

权利要求书

1. 一种分子级装置的实时优化方法，其特征在于，所述方法包括：
获取原油的分子组成；
根据所述原油的分子组成中各种单分子的物性，获取所述原油进行蒸馏得到的不同
5 馏分的分子组成；
按预设原料比例，将相应的各个馏分作为石油加工原料，分别输入预先训练的与石油加工装置对应的产物预测模型，以得到所述产物预测模型输出的相应的预测产物的预测分子组成和所述预测分子组成中每种单分子的预测分子含量；
获取预先设置的目标产物的预设标准集合；
10 根据所述预测产物的预测分子组成和预测分子组成中每种单分子的预测分子含量，判断所述预测产物是否符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准；
如果所述预测产物不符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的任一预设标准，则调整所述产物预测模型中的操作参数，以重新获取所述预测产物的预测分子组成和所述预测分子组成中每种单分子的预测分子含量，直至所述预测产物符合
15 所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准。
2. 根据权利要求 1 所述的方法，其特征在于，所述方法还包括：
获取输入每个所述石油加工装置的石油加工原料的输入流量；
判断每个所述输入流量是否均符合相应所述石油加工装置的预设输入流量范围；
20 若存在任一所述输入流量不符合相应所述石油加工装置的预设输入流量范围，则调整所述预设原料比例，按调整后的所述预设原料比例重新将相应的各个馏分作为石油加工原料分别输入相应的石油加工装置的产物预测模型；直至每个所述输入流量均符合相应所述石油加工装置的预设输入流量范围。
3. 根据权利要求 1 所述的方法，其特征在于，所述判断所述预测产物是否符合所述
25 预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准，包括：
根据所述预测产物的预测分子组成和预测分子组成中每种单分子的预测分子含量计算所述预测分子组成中每种单分子的物性；
根据所述预测分子组成中每种单分子的物性和预测分子组成中每种单分子的预测分子含量，计算所述预测产物的预测物性；
30 判断每个所述预测产物的预测物性是否符合所述预设标准集合中对应的目标产物的预设物性限制区间。

4. 根据权利要求 1 所述的方法, 其特征在于, 所述方法还包括:

将各个所述预测产物作为产品调合原料按预设规则集合进行调合, 得到多组混合产品的分子组成和混合产品中每种单分子的含量;

5 根据每组所述混合产品的分子组成和混合产品中每种单分子的含量分别计算每组所述混合产品的产品物性。

5. 根据权利要求 4 所述的方法, 其特征在于, 所述判断所述预测产物是否符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准, 包括:

判断每组所述混合产品的产品物性是否符合所述预设标准集合中对应的各个目标产物调合得到的目标混合产品的预设产品物性;

10 若符合预设产品物性, 则根据所有所述混合产品获取目标参数, 判断所述目标参数是否符合预设条件;

若所述目标参数符合预设条件, 则确定所述预测产物符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准, 并输出所述预设原料比例、产物预测模型和预设规则集合作为生产加工方案;

15 若所述目标参数不符合预设条件, 则调整所述产物预测模型中的操作参数和所述预设规则集合中的预设规则, 重新得到多组混合产品, 直至每组所述混合产品的产品物性符合预设产品物性, 且所有所述混合产品中的目标参数符合预设条件。

6. 根据权利要求 5 所述的方法, 其特征在于, 所述根据所有所述混合产品获取目标参数, 判断所述目标参数是否符合预设条件, 包括:

20 获取每组混合产品的产品价格和每组混合产品的产量;

根据每组混合产品的产量和每组混合产品的产品价格, 计算每组混合产品的产品效益;

对每组混合产品的产品效益进行累加得到累计效益;

获取每组所述石油加工原料的原料价格和每个所述石油加工装置的操作成本;

25 将所述累计效益减去所有石油加工原料的所述原料价格和所有石油加工装置的操作成本, 得到综合效益;

将所述综合效益作为所述目标参数;

判断所述综合效益是否达到最大值;

若所述综合效益达到最大值, 则确定所述目标参数符合预设条件;

30 若所述综合效益未达到最大值, 则确定所述目标参数不符合预设条件。

7. 根据权利要求 1 所述的方法, 其特征在于, 所述操作参数包括所述产物预测模型

中反应路径所处环境的温度；

所述调整所述产物预测模型中的操作参数，包括：

调整所述产物预测模型中与所述预测产物对应的反应路径所处环境的温度；

- 5 根据调整后的温度重新获取所述预测产物的预测分子组成和每组所述预测产物中每种单分子的预测分子含量，直至所述预测产物符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准。

8. 根据权利要求 1 所述的方法，其特征在于，所述操作参数包括所述产物预测模型中反应路径所处环境的压力；

所述调整所述产物预测模型中的操作参数，包括：

- 10 调整所述产物预测模型中与所述预测产物对应的反应路径所处环境的压力；

根据调整后的压力重新获取所述预测产物的预测分子组成和所述预测产物中每种单分子的预测分子含量，直至所述预测产物符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准。

- 15 9. 根据权利要求 4 所述的方法，其特征在于，所述根据每组所述混合产品的分子组成和每种单分子的含量分别计算每组所述混合产品的产品物性，包括：

获取每组所述产品调合原料的第一分子组成和每组所述产品调合原料中每种单分子的第一组分含量；

- 20 按所述预设规则集合，根据每组所述产品调合原料的第一分子组成和每组所述产品调合原料中每种单分子的第一组分含量，得到每组混合产品的第二分子组成和每组混合产品中每种单分子的第二组分含量；

根据每组混合产品中每种单分子包含的每种基团的基团数量和每种基团对物性的贡献值，计算每组混合产品中每种单分子的物性；

根据每组混合产品中每种单分子的物性和所述第二组分含量，计算每组混合产品的物性。

- 25 10. 根据权利要求 9 所述的方法，其特征在于，所述单分子的物性的计算方法包括：针对每种单分子，获取构成所述单分子的每种基团的基团数量，以及获取每种所述基团对物性的贡献值；

将构成所述单分子的每种基团的基团数量以及每种所述基团对物性的贡献值，输入预先训练的物性计算模型，获取所述物性计算模型输出的所述单分子的物性；其中，

- 30 所述物性计算模型，用于根据单分子包含的每种基团的基团数量以及所述每种基团对物性的贡献值，计算所述单分子的物性。

11. 根据权利要求 10 所述的方法, 其特征在于, 所述将构成所述单分子的每种基团的基团数量以及每种所述基团对物性的贡献值, 输入预先训练的物性计算模型之前, 所述方法还包括:

5 将构成所述单分子的每种基团的基团数量与数据库中预存储的已知物性的模板单分子的分子信息进行比对; 所述分子信息包括: 构成所述模板单分子的每种基团的基团数量;

判断是否存在与所述单分子相同的所述模板单分子;

若存在与所述单分子相同的所述模板单分子, 输出所述模板单分子的物性作为所述单分子的物性;

10 若不存在与所述单分子相同的所述模板单分子, 则进行所述将构成所述单分子的每种基团的基团数量以及每种所述基团对物性的贡献值, 输入预先训练的物性计算模型的步骤。

12. 根据权利要求 10 或 11 项所述的方法, 其特征在于, 训练所述物性计算模型的步骤, 包括:

15 构建单分子的物性计算模型;

获取构成样本单分子的每种基团的基团数量; 其中, 所述样本单分子的物性已知;

将构成所述样本单分子的每种基团的基团数量输入所述物性计算模型;

获取所述物性计算模型输出的所述样本单分子的预测物性;

20 如果所述预测物性与已知的所述物性之间的偏差值小于预设偏差阈值, 则判定所述物性计算模型收敛, 在已收敛的所述物性计算模型中获取每种基团对所述物性的贡献值, 并存储所述基团对所述物性的贡献值;

如果所述预测物性与已知的所述物性之间的偏差值大于等于所述偏差阈值, 则调整所述物性计算模型中每种基团对所述物性的贡献值, 直到所述物性计算模型收敛为止。

13. 根据权利要求 12 所述的方法, 其特征在于, 建立如下所示物性计算模型:

25
$$f = a + \sum n_i \Delta f_i;$$

其中, f 为所述单分子的物性, n_i 为所述单分子中第 i 种基团的基团数量, Δf_i 为所述单分子中第 i 种基团对所述物性的贡献值, a 为关联常数。

14. 根据权利要求 12 所述的方法, 其特征在于, 所述获取构成样本单分子的每种基团的基团数量, 包括:

30 在所述单分子的所有基团中确定一级基团、一级基团的基团数量、多级基团和多级基团的基团数量;

将构成单分子的所有基团作为一级基团；

将同时存在且对同一种物性共同存在贡献的多种基团作为多级基团，将所述多种基团的数量作为所述多级基团的级别。

15. 根据权利要求 14 所述的方法，其特征在于，

5 建立如下所示物性计算模型：

$$f = a + \sum_i m_{1i} \Delta f_{1i} + \sum_j m_{2j} \Delta f_{2j} + \dots + \sum_l m_{Nl} \Delta f_{Nl};$$

其中， f 为所述单分子的物性， m_{1i} 为一级基团中第 i 种基团的基团数量， Δf_{1i} 为一级基团中第 i 种基团对物性的贡献值， m_{2j} 为二级基团中第 j 种基团的基团数量， Δf_{2j} 为二级基团中第 j 种基团对物性的贡献值； m_{Nl} 为 N 级基团中第 l 种基团的基团数量， Δf_{Nl} 为 N 级基团中第 l 种基团对物性的贡献值； a 为关联常数； N 为大于或等于 2 的正整数。

10 16. 根据权利要求 11 所述的方法，其特征在于，所述获取构成所述单分子的每种基团的基团数量，包括：

在所述单分子的所有基团中确定一级基团、一级基团的基团数量、多级基团和多级基团的基团数量；

15 将构成单分子的所有基团作为一级基团；

将同时存在且对同一种物性共同存在贡献的多种基团作为多级基团，将所述多种基团的数量作为所述多级基团的级别。

17. 根据权利要求 16 所述的方法，其特征在于，

所述单分子的物性包括：单分子的沸点；

20 所述计算所述单分子的物性，包括：根据如下物性计算模型计算所述单分子的沸点：
$$T = \frac{SOL \times GROUP_{11} + SOL \times GROUP_{12} + \dots + SOL \times GROUP_{1N} + c}{(SOL \times Numh)^d + b};$$

其中， T 为所述单分子的沸点， SOL 为根据构成所述单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量， $GROUP_{11}$ 为根据一级基团对所述沸点的贡献值转化得到的第一贡献值向量， $GROUP_{12}$ 为根据二级基团对所述沸点的贡献值转化得到的第二贡献值向量， $GROUP_{1N}$ 为根据 N 级基团对沸点的贡献值转化得到的第 N 贡献值向量， $Numh$ 为单分子中除氢原子以外的原子个数， d 为第一预设常数、 b 为第二预设常数、 c 为第三预设常数；所述 N 为大于或等于 2 的正整数。

18. 根据权利要求 16 所述的方法，其特征在于，

所述单分子的物性包括：单分子的密度；

30 所述计算所述单分子的物性，包括：

根据如下物性计算模型计算所述单分子的密度：

$$D = \frac{SOL \times GROUP_{21}}{(SOL \times GROUP_{22} + \dots + SOL \times GROUP_{2N}) \times e};$$

其中， D 为所述单分子的密度， SOL 为根据构成所述单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量， $GROUP_{21}$ 为根据一级基团对所述密度的贡献值转化得到的第 $N+1$ 贡献值向量， $GROUP_{22}$ 为根据二级基团对所述密度的贡献值转化得到的第 $N+2$ 贡献值向量， $GROUP_{2N}$ 为根据 N 级基团对密度的贡献值转化得到的第 $2N$ 贡献值向量， e 为第四预设常数；所述 N 为大于或等于 2 的正整数。

19. 根据权利要求 16 所述的方法，其特征在于，

所述单分子的物性包括：单分子的辛烷值；

10 所述计算所述单分子的物性，包括：

根据如下物性计算模型计算所述单分子的辛烷值：

$$X = SOL \times GROUP_{31} + SOL \times GROUP_{32} + \dots + SOL \times GROUP_{3N} + h;$$

其中， X 为所述单分子的辛烷值， SOL 为根据构成所述单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量， $GROUP_{31}$ 为根据一级基团对辛烷值的贡献值转化得到的第 $2N+1$ 贡献值向量， $GROUP_{32}$ 为根据二级基团对辛烷值的贡献值转化得到的第 $2N+2$ 贡献值向量， $GROUP_{3N}$ 为根据 N 级基团对辛烷值的贡献值转化得到的第 $3N$ 贡献值向量；所述 N 为大于或等于 2 的正整数； h 为第五预设常数。

20. 根据权利要求 4 所述的方法，其特征在于，

所述混合产品的产品物性，包括：密度、浊点、倾点、苯胺点和辛烷值。

20 21. 根据权利要求 20 所述的方法，其特征在于，当所述混合产品的产品物性为密度时，计算每组所述混合产品的产品物性，包括：

通过如下计算公式计算每组所述混合产品的密度：

$$density = \sum (D_i \times x_{i_volume});$$

25 其中， $density$ 为所述混合产品的密度， D_i 为第 i 种所述单分子的密度， x_{i_volume} 为第 i 种所述单分子的第二组分含量。

22. 根据权利要求 20 所述的方法，其特征在于，当所述混合产品的产品物性为浊点时，计算每组所述混合产品的产品物性，包括：

针对每组混合产品，根据该组混合产品中每种所述单分子的密度和沸点计算得到每种所述单分子的浊点贡献值；

30 根据该组混合产品中所有所述单分子的浊点贡献值和每种单分子的含量，计算该组

混合产品的浊点。

23. 根据权利要求 20 所述的方法, 其特征在于, 当所述混合产品的产品物性为倾点时, 计算每组所述混合产品的产品物性, 包括:

针对每组混合产品, 根据该组混合产品中每种所述单分子的密度和分子量, 计算每
5 种所述单分子的倾点贡献值;

根据该组混合产品中所有所述单分子的倾点贡献值和每种单分子的含量, 计算该组混合产品的倾点。

24. 根据权利要求 20 所述的方法, 其特征在于, 当所述混合产品的产品物性为苯胺点时, 计算每组所述混合产品的产品物性, 包括:

10 针对每组混合产品, 根据该组混合产品中所述单分子的密度和沸点计算得到所述单分子的苯胺点贡献值;

根据该组混合产品中所有所述单分子的苯胺点贡献值和每种单分子的含量, 计算所述混合产品的苯胺点。

25. 根据权利要求 20 所述的方法, 其特征在于, 当所述混合产品的产品物性为辛烷
15 值时, 计算每组所述混合产品的产品物性, 包括:

针对每组混合产品, 获取该组混合产品中每种所述单分子的辛烷值和每种单分子的含量;

通过如下计算公式计算所述混合产品的辛烷值:

$$\begin{aligned}
 \text{ON} = & \left(\sum_{i=\text{HISQFG}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{H}} \sum_{i=\text{H}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{I}} \sum_{i=\text{I}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{S}} \sum_{i=\text{S}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i \right. \\
 & \left. + C_{\text{Q}} \sum_{i=\text{Q}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{F}} \sum_{i=\text{F}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{G}} \sum_{i=\text{G}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i \right) \div \\
 & \left(\sum_{i=\text{HISQFG}} \nu_i \beta_i + C_{\text{H}} \left(\sum_{i=\text{H}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{H}} \nu_i \right) + C_{\text{I}} \left(\sum_{i=\text{I}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{I}} \nu_i \right) + C_{\text{S}} \left(\sum_{i=\text{S}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{S}} \nu_i \right) \right. \\
 & \left. + C_{\text{Q}} \left(\sum_{i=\text{Q}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{Q}} \nu_i \right) + C_{\text{F}} \left(\sum_{i=\text{F}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{F}} \nu_i \right) + C_{\text{G}} \left(\sum_{i=\text{G}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{G}} \nu_i \right) \right) ; \\
 C_{\text{H}} = & \frac{k_{\text{HI}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{HS}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{HQ}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{HF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{HG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HI}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{HS}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{HQ}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{HF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{HG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}}; \\
 C_{\text{I}} = & \frac{k_{\text{HI}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{IQ}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{IF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{IG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HI}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{IQ}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{IF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{IG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}}; \\
 C_{\text{S}} = & \frac{k_{\text{HS}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{SF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{SG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HS}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(b)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{SF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{SG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}}; \\
 C_{\text{Q}} = & \frac{k_{\text{HQ}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IQ}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{QG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HQ}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IQ}}^{(b)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{QG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}};
 \end{aligned}$$

$$C_F = \frac{k_{HF}^{(a)}\nu_H + k_{IF}^{(a)}\nu_I + k_{SF}^{(a)}\nu_S + k_{QF}^{(a)}\nu_Q + k_{FG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HF}^{(b)}\nu_H + k_{IF}^{(b)}\nu_I + k_{SF}^{(b)}\nu_S + k_{QF}^{(b)}\nu_Q + k_{FG}^{(b)}\nu_G};$$

$$C_G = \frac{k_{HG}^{(a)}\nu_H + k_{IG}^{(a)}\nu_I + k_{SG}^{(a)}\nu_S + k_{QG}^{(a)}\nu_Q + k_{FG}^{(a)}\nu_F}{1 + k_{HG}^{(b)}\nu_H + k_{IG}^{(b)}\nu_I + k_{SG}^{(b)}\nu_S + k_{QG}^{(b)}\nu_Q + k_{FG}^{(b)}\nu_F};$$

其中, 所述 ON 为所述混合产品的辛烷值, HISQFG 为分子集合, H 为正构烷烃的分子集合, I 为异构烷烃的分子集合, S 为环烷烃的分子集合, Q 为烯烃的分子集合, F 为芳香烃的分子集合, G 为含氧化合物的分子集合, ν_i 为所述混合产品中的各个分子的含量; ν_H 、 ν_I 、 ν_S 、 ν_Q 、 ν_F 、 ν_G 分别为所述混合产品中的正构烷烃的总含量、异构烷烃的总含量、环烷烃的总含量、烯烃的总含量、芳香烃的总含量和含氧化合物的化合物总含量; β_i 为所述混合产品中的每种分子的回归参数; ON_i 为所述混合产品中的每种分子的辛烷值; C_H 表示正构烷烃与其他分子的交互系数; C_I 表示异构烷烃与其他分子的交互系数; C_S 表示环烷烃与其他分子的交互系数; C_Q 表示烯烃与其他分子的交互系数; C_F 表示芳香烃与其他分子的交互系数; C_G 表示含氧类化合物与其他分子的交互系数; $k_{HI}^{(a)}$ 表示正构烷烃与异构烷烃之间的第一常数系数、 $k_{HS}^{(a)}$ 表示正构烷烃与环烷烃之间的第一常数系数、 $k_{HQ}^{(a)}$ 表示正构烷烃与烯烃之间的第一常数系数、 $k_{HF}^{(a)}$ 表示正构烷烃与芳香烃之间的第一常数系数、 $k_{HG}^{(a)}$ 表示正构烷烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{IS}^{(a)}$ 表示异构烷烃与环烷烃之间的第一常数系数、 $k_{IQ}^{(a)}$ 表示异构烷烃与烯烃之间的第一常数系数、 $k_{IF}^{(a)}$ 表示异构烷烃与芳香烃之间的第一常数系数、 $k_{IG}^{(a)}$ 表示异构烷烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{SQ}^{(a)}$ 表示环烷烃与烯烃之间的第一常数系数、 $k_{SF}^{(a)}$ 表示环烷烃与芳香烃之间的第一常数系数、 $k_{SG}^{(a)}$ 表示环烷烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{QF}^{(a)}$ 表示烯烃与芳香烃之间的第一常数系数、 $k_{QG}^{(a)}$ 表示烯烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{FG}^{(a)}$ 表示芳香烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{HI}^{(b)}$ 表示正构烷烃与异构烷烃之间的第二常数系数、 $k_{HS}^{(b)}$ 表示正构烷烃与环烷烃之间的第二常数系数、 $k_{HQ}^{(b)}$ 表示正构烷烃与烯烃之间的第二常数系数、 $k_{HF}^{(b)}$ 表示正构烷烃与芳香烃之间的第二常数系数、 $k_{HG}^{(b)}$ 表示正构烷烃与含氧化合物之间的第二常数系数、 $k_{IS}^{(b)}$ 表示异构烷烃与环烷烃之间的第二常数系数、 $k_{IQ}^{(b)}$ 表示异构烷烃与烯烃之间的第二常数系数、 $k_{IF}^{(b)}$ 表示异构烷烃与芳香烃之间的第二常数系数、 $k_{IG}^{(b)}$ 表示异构烷烃与含氧化合物之间的第二常数系数、 $k_{SQ}^{(b)}$ 表示环烷烃与烯烃之间的第二常数系数、 $k_{SF}^{(b)}$ 表示环烷烃与芳香烃之间的第二常数系数、 $k_{SG}^{(b)}$ 表示环烷烃与含氧化合物之间的第二常数系数、 $k_{QF}^{(b)}$ 表示烯烃与芳香烃之间的第二常数系数、 $k_{QG}^{(b)}$ 表示烯烃与含氧化合物之间的第二常数系数、 $k_{FG}^{(b)}$ 表示芳香烃与含氧化合物之间的第二常数系数; 其中, 所述辛烷值包括: 研究法辛烷值和马达法辛烷值。

26. 根据权利要求 1 所述的方法，其特征在于，对产物预测模型进行训练的步骤，包括：

建立产物预测模型；其中，所述产物预测模型，包括：包括多种反应规则的反应规则集合以及反应速率算法；

5 获取样本原料的样本原料信息；

利用所述样本原料信息，对所述反应规则集合进行训练，并固定训练完成的所述反应规则集合；

利用所述样本原料信息，对所述反应速率算法进行训练，并固定训练完成的所述反应速率算法，得到训练完成的所述产物预测模型。

10 27. 根据权利要求 26 所述的方法，其特征在于，所述样本原料的样本原料信息，包括：所述样本原料的分子组成，所述样本原料中每种分子的分子含量，所述样本原料对应的实际产物的分子组成以及所述实际产物中每种分子的实际含量。

28. 根据权利要求 27 所述的方法，其特征在于，利用所述样本原料信息，对所述反应规则集合进行训练，包括：

15 将所述样本原料的分子组成按预设的反应规则集合进行处理，得到所述样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径；

根据所述样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径，得到包含所述样本原料、中间产物以及预测产物的装置输出产物的第一分子组成；在所述装置输出产物中，包括：所述样本原料、中间产物以及预测产物；

20 根据所述装置输出产物的第一分子组成与所述实际产物的第二分子组成，计算第一相对偏差；

若所述第一相对偏差符合预设条件，则固定所述反应规则集合；

若所述第一相对偏差不符合预设条件，则调整所述反应规则集合中的反应规则，根据调整后的反应规则集合，重新计算所述第一相对差值，直至所述第一相对偏差符合预设条件。
25

29. 根据权利要求 28 所述的方法，其特征在于，根据所述装置输出产物的第一分子组成与所述实际产物的第二分子组成，计算第一相对偏差，包括：

获取所述第一分子组成中单分子的种类，构成第一集合；

获取所述第二分子组成中单分子的种类，构成第二集合；

30 判断所述第二集合是否为所述第一集合的子集；

若所述第二集合不是所述第一集合的子集，则获取预存储的不符合预设条件的相对

偏差值作为所述第一相对偏差值；

若所述第二集合是所述第一集合的子集，通过如下计算公式计算第一相对偏差：

$$x_1 = \frac{\text{card}((M - M_1 - M_2) - M_3)}{\text{card}(M - M_1 - M_2)};$$

x_1 为所述第一相对偏差， M 为所述第一集合， M_1 为所述样本原料的分子组成中单分子的种类组成的集合， M_2 为所述中间产物的分子组成中单分子的种类组成的集合， M_3 为所述第二集合，card 表示集合中元素的个数。

30. 根据权利要求 27 所述的方法，其特征在于，利用所述样本原料信息，对所述反应速率算法进行训练，包括：

根据所述反应速率算法，分别计算所述样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径的反应速率；

根据所述样本原料中每种分子的分子含量和所述分子的反应路径对应的反应速率，得到所述样本原料对应的预测产物中每种分子的预测含量；

根据所述预测产物中每种分子的预测含量和所述实际产物中每种分子的实际含量，计算第二相对偏差；

若所述第二相对偏差符合预设条件，则固定所述反应速率算法；

若所述第二相对偏差不符合预设条件，则调整所述反应速率算法中的参数，根据调整后的反应速率算法，重新计算所述第二相对偏差，直至所述第二相对偏差符合预设条件。

31. 根据权利要求 30 所述的方法，其特征在于，根据所述反应速率算法，分别计算所述样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径的反应速率，包括：

根据所述反应速率算法中的反应速率常数，计算每条反应路径的反应速率；

其中，根据如下计算公式确定所述反应速率常数：

$$k = \frac{k_B E}{h} \exp\left(\frac{E \Delta S - \Delta E}{R E}\right) \phi \times P^\alpha;$$

其中， k 为所述反应速率常数， k_B 为玻尔茨曼常数， h 为普朗克常数， R 为理想气体常数， E 为反应路径所处环境的温度值， $\exp$ 为以自然常数为底的指数函数， ΔS 为反应路径对应的反应规则对应的反应前后的熵变， ΔE 为反应路径对应的反应规则对应的反应能垒， ϕ 催化剂活性因子， P 为反应路径所处环境的压力值， α 为反应路径对应的反应规则对应的压力影响因子。

32. 根据权利要求 1-31 任意一项所述的方法，其特征在于，所述石油加工装置的种类包括：

催化裂化装置,延迟焦化装置,渣油加氢装置,加氢裂化装置,柴油加氢改质装置,柴油加氢精制装置,汽油加氢精制装置,催化重整装置和烷基化装置;其中,每种石油加工装置对应一种反应规则集。

33. 一种分子级装置的实时优化装置,其特征在于,所述实时优化装置包括:

5 第一获取单元,用于获取原油的分子组成;

第一处理单元,用于根据所述原油的分子组成中各种单分子的物性,获取所述原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成;

第二处理单元,用于按预设原料比例,将相应的各个馏分作为石油加工原料,分别输入预先训练的与石油加工装置对应的产物预测模型,以得到所述产物预测模型输出的
10 相应的预测产物的预测分子组成和所述预测分子组成中每种单分子的预测分子含量;

第二获取单元,用于获取预先设置的目标产物的预设标准集合;

第三处理单元,根据所述预测产物的预测分子组成和预测分子组成中每种单分子的预测分子含量,判断所述预测产物是否符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准;如果所述预测产物不符合所述预设标准集合中与所述预测产物对
15 应的目标产物的任一预设标准,则调整所述产物预测模型中的操作参数,以重新获取所述预测产物的预测分子组成和所述预测分子组成中每种单分子的预测分子含量,直至所述预测产物符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准。

34. 根据权利要求 33 所述的装置,其特征在于,所述装置还包括:

流量控制单元,用于获取输入每个所述石油加工装置的石油加工原料的输入流量;
20 判断每个所述输入流量是否均符合相应所述石油加工装置的预设输入流量范围;若存在任一所述输入流量不符合相应所述石油加工装置的预设输入流量范围,则调整所述预设原料比例,按调整后的所述预设原料比例重新将相应的各个馏分作为石油加工原料分别输入相应的石油加工装置的产物预测模型;直至每个所述输入流量均符合相应所述石油加工装置的预设输入流量范围。

25 35. 根据权利要求 33 所述的装置,其特征在于,所述第三处理单元,具体用于根据所述预测产物的预测分子组成和预测分子组成中每种单分子的预测分子含量计算所述预测分子组成中每种单分子的物性;根据所述预测分子组成中每种单分子的物性和预测分子组成中每种单分子的预测分子含量,计算所述预测产物的预测物性;判断每个所述预测产物的预测物性是否符合所述预设标准集合中对应的目标产物的预设物性限制区
30 间。

36. 根据权利要求 33 所述的装置,其特征在于,所述装置还包括:

产品调合单元，用于将各个所述预测产物作为产品调合原料按预设规则集合进行调合，得到多组混合产品的分子组成和混合产品中每种单分子的含量；根据每组所述混合产品的分子组成和混合产品中每种单分子的含量分别计算每组所述混合产品的产品物性。

- 5 37. 根据权利要求 36 所述的装置，其特征在于，所述第三处理单元，具体用于判断每组所述混合产品的产品物性是否符合所述预设标准集合中对应的各个目标产物调合得到的目标混合产品的预设产品物性；

 若符合预设产品物性，则根据所有所述混合产品获取目标参数，判断所述目标参数是否符合预设条件；

- 10 若所述目标参数符合预设条件，则确定所述预测产物符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准，并输出所述预设原料比例、产物预测模型和预设规则集合作为生产加工方案；

- 若所述目标参数不符合预设条件，则调整所述产物预测模型中的操作参数和所述预设规则集合中的预设规则，重新得到多组混合产品，直至每组所述混合产品的产品物性
15 符合预设产品物性，且所有所述混合产品中的目标参数符合预设条件。

38. 根据权利要求 37 所述的装置，其特征在于，所述第三处理单元，具体用于获取每组混合产品的产品价格和每组混合产品的产量；根据每组混合产品的产量和每组混合产品的产品价格，计算每组混合产品的产品效益；对每组混合产品的产品效益进行累加得到累计效益；获取每组所述石油加工原料的原料价格和每个所述石油加工装置的操作
20 成本；将所述累计效益减去所有石油加工原料的所述原料价格和所有石油加工装置的操作成本，得到综合效益；将所述综合效益作为所述目标参数；判断所述综合效益是否达到最大值；若所述综合效益达到最大值，则确定所述目标参数符合预设条件；若所述综合效益未达到最大值，则确定所述目标参数不符合预设条件。

39. 根据权利要求 33 所述的装置，其特征在于，所述第三处理单元，具体用于调整
25 所述产物预测模型中与所述预测产物对应的反应路径所处环境的温度；根据调整后的温度重新获取所述预测产物的预测分子组成和每组所述预测产物中每种单分子的预测分子含量，直至所述预测产物符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准。

40. 根据权利要求 33 所述的装置，其特征在于，所述第三处理单元，具体用于调整
30 所述产物预测模型中与所述预测产物对应的反应路径所处环境的压力；根据调整后的压力重新获取所述预测产物的预测分子组成和所述预测产物中每种单分子的预测分子含

量，直至所述预测产物符合所述预设标准集合中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准。

41. 根据权利要求 36 所述的装置，其特征在于，所述产品调合单元，具体用于获取每组所述产品调合原料的第一分子组成和每组所述产品调合原料中每种单分子的第一组分含量；按所述预设规则集合，根据每组所述产品调合原料的第一分子组成和每组所述产品调合原料中每种单分子的第一组分含量，得到每组混合产品的第二分子组成和每组混合产品中每种单分子的第二组分含量；根据每组混合产品中每种单分子包含的每种基团的基团数量和每种基团对物性的贡献值，计算每组混合产品中每种单分子的物性；根据每组混合产品中每种单分子的物性和所述第二组分含量，计算每组混合产品的物性。

42. 根据权利要求 41 所述的装置，其特征在于，所述产品调合单元，具体用于针对每种单分子，获取构成所述单分子的每种基团的基团数量，以及获取每种所述基团对物性的贡献值；将构成所述单分子的每种基团的基团数量以及每种所述基团对物性的贡献值，输入预先训练的物性计算模型，获取所述物性计算模型输出的所述单分子的物性；其中，所述物性计算模型，用于根据单分子包含的每种基团的基团数量以及所述每种基团对物性的贡献值，计算所述单分子的物性。

43. 根据权利要求 42 所述的装置，其特征在于，所述装置还包括：

单分子物性模板匹配单元，用于将构成所述单分子的每种基团的基团数量与数据库中预存储的已知物性的模板单分子的分子信息进行比较；所述分子信息包括：构成所述模板单分子的每种基团的基团数量；判断是否存在与所述单分子相同的所述模板单分子；若存在与所述单分子相同的所述模板单分子，输出所述模板单分子的物性作为所述单分子的物性；若不存在与所述单分子相同的所述模板单分子，则通过所述产品调合单元进行所述将构成所述单分子的每种基团的基团数量以及每种所述基团对物性的贡献值，输入预先训练的物性计算模型的步骤。

44. 根据权利要求 42 或 43 所述的装置，其特征在于，所述装置还包括：

模型训练单元，用于构建单分子的物性计算模型；获取构成样本单分子的每种基团的基团数量；其中，所述样本单分子的物性已知；将构成所述样本单分子的每种基团的基团数量输入所述物性计算模型；获取所述物性计算模型输出的所述样本单分子的预测物性；如果所述预测物性与已知的所述物性之间的偏差值小于预设偏差阈值，则判定所述物性计算模型收敛，在已收敛的所述物性计算模型中获取每种基团对所述物性的贡献值，并存储所述基团对所述物性的贡献值；如果所述预测物性与已知的所述物性之间的

偏差值大于等于所述偏差阈值,则调整所述物性计算模型中每种基团对所述物性的贡献值,直到所述物性计算模型收敛为止。

45. 根据权利要求 44 所述的装置,其特征在于,所述模型训练单元,具体用于建立如下所示物性计算模型:

$$f = a + \sum n_i \Delta f_i;$$

其中, f 为所述单分子的物性, n_i 为所述单分子中第 i 种基团的基团数量, Δf_i 为所述单分子中第 i 种基团对所述物性的贡献值, a 为关联常数。

46. 根据权利要求 44 所述的装置,其特征在于,所述模型训练单元,具体用于在所述单分子的所有基团中确定一级基团、一级基团的基团数量、多级基团和多级基团的基团数量;将构成单分子的所有基团作为一级基团;将同时存在且对同一种物性共同存在贡献的多种基团作为多级基团,将所述多种基团的数量作为所述多级基团的级别。

47. 根据权利要求 46 所述的装置,其特征在于,所述模型训练单元,具体用于建立如下所示物性计算模型:

$$f = a + \sum_i m_{1i} \Delta f_{1i} + \sum_j m_{2j} \Delta f_{2j} + \dots + \sum_l m_{Nl} \Delta f_{Nl};$$

其中, f 为所述单分子的物性, m_{1i} 为一级基团中第 i 种基团的基团数量, Δf_{1i} 为一级基团中第 i 种基团对物性的贡献值, m_{2j} 为二级基团中第 j 种基团的基团数量, Δf_{2j} 为二级基团中第 j 种基团对物性的贡献值; m_{Nl} 为 N 级基团中第 l 种基团的基团数量, Δf_{Nl} 为 N 级基团中第 l 种基团对物性的贡献值; a 为关联常数; N 为大于或等于 2 的正整数。

48. 根据权利要求 43 所述的装置,其特征在于,产品调合单元,具体用于所述单分子的所有基团中确定一级基团、一级基团的基团数量、多级基团和多级基团的基团数量;将构成单分子的所有基团作为一级基团;将同时存在且对同一种物性共同存在贡献的多种基团作为多级基团,将所述多种基团的数量作为所述多级基团的级别。

49. 根据权利要求 48 所述的装置,其特征在于,所述产品调合单元,具体用于根据如下物性计算模型计算所述单分子的沸点:

$$T = \frac{SOL \times GROUP_{11} + SOL \times GROUP_{12} + \dots + SOL \times GROUP_{1N}}{(SOL \times Numh)^d + b} + c;$$

其中, T 为所述单分子的沸点, SOL 为根据构成所述单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量, $GROUP_{11}$ 为根据一级基团对所述沸点的贡献值转化得到的第一贡献值向量, $GROUP_{12}$ 为根据二级基团对所述沸点的贡献值转化得到的第二贡献值向量, $GROUP_{1N}$ 为根据 N 级基团对沸点的贡献值转化得到的第 N 贡献值向量, $Numh$ 为单分子中除氢原子以外的原子个数, d 为第一预设常数、 b 为第二预设常数、 c 为第三

预设常数；所述 N 为大于或等于 2 的正整数。

50. 根据权利要求 48 所述的装置，其特征在于，所述产品调合单元，具体用于根据如下物性计算模型计算所述单分子的密度：

$$D = \frac{SOL \times GROUP_{21}}{(SOL \times GROUP_{22} + \dots + SOL \times GROUP_{2N}) \times e};$$

5 其中， D 为所述单分子的密度， SOL 为根据构成所述单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量， $GROUP_{21}$ 为根据一级基团对所述密度的贡献值转化得到的第 $N+1$ 贡献值向量， $GROUP_{22}$ 为根据二级基团对所述密度的贡献值转化得到的第 $N+2$ 贡献值向量， $GROUP_{2N}$ 为根据 N 级基团对密度的贡献值转化得到的第 $2N$ 贡献值向量， e 为第四预设常数；所述 N 为大于或等于 2 的正整数。

10 51. 根据权利要求 48 所述的装置，其特征在于，所述产品调合单元，具体用于根据如下物性计算模型计算所述单分子的辛烷值：

$$X = SOL \times GROUP_{31} + SOL \times GROUP_{32} + \dots + SOL \times GROUP_{3N} + h;$$

15 其中， X 为所述单分子的辛烷值， SOL 为根据构成所述单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量， $GROUP_{31}$ 为根据一级基团对辛烷值的贡献值转化得到的第 $2N+1$ 贡献值向量， $GROUP_{32}$ 为根据二级基团对辛烷值的贡献值转化得到的第 $2N+2$ 贡献值向量， $GROUP_{3N}$ 为根据 N 级基团对辛烷值的贡献值转化得到的第 $3N$ 贡献值向量；所述 N 为大于或等于 2 的正整数； h 为第五预设常数。

52. 根据权利要求 36 所述的装置，其特征在于，所述混合产品的产品物性，包括：密度、浊点、倾点、苯胺点和辛烷值。

20 53. 根据权利要求 52 所述的装置，其特征在于，所述产品调合单元，具体用于通过如下计算公式计算每组所述混合产品的密度：

$$density = \sum (D_i \times x_{i_volume});$$

其中， $density$ 为所述混合产品的密度， D_i 为第 i 种所述单分子的密度， x_{i_volume} 为第 i 种所述单分子的第二组分含量。

25 54. 根据权利要求 52 所述的装置，其特征在于，所述产品调合单元，具体用于针对每组混合产品，根据该组混合产品中每种所述单分子的密度和沸点计算得到每种所述单分子的浊点贡献值；根据该组混合产品中所有所述单分子的浊点贡献值和每种单分子的含量，计算该组混合产品的浊点。

30 55. 根据权利要求 52 所述的装置，其特征在于，所述产品调合单元，具体用于针对每组混合产品，根据该组混合产品中每种所述单分子的密度和分子量，计算每种所述单

分子的倾点贡献值；根据该组混合产品中所有所述单分子的倾点贡献值和每种单分子的含量，计算该组混合产品的倾点。

56. 根据权利要求 52 所述的装置，其特征在于，所述产品调合单元，具体用于针对每组混合产品，根据该组混合产品中所述单分子的密度和沸点计算得到所述单分子的苯胺点贡献值；根据该组混合产品中所有所述单分子的苯胺点贡献值和每种单分子的含量，计算所述混合产品的苯胺点。

57. 根据权利要求 52 所述的装置，其特征在于，所述产品调合单元，具体用于针对每组混合产品，获取该组混合产品中每种所述单分子的辛烷值和每种单分子的含量；通过如下计算公式计算所述混合产品的辛烷值：

$$\begin{aligned}
 \text{ON} = & \left(\sum_{i=\text{HISQFG}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_H \sum_{i=\text{H}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_I \sum_{i=\text{I}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_S \sum_{i=\text{S}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i \right. \\
 & \left. + C_Q \sum_{i=\text{Q}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_F \sum_{i=\text{F}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_G \sum_{i=\text{G}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i \right) \div \\
 & \left(\sum_{i=\text{HISQFG}} \nu_i \beta_i + C_H \left(\sum_{i=\text{H}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{H}} \nu_i \right) + C_I \left(\sum_{i=\text{I}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{I}} \nu_i \right) + C_S \left(\sum_{i=\text{S}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{S}} \nu_i \right) \right. \\
 & \left. + C_Q \left(\sum_{i=\text{Q}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{Q}} \nu_i \right) + C_F \left(\sum_{i=\text{F}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{F}} \nu_i \right) + C_G \left(\sum_{i=\text{G}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{G}} \nu_i \right) \right) ;
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_H = & \frac{k_{\text{HI}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{HS}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{HQ}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{HF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{HG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HI}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{HS}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{HQ}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{HF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{HG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}} ; \\
 C_I = & \frac{k_{\text{HI}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{IQ}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{IF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{IG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HI}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{IQ}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{IF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{IG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}} ; \\
 C_S = & \frac{k_{\text{HS}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{SF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{SG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HS}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(b)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{SF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{SG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}} ; \\
 C_Q = & \frac{k_{\text{HQ}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IQ}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{QG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HQ}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IQ}}^{(b)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{QG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}} ; \\
 C_F = & \frac{k_{\text{HF}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IF}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SF}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QF}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{FG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HF}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IF}}^{(b)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SF}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QF}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{FG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}} ; \\
 C_G = & \frac{k_{\text{HG}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IG}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SG}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QG}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{FG}}^{(a)} \nu_{\text{F}}}{1 + k_{\text{HG}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IG}}^{(b)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SG}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QG}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{FG}}^{(b)} \nu_{\text{F}}} ;
 \end{aligned}$$

其中，所述 ON 为所述混合产品的辛烷值，HISQFG 为分子集合，H 为正构烷烃的分子集合，I 为异构烷烃的分子集合，S 为环烷烃的分子集合，Q 为烯烃的分子集合，F 为芳香烃的分子集合，G 为含氧化合物的分子集合， ν_i 为所述混合产品中的各个分子的含量； ν_{H} 、 ν_{I} 、 ν_{S} 、 ν_{Q} 、 ν_{F} 、 ν_{G} 分别为所述混合产品中的正构烷烃的总含量、异构烷烃的总含量、环烷烃的总含量、烯烃的总含量、芳香烃的总含量和含氧化合物的化合物总含量； β_i 为所述混合产品中的每种分子的回归参数； ON_i 为所述混合产品中的每种

分子的辛烷值； C_H 表示正构烷烃与其他分子的交互系数； C_I 表示异构烷烃与其他分子的交互系数； C_S 表示环烷烃与其他分子的交互系数； C_Q 表示烯烃与其他分子的交互系数； C_F 表示芳香烃与其他分子的交互系数； C_G 表示含氧类化合物与其他分子的交互系数； $k_{HH}^{(a)}$ 表示正构烷烃与异构烷烃之间的第一常数系数、 $k_{HS}^{(a)}$ 表示正构烷烃与环烷烃之间的第一常数系数、 $k_{HQ}^{(a)}$ 表示正构烷烃与烯烃之间的第一常数系数、 $k_{HF}^{(a)}$ 表示正构烷烃与芳香烃之间的第一常数系数、 $k_{HG}^{(a)}$ 表示正构烷烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{IS}^{(a)}$ 表示异构烷烃与环烷烃之间的第一常数系数、 $k_{IQ}^{(a)}$ 表示异构烷烃与烯烃之间的第一常数系数、 $k_{IF}^{(a)}$ 表示异构烷烃与芳香烃之间的第一常数系数、 $k_{IG}^{(a)}$ 表示异构烷烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{SQ}^{(a)}$ 表示环烷烃与烯烃之间的第一常数系数、 $k_{SF}^{(a)}$ 表示环烷烃与芳香烃之间的第一常数系数、 $k_{SG}^{(a)}$ 表示环烷烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{QF}^{(a)}$ 表示烯烃与芳香烃之间的第一常数系数、 $k_{QG}^{(a)}$ 表示烯烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{FG}^{(a)}$ 表示芳香烃与含氧化合物之间的第一常数系数、 $k_{HI}^{(b)}$ 表示正构烷烃与异构烷烃之间的第二常数系数、 $k_{HS}^{(b)}$ 表示正构烷烃与环烷烃之间的第二常数系数、 $k_{HQ}^{(b)}$ 表示正构烷烃与烯烃之间的第二常数系数、 $k_{HF}^{(b)}$ 表示正构烷烃与芳香烃之间的第二常数系数、 $k_{HG}^{(b)}$ 表示正构烷烃与含氧化合物之间的第二常数系数、 $k_{IS}^{(b)}$ 表示异构烷烃与环烷烃之间的第二常数系数、 $k_{IQ}^{(b)}$ 表示异构烷烃与烯烃之间的第二常数系数、 $k_{IF}^{(b)}$ 表示异构烷烃与芳香烃之间的第二常数系数、 $k_{IG}^{(b)}$ 表示异构烷烃与含氧化合物之间的第二常数系数、 $k_{SQ}^{(b)}$ 表示环烷烃与烯烃之间的第二常数系数、 $k_{SF}^{(b)}$ 表示环烷烃与芳香烃之间的第二常数系数、 $k_{SG}^{(b)}$ 表示环烷烃与含氧化合物之间的第二常数系数、 $k_{QF}^{(b)}$ 表示烯烃与芳香烃之间的第二常数系数、 $k_{QG}^{(b)}$ 表示烯烃与含氧化合物之间的第二常数系数、 $k_{FG}^{(b)}$ 表示芳香烃与含氧化合物之间的第二常数系数；其中，所述辛烷值包括：研究法辛烷值和马达法辛烷值。

58. 根据权利要求 33 所述的装置，其特征在于，所述装置还包括：

模型训练单元，用于建立产物预测模型；其中，所述产物预测模型，包括：包括多种反应规则的反应规则集合以及反应速率算法；获取样本原料的样本原料信息；利用所述样本原料信息，对所述反应规则集合进行训练，并固定训练完成的所述反应规则集合；利用所述样本原料信息，对所述反应速率算法进行训练，并固定训练完成的所述反应速率算法，得到训练完成的所述产物预测模型。

59. 根据权利要求 58 所述的装置，其特征在于，所述样本原料的样本原料信息，包括：所述样本原料的分子组成，所述样本原料中每种分子的分子含量，所述样本原料对应的实际产物的分子组成以及所述实际产物中每种分子的实际含量。

60. 根据权利要求 59 所述的装置, 其特征在于, 所述模型训练单元, 具体用于将所述样本原料的分子组成按预设的反应规则集合进行处理, 得到所述样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径; 根据所述样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径, 得到包含所述样本原料、中间产物以及预测产物的装置输出产物的第一分子组成; 在所述装置输出产物中, 包括: 所述样本原料、中间产物以及预测产物; 根据所述装置输出产物的第一分子组成与所述实际产物的第二分子组成, 计算第一相对偏差; 若所述第一相对偏差符合预设条件, 则固定所述反应规则集合; 若所述第一相对偏差不符合预设条件, 则调整所述反应规则集合中的反应规则, 根据调整后的反应规则集合, 重新计算所述第一相对差值, 直至所述第一相对偏差符合预设条件。

61. 根据权利要求 60 所述的装置, 其特征在于, 所述模型训练单元, 具体用于获取所述第一分子组成中单分子的种类, 构成第一集合; 获取所述第二分子组成中单分子的种类, 构成第二集合; 判断所述第二集合是否为所述第一集合的子集; 若所述第二集合不是所述第一集合的子集, 则获取预存储的不符合预设条件的相对偏差值作为所述第一相对偏差值; 若所述第二集合是所述第一集合的子集, 通过如下计算公式计算第一相对偏差:

$$x_1 = \frac{\text{card}((M - M_1 - M_2) - M_3)}{\text{card}(M - M_1 - M_2)};$$

x_1 为所述第一相对偏差, M 为所述第一集合, M_1 为所述样本原料的分子组成中单分子的种类组成的集合, M_2 为所述中间产物的分子组成中单分子的种类组成的集合, M_3 为所述第二集合, card 表示集合中元素的个数。

62. 根据权利要求 59 所述的装置, 其特征在于, 所述模型训练单元, 具体用于根据所述反应速率算法, 分别计算所述样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径的反应速率; 根据所述样本原料中每种分子的分子含量和所述分子的反应路径对应的反应速率, 得到所述样本原料对应的预测产物中每种分子的预测含量; 根据所述预测产物中每种分子的预测含量和所述实际产物中每种分子的实际含量, 计算第二相对偏差; 若所述第二相对偏差符合预设条件, 则固定所述反应速率算法; 若所述第二相对偏差不符合预设条件, 则调整所述反应速率算法中的参数, 根据调整后的反应速率算法, 重新计算所述第二相对偏差, 直至所述第二相对偏差符合预设条件。

63. 根据权利要求 62 所述的装置, 其特征在于, 所述模型训练单元, 具体用于根据所述反应速率算法中的反应速率常数, 计算每条反应路径的反应速率;

其中, 根据如下计算公式确定所述反应速率常数:

$$k = \frac{k_B E}{h} \exp\left(\frac{E \Delta S - \Delta E}{R E}\right) \varphi \times P^\alpha ;$$

其中， k 为所述反应速率常数， k_B 为玻尔茨曼常数， h 为普朗克常数， R 为理想气体常数， E 为反应路径所处环境的温度值， $\exp$ 为以自然常数为底的指数函数， ΔS 为反应路径对应的反应规则对应的反应前后的熵变， ΔE 为反应路径对应的反应规则对应的反应能垒， φ 催化剂活性因子， P 为反应路径所处环境的压力值， α 为反应路径对应的反应规则对应的压力影响因子。

64. 根据权利要求 33-63 任意一项所述的装置，其特征在于，所述石油加工装置的种类包括：催化裂化装置，延迟焦化装置，渣油加氢装置，加氢裂化装置，柴油加氢改质装置，柴油加氢精制装置，汽油加氢精制装置，催化重整装置和烷基化装置；其中，
10 每种石油加工装置对应一种反应规则集。

65. 一种分子级装置的实时优化系统，其特征在于，所述分子级装置的实时优化系统包括处理器、存储器；所述处理器用于执行所述存储器中存储的分子级装置的实时优化程序，以实现权利要求 1-32 中任一项所述的分子级装置的实时优化方法。

66. 一种计算机可读存储介质，其特征在于，所述计算机可读存储介质存储有一个
15 或者多个程序，所述一个或者多个程序可被一个或者多个处理器执行，以实现权利要求 1-32 中任一项所述的分子级装置的实时优化方法。