色谱-飞行时间质谱表征了喷气燃料和生物航煤的烃类组成,指出二者碳数分布均在 C6~C17 范围内,但生物航煤几乎不含芳烃,且异构链烷烃含量较高,不同来源样品在异构链烷烃和单环环烷烃含量上存在差异。在掺混影响方面,代佳林等^[9]发现生物航煤掺入 3 号喷气燃料后,对净热值、腐蚀性、热安定性、胶质含量等关键指标基本无影响。在掺混比例测定方面,樊婕等^[10]基于 15 °C 密度与 20 °C 运动黏度建立了混合模型,初步实现了 HEFA-SPK 掺混比例的测定,但该模型难以直接作为掺混比例的预测依据。此外,王睿思等^[11]基于加速器质谱仪(AMS)的 ¹⁴C 检测技术,设计了生物质与煤混燃过程中掺烧比的测定方法,显著提升了输入侧掺混比例的检测精度,为基于组分示踪的掺混比例识别提供了技术参考。

综上,现有研究多集中于生物航煤掺混后的燃烧性能、组成特征及常规理化指标变化,在燃料来源属性的系统鉴别方法及掺混比例的定量预测方面仍存在技术空白。为此,本研究整合主要成分分析、理化性质检测与生物基碳含量测定,建立了适用于 HEFA-SPK 的属性鉴别方法;采用逐步回归构建和优化生物基燃料的掺混比例预测模型,并通过配对 *t* 检验验证其有效性,以期为生物航煤的来源追溯、掺混核查及质量监管提供系统性的方法支撑与技术依据。

1 实验部分

1.1 试验材料

试验材料选取纯 HEFA-SPK 和传统石油基组分的 3 号喷气燃料各 6 个批次记作第 1、第 2 组,样品来源覆盖主要生产企业。选择高芳烃含量的传统石油基组分,与 HEFA-SPK 合成烃类组分进行掺混调和,获得含 HEFA-SPK 的航空喷气燃料共计 6 个批次(混合后样品中 HEFA-SPK 的体积分数不高于 50%),记作第 3 组。

根据行业调研,当前生物航煤掺混系统的实际运行掺混比例多控制在 30% 以内(以 20% 居多),混合燃料需经静置稳定性与安全性验证后方可投入使用,以满足国内及国际通行的航煤掺混比例要求^[12]。此外,常规航空煤油的芳烃含量(体积分数)大多约为 15%,若 HEFA-SPK 掺混比例过高,将导致混合产物在芳烃含量等关键指标上低于标准限值要求(体积分数不高于 8%)。综合上述运行实践与燃料特性约束,本研究将 30% 设为掺混上限。

1.2 检测方法

1.2.1 化学成分检测 采用气相色谱-质谱联用(GC-MS)对 3 组样品的化学成分进行分析。色谱柱为 Agilent J&W HP-5MS 毛细管柱(30 m × 0.25 mm × 0.25 μm);柱流速 1.0 mL/min,分流比 250:1;进样口温度 280 °C,进样量 1.0 μL。升温程序:初始温度 40 °C,保持 5 min,以 8 °C/min 升至 200 °C,再以 15 °C/min 升至 300 °C 保持 10 min。质谱条件采用电子轰击(EI)离子源,离子源温度设置 230 °C,质量扫描范围 *m/z* 50~550,采用全扫描模式采集数据。目标化合物基于 NIST 质谱谱库检索与保留时间对比进行定性分析,匹配度阈值设为 70%。

1.2.2 理化性质检测 根据 GB 6537-2025 和 SN/T 2045-2022 的技术要求,3 组样品在理化性质方面的区别如表 1 所示。对样品的密度、馏程、芳烃含量、冰点、闪点等理化性质进行检测,方法参考 GB 6537-2025^[4]。其中,芳烃体积分数高于 5% 检测限时,按照 GB/T 11132^[13] 荧光指示剂吸附法对芳烃含量进行检测,低于 5% 时,采用 NB/SH/T 0606-2019^[14] 方法检测其质量分数。

表 1 各种燃料理化性质的区别
Table 1 Comparison of physicochemical properties of different fuels

Item	Group 1 (HEFA-SPK)	Group 2 (Conventional petroleum based jet fuel)	Group 3(HEFA-SPK/jet fuel blends)
Density (20 ℃)	726~767 kg·m ⁻³	775~830 kg·m ⁻³	
Distillation range	10%回收温度不高于 205 ℃，终馏点不高于 300 ℃ T90-T10 ^a ≥ 22 ℃	10 %回收温度不高于 205 ℃，50 % 回收温度不高于 232 ℃，终馏点不超过 300 ℃	
Aromatics	质量分数≤0. 5%	—	T50-T10 ^b ≥ 15 ℃ T90-T10≥ 40 ℃
Others	— 冰点≤-40 ℃ 闪点≥38 ℃	— 冰点≤-47 ℃ 闪点≥38 ℃	Volume fraction ≥8%

^aT90-T10: The difference between the 90% and 10% recovery temperatures in the distillation range; ^bT50-T10: The difference between the 50% and 10% recovery temperatures in the distillation range; ^cFor civil jet fuel, the specified volume fraction is no greater than 25%(^a馏程 90 % 回收温度与 10 %回收温度差值; ^b馏程 50%回收温度与 10%回收温度差值; ^c对民用喷气燃料规定为体积分数不大于 25%)

1.2.3 生物基碳含量 由于 HEFA-SPK 源自生物质原料，而传统石油基喷气燃料基于化石资源，二者在碳源属性上存在根本性区别。基于这一差异，采用放射性碳(¹⁴C)检测方法测定燃料中的现代碳含量，能够为判别 HEFA-SPK 的掺混比例提供可靠的量化依据。在无现代¹⁴C 污染的实验室中，样品经石墨化前处理后，放入锡舟，压口封样，打开全自动石墨化合成系统(AGE)。样品先通过元素分析装置(EA)的燃烧单元，彻底氧化并转化为 CO₂，随后自动完成样品碳含量检测，获得样品碳含量(质量分数)，记作 X_0 (%)。系统根据样品碳含量自动完成后续的 CO₂纯化、石墨化合成等步骤，最后将生成的石墨压制成靶，利用 AMS 测试。数据结果经 AMS 自身检测的同位素 ¹³C/¹²C 进行同位素分馏校正和本底扣除，并以现代碳比例(F_m)的形式报道。所有样品重复测定 2 次，测试结果的误差为± 0. 1%。样品中生物基碳的含量 X (%)和基于试样的生物基碳含量 X_B (%)计算公式如式(1)、(2)所示：

$$X = F_m / \text{REF} \times 100\% \tag{1}$$

$$X_B = (X/100) \times (X_0/100) \times 100\% \tag{2}$$

其中， F_m 作为现代碳比例，是 AMS 测定的试样数值，REF 是大气校正因子，数值参考 ASTM D6866 (2026 年取值 99. 1)。

1.3 掺混比例统计分析

在对样品产品属性定性分析的基础上，采用 SPSS AU 在线分析软件对产品属性进行统计分析，构建 HEFA-SPK 组分在样品中掺混比例的预测模型，并对模型的误差和系统偏差进行分析评价。运用多元逐步回归分析，研究掺混比例对样品密度、闪点、冰点、馏程、芳烃组分、生物基碳含量等理化性质检测结果的影响，通过计算预测值与实测值间的均方根误差(RMSE)与平均绝对误差(MAE)，并辅以配对样本 t 检验($\alpha=0. 05$)，定量评估模型的预测性能。将密度、闪点、冰点、馏程(10%回收温度)、馏程(50%回收温度)、馏程(90%回收温度)、馏程(终馏点)、T50-T10、T90-T10、芳烃组分、生物基碳含量(质量分数)分别赋值 $x_1, x_2, \dots, x_n$ ，建立生物燃料掺混含量(y)的多元线性回归一般模型。再通过筛选受影响更显著的因子，组成逐步回归模型，以提升预测方程的稳定性。

模型的预测性能通过计算预测值与实测值之间的 RMSE 和 MAE 进行定量评价，并辅以配对样本 t 检验(显著性水平 $\alpha=0. 05$)，以检验预测结果的系统性偏差。

2 结果与讨论

2.1 分子组成的分析

通过碳数分布对目标燃料组分进行有效筛选。航空喷气燃料的碳数分布集中在 C6~C17 烷烃范围，这一区间决定了其馏程、燃烧性能和低温流动性等关键指标满足航空涡轮发动机的使用要求^[3]。石脑油与柴油的碳数分布则分别集中于 C4~C12 和 C9~C25 区间，前者馏分过轻、闪点偏低，后者馏分偏重、低温流动性不足，均无法直接满足航空燃料的技术规格要求。因此，通过 GC-MS 对样品碳数分布进行初筛，可快速判定样品的基本类型—若碳数主峰和分布范围不属于 C6~C17 区间，即可初步排除其属于航空燃料范畴的可能性，从而判断其是否适用于后续航空燃料属性鉴别流程。

HEFA-SPK 的 GC-MS 总离子流图如图 1 所示, 其碳数分布在 C6~C17 范围内, 与石油基航煤的碳数区间一致, 这是其能够与石油基航煤以任意比例调和而不显著改变基础燃料性能的结构基础。与石油基航煤相比, HEFA-SPK 的碳数分布呈显著非对称性, 异构烷烃的色谱峰数目明显增多, 种类更为多样。结合文献报道^[15-16], 该特征主要源于 HEFA-SPK 生产过程中对正构烷烃的选择性异构化: 加氢裂化与异构化反应使长链正构烷烃发生碳链断裂与骨架重排, 导致产物中异构烷烃的相对丰度明显高于正构烷烃。

综上, 碳数分布分析为航空燃料属性鉴别提供了第一层级的筛查依据—碳数分布范围吻合 C6~C17 区间者方可进入后续鉴别流程, 不符合者可直接排除, 为后续理化性质定性与生物基碳含量确证提供了有价值的指向性信息。

2.2 理化性质特征的分析比较

表 2 汇总了本研究涉及样品的理化特性。首先, 就石油基喷气燃料而言, 不同批次样品在密度、冰点及芳烃含量等关键指标上均表现出一定差异, 这主要归因于原油来源、炼制工艺及调和配方的差异。为满足产品规格, 炼厂通常将直馏、加氢精制及加氢裂化等不同工艺所得馏分进行混合, 该过程直接影响了最终产品的理化性质分布。

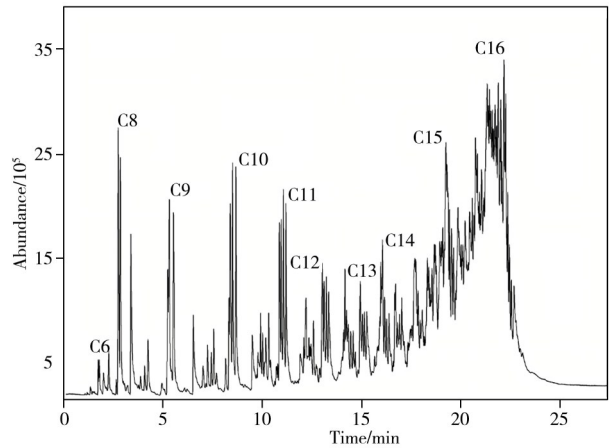


图 1 HEFA-SPK 全扫描总离子流色谱图(C6~C17 碳数范围的烃类化合物)

Fig. 1 Full-scan total ion chromatogram of HEFA-SPK (hydrocarbons in C6~C17 carbon number range)

表 2 各组样品理化性质测试分析结果

Table 2 Analytical results for physicochemical properties of different fuels

Group	No.	Blending ratio (volume fraction)/%	Density (20 °C)/(kg·m ⁻³)	Flash point/°C	Freezing point/°C	10% recovery temperature/°C	50% recovery temperature/°C	90% recovery temperature/°C	Final boiling point/°C	T50-T10/°C	T90-T10/°C	Aromatics/%	Biobased carbon content (mass fraction)/%
Variable assignment		y	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}
Group 1 (HEFA-SPK)	1	100	756.3	42.0	-80.4	166.0	223.0	270.0	286.0	57.0	104.0	0.2 ^a	98.75
	2	100	763.3	40.5	-73.8	167.7	256.5	282.5	284.6	88.8	114.8	0 ^a	98.82
	3	100	766.2	41.0	-70.2	168.0	253.5	283.0	315.9	85.5	115.0	0.2 ^a	99.13
	4	100	766.8	42.0	-47.0	172.8	251.7	277.6	285.2	78.9	104.8	0.3 ^a	98.96
	5	100	751.5	48.5	-54.0	172.9	224.6	260.7	266.3	51.7	87.8	0.2	98.51
	6	100	749.2	39.5	-76.3	162.0	202.5	254.0	273.0	40.5	92.0	0	98.93
Group 2 (Conventional petroleum based jet fuel)	1	0	803.5	45.5	-54.3	169.3	199.0	241.8	253.6	29.7	72.5	18.2	0.15
	2	0	809.1	47.0	-59.4	175.7	201.4	233.4	240.9	25.7	57.7	11.8	0.20
	3	0	807.4	45.5	-53.9	170.4	200.7	240.7	251.5	30.3	70.3	17.5	0.32
	4	0	799.6	48.5	-59.5	175.1	180.9	222.9	239.8	5.8	47.8	17.7	0.18
	5	0	798.1	46.0	-58.0	167.9	188.6	220.9	232.2	20.7	53.0	15.6	0.02
	6	0	797.1	48.5	-56.0	173.9	197.8	233.6	251.2	23.9	59.7	9.3	0.08
Group 3 (HEFA-SPK/jet fuel blends)	1	5	802.5	45.0	-55.2	169.9	201.2	247.2	259.5	31.3	77.3	16.8	4.87
	2	10	803.0	44.5	-55.8	170.2	203.6	250.2	263.0	33.4	80.0	15.9	9.44
	3	15	798.6	44.5	-56.3	170.1	204.2	255.8	269	34.1	85.7	14.8	14.33
	4	20	796.4	44.5	-56.9	169.4	206.4	260.9	272.4	37	91.5	13.7	19.20
	5	25	794.4	44.5	-57.4	168.7	208.6	265.2	275.2	39.9	96.5	13.4	23.82
	6	30	792.4	44.0	-58.0	169.0	210.7	267.9	276.0	41.7	98.9	12.1	28.70

mass fraction of aromatic components was determined by NB/SH/T 0606-2019^[14](按 NB/SH/T 0606-2019 方法检测芳烃组分的质量分数)

其次, 第 1 组样品作为酯类及脂肪酸经加氢裂化与异构化制得的产物, 其理化性质受原料组成和工艺条件的显著影响。异构化程度的不同会直接影响产品的冰点和闪点, 致使不同批次间的组分特性存在较明显差异^[17-19]。然而, 与常规石油基航空喷气燃料相比, HEFA-SPK 整体呈现低密度、宽馏程

及低芳烃含量的特征，可作为掺混比例的辅助定性指标。

对于全部样品的理化特性，密度(20℃)、闪点、冰点、芳烃含量及馏程宽度(T50-T10、T90-T10)等指标与掺混比例之间均呈现良好的线性关系。由图2可知，密度、芳烃含量、T50-T10与掺混比例的相关系数绝对值均大于0.8，表明上述指标与掺混比例关系较为密切。各指标的一元线性回归调整后决定系数(R^2)分别为0.99、0.41、0.26、0.91、0.69及0.59。其中密度与芳烃含量的拟合优度较高，可作为掺混比例辅助定性的优先候选指标；而冰点与闪点的 R^2 均低于0.5，单独作为预测因子的解释能力有限。

值得注意的是，上述一元线性拟合未考虑各理化指标间的共线性及其交互影响，难以准确反映多因素协同作用下各变量的独立贡献；因此，需要通过多元逐步回归模型的构建，识别对掺混比例具有显著独立贡献的预测因子，以提升预测精度与稳健性。

2.3 掺混比例预测模型

为了高效、快速鉴别生物基燃料的掺混比例。采用逐步回归分析法，以密度、闪点、冰点、10%回收温度、T50-T10、T90-T10及芳烃组分为候选自变量，掺混比例(体积分数，%)为因变量，进行变量筛选。回归方程如式(3)所示：

$$y = 1\,281.13 - 1.613x_1 + 0.635x_8 \quad (3)$$

分析结果如表3所示，密度(x_1)和T50-T10(x_8)两个变量进入回归方程，模型决定系数 $R^2=0.99$ ，即二者可解释掺混比例变异的99.0%。 F 检验($F=720.17$, $p<0.05$)结果表明模型有效。共线性诊断显示，所有自变量的方差膨胀因子(VIF)均小于5，不存在多重共线性；Durbin-Watson统计量在1.5~2.5范围内，提示残差无自相关，样本数据间无显著自相关性。

表3 逐步回归分析结果(基于理化性质)

Table 3 Stepwise regression analysis results (considering physicochemical properties)

	Unstandardized coefficient		Standardized coefficient		t	p	Collinearity diagnostics	
	B^a	SE ^b	$Beta^c$				VIF ^d	Tolerance ^e
Constant	1281.13	65.10	-		19.68	0.00	-	-
Density (20℃)	-1.61	0.08	-0.745		-20.18	0.00	1.98	0.50
T50-T10	0.64	0.07	0.318		8.61	0.00	1.98	0.50
R^2			0.99					
Adjusted R^2			0.99					
F			$F(2, 15)=720.17$, $p=0.00$					
D-W statistic			1.85					

^a B : unstandardized regression coefficient, significant when $p<0.05$; ^bSE: standard error, indicates the fluctuation of B ; ^c $Beta$: standardized regression coefficient (when constant is zero); ^dVIF: variance inflation factor, used to diagnose multicollinearity; ^eTolerance: $1/VIF$, values above 0.1 indicate no significant multicollinearity (^a B : 回归系数值, 当 $p<0.05$ 时有意义; ^b标准误差: 表示 B 值的波动; ^c $Beta$: 表示常数为0时的回归系数值; ^dVIF: 方差膨胀因子, 用于诊断多重共线性; ^eTolerance: 容忍度, 等于 $1/VIF$, 其值大于0.1时表示不存在显著的多重共线性)

为评估预测模型的系统性，将模型预测值与实验实测值进行配对样本 t 检验，结果显示，预测值与实测值的均值无显著差异($t=0.00$, $p=1.00$)，差值为0，差值标准差为4.58。如图3A所示，预测值与实测值散点紧密分布于对角线两侧，差值95%置信区间为(-2.28, 2.28)，证实了模型无显著系统性偏差。但模型预测值和实测值之间的MAE达3.36%，RMSE达4.43%，RMSE显著高于MAE(偏差31.9%)，表明预测误差分布不均，存在少数样本的较大预测偏差。因此，模型对于总体趋势具有良好的跟随能力，但在极端值或特定组分条件下的定量精度仍有待提升，当前模型适用于HEFA-SPK掺混比例的定性判别。

为进一步提升预测精度，引入生物基碳含量作为新增变量，重新建模。回归方程如式(4)所示：

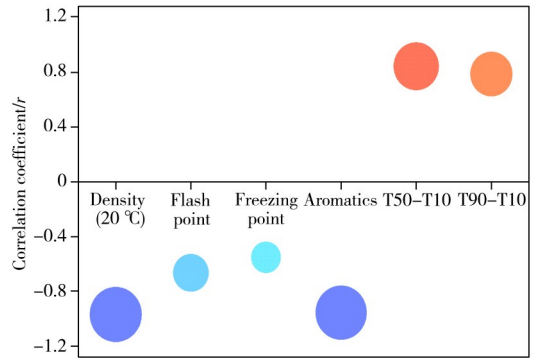


图2 掺混比例与关键理化指标的相关性系数分析
Fig. 2 Bubble chart of correlation coefficients between blending ratio and key physicochemical indicators

$$y = -6.149 + 0.087x_2 - 0.023x_8 + 0.041x_9 + 1.009x_{11} \quad (4)$$

分析结果见表4, 闪点(x_2)、T50-T10(x_8)、T90-T10(x_9)、生物基碳含量(x_{11})4个变量进入回归方程。该模型对 HEFA-SPK 掺混比例的解释能力显著提高, 模型决定系数(R^2)达0.99, 较原模型升高1.3%, 残差平方降至0, 拟合精度明显改善。

表4 逐步回归分析结果(引入生物基碳含量)

Table 4 Stepwise regression analysis results (with biogenic carbon content included)

	Unstandardized coefficient		Standardized coefficient	<i>t</i>	<i>p</i>	Collinearity diagnostics	
	<i>B</i> ^a	SE ^b	<i>Beta</i> ^c			VIF ^d	Tolerance ^e
Constant	-6.15	1.79	—	-3.43	0.00	—	—
Flash Point	0.09	0.03	0.01	2.60	0.02	2.71	0.37
T50-T10	-0.02	0.01	-0.01	-3.65	0.00	6.62	0.15
T90-T10	0.04	0.01	0.02	6.12	0.00	6.41	0.16
Biobased carbon content (mass fraction)	1.01	0.00	0.10	434.33	0.00	3.56	0.28
R^2	1.00						
Adjusted R^2	1.00						
<i>F</i>	$F(4, 13)=168\,224.38, p=0.00$						
D-W statistic	2.45						

a-e were the same as those in Table 3

通过多项指标对模型的过拟合风险进行综合评价。模型 R^2 和调整 R^2 均高于0.99, 二者高度一致, 排除了 R^2 虚高的可能性; 预测值和实测值之间的MAE为0.20%, RMSE为0.17%, 两者数值极为接近, RMSE仅高出MAE约0.03%, 说明模型的数值稳定性和泛化能力较好, 过拟合倾向不显著, 满足燃料掺混比例的定量预测需求。通过 F 检验($F=168\,224.38, p<0.01$)发现, 模型在统计学上具有高度显著性。配对样本 t 检验结果显示, 此时差值标准差为0.20, 平均值差值为0。如图3B所示, 预测值与实测值差值95%置信区间在(-0.10, 0.10)内, 进一步证实了模型预测的系统性偏差在可接受范围之内, 可用于燃料掺混比例的定量预测。

鉴于本研究的样本量有限, 自变量间可能存在偶然的多重共线性。共线性诊断显示, 新变量引入后, 个别自变量VIF略高于5, 提示存在一定程度的共线性。然而, 本部分建模的首要目标在于优化预测效能, 而非严格估计各变量的独立贡献; 在预测误差显著降低的前提下, 该变量仍有助于提升整体性能, 因此未对其进行剔除或合并处理, 而予以保留。即掺混比例低于30%的情况下, 上述处理方式在预测导向的建模实践中具有合理性。

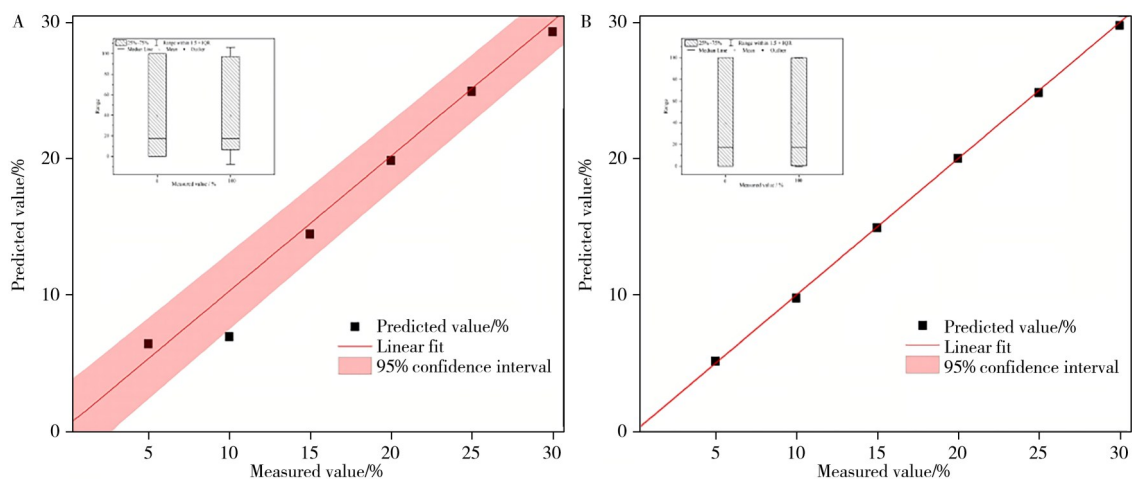


图3 逐步回归模型预测值与实测值散点对比图

Fig. 3 Scatter plot comparing predicted and measured values of stepwise regression model

A. model based on physicochemical properties; B. model incorporating biogenic carbon content (A. 基于理化性质的逐步回归模型; B. 引入生物基碳含量后的逐步回归模型)

2.4 产品属性鉴别方法

基于“2.2”理化性质分析结果, 构建“主要成分初筛-理化性质定性-生物基碳含量判别”的逐级鉴别流程, 如图4所示。

HEFA-SPK 区别于传统石油基燃料的显著特征在于密度明显偏低($726\sim 767\text{ kg/m}^3$)及芳烃含量极低(质量分数 $\leq 0.5\%$),二者可作为快速定性的有效指标;馏程分布与闪点虽在两类燃料间存在一定差异,但因技术要求范围存在重叠,单独使用判别效能有限,故宜作为辅助性参数纳入综合评判。

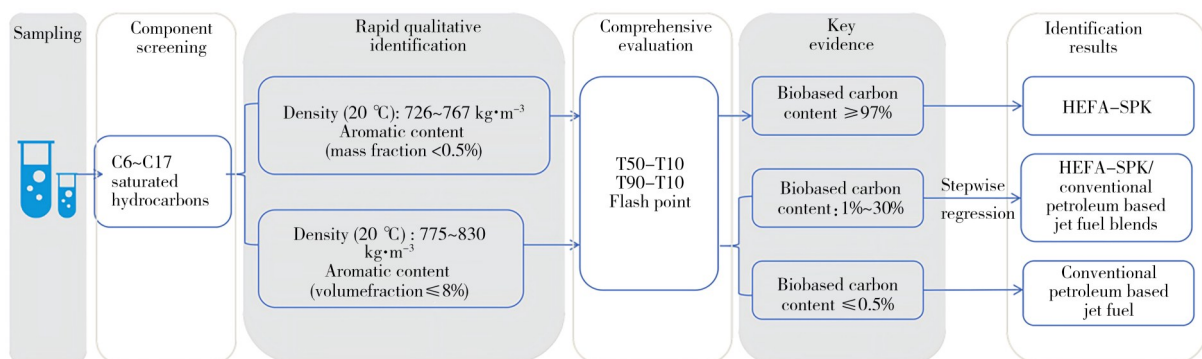


图4 产品属性鉴别方法

Fig. 4 Method for identifying product attributes

生物基碳含量检测结果可作为产品鉴别的关键依据。为确定本方法的检出限,对第1组传统石油基航空燃料样品进行测定,平均值为0.2%,标准偏差(SD)为0.1%。依据国际纯粹与应用化学联合会推荐方法计算^[20],现代碳含量的最低检出限(LOD)为0.5%,实测值低于该限值时视为未检出;定量下限(按10倍标准偏差计算)为1.0%,实测值高于该限值时可进行准确定量。

参考NB/SH/T 6044-2021及ASTM D6866-24标准^[21-22],纯HEFA-SPK组分的生物基碳含量理论值为100%,考虑测量不确定度($\pm 3\%$)后,以实测值高于97.0%作为纯生物基组分的判定依据。依据放射性碳(^{14}C)检测原理,当实测值低于检出限(LOD, 0.5%)时,判定为传统石油基航空燃料样品;实测值高于97.0%时,判定为HEFA-SPK;实测值处于定量下限(1.0%)以上时,引入生物基碳含量检测结果的逐步回归模型,对掺混比例进行定量预测。掺混比例范围处于1%~30%时,预测结果具有合理性。

与现有方法相比,樊婕等^[10]基于密度与黏度的二元混合模型虽操作简便,但对掺混比例的预测精度有限,难以直接用于定量判定;ASTM D6866-24标准方法虽为生物基碳含量测定的国际通用方法^[21],但仅依赖AMS,检测成本较高、周期较长,难以满足日常快速筛查需求。为此,本研究建立的逐步回归模型以常规理化指标为输入,可在无需同位素分析的条件下实现快速预测;引入生物基碳含量后,定量精度显著提升(MAE由3.36%降至0.20%,RMSE由4.43%降至0.17%),且预测误差分布均匀,95%置信区间在 $(-0.10, 0.10)$,为HEFA-SPK与传统石油基喷气燃料的快速、准确鉴别提供了可靠的技术路径。

3 结 论

本研究针对现行航空燃料产品标准无法鉴别燃料来源属性的监管空白,整合主要成分分析、理化性质检测与生物基碳含量测定,建立了适用于HEFA-SPK的属性鉴别方法,主要结论如下:

(1)提出了“主要成分初筛—理化性质定性—生物基碳含量确证”的逐级鉴别策略。以密度和芳烃含量作为关键区分指标,馏程、闪点等作为辅助参数,生物基碳含量作为最终确证依据,实现了HEFA-SPK与石油基航煤的有效区分;(2)明确了基于生物基碳含量的燃料来源判定准则:AMS测定值高于97.0%为纯生物基燃料,低于0.5%为石油基燃料,介于两者之间时可通过模型估算掺混比例;(3)建立了HEFA-SPK掺混比例(1%~30%)逐步回归预测模型,模型决定系数 $R^2 > 0.99$,具备良好的定量预测能力;(4)后续研究需进一步扩充不同原料来源及工艺条件下的样品库,开展低掺混比区间(0~5%)的模型优化,以提升模型的适用性与定量精度。

参考文献:

- [1] Watson M J, Machado P G, da Silva A V, Saltar Y, Ribeiro C O, Nascimento C A O, Dowling A W. *J. Cleaner Prod.*, **2024**, 449(449): 141472.
- [2] Guo T T, Li H J. *Sino-Global Energy*(郭汀汀, 李华杰. 中外能源), **2023**, 28(8): 8-14.

- [3] Dong C L. *Experimental Study on Catalytic Hydrogenation of Metal-modified SAPO-11 for the Preparation of Bioaerophilic Coal*. Shenyang: Shenyang Aerospace University(董春良.金属改性SAPO-11催化加氢制备生物航空煤油实验研究.沈阳:沈阳航空航天大学), **2024**.
- [4] GB 6537-2025. No.3 Jet Fuel. National Standards of the People's Republic of China(3号喷气燃料.中华人民共和国国家标准).
- [5] MH/T 6106-2014. Technological Requirements of Aviation Turbine Fuel Containing Synthesized Hydrocarbons. Civil Aviation Administration of China(含合成烃航空喷气燃料技术要求.中国民用航空局).
- [6] SN/T 2045-2022. Technical Specifications for Import and Export of Fuel Oil Products. General Administration of Customs of the People's Republic of China(进出口燃料油产品技术规范.中华人民共和国海关总署).
- [7] Liu W J, Chen C X, Lu W, Yu B B, Liang B L. *J. Aerosp. Power*(刘文杰, 陈春香, 卢苇, 余彬宾, 梁斌兰.航空动力学报), **2026**, 41(6): 240-250.
- [8] Ma C F, Xiao Z M, He J, Liu J X, Liang Y C. *Acta Pet. Sin. (Pet. Process. Sect.)*(马晨菲, 肖占敏, 何京, 刘靖新, 梁迎春.石油学报(石油加工)), **2019**, 35(6): 1211-1218.
- [9] Dai J L, Du Y T, Hu T T, Li M, Li L S, Huang C S. *J. Petrochem.Univ.*(代佳林, 杜宇腾, 胡彤彤, 李明, 李禄生, 黄春生.石油化工高等学校学报), **2025**, 38(2): 21-27.
- [10] Fan J, Cao G S, He M, Gao J W. *Chem. Enter. Manag.*(樊婕, 曹桂松, 何敏, 高金伟.化工管理), **2024**, 697(9): 35-38.
- [11] Wang R S, Sun T L, Yang Y T, Liu P, Lei T Z. *China For. Prod. Ind.*(王睿思, 孙堂磊, 杨延涛, 刘鹏, 雷廷宙.林产工业), **2023**, 60(10): 33-39.
- [12] Daily Chengdu. China's First International Flight Refueled with 'SAF + bonded aviation fuel' Departs from Chengdu(成都日报.全国首个 加注“SAF+保税航油”国际航班在蓉起航). [2026-3-18]. https://www.chengdu.gov.cn/cdsrmzf/c169603/2026-03/18/content_a3348ea1848f40e3aae952632ca13fe7.shtml.
- [13] GB/T 11132. Test Method for Hydrocarbon Types in Liquid Petroleum Products—Fluorescent Indicator Adsorption. National Standards of the People's Republic of China(液体石油产品烃类的测定 荧光指示剂吸附法.中华人民共和国国家标准).
- [14] NB/SH/T 0606-2019. Standard Test Method for Determination of Hydrocarbon Types in Middle Distillates by Mass Spectrometry. Petrochemical Industry Standard of the People's Republic of China(中间馏分烃类组成的测定 质谱法.中华人民共和国石油化工行业标准).
- [15] ASTM D7566-25a. Specification for Aviation Turbine Fuel Containing Synthesized Hydrocarbons. West Conshohocken: ASTM International.
- [16] Liang Y, Liu X, Yang M, Hui X, Wang J. *Combust. Flame*, **2024**, 270 (113778): 1-10.
- [17] Song M J, Zhang X H, Chen Y B, Zhang Q, Chen L G, Liu J G, Ma L L. *Energy*, **2023**, 283(129107): 1-14.
- [18] Yadav S, Kumar S. *Energy Fuels*, **2026**, 40(24): 12629-12651.
- [19] Liao C Y, Chen Y S, Jiang Y H, Lee J Y. *Renew. Energy*, **2026**, 273(126120): 1-9.
- [20] IUPAC. *Compendium of Analytical Nomenclature (Definitive Rules 1997, 3rd ed.)*. Oxford: Blackwell Science, **1998**.
- [21] ASTM D6866-24. Standard Test Methods for Determining the Biobased Content of Solid, Liquid, and Gaseous Samples Using Radiocarbon Analysis. West Conshohocken: ASTM International.
- [22] NB/SH/T 6044-2021. Standard Test Method for Determining the Biobased Content of Liquid Petroleumproducts Using Radiocarbon Analysis by Accelerator Mass Spectrometry. Petrochemical Industry Standard of the People's Republic of China(液体石油产品中含放射性碳的生物基含量测定 加速器质谱法.中华人民共和国石油化工行业标准).

(责任编辑: 盛文彦)