

一种分子级装置的实时优化方法、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装置的实时优化方法、装置、系统及存储介质。

背景技术

在石油加工领域，现有的生产加工装置的加工过程中，要想实现生产加工装置的原料向高附加值产品高效转化，需要对原料在生产加工流程中进行最大化利用。

10 要实现原料在加工流程中的最大化利用，需要对生产加工装置的生成加工过程进行实时优化，然而由于生产加工装置的生成加工过程的复杂性，使得优化比较困难，难以生产出高效益的产品。

有鉴于此，如何优化生产加工装置的生产加工过程已经成为本领域技术人员急需解决的问题之一。

发明内容

15 为了解决上述技术问题或者至少部分地解决上述技术问题，本发明提供了一种分子级装置的实时优化方法、装置、系统及存储介质。

有鉴于此，第一方面，本发明提供了一种分子级装置的实时优化方法，所述方法包括以下步骤：

获取原油的分子组成；

20 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；

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；

25 获取预先设置的目标产物的预设标准集合；

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；

30 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

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。

其中，所述方法优选还包括：

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；

- 5       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。

- 10       在该优选实施方式中，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的步骤。

其中，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，优选包括：

- 15       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间。

- 20       在该优选实施方式中，若每个所述预测产物的预测物性均符合所述预设物性限制区间，则认为可以进行后续步骤，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，则执行所述得到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的步骤。

其中，所述方法优选还包括：

- 25       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。

- 30       其中，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，优选包括：

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；

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  
5 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。

10 其中，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，优选包括：

获取每组混合产品的产品价格和每组混合产品的产量；

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；

15 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；

20 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。

其中，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，优选包括：

25 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；

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。

其中，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  
30 所述产物预测模型中的操作参数，优选包括：

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。

其中，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，优选包括：

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；

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所述产品调合原料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第二组分含量，计算每组混合产品的物性。

其中，所述计算每种单分子的物性优选包括：

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，

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。

其中，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，所述方法优选还包括：

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。

其中，训练所述物性计算模型的步骤，优选包括：

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；

5 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；

10 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。

其中，所述获取构成样本单分子的每种基团的基团数量，优选包括：

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。

其中，所述物性计算模型优选按照下述方式确定单分子的物性：

获得各种基团的基团数量与各种基团对所述物性的贡献值的乘积；

20 根据各种基团相应的乘积的总和获得所述单分子的物性。

例如，所述物性计算模型如下所示： $f = a + \sum n_i \Delta f_i$ ；

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， $\Delta f_i$  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。

其中，所述获取构成所述单分子的每种基团的基团数量，包括：

25 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。

30 其中，所述物性计算模型按照下述方式确定单分子的物性：

在每一级基团中，分别获得其所包含的各种基团的基团数量与各种基团对所述物性

的贡献值的乘积, 然后获得各种基团相应的乘积的总和记为该级基团对物性的贡献值;

根据各级基团对物性的贡献值的总和获得所述单分子的物性。

例如, 所述物性计算模型如下所示:  $f = a + \sum_i m_{1i} \Delta f_{1i} + \sum_j m_{2j} \Delta f_{2j} + \dots + \sum_l m_{Nl} \Delta f_{Nl}$ ;

- 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,  $\Delta f_{1i}$  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,  $\Delta f_{2j}$  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,  $\Delta f_{Nl}$  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。

其中, 所述单分子的物性优选包括: 单分子的沸点;

所述计算所述单分子的物性, 包括:

- 10 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。

其中, 所述单分子的物性优选包括: 单分子的密度;

所述物性计算模型优选按照下述方式确定所述单分子的密度:

- 20 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;

根据每一级基团对所述密度的贡献值转化得到的该级基团的贡献值向量;

获得单分子向量分别与各级基团的贡献值向量的乘积, 然后获得单分子向量与各级基团相应的乘积的总和;

- 25 根据单分子向量与一级基团的贡献值向量的乘积在单分子向量与各级基团相应的乘积的总和中的占比获得所述单分子的密度。

例如, 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。

其中, 所述单分子的物性优选包括: 单分子的辛烷值;

5 所述物性计算模型优选按照下述方式确定单分子的辛烷值:

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;

根据每一级基团对所述辛烷值的贡献值转化得到的该级基团的贡献值向量;

获得单分子向量分别与各级基团的贡献值向量的乘积;

根据单分子向量与各级基团相应的乘积的总和获得所述单分子的辛烷值。

10 例如, 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; 15 所述 N 为大于或等于 2 的正整数; h 为第五预设常数。

其中, 所述混合产品的产品物性, 优选包括: 密度、浊点、倾点、苯胺点和辛烷值。

其中, 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, 优选包括:

20 通过如下方法计算每组所述混合物的密度:

针对每组混合产品, 获得该组混合产品中每种单分子的密度与该种单分子的含量的乘积;

根据各种单分子相应的乘积的总和获得该组混合产品的密度。

例如, 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。

其中, 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, 优选包括:

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 30 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。

其中，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，优选包括：

- 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。

其中，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，优选包括：

- 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，计算该组混合产品的苯胺点。

- 其中，当所述混合产品的产品物性为辛烷值时，计算每组所述混合产品的产品物性，
- 15 优选包括：

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：

$$\text{ON} = \left( \sum_{i=\text{HISQFG}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{H}} \sum_{i=\text{H}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{I}} \sum_{i=\text{I}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{S}} \sum_{i=\text{S}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{Q}} \sum_{i=\text{Q}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{F}} \sum_{i=\text{F}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i + C_{\text{G}} \sum_{i=\text{G}} \nu_i \beta_i \text{ON}_i \right) \div$$

$$\left( \sum_{i=\text{HISQFG}} \nu_i \beta_i + C_{\text{H}} \left( \sum_{i=\text{H}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{H}} \nu_i \right) + C_{\text{I}} \left( \sum_{i=\text{I}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{I}} \nu_i \right) + C_{\text{S}} \left( \sum_{i=\text{S}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{S}} \nu_i \right) + C_{\text{Q}} \left( \sum_{i=\text{Q}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{Q}} \nu_i \right) + C_{\text{F}} \left( \sum_{i=\text{F}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{F}} \nu_i \right) + C_{\text{G}} \left( \sum_{i=\text{G}} \nu_i \beta_i - \sum_{i=\text{G}} \nu_i \right) \right);$$

$$20 \quad C_{\text{H}} = \frac{k_{\text{HI}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{HS}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{HQ}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{HF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{HG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HI}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{HS}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{HQ}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{HF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{HG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}};$$

$$C_{\text{I}} = \frac{k_{\text{HI}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{IQ}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{IF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{IG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HI}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{IQ}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{IF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{IG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}};$$

$$C_{\text{S}} = \frac{k_{\text{HS}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(a)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{SF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{SG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HS}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IS}}^{(b)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(b)} \nu_{\text{Q}} + k_{\text{SF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{SG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}};$$

$$C_{\text{Q}} = \frac{k_{\text{HQ}}^{(a)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IQ}}^{(a)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(a)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QF}}^{(a)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{QG}}^{(a)} \nu_{\text{G}}}{1 + k_{\text{HQ}}^{(b)} \nu_{\text{H}} + k_{\text{IQ}}^{(b)} \nu_{\text{I}} + k_{\text{SQ}}^{(b)} \nu_{\text{S}} + k_{\text{QF}}^{(b)} \nu_{\text{F}} + k_{\text{QG}}^{(b)} \nu_{\text{G}}};$$

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

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

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,  $\nu_i$  为所述混合产品中的各个分子的含量;  $\nu_H$ 、 $\nu_I$ 、 $\nu_S$ 、 $\nu_Q$ 、 $\nu_F$ 、 $\nu_G$  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;  $\beta_i$  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。

其中，对产物预测模型进行训练的步骤，优选包括：

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；

获取样本原料的样本原料信息；

- 5        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       其中，所述样本原料的样本原料信息，优选包括：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。

其中，利用所述样本原料信息，对所述反应规则集合进行训练，优选包括：

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；

- 15       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；

- 20       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       其中，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，优选包括：

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；

判断所述第二集合是否为所述第一集合的子集；

- 30       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

述预测产物的分子组成中的单分子不在所述第二集合中的部分种类数量在所述预测产物的分子组成中的单分子的种类总数量中的占比确定所述第一相对偏差。

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

$x_1$ 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。

其中,利用所述样本原料信息,对所述反应速率算法进行训练,优选包括:

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;

10 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;

15 若所述第二相对偏差符合预设条件,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。

其中,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,优选包括:

20 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。

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

25 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,  $\Delta S$ 为反应路径对应的反应规则对应的反应前后的熵变,  $\Delta E$ 为反应路径对应的反应规则对应的反应能垒,  $\phi$ 为催化剂活性因子,  $P$ 为反应路径所处环境的压力值,  $\alpha$ 为反应路径对应的反应规则对应的压力影响因子。

其中,所述获取原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成,优选包括:

获取原油的分子组成;

30 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。

其中，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  
5 加工装置对应一种反应规则集。

第二方面，本发明实施例提供了一种分子级装置的实时优化装置，所述实时优化装置包括：

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  
10 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；

15 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  
20 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。

其中，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；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  
25 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。

其中，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  
30 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间。

其中，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。

其中，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；

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。

其中，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。

其中，所述第三处理单元，具体用于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；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。

其中，所述第三处理单元，具体用于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。

其中，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。

其中，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及所述每种基团对物性的贡献值，计算所述单分子的物性。

其中，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。

其中，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。

其中，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,  $\Delta f_i$  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。

其中, 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。

其中, 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,  $\Delta f_{1i}$  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,  $\Delta f_{2j}$  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,  $\Delta f_{Nl}$  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。

其中, 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。

其中, 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:

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

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。

其中, 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:

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

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。

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

- 5 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。

- 10 其中, 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。

其中, 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。

- 15 其中, 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。

其中, 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。

- 20 其中, 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。

其中, 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

- 25 所述单分子的辛烷值和每种单分子的含量; 通过如下公式计算所述混合产品的辛烷值:

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

$$\begin{aligned}
C_H &= \frac{k_{HI}^{(a)}\nu_I + k_{HS}^{(a)}\nu_S + k_{HQ}^{(a)}\nu_Q + k_{HF}^{(a)}\nu_F + k_{HG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HI}^{(b)}\nu_I + k_{HS}^{(b)}\nu_S + k_{HQ}^{(b)}\nu_Q + k_{HF}^{(b)}\nu_F + k_{HG}^{(b)}\nu_G}; \\
C_I &= \frac{k_{HI}^{(a)}\nu_H + k_{IS}^{(a)}\nu_S + k_{IQ}^{(a)}\nu_Q + k_{IF}^{(a)}\nu_F + k_{IG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HI}^{(b)}\nu_H + k_{IS}^{(b)}\nu_S + k_{IQ}^{(b)}\nu_Q + k_{IF}^{(b)}\nu_F + k_{IG}^{(b)}\nu_G}; \\
C_S &= \frac{k_{HS}^{(a)}\nu_H + k_{IS}^{(a)}\nu_I + k_{SQ}^{(a)}\nu_Q + k_{SF}^{(a)}\nu_F + k_{SG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HS}^{(b)}\nu_H + k_{IS}^{(b)}\nu_I + k_{SQ}^{(b)}\nu_Q + k_{SF}^{(b)}\nu_F + k_{SG}^{(b)}\nu_G}; \\
C_Q &= \frac{k_{HQ}^{(a)}\nu_H + k_{IQ}^{(a)}\nu_I + k_{SQ}^{(a)}\nu_S + k_{QF}^{(a)}\nu_F + k_{QG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HQ}^{(b)}\nu_H + k_{IQ}^{(b)}\nu_I + k_{SQ}^{(b)}\nu_S + k_{QF}^{(b)}\nu_F + k_{QG}^{(b)}\nu_G}; \\
C_F &= \frac{k_{HF}^{(a)}\nu_H + k_{IF}^{(a)}\nu_I + k_{SF}^{(a)}\nu_S + k_{QF}^{(a)}\nu_Q + k_{FG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HF}^{(b)}\nu_H + k_{IF}^{(b)}\nu_I + k_{SF}^{(b)}\nu_S + k_{QF}^{(b)}\nu_Q + k_{FG}^{(b)}\nu_G}; \\
C_G &= \frac{k_{HG}^{(a)}\nu_H + k_{IG}^{(a)}\nu_I + k_{SG}^{(a)}\nu_S + k_{QG}^{(a)}\nu_Q + k_{FG}^{(a)}\nu_F}{1 + k_{HG}^{(b)}\nu_H + k_{IG}^{(b)}\nu_I + k_{SG}^{(b)}\nu_S + k_{QG}^{(b)}\nu_Q + k_{FG}^{(b)}\nu_F};
\end{aligned}$$

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,  $\nu_i$  为所述混合产品中的各个分子的含量;  $\nu_H$ 、 $\nu_I$ 、 $\nu_S$ 、 $\nu_Q$ 、 $\nu_F$ 、 $\nu_G$  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;  $\beta_i$  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。

其中，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。

其中，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。

其中，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偏差，直至所述第一相对偏差符合预设条件。

其中，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。

其中, 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。

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

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,  $\Delta S$  为反应路径对应的反应规则对应的反应前后的熵变,  $\Delta E$  为反应路径对应的反应规则对应的反应能垒,  $\phi$  为催化剂活性因子,  $P$  为反应路径所处环境的压力值,  $\alpha$  为反应路径对应的反应规则对应的压力影响因子。

其中, 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。

第三方面, 本发明提供了一种分子级装置的实时优化系统, 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, 以实现第一方面所述的分子级装置的实时优化方法。

第四方面, 本发明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, 以实现第一方面所述的分子级装置的实时优化方法。

本发明实施例提供的上述技术方案与现有技术相比具有如下优点:

本发明实施例提供的该方法, 通过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；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，  
5 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。本发明实现了分子级装置从原料到产品  
10 加工过程的分子级整体模拟及实时优化，提高了精度和生产效益。

#### 附图说明

图 1 为本发明实施例提供的一种分子级装置的实时优化方法的流程示意图。

图 2 为本发明实施例提供的一种分子级装置的实时优化装置的结构示意图。

图 3 为本发明另一实施例提供的一种分子级装置的实时优化系统的结构图。

#### 15 具体实施方式

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  
20 的范围。

现在将参考附图描述实现本发明各个实施例的服务器。在后续的描述中，使用用于表示元件的诸如“模块”、“部件”或“单元”的后缀仅为了有利于本发明的说明，其本身并没有特定的意义。因此，“模块”与“部件”可以混合地使用。

本发明实施例提供了一种分子级装置的实时优化方法，如图 1 所示，该方法可以包  
25 括以下步骤：

S101、确定石油加工原料的原料分子组成。

在本实施例中，石油加工原料的原料分子组成，即石油加工原料包括的各种分子（单分子）的信息。例如：各种单分子的种类，各种单分子的含量，各种单分子的浓度。其中，该石油加工原料的原料分子组成为基于 SOL 的分子组成。

30 在本实施例中，单分子的种类包括但不限于：烯烃、烷烃、环烷烃和芳香烃。

S102、将所述原料分子组成输入预先训练的与所述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。

在本发明实施例中，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，  
5 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。

S103、获取预先设置的目标产物的预设标准集合。

- 在本发明实施例中，预设标准集合包括一个或多个预设标准，其中，预设标准包括但不限于：生成的产品的综合效益、预测产物的生成量在混合产品中的占比量、预测产  
10 物对应的预测物性。针对不同的预设标准将在后面进行描述，在此不做赘述。

S104、根据所述预测产物中的预测分子组成和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，如果符合，执行步骤 S105；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，执行步骤 S106。

- 15 S105、直接利用所述石油加工原料进行生产。

S106、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。

- 在本发明实施例中的操作参数包括产物预测模型中反应路径所处环境的温度、产物  
20 预测模型中反应路径所处环境的压力。针对该操作参数的调整将在后面进行描述，在此不做赘述。

在本发明另一实施例中，该方法还包括：

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，得到所述原油进行蒸馏切割得到的不同馏分产物的分子组成；  
25

按预设原料比例将相应的各个馏分产物作为所述石油加工原料。

- 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，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。  
30

在本发明实施例中，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、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，确定所述石油加工原料的分子组成。当然，还可以通过其他方式来确定石油加工原料的分子组成，例如：ASTM D2425、SH/T 0606 和 ASTM D8144-18。

- 5       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，
- 10       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。

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

15       包含的单分子，单分子的种类，每种单分子的体积、含量等。

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分的分子组成。

- 20       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的油品和重质油品，其中轻质

25       的油品比如石脑油，并不需要再进行二次加工，而重质油品一般需要进行不同的二次加工，使得重质油品转换为轻质的油品，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
- 30       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。

在本发明另一实施例中，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预设输入流量范围；

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；

- 5       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；

- 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，则执行所  
10   述得到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，直接进行方案的后续步骤。

- 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，  
15   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。

- 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  
20   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。

在本发明另一实施例中，上述步骤 S104 中的，所述判断所述预测产物是否符合所述预设标准集中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准，进一步包括：

- 根据所述预测分子组成中每种单分子的物性和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；预测产物的预测物性，包括但不限于：密度、浊点、倾点、苯  
25   胺点和辛烷值。

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中对应的目标产物的预设物性限制区间；

- 若每个所述预测产物的预测物性均符合所述预设物性限制区间，则确定所述预测产物符合所述预设标准集中与所述预测产物对应的目标产物的预设标准，则执行所述得  
30   到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的步骤。

在本发明另一实施例中，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。

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  
10 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。

在本发明另一实施例中，上述步骤 S104 中的，所述判断所述预测产物是否符合所  
15 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，进一步包括：

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；

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；

20 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  
25 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。

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混合汽油产品的物性。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。  
30

在本实施例中，若每组混合产品的产品物性符合预设产品物性时，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，在本发明另一实施例中，上述步骤 S104 中的，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，进一步包括：

获取每组混合产品的产品价格和每组混合产品的产量；  
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的操作成本，得到综合效益；

将综合效益作为目标参数，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。

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。

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装置的实时优化。

- 5        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，此时可通过调整产物预测模型中的操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产品物性，同时所有混合产品中的目标参数符合预设条件，即完成对分子级装置的实时优化。

在本发明另一实施例中，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，上述步骤 S106 中的，调整所述产物预测模型中的操作参数，进一步包括：

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；

- 15       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。

在本发明另一实施例中，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，进一步包括：

- 20       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。

- 25       下面对计算每组混合产品的产品物性进行进一步的描述，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种单分子的第一组分含量；由于产品调合原料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。

- 30       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；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。

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  
5 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。

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。

10 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。

计算单分子的物性，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  
15 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。

在本发明另一实施例中，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，所述方法还包括：

20 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  
25 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。

在本发明另一实施例中，训练所述物性计算模型的步骤，包括：

30 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。

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。

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。

在本实施例中，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），计算出该需要获知的物性。

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。

模型一、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， $\Delta f_i$  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。

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。

在本发明另一实施例中，所述获取构成样本单分子的每种基团的基团数量，包括：

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。

模型二：基于划分的多级基团，可以建立如下物性计算模型：

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

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， $\Delta f_{1i}$  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， $\Delta f_{2j}$  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， $\Delta f_{Nl}$  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。

在本发明另一实施例中，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；

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。

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。

混合产品的产品物性，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：

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

10 其中， $density$  为混合产品的密度， $D_i$  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；

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。

15 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：

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；

20 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：

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

$$C_H = \frac{k_{HI}^{(a)} v_I + k_{HS}^{(a)} v_S + k_{HQ}^{(a)} v_Q + k_{HF}^{(a)} v_F + k_{HG}^{(a)} v_G}{1 + k_{HI}^{(b)} v_I + k_{HS}^{(b)} v_S + k_{HQ}^{(b)} v_Q + k_{HF}^{(b)} v_F + k_{HG}^{(b)} v_G} ;$$

25

$$\begin{aligned}
C_I &= \frac{k_{HI}^{(a)}\nu_H + k_{IS}^{(a)}\nu_S + k_{IQ}^{(a)}\nu_Q + k_{IF}^{(a)}\nu_F + k_{IG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HI}^{(b)}\nu_H + k_{IS}^{(b)}\nu_S + k_{IQ}^{(b)}\nu_Q + k_{IF}^{(b)}\nu_F + k_{IG}^{(b)}\nu_G}; \\
C_S &= \frac{k_{HS}^{(a)}\nu_H + k_{IS}^{(a)}\nu_I + k_{SQ}^{(a)}\nu_Q + k_{SF}^{(a)}\nu_F + k_{SG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HS}^{(b)}\nu_H + k_{IS}^{(b)}\nu_I + k_{SQ}^{(b)}\nu_Q + k_{SF}^{(b)}\nu_F + k_{SG}^{(b)}\nu_G}; \\
C_Q &= \frac{k_{HQ}^{(a)}\nu_H + k_{IQ}^{(a)}\nu_I + k_{SQ}^{(a)}\nu_S + k_{QF}^{(a)}\nu_F + k_{QG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HQ}^{(b)}\nu_H + k_{IQ}^{(b)}\nu_I + k_{SQ}^{(b)}\nu_S + k_{QF}^{(b)}\nu_F + k_{QG}^{(b)}\nu_G}; \\
C_F &= \frac{k_{HF}^{(a)}\nu_H + k_{IF}^{(a)}\nu_I + k_{SF}^{(a)}\nu_S + k_{QF}^{(a)}\nu_Q + k_{FG}^{(a)}\nu_G}{1 + k_{HF}^{(b)}\nu_H + k_{IF}^{(b)}\nu_I + k_{SF}^{(b)}\nu_S + k_{QF}^{(b)}\nu_Q + k_{FG}^{(b)}\nu_G}; \\
C_G &= \frac{k_{HG}^{(a)}\nu_H + k_{IG}^{(a)}\nu_I + k_{SG}^{(a)}\nu_S + k_{QG}^{(a)}\nu_Q + k_{FG}^{(a)}\nu_F}{1 + k_{HG}^{(b)}\nu_H + k_{IG}^{(b)}\nu_I + k_{SG}^{(b)}\nu_S + k_{QG}^{(b)}\nu_Q + k_{FG}^{(b)}\nu_F};
\end{aligned}$$

5

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,  $\nu_i$  为所述混合产品中的各个分子的含量;  $\nu_H$ 、 $\nu_I$ 、 $\nu_S$ 、 $\nu_Q$ 、 $\nu_F$ 、 $\nu_G$  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;  $\beta_i$  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

25

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。

下面对训练产物预测模型的步骤进行进一步地描述。

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；

10 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。

在本发明实施例中，根据石油加工装置的种类对应建立产物预测模型。

15 在与石油加工装置对应的产物预测模型中包括：与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：与石油加工装置对应的多个反应规则。

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石油加工装置处理后得到的产物。

20 下面给出一种对反应规则集合进行训练的方式。

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；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。

25 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。

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；

30 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。

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，具体包括：

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；

10 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：

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

15  $x_1$  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。

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。

20 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；

25 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。

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

其中， $k$  为反应速率常数， $k_B$  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， $\Delta S$  为反应路径对应的反应规则对应的反应前后的熵变， $\Delta E$  为反应路径对应的反应规则对应的反应能垒， $\varphi$  催化剂活性因子， $P$  为反应路径所处环境的压力值， $\alpha$  为反应路径对应的反应规则对应的压力影响因子。

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，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。

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，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。

本实施例中，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。

本发明实施例提供的该方法，通过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；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。本发明实现了分子级装置从原料到产品加工过程的分子级整体模拟及实时优化，提高了精度和生产效益。

- 5        本发明实施例还提供了一种分子级装置的实时优化装置，如图 2 所示，为本发明实施例的分子级装置的实时优化装置的结构图。实时优化装置包括：第一获取单元 11、第一处理单元 12、第二处理单元 13、第二获取单元 14 和第三处理单元 15。

在本实施例中，第一处理单元 12，用于根据原油的分子组成中各种单分子的物性，获取原油进行蒸馏得到的不同馏分的分子组成。

- 10       在本实施例中，第二处理单元 13，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，以得到产物预测模型输出的相应的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。

在本实施例中，第二获取单元 14，用于获取预先设置的目标产物的预设标准集合。

- 15       在本实施例中，第三处理单元 15，根据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，判断预测产物是否符合预设标准集合中与预测产物对应的目标产物的预设标准；如果预测产物不符合预设标准集合中与预测产物对应的目标产物的任一预设标准，则调整产物预测模型中的操作参数，以重新获取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，直至预测产物符合预设标准集合中  
20       与预测产物对应的目标产物的预设标准。

在本实施例中，装置还包括：流量控制单元。

- 流量控制单元，用于获取输入每个石油加工装置的石油加工原料的输入流量；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；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  
25       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，第三处理单元 15，具体用于根据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预测分子组成中每种单分子的物性；根据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，计算预测  
30       产物的预测物性；判断每个预测产物的预测物性是否符合预设标准集合中对应的目标产物的预设物性限制区间。

在本实施例中，装置还包括：产品调合单元。

产品调合单元，用于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混合产品中每种单分子的含量分别计算每组混合产品的产品物性。

- 5        在本实施例中，第三处理单元 15，具体用于判断每组混合产品的产品物性是否符合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，则确定预测产物符合预设标准集合中与预测产物对应的目标产物的预设标准，并输出预设原料比例、产物预测模型和预设规则集合作为生产加工方
- 10    案；若目标参数不符合预设条件，则调整产物预测模型中的操作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产品物性，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，第三处理单元 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
- 15    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；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的操作成本，得到综合效益；将综合效益作为目标参数；判断综合效益是否达到最大值；若综合效益达到最大值，则确定目标参数符合预设条件；若综合效益未达到最大值，则确定目标参数不符合预设条件。

- 20    在本实施例中，第三处理单元 15，具体用于调整产物预测模型中与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预测产物的预测分子组成和每组预测产物中每种单分子的预测分子含量，直至预测产物符合预设标准集合中与预测产物对应的目标产物的预设标准。

- 在本实施例中，第三处理单元 15，具体用于调整产物预测模型中与预测产物对应的
- 25    反应路径所处环境的压力；根据调整后的压力重新获取预测产物的预测分子组成和预测产物中每种单分子的预测分子含量，直至预测产物符合预设标准集合中与预测产物对应的目标产物的预设标准。

- 在本实施例中，产品调合单元，具体用于获取每组产品调合原料的第一分子组成和每组产品调合原料中每种单分子的第一组分含量；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组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
- 30    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第二组分含量，计算每组混合产品的物性。

在本实施例中，产品调合单元，具体用于针对每种单分子，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；其中，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每种基团对物性的贡献值，计算单分子的物性。

在本实施例中，装置还包括：

单分子物性模板匹配单元，用于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；判断是否存在与单分子相同的模板单分子；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；若不存在与单分子相同的模板单分子，则通过产品调合单元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。

在本实施例中，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；其中，样本单分子的物性已知；将构成样本单分子的每种基团的基团数量输入物性计算模型；获取物性计算模型输出的样本单分子的预测物性；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物性的贡献值，并存储基团对物性的贡献值；如果预测物性与已知的物性之间的偏差值大于等于偏差阈值，则调整物性计算模型中每种基团对物性的贡献值，直到物性计算模型收敛为止。

在本实施例中，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， $f$  为单分子的物性， $n_i$  为单分子中第  $i$  种基团的基团数量， $\Delta f_i$  为单分子中第  $i$  种基团对物性的贡献值， $a$  为关联常数。

在本实施例中，模型训练单元，具体用于在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，将多种基团的数量作为多级基团的级别。

在本实施例中，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， $f$  为单分子的物性， $m_{1i}$  为一级基团中第  $i$  种基团的基团数量， $\Delta f_{1i}$  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， $\Delta f_{2j}$  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， $\Delta f_{Nl}$  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，产品调合单元，具体用于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，将多种基团的数量作为多级基团的级别。

在本实施例中，产品调合单元，具体用于根据如下物性计算模型计算单分子的沸点：

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

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， $GROUP_{11}$  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， $GROUP_{12}$  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， $GROUP_{1N}$  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； $N$  为大于或等于 2 的正整数。

在本实施例中，产品调合单元，具体用于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。

在本实施例中，产品调合单元，具体用于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。

在本实施例中, 混合产品的产品物性, 包括: 密度、浊点、倾点、苯胺点和辛烷值, 当然还包括其他产品物性, 本方案在此不再赘述。

在本实施例中, 产品调合单元, 具体用于通过如下计算公式计算每组混合产品的密度:  $density = \sum (D_i \times x_{i\_volume})$ ;

其中,  $density$  为混合产品的密度,  $D_i$  为第  $i$  种单分子的密度,  $x_{i\_volume}$  为第  $i$  种单分子的组分含量。

在本实施例中, 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单分子的密度和沸点计算得到每种单分子的浊点贡献值; 根据该组混合产品中所有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。

在本实施例中, 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; 根据该组混合产品中所有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。

在本实施例中, 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; 根据该组混合产品中所有单分子的苯胺点贡献值和每种单分子的含量, 计算混合产品的苯胺点。

在本实施例中, 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混合产品的辛烷值:

$$\begin{aligned}
 ON = & \left( \sum_{i=HISQFG} v_i \beta_i ON_i + C_H \sum_{i=H} v_i \beta_i ON_i + C_I \sum_{i=I} v_i \beta_i ON_i + C_S \sum_{i=S} v_i \beta_i ON_i \right. \\
 & \left. + C_Q \sum_{i=Q} v_i \beta_i ON_i + C_F \sum_{i=F} v_i \beta_i ON_i + C_G \sum_{i=G} v_i \beta_i ON_i \right) \div \\
 & \left( \sum_{i=HISQFG} v_i \beta_i + C_H \left( \sum_{i=H} v_i \beta_i - \sum_{i=H} v_i \right) + C_I \left( \sum_{i=I} v_i \beta_i - \sum_{i=I} v_i \right) + C_S \left( \sum_{i=S} v_i \beta_i - \sum_{i=S} v_i \right) \right. \\
 & \left. + C_Q \left( \sum_{i=Q} v_i \beta_i - \sum_{i=Q} v_i \right) + C_F \left( \sum_{i=F} v_i \beta_i - \sum_{i=F} v_i \right) + C_G \left( \sum_{i=G} v_i \beta_i - \sum_{i=G} v_i \right) \right) ; \\
 C_H = & \frac{k_{HI}^{(a)} v_1 + k_{HS}^{(a)} v_S + k_{HQ}^{(a)} v_Q + k_{HF}^{(a)} v_F + k_{HG}^{(a)} v_G}{1 + k_{HI}^{(b)} v_1 + k_{HS}^{(b)} v_S + k_{HQ}^{(b)} v_Q + k_{HF}^{(b)} v_F + k_{HG}^{(b)} v_G} ; \\
 C_I = & \frac{k_{HI}^{(a)} v_H + k_{IS}^{(a)} v_S + k_{IQ}^{(a)} v_Q + k_{IF}^{(a)} v_F + k_{IG}^{(a)} v_G}{1 + k_{HI}^{(b)} v_H + k_{IS}^{(b)} v_S + k_{IQ}^{(b)} v_Q + k_{IF}^{(b)} v_F + k_{IG}^{(b)} v_G} ; \\
 C_S = & \frac{k_{HS}^{(a)} v_H + k_{IS}^{(a)} v_1 + k_{SQ}^{(a)} v_Q + k_{SF}^{(a)} v_F + k_{SG}^{(a)} v_G}{1 + k_{HS}^{(b)} v_H + k_{IS}^{(b)} v_1 + k_{SQ}^{(b)} v_Q + k_{SF}^{(b)} v_F + k_{SG}^{(b)} v_G} ;
 \end{aligned}$$

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

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

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

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,  $\nu_i$  为所述混合产品中的各个分子的含量;  $\nu_H$ 、 $\nu_I$ 、 $\nu_S$ 、 $\nu_Q$ 、 $\nu_F$ 、 $\nu_G$  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;  $\beta_i$  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、 $k_{\text{QG}}^{(b)}$ 表示烯烃与含氧化合物之间的第二常数系数、 $k_{\text{FG}}^{(b)}$ 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，装置还包括：模型训练单元。

模型训练单元，用于建立产物预测模型；其中，产物预测模型，包括：包括多种反应规则的5 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；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。

在本实施例中，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10 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。

在本实施例中，模型训练单元，具体用于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；根据样本原料的分子组成中每种分子对应的反应路径，得到包含样本原料、中间产物以及预测产物的装15 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；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；若第一相对偏差符合预设条件，则固定反应规则集合；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，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。

在本实施例中，模型训练单元，具体用于获取第一分子组成中单分子的种类，构成20 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；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：
$$x_1 = \frac{\text{card}((M - M_1 - M_2) - M_3)}{\text{card}(M - M_1 - M_2)}$$
；

25  $x_1$ 为第一相对偏差， $M$ 为第一集合， $M_1$ 为样本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。

在本实施例中，模型训练单元，具体用于根据反应速率算法，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的反应速率；根据样本原料中每种分子的分子含量30 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；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；若第二相对偏差符合预设条件，则固定反应速率算法；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，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        在本实施例中，模型训练单元，具体用于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；

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

- 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， $\Delta S$  为反应路径对应的反应规则对应的反应前后的熵变， $\Delta E$  为反应路径对应的反应规则对应的反应能垒， $\varphi$  为催化剂活性因子， $P$  为反应路径所处环境的压力值， $\alpha$  为反应路径对应的反应规则对应的压力影响因子。
- 10        在本实施例中，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，

- 15        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。

本发明实施例还提供了一种分子级装置的实时优化系统，如图 3 所示，为本发明实施例的分子级装置的实时优化系统的结构图。

- 在本发明实施例中，所述分子级装置的实时优化系统包括处理器 210、存储器 211；
- 20        所述处理器 210 用于执行所述存储器 211 中存储的分子级装置的实时优化程序，以实现各方法实施例所述的分子级装置的实时优化方法，例如包括以下步骤：

- 通过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
- 25        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；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
- 30        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。

本发明实施例还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上存储有一个或者多个程序，其中，存储介质可以包括易失性存储器，例如随机存取存储器；存储器也可以包括非易失性存储器，例如只读存储器、快闪存储器、硬盘或固态存储器；存储器还可以包括上述种类的存储器的组合。

当存储介质中所述一个或者多个程序可被一个或者多个处理器执行时，以实现各方实施例所述的分子级装置的实时优化方法，例如包括以下步骤：

10 通过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；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。

为了描述的方便，描述以上装置时以功能分为各种单元分别描述。当然，在实施本发明时可以把各单元的功能在同一个或多个软件和/或硬件中实现。

本说明书中的各个实施例均采用递进的方式描述，各个实施例之间相同相似的部分互相参见即可，每个实施例重点说明的都是与其他实施例的不同之处。尤其，对于装置或系统实施例而言，由于其基本相似于方法实施例，所以描述得比较简单，相关之处参见方法实施例的部分说明即可。以上所描述的装置及系统实施例仅仅是示意性的，其中所述作为分离部件说明的单元可以是或者也可以不是物理上分开的，作为单元显示的部件可以是或者也可以不是物理单元，即可以位于一个地方，或者也可以分布到多个网络单元上。可以根据目标的需要选择其中的部分或者全部模块来实现本实施例方案的目的。本领域普通技术人员在不付出创造性劳动的情况下，即可以理解并实施。

需要说明的是，在本文中，诸如“第一”和“第二”等之类的关系术语仅仅用来将

一个实体或者操作与另一个实体或操作区分开来，而不一定要求或者暗示这些实体或操作之间存在任何这种目标的关系或者顺序。而且，术语“包括”、“包含”或者其任何其他变体意在涵盖非排他性的包含，从而使得包括一系列要素的过程、方法、物品或者设备不仅包括那些要素，而且还包括没有明确列出的其他要素，或者是还包括为这种过程、方法、物品或者设备所固有的要素。在没有更多限制的情况下，由语句“包括一个……”限定的要素，并不排除在包括所述要素的过程、方法、物品或者设备中还存在另外的相同要素。

以上所述仅是本发明的具体实施方式，使本领域技术人员能够理解或实现本发明。对这些实施例的多种修改对本领域的技术人员来说将是显而易见的，本文中所定义的一般原理可以在不脱离本发明的精神或范围的情况下，在其它实施例中实现。因此，本发明将不会被限制于本文所示的这些实施例，而是要符合与本文所申请的原理和新颖特点相一致的最宽的范围。