

一种分子级炼油加工全流程优化方法、装置、系统及存储介质

技术领域

5 本发明涉及石油加工技术领域，尤其涉及一种分子级炼油加工全流程优化方法、装置、系统及存储介质。

背景技术

由于原油中的分子种类较多，导致油品炼制生产过程十分复杂。要实现原油资源的最大化利用，最为重要的一点是实现原油分子在炼油加工全流程上的整体优化配置，使得整体效益最大化。炼油加工全流程整体优化技术一直是研究热点与难点之一。

10 发明内容

为了解决现有技术存在的问题，本发明的至少一个实施例提供了一种分子级炼油加工全流程优化方法、装置、系统及存储介质。

第一方面，本发明实施例提供了一种分子级炼油加工全流程优化方法，所述优化方法包括：

15 获取原油的分子组成；

根据所述原油的分子组成中各单分子的物性，获取所述原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成；

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相应的石油加工装置的产物预测模型，得到相应的预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量；

20 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，判断每组所述混合产品的产品物性是否符合预设标准集合中的任一预设标准；

25 若每组所述混合产品的产品物性符合预设标准集合中的任一预设标准，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；

若所述目标参数不符合预设条件，则调整所述预设原料比例、产物预测模型中的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标准集合中的任一预设标准，且所有所述混合产品中的目标参数符合预设条件。

30

在上述技术方案中，若所述目标参数符合预设条件，则可以认为此时的方案是较优

方案；可以考虑按照此方案进行生产加工；具体地，可以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。

基于上述技术方案，本发明实施例还可以做出如下改进。

结合第一方面，在第一方面的第一种实施例中，所述优化方法还包括：

5 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；

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。

在第一方面的第一种实施例中，若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，则认为可以进行后续步骤，执行所述得到相应的预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量的步骤。

结合第一方面，在第一方面的第二种实施例中，所述优化方法还包括：

15 获取输入每个所述石油加工装置的石油加工原料的分子组成和石油加工原料中每种单分子的含量；

计算石油加工原料中每种单分子的物性，根据所述石油加工原料中每种单分子的物性和每种单分子的含量计算所述石油加工原料的原料物性；

判断每个所述原料物性是否符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间；

20 若存在任一所述原料物性不符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间，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；直至每个所述原料物性均符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间。

在第一方面的第二种实施例中，若所述每个原料物性均符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间，则认为可以进行后续步骤，执行所述得到相应的预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量的步骤。

结合第一方面，在第一方面的第三种实施例中，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：

获取每组混合产品的产品价格和每组混合产品的产量；

30 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；

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操作成本，得到综合效益；

5 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，则所述目标参数不符合预设条件。

结合第一方面，在第一方面的第四种实施例中，所述优化方法还包括：

10 若任一组所述混合产品的产品物性不符合所述预设标准集合中的任一预设标准，则调整所述预设规则集合中的预设规则，将各个所述产品调合原料按调整后的预设规则集合进行调合，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标准集合中的任一预设标准。

结合第一方面，在第一方面的第五种实施例中，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：

15 获取每组所述产品调合原料的分子组成（即第一分子组成）和每种单分子的含量（即第一组分含量）；

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种单分子的第一组分含量，得到每组混合产品的分子组成（即第二分子组成）和每种单分子的含量

20 （即第二组分含量）；

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第二组分含量，计算每组混合产品的物性。

25 结合第一方面第二种实施例或第五种实施例，在第一方面的第六种实施例中，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；

30 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。

结合第一方面第六种实施例，在第一方面的第七种实施例中，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，所述优化方法还包括：

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；

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。

结合第一方面，在第一方面的第八种实施例中，所述根据所述原油的分子组成中各分子的物性，得到所述原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成，包括：

获取原油中的每种单分子和每种单分子的含量；

分别计算每种单分子的沸点；

基于预设馏分馏程对所述原油进行蒸馏切割得到多组馏分，并根据所述原油中每种所述单分子的沸点和含量确定每组所述馏分中包含的单分子和单分子的含量。

结合第一方面的第八种实施例，在第一方面的第九种实施例中，所述优化方法还包括：

针对馏程相邻的两组馏分，将馏程温度相对较高的馏分作为第一馏分，将馏程温度相对较低的馏分作为第二馏分；

确定所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间；

根据所述重叠区间的各个沸点对应的每种单分子和每种单分子的含量，计算得到重叠区间内每种单分子分别蒸馏进所述两组馏分的含量；

根据沸点位于重叠区间中的单分子分别蒸馏进所述第一馏分和所述第二馏分的含量，得到所述原油蒸馏切割后，第一馏分和第二馏分中的每种单分子和每种单分子的含量。

所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最小值以及最大值，各自通过第一馏分和第二馏分的分离指数与第一馏分和第二馏分的蒸馏切割温度确定。

其中，确定所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最小值可以通过如下方式确定：获取与第一馏分和第二馏分的分离指数的差值，根据所述差值与第一馏分和第

二馏分的蒸馏切割温度的乘积确定所述重叠区间的最小值；

例如，通过如下公式计算得到所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最小值： $T_{\min} = T_{\text{cut}} \times (1 - SF)$ ；

5 确定所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最大值可以通过如下方式确定：获取与第一馏分和第二馏分的分离指数的加和，根据所述加和与第一馏分和第二馏分的蒸馏切割温度的乘积确定所述重叠区间的最大值；

例如，通过如下公式计算得到所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最大值： $T_{\max} = T_{\text{cut}} \times (1 + SF)$ ；

10 其中， $T_{\min}$ 为所述重叠区间的最小值， $T_{\max}$ 为所述重叠区间的最大值， T_{cut} 为所述第一馏分和第二馏分的蒸馏切割温度， SF 为所述第一馏分和第二馏分的分离指数。

结合第一方面的第九种实施例，在第一方面的第十种实施例中，所述重叠区间内每种单分子分别蒸馏进所述两组馏分的含量通过如下方法确定包括：

针对沸点位于重叠区间每种所述单分子，获取所述单分子的沸点与所述重叠区间的最小值此二者的自然对数之差；

15 根据所述自然对数之差与所述单分子的含量的乘积确定所述单分子蒸馏进第一馏分的含量；

根据所述单分子的含量与所述单分子蒸馏进第一馏分的含量之差确定所述单分子蒸馏进第二馏分的含量；

例如，通过如下公式计算重叠区间内每种单分子分别蒸馏进所述两组馏分的含量：

$$20 \quad C_h^i = \ln \left(\frac{T_i}{T_{\min}} \right) \times C^i; \quad C_l^i = C^i - C_h^i;$$

其中， C_h^i 为沸点位于所述重叠区间中的第 i 种单分子蒸馏进所述第一馏分的含量， C_l^i 为沸点位于所述重叠区间中的第 i 种单分子蒸馏进所述第二馏分的含量， T_i 为所述第 i 种单分子的沸点， $T_{\min}$ 为重叠区间的最小值， C^i 为沸点位于所述重叠区间中的第 i 种单分子的含量。

25 结合第一方面的第八种实施例，在第一方面的第十一种实施例中，所述计算每种单分子的沸点包括：

针对每种所述单分子，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沸点的贡献值；

30 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沸点的贡献值，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沸点。

结合第一方面的第十一种实施例，在第一方面的第十二种实施例中，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沸点的贡献值，输入预先训练的物性计算模型之前，所述优化方法还包括：

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沸点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沸点作为所述单分子的沸点；

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沸点的贡献值，输入预先训练的物性计算模型的步骤。

结合第一方面的第六或第十种实施例，在第一方面的第十种实施例中，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；所述样本单分子的物性已知；

将所述样本单分子包含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应的贡献值，并存储为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预设偏差阈值，则调整所述物性计算模型中每种基团对应的贡献值，直到所述物性计算模型收敛为止。

结合第一方面的第十三种实施例，在第一方面的第十四种实施例中，建立如下所示物性计算模型： $f = a + \sum_i n_i \Delta f_i$ ；

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

结合第一方面的第十三种实施例，在第一方面的第十五种实施例中，所述获取构成样本单分子的每种基团的基团数量，包括：

30 在所述样本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。

5 结合第一方面的第十五种实施例，在第一方面的第十六种实施例中，

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}

10 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。

结合第一方面的第十一种实施例，在第一方面的第十七种实施例中，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。

结合第一方面的第十七种实施例，在第一方面的第十八种实施例中，

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，

20 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沸点，包括：

根据如下物性计算模型计算所述单分子的沸点：

$$T = \frac{SOL \times GROUP_1 + SOL \times GROUP_2 + \dots + SOL \times GROUP_N}{(SOL \times Numh)^d + b} + c$$

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， $GROUP_1$ 为根据一级基团对沸点的贡献值转化得到的第一贡献值向量， $GROUP_2$ 为根据二级基团对沸点的贡献值转化得到的第二贡献值向量， $GROUP_N$ 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。

结合第一方面的第十八种实施例，在第一方面的第十九种实施例中，所述优化方法
30 还包括：

所述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，包括：

将基团的种类的数量作为所述单分子向量的维数；

将每种基团的基团数量作为所述单分子向量中对应维度的元素值；

所述根据一级基团对沸点的贡献值转化得到的第一贡献值向量，包括：

5 将一级基团的种类的数量作为所述第一贡献值向量的维数；

将每种所述一级基团对沸点的贡献值作为所述第一贡献值向量中对应维度的元素值；

所述根据二级基团对沸点的贡献值转化得到的第二贡献值向量，包括：

将二级基团的种类的数量作为所述第二贡献值向量的维数；

10 将每种所述二级基团对沸点的贡献值作为所述第二贡献值向量中对应维度的元素值；

所述根据 N 级基团对沸点的贡献值转化得到的第 N 贡献值向量，包括：

将 N 级基团的种类的数量作为所述第 N 贡献值向量的维数；

15 将每种所述 N 级基团对沸点的贡献值作为所述第 N 贡献值向量中对应维度的元素值。

结合第一方面，在第一方面的第二十二种实施例中，所述按预设原料比例将相应的各个馏分分别输入相应的石油加工装置的产物预测模型，包括：

根据预设原料比例，获取不同数量的各个馏分分别输入相应的石油加工装置的产物预测模型中；

20 所述石油加工装置包括：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。

结合第一方面第二十种实施例，在第一方面的第二十一实施例中，对产物预测模型进行训练的步骤，包括：

25 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；

30 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。

结合第一方面的第二十一实施例，在第一方面的第二十二实施例中，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。

- 5 结合第一方面的第二十二实施例，在第一方面的第二十三实施例中，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：

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；

- 10 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；

- 15 若所述第一相对偏差符合预设条件，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偏差，直至所述第一相对偏差符合预设条件。

- 结合第一方面的第二十三实施例，在第一方面的第二十四实施例中，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
20 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；

判断所述第二集合是否为所述第一集合的子集；

- 25 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，通过如下方式计算第一相对偏差：根据所述预测产物中不在所述第二集合中的部分的数量在所述预测产物总数量中的占比确定第一相对偏差；

例如通过如下计算公式计算第一相对偏差：
$$x_1 = \frac{\text{card}((M - M_1 - M_2) - M_3)}{\text{card}(M - M_1 - M_2)};$$

- 30 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。

结合第一方面的第二十二种实施例，在第一方面的第二十五种实施例中，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：

- 5 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；

- 10 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。

- 15 结合第一方面的第二十五种实施例，在第一方面的第二十六种实施例中，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，所述反应速率常数基于过渡态理论计算方法确定；

- 20 例如，根据如下计算公式确定所述反应速率常数： $k = \frac{k_B E}{h} \exp\left(\frac{E\Delta S - \Delta E}{RE}\right) \phi \times P^\alpha$ ；

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 为催化剂活性因子， P 为反应路径所述环境的压力值， α 为反应路径对应的反应规则对应的压力影响因子；

- 25 根据所述反应速率常数，得到所述反应路径的反应速率。

- 结合第一方面或第一方面的第一、第二、第三、第四、第五、第六、第七、第八、第九、第十、第十一、第十二、第十三、第十四、第十五、第十六、第十七、第十八、第十九、第二十、第二十一、第二十二、第二十三、第二十四、第二十五、第二十六种实施例，在第一方面的第二十七种实施例中，每种石油加工装置对应一种反应规则集合。
- 30

第二方面，本发明实施例提供了一种分子级炼油加工全流程优化装置，所述优化装置包括：

获取单元，用于获取原油的分子组成；

5 第一处理单元，用于根据所述原油的分子组成中各单分子的物性，获取所述原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成；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相应的石油加工装置的产物预测模型，得到相应的预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量；

第二处理单元，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；

10 第三处理单元，用于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，判断每组所述混合产品的产品物性是否符合预设标准集合中的任一预设标准；

第四处理单元，用于若每组所述混合产品的产品物性符合预设标准集合中的任一预设标准，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；
15 若所述目标参数不符合预设条件，则调整所述预设原料比例、产物预测模型中的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标准集合中的任一预设标准，且所有所述混合产品中的目标参数符合预设条件。

结合第二方面，在第二方面的第一种实施例中，所述优化装置还包括：

20 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；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
25 加工装置的预设输入流量范围。

结合第二方面，在第二方面的第二种实施例中，所述优化装置还包括：

入料物性控制单元，用于获取输入每个所述石油加工装置的石油加工原料的分子组成和石油加工原料中每种单分子的含量；计算石油加工原料中每种单分子的物性，根据所述石油加工原料中每种单分子的物性和每种单分子的含量计算所述石油加工原料的
30 原料物性；判断每个所述原料物性是否符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间；若存在任一所述原料物性不符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间，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；直至每个所述原料物性均符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间。

结合第二方面，在第二方面的第三种实施例中，所述第四处理单元，具体用于获取
5 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；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
10 最大值；若所述综合效益达到最大值，则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，则所述目标参数不符合预设条件。

结合第二方面，在第二方面的第四种实施例中，所述优化装置还包括：

产品物性控制单元，用于若任一所述混合产品的产品物性不符合所述预设标准集合中的任一预设标准，则调整所述预设规则集合中的预设规则，将各个所述产品调合原
15 料按调整后的预设规则集合进行调合，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标准集合中的任一预设标准。

结合第二方面，在第二方面的第五种实施例中，所述第三处理单元，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种单分子的第一组分含量，得到
20 每组混合产品的第二分子组成和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第二组分含量，计算每组混合产品的物性。

结合第二方面的第五种实施例，在第二方面的第六种实施例中，所述第三处理单元，
25 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。

结合第二方面的第六种实施例，在第二方面的第七种实施例中，所述优化装置还包
30 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；若不存在与所述单分子相同的所述模板单分子，则通过所述第三处理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。

结合第二方面，在第二方面的第八种实施例中，所述第一处理单元，具体用于获取原油中的每种单分子和每种单分子的含量；分别计算每种单分子的沸点；基于预设馏分馏程对所述原油进行蒸馏切割得到多组馏分，并根据所述原油中每种所述单分子的沸点和含量确定每组所述馏分中包含的单分子和单分子的含量。

结合第二方面的第八种实施例，在第二方面的第九种实施例中，所述第一处理单元，还用于针对馏程相邻的两组馏分，将馏程温度相对较高的馏分作为第一馏分，将馏程温度相对较低的馏分作为第二馏分；

通过如下公式计算得到所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最小值：

$$T_{\min} = T_{\text{cut}} \times (1 - SF);$$

通过如下公式计算得到所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最大值：

$$T_{\max} = T_{\text{cut}} \times (1 + SF);$$

其中， $T_{\min}$ 为所述重叠区间的最小值， $T_{\max}$ 为所述重叠区间的最大值， T_{cut} 为所述第一馏分和第二馏分的蒸馏切割温度， SF 为所述第一馏分和第二馏分的分离指数。

结合第二方面的第九种实施例，在第二方面的第十种实施例中，所述第一处理单元，还用于根据所述重叠区间的各个沸点对应的每种单分子和每种单分子的含量，计算得到重叠区间内每种单分子分别蒸馏进所述两组馏分的含量；根据沸点位于重叠区间中的单分子分别蒸馏进所述第一馏分和所述第二馏分的含量，得到所述原油蒸馏切割后，第一馏分和第二馏分中的每种单分子和每种单分子的含量；

其中，通过如下公式计算重叠区间内每种单分子分别蒸馏进所述两组馏分的含量：

$$C_h^i = \ln \left(\frac{T_i}{T_{\min}} \right) \times C^i; \quad C_l^i = C^i - C_h^i;$$

其中， C_h^i 为沸点位于所述重叠区间中的第 i 种单分子蒸馏进所述第一馏分的含量， C_l^i 为沸点位于所述重叠区间中的第 i 种单分子蒸馏进所述第二馏分的含量， T_i 为所述第 i 种单分子的沸点， $T_{\min}$ 为重叠区间的最小值， C^i 为沸点位于所述重叠区间中的第 i 种单分子的含量。

结合第二方面的第八种实施例，在第二方面的第十一种实施例中，所述第一处理单元，具体用于针对每种所述单分子，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沸点的贡献值；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沸点的贡献值，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沸点。

结合第二方面的第十一种实施例，在第二方面的第十二种实施例中，所述优化装置还包括：

单分子沸点模板匹配单元，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沸点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沸点作为所述单分子的沸点；若不存在与所述单分子相同的所述模板单分子，则通过所述第一处理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沸点的贡献值，输入预先训练的物性计算模型的步骤。

结合第二方面的第六或第十一种实施例，在第二方面的第十三种实施例中，所述优化装置还包括：

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；所述样本单分子的物性已知；将所述样本单分子包含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应的贡献值，并存储为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预设偏差阈值，则调整所述物性计算模型中每种基团对应的贡献值，直到所述物性计算模型收敛为止。

结合第二方面的第十三种实施例，在第二方面的第十四种实施例中，所述模型训练单元，用于建立如下所示物性计算模型：
$$f = a + \sum_i n_i \Delta f_i;$$

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

结合第二方面的第十四种实施例，在第二方面的第十五种实施例中，所述模型训练单元，具体用于在所述样本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。

结合第二方面的第十五种实施例，在第二方面的第十六种实施例中，所述模型训练
5 单元，用于建立如下所示物性计算模型： $f = a + \sum_i m_{li} \Delta f_{li} + \sum_j m_{2j} \Delta f_{2j} \dots + \sum_l m_{Nl} \Delta f_{Nl}$ ；

其中， f 为所述单分子的物性， m_{li} 为一级基团中第 i 种基团的基团数量， Δf_{li} 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 结合第二方面的第十一种实施例，在第二方面的第十七种实施例中，所述第一处理单元，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。

15 结合第二方面的第十七种实施例，在第二方面的第十八种实施例中，所述第一处理单元，具体用于根据如下物性计算模型计算所述单分子的沸点：

$$T = \frac{SOL \times GROUP_1 + SOL \times GROUP_2 + \dots + SOL \times GROUP_N}{(SOL \times Numh)^d + b} + c ;$$

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， $GROUP_1$ 为根据一级基团对沸点的贡献值转化得到的第一贡献
20 值向量， $GROUP_2$ 为根据二级基团对沸点的贡献值转化得到的第二贡献值向量， $GROUP_N$ 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。

结合第二方面的第十八种实施例，在第二方面的第十九种实施例中，所述第一处理
25 单元，具体用于将基团的种类的数量作为所述单分子向量的维数；将每种基团的基团数量作为所述单分子向量中对应维度的元素值；

所述第一处理单元，具体用于将一级基团的种类的数量作为所述第一贡献值向量的维数；将每种所述一级基团对沸点的贡献值作为所述第一贡献值向量中对应维度的元素值；

30 所述第一处理单元，具体用于将二级基团的种类的数量作为所述第二贡献值向量的

维数；将每种所述二级基团对沸点的贡献值作为所述第二贡献值向量中对应维度的元素值；

所述第一处理单元，具体用于将 N 级基团的种类的数量作为所述第 N 贡献值向量的维数；将每种所述 N 级基团对沸点的贡献值作为所述第 N 贡献值向量中对应维度的元素值。

结合第二方面，在第二方面的第二十种实施例中，第一处理单元，具体用于根据预设原料比例，获取不同数量的各个馏分分别输入相应的石油加工装置的产物预测模型中；所述石油加工装置包括：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。

结合第二方面的第二十种实施例，在第二方面的第二十一实施例中，所述优化装置还包括：

模型训练单元，用于建立产物预测模型；获取样本原料的样本原料信息；利用所述样本原料信息，对所述产物预测模型中的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，对产物预测模型包括的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；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。

结合第二方面的第二十一实施例中，在第二方面的第二十二实施例中，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。

结合第二方面的第二十二实施例中，在第二方面的第二十三实施例中，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。

结合第二方面的第二十三实施例中，在第二方面的第二十四实施例中，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

$$5 \quad \text{下方式计算第一相对偏差：} x_1 = \frac{\text{card}((M - M_1 - M_2) - M_3)}{\text{card}(M - M_1 - M_2)} ;$$

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。

结合第二方面的第二十三种实施例，在第二方面的第二十五种实施例中，所述模型
10 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
15 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。

结合第二方面的第二十五种实施例，在第二方面的第二十六种实施例中，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；

$$20 \quad \text{其中，根据如下计算公式确定所述反应速率常数：} k = \frac{k_B E}{h} \exp\left(\frac{E \Delta S - \Delta E}{RE}\right) \phi \times P^\alpha ;$$

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 为反应路径所述环境的压力值， α 为反应路径对应的
25 反应规则对应的压力影响因子。

结合第二方面的第二十、二十一、二十二、二十三、二十四、二十五或二十六种实施例，在第二方面的第二十七种实施例中，每种石油加工装置对应一种反应规则集合。

第三方面，本发明实施例提供了一种分子级炼油加工全流程优化系统，包括处理器、通信接口、存储器和通信总线，其中，处理器，通信接口，存储器通过通信总线完成相
30 互间的通信；

存储器，用于存放计算机程序；

处理器，用于执行存储器上所存放的程序时，实现第一方面中任一实施例所述的优化方法。

第四方面，本发明实施例提供了一种计算机可读存储介质，所述计算机可读存储介质存储有一个或者多个程序，所述一个或者多个程序可被一个或者多个处理器执行，以实现第一方面中任一实施例所述的优化方法。

本发明的上述技术方案与现有技术相比具有如下优点：本发明实施例通过获取原油的分子组成，获取原油进行蒸馏后不同馏分的分子组成，获取不同馏分经相应石油加工装置的产物预测模型处理得到的预测产物的分子组成和每种单分子的含量，将预测产物进行混合得到多组混合产品，当任一混合产品的产品物性不符合任一预设标准，或者，混合产品的目标参数未符合预设条件，调整不同馏分进入相应石油加工装置的比例，调整产物预测模型中的操作参数，调整预测产物进行混合的混合规则，重新得到混合产品，直至所有混合产品的产品物性符合任一预设标准，且所有混合产品的目标参数符合预设条件，通过调整馏分进行二次处理的比例，预测最终的预测产物，并按预设混合规则进行调合得到混合产品，保证最终调合出的混合产品的物性符合预设标准，且混合产品的目标参数符合预设条件，通过对生产工艺进行仿真优化，提高生产效益。

附图说明

图 1 是本发明一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图。

图 2 是本发明另一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图。

图 3 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其一。

图 4 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其二。

图 5 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其三。

图 6 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其四。

图 7 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其五。

图 8 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其六。

图 9 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其七。

图 10 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其八。

图 11 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其九。

图 12 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其十。

图 13 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化方法流程示意图其十一。

图 14 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化装置结构示意图。

图 15 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化系统结构示意图。

图 16 是本发明又一实施例提供的分子级炼油加工全流程优化设备结构示意图。

具体实施方式

5 为使本发明实施例的目的、技术方案和优点更加清楚，下面将结合本发明实施例中的附图，对本发明实施例中的技术方案进行清楚、完整地描述，显然，所描述的实施例是本发明的一部分实施例，而不是全部的实施例。基于本发明中的实施例，本领域普通技术人员在没有做出创造性劳动的前提下所获得的所有其他实施例，都属于本发明保护的范围。

10 如图 1 所示，本发明实施例提供了一种分子级炼油加工全流程优化方法。参照图 1 所示，优化方法包括以下步骤：

S11、获取原油的分子组成。

在本实施例中，原油的分子种类多，不同的单分子的沸点不同，需要以不同的温度蒸馏分离，一般来说，原油中分子量越大的单分子，其沸点越高，就越难分离，在原油
15 分离过程中，按蒸馏出来的油品的种类，结合分子的沸点划分馏程，每个馏程对应一种油品，以完成对原油的分离，在本步骤中，获取原油中的单分子和每种单分子对应的含量。

在本实施例中，可以通过全二维气相色谱法、四级杆气相色谱-质谱仪检测法、气相色谱/场电离-飞行时间质谱检测法、气相色谱法、近红外光谱法、核磁共振波谱法、
20 拉曼光谱法、傅立叶变换离子回旋共振质谱法、静电场轨道阱质谱法和离子淌度质谱法中的一种或多种，确定混合物的分子组成。当然，还可以通过其他方式来确定混合物的分子组成，例如：通过 ASTM D2425、SH/T 0606 和/或 ASTM D8144-18 的方式确定混合物的分子组成。

上述分子检测方法可以检测出分子的结构，并以此来得到分子的种类，但是由于原油
25 中的分子种类数量大，虽然检测一次原油，在该原油再次使用时，可以不再检测原油的分子，但是每个单分子均进行检测的工作量大，耗时久，所以，在本方案中还可以基于结构导向集总分子表征方法构建单分子，结构导向集总分子表征方法，就是 SOL 分子表征方法，该方法利用 24 个结构增量片段表征复杂烃类分子的基础结构。任何一个石油分子都能够用一组特定的结构增量片段来表述。SOL 方法属于分子尺度上的集总，
30 将实际体系中的分子数由上百万个减少到几千，大大降低了模拟的复杂性。该表征方法不仅可以表示烷烃、环烷烃，一直到包含 50-60 个碳原子的复杂芳烃结构，还可表示作

为中间产物或二次反应产物的烯烃或环烯烃，另外还考虑了含硫、氮、氧等杂原子化合物。

在本实施例中，原油的分子组成为原油中各种分子（单分子）的信息。例如：原料包含的单分子，单分子的种类，每种单分子的体积、含量等。

- 5 S12、根据原油的分子组成中各单分子的物性，获取原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成。

在本实施例中，可以通过分别计算原油中每种单分子的沸点，基于每种单分子的沸点和含量确定馏分馏程，根据馏分馏程对原油进行蒸馏切割，得到多组馏分，在本步骤中，由于是基于单分子的物性对原油进行蒸馏，所以可以知晓原油蒸馏后得到的每组馏

10 分的分子组成。

S13、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相应的石油加工装置的产物预测模型，得到相应的预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量。

在本实施例中，将相应的各个馏分作为石油加工原料进行二次处理，其中预设原料

15 比例即分别输入进不同的石油加工装置的各个馏分的比例，通过各个石油加工装置的产物预测模型，结合输入石油加工装置的馏分的分子组成，得到预测产物中的分子组成和预测产物中每种单分子的含量。

在本实施例中，原油进行蒸馏后得到的馏分包括轻质馏分和重质馏分，其中轻质馏分比如石脑油，可不需要再进行二次加工，而重质馏分一般需要进行不同的二次加工，

20 使得重质馏分转换为轻质的油品，以提高油品的各项性质，在本方案中，按预设原料比例将相应的各个馏分输入石油加工装置进行处理，预设原料比例包括：输入石油加工装置的馏分的种类和量，不需要进行二次加工装置的馏分则不再预设原料比例中。

在本实施例中，产物预测模型已训练优化完成，通过产物预测模型就可以得到石油加工原料在输入石油加工装置后，调整石油加工装置中的反应条件，比如压力、温度和

25 空速等条件，以抑制某些反应的进行或者提高某些反应的进行，实现控制产物的生成，在本步骤中，可以得到某一设定条件下的产物情况。

石油加工装置包括：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。

- 30 S14、将各个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。

在本实施例中，将各个石油加工装置输入的预测产物作为产品调合原料进行调合，其中，预设规则集合中的每组预设规则中包括所使用的预测产物的种类和数量，通过混合不同石油加工装置输出的预测产物得到相应的混合产品，其中混合产品包括但不限于，用于车辆的车用油品、润滑油、液压油、齿轮油、切削油等汽油产品。通过对各个产品调合原料进行调合，使得得到的各个混合产品均符合相应产品的国家标准，即可完成生产规划。

在本实施例中，根据预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量，结合预设规则集合，得到不同的混合产品的分子组成和混合产品中每种单分子的含量。

S15、根据每组混合产品的分子组成和每种单分子的含量分别计算每组混合产品的产品物性，判断每组混合产品的产品物性是否符合预设标准集合中的任一预设标准。

在本实施例中，分别计算每组混合产品的产品物性，可以通过确定每组混合产品中包含的各种单分子，即确定混合产品的分子组成，分别计算混合产品中每种单分子的物性，再根据混合汽油中每种单分子的物性和含量计算得到调和汽油产品的物性。其中，单分子的物性，包括但不限于：密度、沸点、密度、辛烷值。例如：单分子的物性还可以包括：粘度、溶解度参数、十六烷值、不饱和度等。

在本实施例中，预设标准集合中的预设标准可以是车用汽油的标准、润滑油的标准、液压油的标准、齿轮油的标准和切削油的标准等汽油产品的标准，只要调合出的混合产品符合预设标准集合中的任一项，则说明这个混合产品可以进行售卖，同时，由于不同的混合产品是同时进行调合的，所以，同时进行调合得到的混合产品应分别符合预设标准集合中的任一标准，这样，用以调合的预设规则集合才是合格的集合，避免出现混合产品无法产生价值的情况。

其中，预设标准集合的建立方法可以包括如下步骤：获取不同牌号的车用油品的标准；将每种牌号的车用油品的标准均作为预设标准，组成预设标准集合。通过获取不同牌号的车用油品的标准，组成预设标准集合，使得调合出来的混合汽油产品均为车用油品。

S16、若每组混合产品的产品物性符合预设标准集合中的任一预设标准，根据所有混合产品获取目标参数，判断目标参数是否符合预设条件。

在本实施例中，若每组混合产品的产品物性符合预设标准集合中的任一预设标准时，说明此时调合出来的每个混合产品均为合格产品，根据混合产品获取相关的目标参数，确认目标参数是否符合预设条件，其中，目标参数可以是产品的经济效益、产品中会对环境造成危害的物质的含量，各种混合产品中符合某项预设标准的产品在所有混合

产品中的占比，在本步骤中，炼油厂进行炼油的最终目的就是为了追求效益，通过各个混合产品的价格和混合产品的量即可计算得到一个毛利值，可以通过该毛利值确认最终效益是否达到最大，来确认目标参数是否符合预设条件，确认最终效益是否达到最大可以通过随机算法进行计算，同时，随着人们环保意识的逐渐加强，混合产品中会对环境造成危害的物质的含量也会影响到该混合产品的销售，即使计算得到的效益值较大，在销售端无法售出，也无法转换成效益，所以，为增加油品的竞争力，可以对混合产品中对环境造成危害的物质的含量进行限制；同时，在不同的混合产品进行销售时，市场会有不同的需求量，比如，九十八号车用汽油的价格高于九十五号车用汽油的价格，但是九十五号车用汽油的消耗量更大，炼厂生产出大量的九十八号车用汽油，但市场的消化时间会更长，造成九十八号车用汽油库存积压，导致更多的人力和其他方面的成本，导致最终产生的效益还不如生产九十五号车用汽油，所以在本步骤中可以对符合某项预设标准的混合产品的生产量在所有混合产品中的占比，以避免产品积压。

比如，判断目标参数是否符合预设条件包括以下步骤（参照图 2 所示）：

- S21、获取每组混合产品的产品价格和每组混合产品的产量。
- 15 S22、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。
- S23、对每组混合产品的产品效益进行累加得到累计效益。
- S24、获取每组石油加工原料的原料价格和每个石油加工装置的操作成本。
- S25、将累计效益减去所有石油加工原料的原料价格和所有石油加工装置操作成本，
- 20 得到综合效益。

在本实施例中，将混合产品的累计效益减去各个石油加工装置的操作成本和石油加工原料的原料成本，即可得到相应综合效益，其中，石油加工装置的操作成本包括：装置损耗成本、人工操作成本。

- S26、将综合效益作为目标参数；判断综合效益是否达到最大值；
- 25 S27a、若综合效益达到最大值，则目标参数符合预设条件；
- S27b、若综合效益未达到最大值，则目标参数不符合预设条件。

在本实施例中，将综合效益作为目标参数，以保证生产效益，可以通过多起点随机搜索的全局优化算法判断综合效益是否达到最大值。

- S17a、若目标参数符合预设条件，则输出预设原料比例、产物预测模型和预设规则
- 30 集合作为生产加工方案。

在本实施例中，当目标参数也符合相应的预设条件时，说明此时整个生产流程已经

符合各项生产需求，可以进行可持续性生产，此时，输出方案中的将不同的馏分输入进不同的石油加工装置的预设原料比例、用以计算每个石油加工装置生产出的预测产物的分子组成和每种单分子的含量的产物预测模型和用以对石油加工装置产出的预测产物进行调合的预设规则集合，作为生产加工方案，在实际生产过程中，利用该生产加工方案进行生产，在分子级的层次上实现对炼油的全流程优化。

S17b、若目标参数不符合预设条件，则调整预设原料比例、产物预测模型中的参数和预设规则集合中的预设规则，重新得到多组混合产品，直至每组混合产品的产品物性符合预设标准集合中的任一预设标准，且所有混合产品中的目标参数符合预设条件。

在本实施例中，在目标参数不符合预设条件时，说明最终调合出来的混合产品产生的经济效益可能未达到最大值，或者，混合产品中对环境造成影响的物质的量超过了设定值，或者，混合产品中符合某个预设标准的混合产品在所有混合产品中的占比量未达到设定值，此时可通过调整预设原料比例、产物预测模型中的工作参数、和预设规则集合中的预设规则，从而得到另一情况下的多组混合产品，直至本方案中输出的每组混合产品的产品物性符合预设标准集合中的任一预设标准，同时所有混合产品中的目标参数符合预设条件，即完成对炼油厂的全流程优化。

在本实施例中，优化方法还包括如下步骤：

若任一组混合产品的产品物性不符合预设标准集合中的任一预设标准，则调整预设规则集合中的预设规则，将各个产品调合原料按调整后的预设规则集合进行调合，重新得到多组混合产品，直至每组混合产品的产品物性符合预设标准集合中的任一预设标准。

在本实施例中，若任一混合产品的产品物性不符合预设标准集合中的任一预设标准时，比如，调整得到的 95 号汽油的辛烷值达不到 95 号汽油的标准，则这次调合就是失败的调合，调合得到的产品无法进入市场，此时，调整预设规则集合中的预设规则，重新对产品调合原料进行调合，直至所得到的混合产品符合预设标准集合中的任一预设标准。

如图 3 所示，在一个具体的实施例中，优化方法还包括如下步骤：

S31、获取输入每个石油加工装置的石油加工原料的输入流量。

在本实施例中，根据预设原料比例，和分别输入石油加工装置的石油加工原料，得到单位时间分别输入每个石油加工装置的量，即可得到该石油加工装置的输入流量。

S32、判断每个输入流量是否均符合相应石油加工装置的预设输入流量范围。

在本实施例中，每组石油加工装置均有相应的处理能力，为避免原料输入量超出石

油加工装置的处理量,造成原料在石油加工装置中处理时间过短,无法完全反应的情况,更糟的情况可能会对石油加工装置造成损坏,在本实施例中,设置一预设输入流量范围,该范围的最大值可以是石油加工装置最大处理能力的百分之八十至百分之九十五之间,通过限制进入石油加工装置的原料的量,避免石油加工装置损坏。

- 5 S33a、若存在任一输入流量不符合相应石油加工装置的预设输入流量范围,则调整预设原料比例,按调整后的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;直至每个输入流量均符合相应石油加工装置的预设输入流量范围。

在本实施例中,在任一石油加工装置的原料输入流量大于预设输入流量范围时,调
10 整预设原料比例,重新规划输入石油加工装置的石油加工原料的量,使得每个石油加工装置的原料的输入流量均符合相应的石油加工装置的预设输入流量范围。

S33b、若每个输入流量均符合相应石油加工装置的预设输入流量范围,则执行得到相应的预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量的步骤。

在本实施例中,原料的输入流量符合相应的石油加工装置的预设输入流量范围时,
15 直接进行方案的后续步骤。

如图4所示,在一个具体的实施例中,优化方法还包括如下步骤:

S41、获取输入每个石油加工装置的石油加工原料的分子组成和石油加工原料中每种单分子的含量。

在本实施例中,根据预设原料比例,和各个馏分产物的分子组成和含量,得到分别
20 输入每个石油加工装置的石油加工原料的分子组成和石油加工原料中每种单分子的含量。

S42、计算石油加工原料中每种单分子的物性,根据石油加工原料中每种单分子的物性和每种单分子的含量计算石油加工原料的原料物性。

在本实施例中,分别计算输入每组石油加工装置的石油加工原料中每种单分子的物
25 性,根据石油加工原料中每种单分子的物性和每种单分子的含量计算该石油加工原料的原料物性。

其中,计算单分子的物性可以通过其他实施例中计算单分子的物性的方法进行计算,计算石油加工原料的原料物性可通过其他实施例中计算混合物的物性进行计算。

S43、判断每种石油加工原料物性是否符合相应石油加工装置的预设物性限制区间。

30 S44a、若存在任一原料物性不符合相应石油加工装置的预设物性限制区间,则调整预设原料比例,按调整后的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；直至每个原料物性均符合相应石油加工装置的预设物性限制区间。

在本实施例中，不同石油加工装置对进入的原料的物性有不同的要求为保证石油加工装置的使用寿命，在本方案中，确认输入石油加工装置的石油加工原料的原料物性，
5 并确认原料物性是否符合对应石油加工装置的预设物性限制区间，以保证石油加工装置正常使用，若任一石油加工原料不符合对应石油加工装置，则再次调整预设原料比例，调整输入石油加工装置的石油加工原料的原料物性，直至石油加工原料的原料物性符合相对应的石油加工装置的使用限制。由于不同石油加工装置的石油限制不同，所以每个石油加工装置均对应一个预设物性限制区间。

10 S44b、若每种石油加工原料物性均符合相应石油加工装置的预设物性限制区间，则执行得到相应的预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量的步骤。

在本实施例中，若石油加工原料的原料物性符合预设物性限制条件，则执行本方案的后续步骤。

下面对计算每组混合产品的产品物性进行进一步的描述，如图 5 所示，为根据本发
15 明一实施例的计算混合产品的产品物性的步骤流程图。

S51、获取每组产品调合原料的第一分子组成和每种单分子的第一组分含量。

由于产品调合原料是就是每组石油加工装置的预测产物，所以，基于预测产物即可得到产品调合原料的第一分子组成和每种单分子的第一组分含量。

S52、按预设规则集合，根据每组产品调合原料的第一分子组成和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种单分子的第二组分含量。
20

在本实施例中，预设规则集合中的预设规则中设定了需要的产品调合原料的种类和数量，通过产品调合原料的分子组成和每种单分子的第一组分含量，得到混合产品的第二分子组成和每种单分子的第二组分含量。

S53、根据每组混合产品的每种单分子包含的每种基团的基团数量和每种基团对物
25 性的贡献值，计算每种单分子的物性。

在本实施例中，针对每种单分子，获取构成单分子的每种基团的基团数量，以及获取每种基团对物性的贡献值；将构成单分子的每种基团的基团数量以及每种基团对物性的贡献值，输入预先训练的物性计算模型，获取物性计算模型输出的单分子的物性。

S54、根据每组混合产品中每种单分子的物性和第二组分含量，计算每组混合产
30 物的物性。

混合汽油产品的物性包括：研究法辛烷值、马达法辛烷值、雷德蒸汽压、恩氏馏程、

密度、苯体积分数、芳烃体积分数、烯烃体积分数、氧质量分数和硫质量分数。

下面提供五种，计算混合物物性的方式，但是本领域技术人员应当知道的是，以下几种方式仅用于说明本实施例，而不适用于限定本实施例。

方式一，当混合物的物性为密度时，通过如下计算公式计算混合物的密度：

$$5 \quad density = \sum (D_i \times x_{i-volume}) ;$$

其中， $density$ 为混合物的密度， D_i 为第 i 种单分子的密度， $x_{i-volume}$ 为第 i 种单分子的含量。

方式二，当混合物的物性为浊点时，计算混合物的物性，包括：

根据每种单分子的密度和沸点计算得到每种单分子的浊点贡献值；

10 根据混合物中所有单分子的浊点贡献值和含量，计算混合物的浊点。

方式三，当混合物的物性为倾点时，计算混合物的物性，包括：

根据每种单分子的密度和分子量，计算每种单分子的倾点贡献值；

根据混合物中所有单分子的倾点贡献值和含量，计算混合物的倾点。

方式四，当混合物的物性为苯胺点时，计算混合物的物性，包括：

15 根据单分子的密度和沸点计算得到单分子的苯胺点贡献值；

根据混合物中所有单分子的苯胺点贡献值和含量，计算混合物的苯胺点。

方式五，当混合物的物性为辛烷值时，计算方法包括：

获取混合物中每种单分子的辛烷值和含量；

通过如下计算公式计算混合物的辛烷值：

$$20 \quad \begin{aligned} ON = & \left(\sum_{i=HISQFG} \nu_i \beta_i ON_i + C_H \sum_{i=H} \nu_i \beta_i ON_i + C_I \sum_{i=I} \nu_i \beta_i ON_i + C_S \sum_{i=S} \nu_i \beta_i ON_i \right. \\ & \left. + C_Q \sum_{i=Q} \nu_i \beta_i ON_i + C_F \sum_{i=F} \nu_i \beta_i ON_i + C_G \sum_{i=G} \nu_i \beta_i ON_i \right) \div \\ & \left(\sum_{i=HISQFG} \nu_i \beta_i + C_H \left(\sum_{i=H} \nu_i \beta_i - \sum_{i=H} \nu_i \right) + C_I \left(\sum_{i=I} \nu_i \beta_i - \sum_{i=I} \nu_i \right) + C_S \left(\sum_{i=S} \nu_i \beta_i - \sum_{i=S} \nu_i \right) \right. \\ & \left. + C_Q \left(\sum_{i=Q} \nu_i \beta_i - \sum_{i=Q} \nu_i \right) + C_F \left(\sum_{i=F} \nu_i \beta_i - \sum_{i=F} \nu_i \right) + C_G \left(\sum_{i=G} \nu_i \beta_i - \sum_{i=G} \nu_i \right) \right) ; \end{aligned}$$

$$C_H = \frac{k_{HI}^{(a)} \nu_I + k_{HS}^{(a)} \nu_S + k_{HQ}^{(a)} \nu_Q + k_{HF}^{(a)} \nu_F + k_{HG}^{(a)} \nu_G}{1 + k_{HI}^{(b)} \nu_I + k_{HS}^{(b)} \nu_S + k_{HQ}^{(b)} \nu_Q + k_{HF}^{(b)} \nu_F + k_{HG}^{(b)} \nu_G} ;$$

$$C_I = \frac{k_{HI}^{(a)} \nu_H + k_{IS}^{(a)} \nu_S + k_{IQ}^{(a)} \nu_Q + k_{IF}^{(a)} \nu_F + k_{IG}^{(a)} \nu_G}{1 + k_{HI}^{(b)} \nu_H + k_{IS}^{(b)} \nu_S + k_{IQ}^{(b)} \nu_Q + k_{IF}^{(b)} \nu_F + k_{IG}^{(b)} \nu_G} ;$$

$$C_S = \frac{k_{HS}^{(a)} \nu_H + k_{IS}^{(a)} \nu_I + k_{SQ}^{(a)} \nu_Q + k_{SF}^{(a)} \nu_F + k_{SG}^{(a)} \nu_G}{1 + k_{HS}^{(b)} \nu_H + k_{IS}^{(b)} \nu_I + k_{SQ}^{(b)} \nu_Q + k_{SF}^{(b)} \nu_F + k_{SG}^{(b)} \nu_G} ;$$

$$C_Q = \frac{k_{HQ}^{(a)} \nu_H + k_{IQ}^{(a)} \nu_I + k_{SQ}^{(a)} \nu_S + k_{QF}^{(a)} \nu_F + k_{QG}^{(a)} \nu_G}{1 + k_{HQ}^{(b)} \nu_H + k_{IQ}^{(b)} \nu_I + k_{SQ}^{(b)} \nu_S + k_{QF}^{(b)} \nu_F + k_{QG}^{(b)} \nu_G} ;$$

$$C_F = \frac{k_{HF}^{(a)}v_H + k_{IF}^{(a)}v_I + k_{SF}^{(a)}v_S + k_{QF}^{(a)}v_Q + k_{FG}^{(a)}v_G}{1 + k_{HF}^{(b)}v_H + k_{IF}^{(b)}v_I + k_{SF}^{(b)}v_S + k_{QF}^{(b)}v_Q + k_{FG}^{(b)}v_G};$$

$$C_G = \frac{k_{HG}^{(a)}v_H + k_{IG}^{(a)}v_I + k_{SG}^{(a)}v_S + k_{QG}^{(a)}v_Q + k_{FG}^{(a)}v_F}{1 + k_{HG}^{(b)}v_H + k_{IG}^{(b)}v_I + k_{SG}^{(b)}v_S + k_{QG}^{(b)}v_Q + k_{FG}^{(b)}v_F};$$

- 其中, 所述 ON 为所述混合物的辛烷值, 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, v_i 为所述混合物中的各个分子的含量; v_H 、 v_I 、 v_S 、 v_Q 、 v_F 、 v_G 分别为所述混合物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 为所述混合物中的每种分子的回归参数; ON_i 为所述混合物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。

在本实施例中，计算每种单分子的物性包括如下步骤：

针对每种单分子，获取构成单分子的每种基团的基团数量，以及获取每种基团对物性的贡献值；将构成单分子的每种基团的基团数量以及每种基团对物性的贡献值，输入预先训练的物性计算模型，获取物性计算模型输出的单分子的物性。

- 5 下面对根据原油的分子组成中各分子的物性，得到原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成进行进一步描述，如图 6 所示，为根据本发明一实施例的得到不同馏分的分子组成的步骤流程图。

S61、获取原油中的每种单分子和每种单分子的含量。

- 在本实施例中，原油的分子种类多，不同的单分子的沸点不同，需要以不同的温度
10 蒸馏分离，一般来说，原油中分子量越大的单分子，其沸点越高，越难分离，在原油分离过程中，按蒸馏出来的油品的种类，结合分子的沸点划分馏程，每个馏程对应一种油品，以完成对原油的分离，在本步骤中，获取原油中的单分子和每种单分子对应的含量。

- 在本实施例中，可以通过全二维气相色谱法、四级杆气相色谱-质谱仪检测法、气相色谱/场电离-飞行时间质谱检测法、气相色谱法、近红外光谱法、核磁共振波谱法、
15 拉曼光谱法、傅立叶变换离子回旋共振质谱法、静电场轨道阱质谱法和离子淌度质谱法中的一种或多种，确定混合物的分子组成。当然，还可以通过其他方式来确定混合物的分子组成，例如：通过 ASTM D2425、SH/T 0606 和/或 ASTM D8144-18 的方式确定混合物的分子组成。

- 上述分子检测方法可以检测出分子的结构，并以此来得到分子的种类。但是由于原油中的分子种类数量大，虽然检测一次原油，在该原油再次使用时，可以不再检测原油
20 的分子，但是每个单分子均进行检测的工作量大、耗时长。所以，在本方案中还可以基于结构导向集总分子表征方法构建单分子，结构导向集总分子表征方法，就是 SOL 分子表征方法，该方法利用 24 个结构增量片段表征复杂烃类分子的基础结构。任何一个石油分子都能够用一组特定的结构增量片段来表述。SOL 方法属于分子尺度上的集总，
25 将实际体系中的分子数由上百万个减少到几千，大大降低了模拟的复杂性。该表征方法不仅可以表示烷烃、环烷烃，直到包含 50-60 个碳原子的复杂芳烃结构，还可表示作为中间产物或二次反应产物的烯烃或环烯烃，另外还考虑了含硫、氮、氧等杂原子化合物。

S62、分别计算每种单分子的沸点。

- 在本实施例中，分别计算每种单分子的沸点，可以通过获取构成单分子的每种基团的基团数量以及每种基团对沸点的贡献值，输入预先训练的物性计算模型，获取物性计算模型输出的单分子的沸点，其中构成单分子的基团就是上述实施例中基于 SOL 分子
30

表征方法的 24 个结构增量片段。

S63、基于预设馏分馏程对所述原油进行蒸馏切割得到多组馏分，并根据所述原油中每种所述单分子的沸点和含量确定每组所述馏分中包含的单分子和单分子的含量。

在本实施例中，按预设馏分馏程对原油进行切割，分别得到原油蒸馏处的各组馏分。

5 如图 7 所示，在一个具体的实施例中，全流程优化方法还包括以下步骤：

S71、针对馏程相邻的两组馏分，将馏程温度相对较高的馏分作为第一馏分，将馏程温度相对较低的馏分作为第二馏分。

在本实施例中，针对任意两组馏程相邻的两组馏分，在蒸馏过程中，两组馏分分割温度处，不仅沸点较低的馏分会蒸馏出来，沸点高于该分割温度的另一组馏分也会出现
10 蒸馏出一定量，比如，水的沸点为 100 摄氏度，但是在低于 100 摄氏度的温度时，水也会蒸发，在本方案中，通过计算得到原油蒸馏时，到什么温度时第二馏分中会出现第一馏分中的分子，到什么温度时，第一馏分中不会再出现第二馏分中的分子，实现对馏分中分子种类的分子级掌握。

S72、通过如下公式计算得到第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最小值：

15
$$T_{\min} = T_{\text{cut}} \times (1 - SF) ;$$

通过如下公式计算得到第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最大值：

$$T_{\max} = T_{\text{cut}} \times (1 + SF) ;$$

其中， $T_{\min}$ 为重叠区间的最小值， $T_{\max}$ 为重叠区间的最大值， T_{cut} 为第一馏分和第二馏分的蒸馏切割温度， SF 为第一馏分和第二馏分的分离指数。

20 S73、根据最小值和最大值得到重叠区间。

在本实施例中，计算相邻两个馏分的重叠区间，比如，第一馏分的馏程为 100-150℃，第二馏分的馏程为 50-100℃，℃为温度单元，此时的蒸馏分割温度为 100℃，第一馏分的馏程虽然是 100-150℃，比如，在蒸馏温度为 70℃时，蒸馏得到第二馏分的过程中，就有部分第一馏分蒸发出，掺杂在第二馏分中，在较低温度时第一馏分的蒸馏量较小，
25 随着温度的升高，蒸发进第二馏分中的第一馏分就越多，在本方案中，通过确认第一馏分中何时出现预设量第二馏分时，进行记录，在本实施例中，第一馏分和第二馏分的分离指数可以通过过往蒸馏过程中记录的相邻馏分出现混合的情况计算得到。具体的，在过往的蒸馏过程中，记录第二馏分中出现预设量的第一馏分时的温度，和第一馏分中不再出现预设量的第二馏分时的温度，基于第一馏分和第二馏分的蒸馏切割温度，计算得
30 到预备分离指数，获取大量的预备分离指数计算结果，平均得到该蒸馏切割温度下的分离指数。

在本实施例中，重叠区间内的每种单分子分别进入不同馏分的含量的步骤包括：

根据重叠区间的各个沸点对应的每种单分子和每种单分子的含量，计算得到重叠区间内每种单分子分别蒸馏进两组馏分的含量；

其中，通过如下公式计算重叠区间内每种单分子分别蒸馏进两组馏分的含量：

$$C_h^i = \ln\left(\frac{T_i}{T_{\min}}\right) \times C^i; \quad C_l^i = C^i - C_h^i;$$

其中， C_h^i 为沸点位于重叠区间中的第 i 种单分子蒸馏进第一馏分的含量， C_l^i 为沸点位于重叠区间中的第 i 种单分子蒸馏进第二馏分的含量， T_i 为第 i 种单分子的沸点， $T_{\min}$ 为重叠区间的最小值， C^i 为沸点位于重叠区间中的第 i 种单分子的含量；

根据沸点位于重叠区间中的单分子分别蒸馏进第一馏分和第二馏分的含量，得到原油蒸馏切割后，第一馏分和第二馏分中的每种单分子和每种单分子的含量。

在本实施例中，在确定重叠区间后，再计算得到重叠区间中每种单分子在进入相邻两组馏分的量，通过构建模型完成对不同馏分中各种分子的含量确定，提高后续精炼的准确度。

下面对计算单分子的沸点进行进一步描述。

如图 8 式所示，计算每种单分子的沸点的步骤流程包括：

S81、针对每种单分子，获取构成单分子的每种基团的基团数量，以及获取每种基团对沸点的贡献值。

在本实施例中，基于结构导向集总分子表征方法构建单分子，结构导向集总分子表征方法，就是 SOL 分子表征方法利用 24 个结构增量片段表征复杂烃类分子的基础结构。任何一个石油分子都能够用一组特定的结构增量片段来表述。SOL 分子表征方法属于分子尺度上的集总，将实际体系中的分子数由上百万个减少到几千，大大降低了模拟的复杂性。该表征方法不仅可以表示烷烃、环烷烃，一直到包含 50-60 个碳原子的复杂芳烃结构，还可表示作为中间产物或二次反应产物的烯烃或环烯烃，另外还考虑了含硫、氮、氧等杂原子化合物。可以通过拉曼光谱法、四级杆气相色谱-质谱仪检测法、气相色谱/场电离-飞行时间质谱检测法、气相色谱法、近红外光谱法、核磁共振波谱法、傅立叶变换离子回旋共振质谱法、静电场轨道阱质谱法和离子淌度质谱法中的一种或多种，确定分子结构，而后通过结构导向集总分子表征方法构建该单分子，在本步骤中，获取构成单分子的每种基团的基团数量，并获取每种基团对物性的贡献值，由于分子的物性是由分子的结构确定的，而在本方案中通过基团构建单分子，获取每种基团的基团数量和每种基团对物性的贡献值。

在本实施例中，基于 SOL 分子表征方法，确定每种单分子包含的基团；分别在每个单分子中，确定该单分子的每种基团的基团数量以及在该单分子中每种基团对物性的贡献值。由于单分子的物性的数量为多个，需要确定该单分子中每种基团分别对每种物性的贡献值。

- 5 S82、将构成单分子的每种基团的基团数量以及每种基团对沸点的贡献值，输入预先训练的物性计算模型，获取物性计算模型输出的单分子的沸点。

在本实施例中，通过将每种基团的基团数量和每种基团对物性的贡献值输入预先训练的物性计算模型，获取物性计算模型输出的该单分子的多个物性。

下面对训练物性计算模型的步骤进行进一步地描述。

- 10 如图 9 所示，训练物性计算模型的步骤流程包括：

S91、构建单分子的物性计算模型。

在本实施例中，在该物性计算模型中，包括：每种基团对物性的贡献值。该贡献值为可调的值，该贡献值在首次训练时为初始值。进一步地，在该物性计算模型中，包括：每种基团对每种物性的贡献值。

- 15 S92、获取构成样本单分子的每种基团的基团数量；样本单分子的物性已知。

在本实施例中，预先设置训练样本集。在训练样本集中包括多个样本单分子信息。样本单分子信息，包括但不限于：构成样本单分子的每种基团的基团数量，以及样本单分子的物性。

S93、将样本单分子包含的每种基团的基团数量输入物性计算模型。

- 20 S94、获取物性计算模型输出的样本单分子的预测物性；

S95a、如果预测物性与已知的物性之间的偏差值小于预设偏差阈值，则判定物性计算模型收敛，在已收敛的物性计算模型中获取每种基团对应的贡献值，并存储为基团对物性的贡献值。

- 25 由于单分子的物性可能为多种，所以，可以在已收敛的物性计算模型中获取到每种基团分别对每种物性的贡献值。

- 针对每种基团而言，存储该基团对每种物性的贡献值，以便后续计算单分子的物性时，可以获取到该单分子中每种基团对需要获知的物性的贡献值，并将该单分子的每种基团的基团数量，以及每种基团对需要获知的物性的贡献值作为物性计算模型的输入，物性计算模型将该单分子的每种基团的基团数量作为模型变量，将每种基团对需要获知的物性的贡献值作为模型参量（替换物性计算模型中每种基团对物性的可调贡献值），
30 计算出该需要获知的物性。

S95b、如果预测物性与已知的物性之间的偏差值大于等于预设偏差阈值，则调整物性计算模型中每种基团对应的贡献值，直到物性计算模型收敛为止。

在本实施例中，如果样本单分子的物性为多个，那么物性计算模型输出的样本单分子的预测物性也将为多个，这时，计算每个预测物性与对应的已知物性之间的偏差值，判定所有预测物性分别与对应的已知物性之间的偏差值是否都小于预设偏差值，若是，则判定该物性计算模型收敛，根据收敛的物性计算模型中即可获取得到每种基团对应物性的贡献值，通过上述方案可以得到每种基团对不同物性的贡献值。

下面给出两种针对不同物性均可使用的物性计算模型。本领域技术人员应当知道的是，下面两种物性计算模型仅为说明本实施例，而不适用于限定本实施例。

10 模型一：建立如下所示的物性计算模型： $f = a + \sum_i n_i \Delta f_i$;

其中， f 为单分子的物性， n_i 为第 i 种基团的基团数量， Δf_i 为第 i 种基团对物性的贡献值， a 为关联常数。

例如：对于沸点而言，在基于 SOL 的分子表征方法中，24 种基团都作为一级基团；在 24 种基团中，N6、N5、N4、N3、me、AA、NN、RN、NO、RO 和 KO 等基团中的一种或者多种同时存在会对沸点存在贡献，而针对不同的物性，基团对物性的贡献值均不一致，但在不同分子中同一基团对同一物性的贡献值是一致的，基于该方案，在本实施例中构建上述物性计算模型，通过训练构建的物性计算模型，使得物性计算模型收敛，即训练模型中的每种基团对物性的贡献值，最终得到每种基团对物性的贡献值。

在本实施例中，对于构成单分子的基团，我们可以进一步划分为多级基团。进一步地，在单分子的所有基团中确定一级基团和多级基团；其中，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，将多种基团的数量作为多级基团的级别，我们可以根据同时存在对同一种物性会一起产生作用的多种基团作为多级基团，具体的，比如，N6 和 N4 基团分别单独存在不同的分子中时，会对物性产生一定的影响，而其同时存在在一个分子中时，在原先对物性的贡献值的基础上，对物性的贡献值会产生一定的波动。我们划分上述多级基团的方式还可以通过基团之间的化学键力按预设键力区间进行划分，针对不同的物性，化学键力不同会有不同的影响，具体的可以根据分子稳定性对物性的影响进行划分。

模型二：基于划分的多级基团，可以建立如下物性计算模型：

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

30 其中， f 为单分子的物性， 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。

除了上述的通用型的物性计算模型, 还可以根据物性种类的不同, 为每种物性分别构建物性计算模型。

例如: 根据如下物性计算模型计算单分子的沸点:

$$T = \frac{SOL \times GROUP_1 + SOL \times GROUP_2 + \dots + SOL \times GROUP_N}{(SOL \times Numh)^d + b} + c;$$

其中, T 为单分子的沸点, SOL 为根据构成单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量, $GROUP_1$ 为根据一级基团对沸点的贡献值转化得到的第一贡献值向量, $GROUP_2$ 为根据二级基团对沸点的贡献值转化得到的第二贡献值向量, $GROUP_N$ 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; N 为大于或等于 2 的正整数。

根据构成单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量, 包括: 将构成单分子的所有基团的种类的数量作为单分子向量的维数; 将每种基团的基团数量作为单分子向量中对应维度的元素值。

根据单分子的各个一级基团分别对沸点的贡献值转化得到的第一贡献值向量, 包括: 将一级基团的种类的数量作为第一贡献值向量的维数; 将每种一级基团对沸点的贡献值作为第一贡献值向量中对应维度的元素值。根据单分子的各个二级基团分别对沸点的贡献值转化得到的第二贡献值向量, 包括: 将二级基团的种类的数量作为第二贡献值向量的维数; 将每种二级基团对沸点的贡献值作为第二贡献值向量中对应维度的元素值。以此类推, 根据单分子的各个 N 级基团分别对沸点的贡献值转化得到的第 N 贡献值向量, 包括: 将 N 级基团的种类的数量作为第 N 贡献值向量的维数; 将每种 N 级基团对沸点的贡献值作为第 N 贡献值向量中对应维度的元素值。

又如, 根据如下物性计算模型计算单分子的密度:

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

其中, D 为单分子的密度, SOL 为根据构成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; N 为大于或等于 2 的正整数。

根据构成单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量, 包括: 将构成单分子的所有基团的种类的数量作为单分子向量的维数; 将每种基团的基团数量作为单分子向量中对应维度的元素值。

根据单分子的各个一级基团分别对密度的贡献值转化得到的第 N+1 贡献值向量, 包括: 将一级基团的种类的数量作为第 N+1 贡献值向量的维数; 将每种一级基团对密度的贡献值作为第 N+1 贡献值向量中对应维度的元素值。根据单分子的各个二级基团分别对密度的贡献值转化得到的第 N+2 贡献值向量, 包括: 将二级基团的种类的数量作为第 N+2 贡献值向量的维数; 将每种二级基团对密度的贡献值作为第 N+2 贡献值向量中对应维度的元素值。以此类推, 根据单分子的各个 N 级基团分别对密度的贡献值转化得到的第 2N 贡献值向量, 包括: 将 N 级基团的种类的数量作为第 2N 贡献值向量的维数; 将每种 N 级基团对密度的贡献值作为第 2N 贡献值向量中对应维度的元素值。

比如, 根据如下物性计算模型计算单分子的辛烷值:

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

其中, X 为单分子的辛烷值, SOL 为根据构成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; N 为大于或等于 2 的正整数; h 为第五预设常数。

根据构成单分子的每种基团的基团数量转化得到的单分子向量, 包括: 将构成单分子的所有基团的种类的数量作为单分子向量的维数; 将每种基团的基团数量作为单分子向量中对应维度的元素值。

根据单分子的各个一级基团分别对辛烷值的贡献值转化得到的第 2N+1 贡献值向量, 包括: 将一级基团的种类的数量作为第 2N+1 贡献值向量的维数; 将每种一级基团对辛烷值的贡献值作为第 2N+1 贡献值向量中对应维度的元素值。根据单分子的各个二级基团分别对辛烷值的贡献值转化得到的第 2N+2 贡献值向量, 包括: 将二级基团的种类的数量作为第 2N+2 贡献值向量的维数; 将每种二级基团对辛烷值的贡献值作为第 2N+2 贡献值向量中对应维度的元素值。以此类推, 根据单分子的各个 N 级基团分别对辛烷值的贡献值转化得到的第 3N 贡献值向量, 包括: 将 N 级基团的种类的数量作为第 3N 贡献值向量的维数; 将每种 N 级基团对辛烷值的贡献值作为第 3N 贡献值向量中对应维度的元素值。

应维度的元素值。

上述步骤中计算得到相应的单分子的物性后，将单分子作为模板单分子，并将构成单分子的每种基团的基团数量和对应的物性存储进数据库中。

如图 10 所示，上述步骤 S82 之前，计算方法还包括：

- 5 S101、将构成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；分子信息包括：构成模板单分子的每种基团的基团数量。

S102、判断是否存在与单分子相同的模板单分子。

S103、若存在与单分子相同的模板单分子，输出模板单分子的物性作为单分子的物性。

- 10 S104、若不存在与单分子相同的模板单分子，则进行将构成单分子的每种基团的基团数量以及每种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。

本方案在获取到构成单分子的每种基团的基团数量后，通过比对相应的基团数量，确认该类单分子的结构和物性是否已被存储在数据库中，并在确认出现与单分子一致的模板单分子后，直接输出单分子的物性，提高单分子物性计算效率，减少计算量。

- 15 下面对训练产物预测模型的步骤进行进一步地描述。如图 11，为根据本发明一实施例的训练产物预测模型的步骤流程图。

S111、建立产物预测模型；其中，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。

根据石油加工装置的种类对应建立产物预测模型。

- 20 在与种类的石油加工装置对应的产物预测模型中包括：与种类的石油加工装置对应的反应规则集合和反应速率算法。其中，反应规则集合中包括：与种类的石油加工装置对应的多个反应规则。

S112、获取样本原料的样本原料信息。

- 25 样本原料的样本原料信息，包括：样本原料的分子组成，样本原料中每种分子的分子含量，样本原料对应的实际产物的分子组成以及实际产物中每种分子的实际含量。实际产物是指样本原料经过种类的石油加工装置处理后得到的产物。

S113、利用样本原料信息，对反应规则集合进行训练，并固定训练完成的反应规则集合。

- 30 下面给出一种对反应规则集合进行训练的方式。本领域技术人员应当知道的是，该方式仅用于说明本实施例，而不适用于限定本实施例。

如图 12 所示，为根据本发明一实施例的反应规则集合的训练步骤流程图。

S121、将样本原料的分子组成按照反应规则集合进行处理，得到样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径。

在首次计算反应路径时，将样本原料的分子组成按预设的反应规则集合进行处理，得到样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径。

- 5 将样本原料中的每种分子按照反应规则集合中的反应规则进行反应，得到每种分子对应的反应路径。

S122、根据样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径，得到装置输出产物的第一分子组成。

在装置输出产物中，包括：样本原料、中间产物以及预测产物。

- 10 S123、根据装置输出产物的第一分子组成与实际产物的第二分子组成，计算第一相对偏差。

具体的，获取第一分子组成中单分子的种类，构成第一集合；获取第二分子组成中单分子的种类，构成第二集合；判断第二集合是否为第一集合的子集；若第二集合不是第一集合的子集，则获取预存储的不符合预设条件的相对偏差值作为第一相对偏差值；

- 15 若第二集合是第一集合的子集，通过如下计算公式计算第一相对偏差：

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

其中， x_1 为第一相对偏差， M 为第一集合， M_1 为催化重整原料的分子组成中单分子的种类组成的集合， M_2 为中间产物的分子组成中单分子的种类组成的集合， M_3 为第二集合，card表示集合中元素的个数。

- 20 S124、判断第一相对偏差是否符合预设条件；如果是，则执行步骤 S125；如果不是，则执行步骤 S126。

步骤 S125，若第一相对偏差符合预设条件，则固定反应规则集合。

- 步骤 S126，若第一相对偏差不符合预设条件，则调整反应规则集合中的反应规则，跳转到步骤 S121，根据调整后的反应规则集合，重新计算第一相对差值，直至第一相对偏差符合预设条件。

S114、利用样本原料信息，对反应速率算法进行训练，并固定训练完成的反应速率算法，得到训练完成的产物预测模型。

下面给出一种对反应速率算法进行训练的方式。本领域技术人员应当知道的是，该方式仅用于说明本实施例，而不用限定本实施例。

- 30 如图 13 所示，为根据本发明一实施例的反应速率算法的训练步骤流程图。

S131、根据反应速率算法，分别计算样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径对应的反应速率。

具体的，根据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；

根据如下计算公式确定反应速率常数： $k = \frac{k_B E}{h} \exp(\frac{E\Delta S - \Delta E}{RE}) \varphi \times P^\alpha$ ；

5 其中， k 为反应速率常数， k_B 为玻尔兹曼常数， 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。

10 具体的，根据反应路径对应的反应速率常数和反应浓度，得到该反应路径的反应速率。例如：在反应速率常数已经确定的情况下，空速越大，原料和催化剂的接触时间越短，原料的反应时间越短，原料中反应物的浓度越高，该反应路径的反应速率越高；相反的，空速越小，原料和催化剂的接触时间越长，原料的反应时间越长，原料中反应物的浓度越低，该反应路径的反应速率越低。

15 S132、根据样本原料中每种分子的分子含量和分子的反应路径对应的反应速率，得到样本原料对应的预测产物中每种分子的预测含量。

在本实施例中，通过产物预测模型中的反应速率计算方法计算得到每条反应路径对应的反应速率，结合原料中每种单分子的单分子含量，即可计算得到预测产物中每种单分子的预测含量，比如，原料中的单分子 A，假设该单分子 A 对应了有 3 条反应路径，
20 已知 3 条反应路径对应的反应速率，随着反应的进行，单分子 A 的浓度降低，3 条反应路径对应的反应速率会按浓度的下降比例而降低，所以单分子 A 会以 3 条路径的反应速率的比例生成生成物，按上述步骤，即可得到每种分子进行反应得到的生成物，并得到预测产物，在知晓催化重整原料中每种单分子的单分子含量时，即可得到预测产物中每种单分子的含量。

25 S133、根据预测产物中每种分子的预测含量和实际产物中每种分子的实际含量，计算第二相对偏差。

计算第二相对偏差例如是：

第二相对偏差 = (实际含量 - 预测含量) ÷ 实际含量。

S134、判断第二相对偏差是否符合预设条件；如果是，则执行步骤 S135；如果否，
30 则执行步骤 S136。

步骤 S135, 若第二相对偏差符合预设条件, 则固定反应速率算法。

步骤 S136, 若第二相对偏差不符合预设条件, 则调整反应速率算法中的参数, 跳转到步骤 S131, 根据调整后的反应速率算法, 重新计算第二相对偏差, 直至第二相对偏差符合预设条件。

5

如图 14 所示, 本发明实施例提供了一种分子级炼油加工全流程优化装置, 所述优化装置包括: 获取单元 11、第一处理单元 12、第二处理单元 13、第三处理单元 14 和第四处理单元 15。

在本实施例中, 获取单元 11, 用于获取原油的分子组成。

10 在本实施例中, 第一处理单元 12, 用于根据所述原油的分子组成中各单分子的物性, 获取所述原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成; 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相应的石油加工装置的产物预测模型, 得到相应的预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量。

15 在本实施例中, 第二处理单元 13, 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。

在本实施例中, 第三处理单元 14, 用于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, 判断每组所述混合产品的产品物性是否符合预设标准集合中的任一预设标准。

20 在本实施例中, 第四处理单元 15, 用于若每组所述混合产品的产品物性符合预设标准集合中的任一预设标准, 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; 若所述目标参数不符合预设条件, 则调整所述预设原料比例、产物预测模型中的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标准集合中的任一预设标准, 且所有所述混合产品中的目标参数符合预设条件。

25 在本实施例中, 所述优化装置还包括:

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; 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
30 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。

在本实施例中，所述优化装置还包括：

入料物性控制单元，用于获取输入每个所述石油加工装置的石油加工原料的分子组成和石油加工原料中每种单分子的含量；计算石油加工原料中每种单分子的物性，根据所述石油加工原料中每种单分子的物性和每种单分子的含量计算所述石油加工原料的原料物性；判断每个所述原料物性是否符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间；若存在任一所述原料物性不符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间，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；直至每个所述原料物性均符合相应所述石油加工装置的预设物性限制区间。

10 在本实施例中，所述第四处理单元 15，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，则所述目标参数不符合预设条件。

在本实施例中，所述优化装置还包括：

20 产品物性控制单元，用于若任一组所述混合产品的产品物性不符合所述预设标准集中的任一预设标准，则调整所述预设规则集合中的预设规则，将各个所述产品调合原料按调整后的预设规则集合进行调合，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标准集合中的任一预设标准。

25 在本实施例中，所述第三处理单元 14，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第二组分含量，计算每组混合产品的物性。

30 在本实施例中，所述第三处理单元 14，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。

在本实施例中, 所述优化装置还包括: 单分子物性模板匹配单元。

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; 若不存在与所述单分子相同的所述模板单分子, 则通过所述第三处理单元 14 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。

10 在本实施例中, 所述第一处理单元 12, 具体用于获取原油中的每种单分子和每种单分子的含量; 分别计算每种单分子的沸点; 基于预设馏分馏程对所述原油进行蒸馏切割得到多组馏分, 并根据所述原油中每种所述单分子的沸点和含量确定每组所述馏分中包含的单分子和单分子的含量。

在本实施例中, 所述第一处理单元 12, 还用于针对馏程相邻的两组馏分, 将馏程温度相对较高的馏分作为第一馏分, 将馏程温度相对较低的馏分作为第二馏分;

通过如下公式计算得到所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最小值:

$$T_{\min} = T_{\text{cut}} \times (1 - SF);$$

通过如下公式计算得到所述第一馏分和第二馏分馏程重叠的重叠区间的最大值:

$$T_{\max} = T_{\text{cut}} \times (1 + SF);$$

20 其中, $T_{\min}$ 为所述重叠区间的最小值, $T_{\max}$ 为所述重叠区间的最大值, T_{cut} 为所述第一馏分和第二馏分的蒸馏切割温度, SF 为所述第一馏分和第二馏分的分离指数。

在本实施例中, 所述第一处理单元 12, 还用于根据所述重叠区间的各个沸点对应的每种单分子和每种单分子的含量, 计算得到重叠区间内每种单分子分别蒸馏进所述两组馏分的含量; 根据沸点位于重叠区间中的单分子分别蒸馏进所述第一馏分和所述第二馏分的含量, 得到所述原油蒸馏切割后, 第一馏分和第二馏分中的每种单分子和每种单分子的含量;

其中, 通过如下公式计算重叠区间内每种单分子分别蒸馏进所述两组馏分的含量:

$$C_h^i = \ln \left(\frac{T_i}{T_{\min}} \right) \times C^i; \quad C_l^i = C^i - C_h^i;$$

30 其中, C_h^i 为沸点位于所述重叠区间中的第 i 种单分子蒸馏进所述第一馏分的含量, C_l^i 为沸点位于所述重叠区间中的第 i 种单分子蒸馏进所述第二馏分的含量, T_i 为所述第

i 种单分子的沸点, $T_{\min}$ 为重叠区间的最小值, C^i 为沸点位于所述重叠区间中的第 i 种单分子的含量。

在本实施例中, 所述第一处理单元 12, 具体用于针对每种所述单分子, 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沸点的贡献值; 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沸点的贡献值, 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沸点。

在本实施例中, 所述优化装置还包括: 单分子沸点模板匹配单元。

单分子沸点模板匹配单元, 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沸点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沸点作为所述单分子的沸点; 若不存在与所述单分子相同的所述模板单分子, 则通过所述第一处理单元 12 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沸点的贡献值, 输入预先训练的物性计算模型的步骤。

在本实施例中, 所述优化装置还包括: 模型训练单元。

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; 所述样本单分子的物性已知; 将所述样本单分子包含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应的贡献值, 并存储为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预设偏差阈值, 则调整所述物性计算模型中每种基团对应的贡献值, 直到所述物性计算模型收敛为止。

在本实施例中, 所述模型训练单元, 用于建立如下所示物性计算模型:

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

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

在本实施例中, 所述模型训练单元, 具体用于在所述样本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。

在本实施例中, 所述模型训练单元, 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。

在本实施例中, 所述第一处理单元 12, 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。

在本实施例中, 所述第一处理单元 12, 具体用于根据如下物性计算模型计算所述单分子的沸点: $T = \frac{SOL \times GROUP_1 + SOL \times GROUP_2 + \dots + SOL \times GROUP_N}{(SOL \times Numh)^d + b} + c$;

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, $GROUP_1$ 为根据一级基团对沸点的贡献值转化得到的第一贡献值向量, $GROUP_2$ 为根据二级基团对沸点的贡献值转化得到的第二贡献值向量, $GROUP_N$ 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。

在本实施例中, 所述第一处理单元 12, 具体用于将基团的种类的数量作为所述单分子向量的维数; 将每种基团的基团数量作为所述单分子向量中对应维度的元素值;

所述第一处理单元 12, 具体用于将一级基团的种类的数量作为所述第一贡献值向量的维数; 将每种所述一级基团对沸点的贡献值作为所述第一贡献值向量中对应维度的元素值;

所述第一处理单元 12, 具体用于将二级基团的种类的数量作为所述第二贡献值向量的维数; 将每种所述二级基团对沸点的贡献值作为所述第二贡献值向量中对应维度的元素值;

所述第一处理单元 12, 具体用于将 N 级基团的种类的数量作为所述第 N 贡献值向量的维数; 将每种所述 N 级基团对沸点的贡献值作为所述第 N 贡献值向量中对应维度的元素值。

在本实施例中，第一处理单元 12，具体用于根据预设原料比例，获取不同数量的各个馏分分别输入相应的石油加工装置的产物预测模型中；所述石油加工装置包括：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。

5 在本实施例中，所述优化装置还包括：

模型训练单元，用于建立产物预测模型；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，对产物预测模型包括的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；其中，所述产物预测模型，
10 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。

在本实施例中，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。

在本实施例中，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
15 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
20 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。

在本实施例中，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
25 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，通过如下方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，
30 M_3 为所述第二集合，card 表示集合中元素的个数。

在本实施例中，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。

在本实施例中，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 为催化剂活性因子， P 为反应路径所述环境的压力值， α 为反应路径对应的反应规则对应的压力影响因子。

在本实施例中，每种石油加工装置对应一种反应规则集合。

如图 15 所示，本发明实施例提供了一种分子级炼油加工全流程优化系统，包括处理器 1110、通信接口 1120、存储器 1130 和通信总线 1140，其中，处理器 1110，通信接口 1120，存储器 1130 通过通信总线 1140 完成相互间的通信；

存储器 1130，用于存放计算机程序；

处理器 1110，用于执行存储器 1130 上所存放的程序时，实现分子级炼油加工全流程优化方法：获取原油的分子组成；根据原油的分子组成中各单分子的物性，获取原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成；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相应的石油加工装置的产物预测模型，得到相应的预测产物的分子组成和预测产物中每种单分子的含量；根据将各个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；根据每组混合产品的分子组成和每种单分子的含量分别计算每组混合产品的产品物性，判断每组混合产品的产品物性是否符合预设标准集合中的任一预设标准；若每组混合产品的产品

物性符合预设标准集合中的任一预设标准，根据所有混合产品获取目标参数，判断目标参数是否符合预设条件；若目标参数符合预设条件，则输出预设原料比例、产物预测模型和预设规则集合作为生产加工方案；若目标参数不符合预设条件，则调整预设原料比例、产物预测模型中的参数和预设规则集合中的预设规则，重新得到多组混合产品，直至每组混合产品的产品物性符合预设标准集合中的任一预设标准，且所有混合产品中的目标参数符合预设条件。

本发明实施例提供的优化系统，处理器 1110 通过执行存储器 1130 上所存放的程序实现了通过。

上述电子设备提到的通信总线 1140 可以是外设部件互连标准(Peripheral Component Interconnect, 简称 PCI)总线或扩展工业标准结构(Extended Industry Standard Architecture, 简称 EISA)总线等。该通信总线 1140 可以分为地址总线、数据总线、控制总线等。为便于表示，图 15 中仅用一条粗线表示，但并不表示仅有一根总线或一种类型的总线。

通信接口 1120 用于上述电子设备与其他设备之间的通信。

存储器 1130 可以包括随机存取存储器(Random Access Memory, 简称 RAM)，也可以包括非易失性存储器(Non-volatile Memory)，例如至少一个磁盘存储器。可选的，存储器还可以是至少一个位于远离前述处理器的存储装置。

上述的处理器 1110 可以是通用处理器，包括中央处理器(Central Processing Unit, 简称 CPU)、网络处理器(Network Processor, 简称 NP)等；还可以是数字信号处理器(Digital Signal Processing, 简称 DSP)、专用集成电路(Application Specific Integrated Circuit, 简称 ASIC)、现场可编程门阵列(Field-Programmable Gate Array, 简称 FPGA)或者其他可编程逻辑器件、分立门或者晶体管逻辑器件、分立硬件组件。

在一具体实施例中，所述分子级炼油加工全流程优化系统构成的示意框图如图 16 所示，所述分子级炼油加工全流程优化系统进一步包含输入单元 1150、显示器 1160 和电源 1170，所述处理器 1110 使用中央处理器 1111（中央处理器 1111 用于执行存储器 1130 上所存放的程序时，实现汽油调合方法的步骤，参照上述“处理器 1110，用于执行存储器 1130 上所存放的程序时，实现分子级炼油加工全流程优化方法”的内容，重复之处不再赘述）；

所述存储器 1130 包括缓冲存储器 1131（有时被称为缓冲器）。存储器 140 可以包括应用/功能存储部 1132，该应用/功能存储部 1132 用于存储应用程序和功能程序或用于通过中央处理器 1111 执行分子级炼油加工全流程优化系统的操作的流程；

存储器 1130 还可以包括数据存储部 1133，该数据存储部 1133 用于存储数据，例如

产物预测模型、预设规则集合、预设标准集合、预设输入流量范围、数字数据、图片和/或任何其他由分子级炼油加工全流程优化系统使用的数据；存储器 1130 的驱动程序存储部 1134 可以包括汽油调合设备的各种驱动程序；

中央处理器 1111 有时也称为控制器或操作控件，可以包括微处理器或其他处理器装置和/或逻辑装置，该中央处理器 1111 接收输入并控制分子级炼油加工全流程优化系统的各个部件的操作；

输入单元 1150 向中央处理器 1111 提供输入；该输入单元 1150 例如为按键或触摸输入装置；电源 1170 用于向分子级炼油加工全流程优化系统提供电力；显示器 1160 用于进行图像和文字等显示对象的显示；该显示器例如可为 LCD 显示器，但并不限于此。

10

本发明实施例提供了一种计算机可读存储介质，计算机可读存储介质存储有一个或者多个程序，一个或者多个程序可被一个或者多个处理器执行，以实现上述任一实施例的优化方法。

在上述实施例中，可以全部或部分地通过软件、硬件、固件或者其任意组合来实现。

当使用软件实现时，可以全部或部分地以计算机程序产品的形式实现。计算机程序产品包括一个或多个计算机指令。在计算机上加载和执行计算机程序指令时，全部或部分地产生按照本发明实施例的流程或功能。计算机可以是通用计算机、专用计算机、计算机网络、或者其他可编程装置。计算机指令可以存储在计算机可读存储介质中，或者从一个计算机可读存储介质向另一个计算机可读存储介质传输，例如，计算机指令可以从一个网站站点、计算机、服务器或数据中心通过有线(例如同轴电缆、光纤、数字用户线(DSL))或无线(例如红外、无线、微波等)方式向另一个网站站点、计算机、服务器或数据中心进行传输。计算机可读存储介质可以是计算机能够存取的任何可用介质或者是包含一个或多个可用介质集成的服务器、数据中心等数据存储设备。可用介质可以是磁性介质，(例如，软盘、硬盘、磁带)、光介质(例如，DVD)、或者半导体介质(例如固态硬盘 Solid State Disk(SSD))等。

最后应说明的是：以上实施例仅用以说明本发明的技术方案，而非对其限制；尽管参照前述实施例对本发明进行了详细的说明，本领域的普通技术人员应当理解：其依然可以对前述各实施例所记载的技术方案进行修改，或者对其中部分技术特征进行等同替换；而这些修改或者替换，并不使相应技术方案的本质脱离本发明各实施例技术方案的精神和范围。

30