

综述与专论

DOI: 10.11949/0438-1157.

石油分子工程数据库及过程模拟平台

陈政宇^{1,2}, 张霖宙¹, 史权¹, 徐春明¹

(¹ 中国石油大学(北京)重质油全国重点实验室分子工程中心, 北京 102249; ² 中国石油大学(北京)未来能源学院, 北京 102249)

摘要: 石油加工过程正由高碳排的油品生产模式向高值化、精细化、低碳化和智能化转型, 传统基于宏观性质表征和集总模型的研究方法已难以满足转型升级中对精准认知与过程优化的需求。针对复杂石油分子组成认识难和模型构建难的双重挑战, 重质油全国重点实验室分子工程中心整合过去20余年的基础研究成果, 构建了石油分子工程数据库及过程模拟平台, 形成了涵盖石油分子评价平台、石油分子信息数据库和分子级过程模拟平台的一体化解决方案。该平台将分析仪器、分析方法、数据库、动力学/热力学基础模块以及工业软件模块统筹集成, 实现了从基础研究到工业应用的贯通式研发。本文系统评述了该平台的发展背景、整体架构、关键技术及其在工业分子级过程模拟与优化中的应用。相关研究表明, 该平台的构建为推动石油分子工程理念落地提供了关键的分析方法、数据与模型支撑。

关键词: 石油; 分子工程; 分子表征; 分子数据库; 分子级过程模拟

中图分类号: TE 624

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (XXXX) XX-0001-17

Petroleum molecular engineering database and process simulation platform

CHEN Zhengyu^{1,2}, ZHANG Linzhou¹, Shi QUAN¹, XU Chunming¹

(¹ State Key Laboratory of Heavy Oil Processing, Petroleum Molecular Engineering Center (PMEC), China University of Petroleum, Beijing 102249, China; ² College of Energy Innovation, China University of Petroleum, Beijing 102249, China)

Abstract: Petroleum refining is undergoing a transition from conventional high-carbon fuel production toward high-value, low-carbon, and intelligent processing. Conventional research methods based on bulk-property characterization and lumped models are increasingly unable to match the demands for precise characterization, simulation, and optimization in modern refining. To address the challenges of molecular-level characterization and modeling for complex petroleum molecular systems, the Petroleum Molecular Engineering Center (PMEC) of the State Key Laboratory of Heavy Oil Processing integrated over two decades of fundamental research into a petroleum molecular engineering database and process simulation platform. There are three major components in this platform, including a petroleum molecular evaluation platform, a petroleum molecular information database, and a molecular-level process simulation platform. The platform integrated analytical instruments, analytical methods, databases, kinetic/thermodynamic models, and industrial software, achieving end-to-end R&D from basic research to industrial practices. This work systematically summarizes the development background, overall framework, key

收稿日期: 2026-04-22 修回日期: 2026-05-23

通信作者: 张霖宙(1987—), 男, 博士, 教授, Lzz@cup.edu.cn; 史权(1972—), 男, 博士, 教授, sq@cup.edu.cn

第一作者: 陈政宇(1994—), 男, 博士, 讲师, zychen@cup.edu.com

基金项目: 国家自然科学基金项目(22441040, 22508414); 北京市自然科学基金资助项目(L259001); 中国石油大学(北京)科研基金项目(2462025BJRC007); 重质油全国重点实验室自主项目(SKLHOP20260103)

引用本文: 陈政宇, 张霖宙, 史权, 徐春明. 石油分子工程数据库及过程模拟平台[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1-17

Citation: CHEN Zhengyu, ZHANG Linzhou, Shi QUAN, XU Chunming. Petroleum molecular engineering database and process simulation platform[J].

CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1-17

technologies, and their industrial applications in the molecular-level process simulation and optimization. The platform provides a critical analytical method, data, and model foundation for the implementation of petroleum molecular engineering.

Keywords: petroleum; molecular engineering; molecular characterization; molecular database; molecular-level process simulation

引 言

我国石油加工能力已接近10亿吨/年^[1],整体规模居世界首位。石油加工行业作为关系国计民生的重要支柱产业,其高质量发展正加速向高值化、精细化、低碳化和智慧化方向迈进。然而,石油是自然界中组成最为复杂的混合物之一,其加工转化过程涉及成千上万种分子及其相互转化路径。传统基于宏观性质表征和集总/组分模型的研究方法,已难以适应行业高质量发展对精准表征、过程模拟与优化调控的迫切需求。因此,发展贯穿全链条的分子级加工技术,推动石油分子工程理念落地,将成为石油加工领域的重要发展方向,其核心在于对石油分子组成及转化规律的分子级认识,以及构建面向工业过程优化的分子级模拟平台。

从分子层面深入认识石油组成,是实现其原料筛选、过程优化与产品调控的基础。然而,石油分子组成极为复杂,传统气相色谱与质谱技术难以对其开展分子级表征。随着软电离技术和高分辨质谱技术的发展,石油分子表征进入了新的发展阶段。John Fenn教授发明的电喷雾电离(ESI)技术为石油中极性分子的非破坏性电离提供了重要手段^[2],美国国家高磁场实验室的Allan G. Marshall院士团队将傅里叶变换离子回旋共振质谱(FT-ICR MS)应用于重油分析^[3],实现了对其中数千种极性分子组成(分子式)的解析。此后,相关研究在国际上迅速展开,其中,埃克森美孚Qian研究组在重质油分子组成表征方面开展了大量开创性工作^[4,5],此外,来自英国帝国理工学院、德国慕尼黑大学和韩国庆北大学的学者也在石油酸、含硫和含氮化合物的分析上取得了系列进展^[6-9]。2010年以来,中国石油大学(北京)和石油化工科学研究院均陆续购置了高分辨质谱^[10,11],发展了针对不同类型化合物的选择性电离方法^[12-15],显著拓展了石油复杂分子体系的表征范围。尽管FT-ICR MS显著提升了石油分子组成的定性表征能力,但其定量分析长期面临挑战。直到2019年,Li等人以催化裂化油浆为对

象,首次实现了其中20类化合物、超7,000个分子式的定量分析^[16],突破了高分辨质谱在重质油定量表征中的关键瓶颈。随后,沙特阿美Muller等人也对重油中的芳香族化合物开展了量化分析^[17]。这些研究表明,高分辨质谱技术正逐步由定性分析迈向定量表征,所获取的分子信息,为石油复杂分子体系的数字化表达和分子级建模提供了关键的基础理论和数据支撑。

在模型构建方面,石油加工分子级过程模型的发展经历了从手工处理到计算机辅助的演进。在上世纪60年代,研究者主要针对石脑油等轻馏分,通过人工推导反应网络并结合实验数据拟合的方式,建立了机理或分子层次的动力学模型,代表性成果包括用于乙烯裂解过程的SPYRO模型和用于重整过程的KINPTR模型^[18,19]。然而,随着馏分变重,分子数量和反应网络复杂度指数增加,传统人工建模方法已难以满足复杂体系模拟需求,从而推动了计算机辅助建模方法的发展。在众多方法中,由埃克森美孚的Jaffe团队提出的结构导向集总(SOL)法是商业化最为成功的方法之一^[20,21]。该方法通过结构单元组合来描述分子与反应,兼顾了模型表达能力与工程可计算性,并由此开发了自动化建模工具,形成了企业内部使用的分子级过程模型软件。国内华东理工大学和清华大学也基于此框架构建了系列分子级模型^[22,23]。与此同时,美国特拉华大学Klein课题组提出了基于键电矩阵(BEM)的分子表示方法^[24],该方法能够从原子连接和化学环境层面精细表示分子结构。在此基础上,进一步发展了分子组成重构、反应网络生成及求解算法,形成了KMT软件包^[25],已用于多种石油加工过程的分子级模拟^[26,27]。相比SOL方法,BEM方法具有更强的分子结构表达能力,但对建模者的化学和数学基础要求较高,目前仅被少数顶尖团队掌握。另一类建模思路是在传统集总模型基础上引入更多分子信息,采用预定义分子组分的方法进行建模,例如曼彻斯特大学提出的分子类型同系物矩阵(MTHS)框架^[28,29],该方法将石油组成与反应转化为

矩阵运算,易于与轻馏分检测数据结合且计算效率较高。法国石油研究院(IFP)也发展了类似的虚拟化合物矩阵方法^[30]。这类工作表明,高度简化的分子级模型与传统的集总模型之间并无严格界限,将分子信息逐步引入传统模型,是实现精细化建模的重要途径。总体而言,不同层级的模型各有特点,SOL方法易于计算但拓展性有限,BEM描述能力强但建模难度更大^[31]。为此,中国石油大学(北京)提出了耦合结构单元-键电矩阵(SU-BEM)的混合式建模方法^[32],通过分子基团与化学键的相互映射,在便于计算机处理的同时也兼顾了用户友好性。在此基础上,进一步建立了面向性质预测、反应过程和分离过程的建模框架^[33]。

现阶段,石油分子级表征与分子级建模的研究大多独自开展,两者缺乏有效的协同联动,以及可用于工程计算的集成平台。在过去的十几年中,依靠分子级表征技术积累了大量的分子组成与转化数据,却难以高效应用于分子级模型的构建与优化,而分子级模型中的各类建模方法和技术,也缺乏统一的数据支撑和交互接口,导致无法充分发挥其模拟与优化潜力,严重制约了石油分子工程理念的落地和石油加工行业的高质量发展。为此,重质油全国重点实验室分子工程中心对过去20多年的基础研究成果进行了产品化整合,构建了石油分子工程数据库及过程模拟平台,成功打通了“分子表征—分子数据库—分子级模拟—工业应用”全链条。基于此,本文将围绕石油分子工程数据库及过程模拟平台的发展历程、整体架构、关键技术及工业应用进行系统介绍,以期石油分子工程理念的产业化落地提供参考与借鉴。

1 石油分子工程数据库及过程模拟平台整体架构

石油分子工程数据库及过程模拟平台以石油分子工程理念为指导,石油分子工程是指从分子层次认识石油组成及转化规律,构建分子层次过程模拟系统,实现高效精准的过程优化。基于这一理念,平台围绕“表征—数据库—计算”三个核心环节构建,主要包括石油分子评价平台、石油分子信息数据库和分子级过程模拟平台三个部分,如图1(a)。其中,石油分子评价平台依托先进分析仪器与配套的分析方法,可实现复杂石油全馏分的分子级

(半)定量表征;石油分子信息数据库汇集并整理了上百套原油/重油分子表征数据,形成了包含百万个实测分子信息的数据库;分子级过程模拟平台则基于计算机辅助建模与高效求解技术,具备上万量级的组分与反应/分离过程的建模与计算能力。三者相互衔接,共同构成了面向石油复杂分子体系基础研究与工业应用的通用平台。三大功能模块集成后,平台可将分子评价平台获得的分子信息转化为数字化分子,并以标准化形式存入石油分子信息数据库,使实验表征结果能够被过程模拟平台直接调用,进而支撑装置的原料选择、工艺优化和产物调控。同时,工业装置生产数据也可反馈至过程模拟平台,用于修正动力学和热力学模型参数,模型计算和预测结果经验证后,也可进一步补充至数据库。由此,形成了正向计算和逆向优化的协同迭代机制,使其具备面向工程场景持续更新和优化调控的能力。

从整体架构来看,平台主要由五个层次构成,如图1(b)。从下往上分别是分析仪器、分析方法、数据库、基础模块和软件模块。分析仪器和分析方法是整个平台的基石,主要是用于获取石油分子组成数据。分析仪器主要包括红外光谱、全二维气相色谱以及高分辨质谱,基于这些先进仪器,开发了面向不同类型化合物的分析方法、油品快评方法及相应的数据处理软件,实现了复杂石油分子的(半)定量表征。在此基础上,整合表征得到的分子级数据,形成了三个核心数据库,即原油/稠油性质与分子组成数据库、硫化物数据库和原油色谱指纹数据库。进一步地,发展了融入分子表征数据的分子级建模基础模块,主要功能有分子矩阵运算、物性计算、反应网络生成以及动力学与热力学计算引擎。最后,针对典型加工过程建立了分子级软件模块,如常减压装置、加氢处理、催化裂化、催化重整以及甲醇制烯烃(MTO)等,进而支撑工业分子级过程模拟系统的搭建。平台支持本地部署和Web API调用两种使用模式,可根据需求定制开发相应的计算软件与工业模拟系统。

2 石油分子评价平台

电喷雾电离源与高分辨质谱联用技术通过质子化/去质子化反应使石油中极性分子带上电荷,推动了石油表征进入“分子时代”。如-ESI和高分辨



图1 石油分子工程数据库及过程模拟平台的核心功能及整体架构。(a)核心功能;(b)整体架构

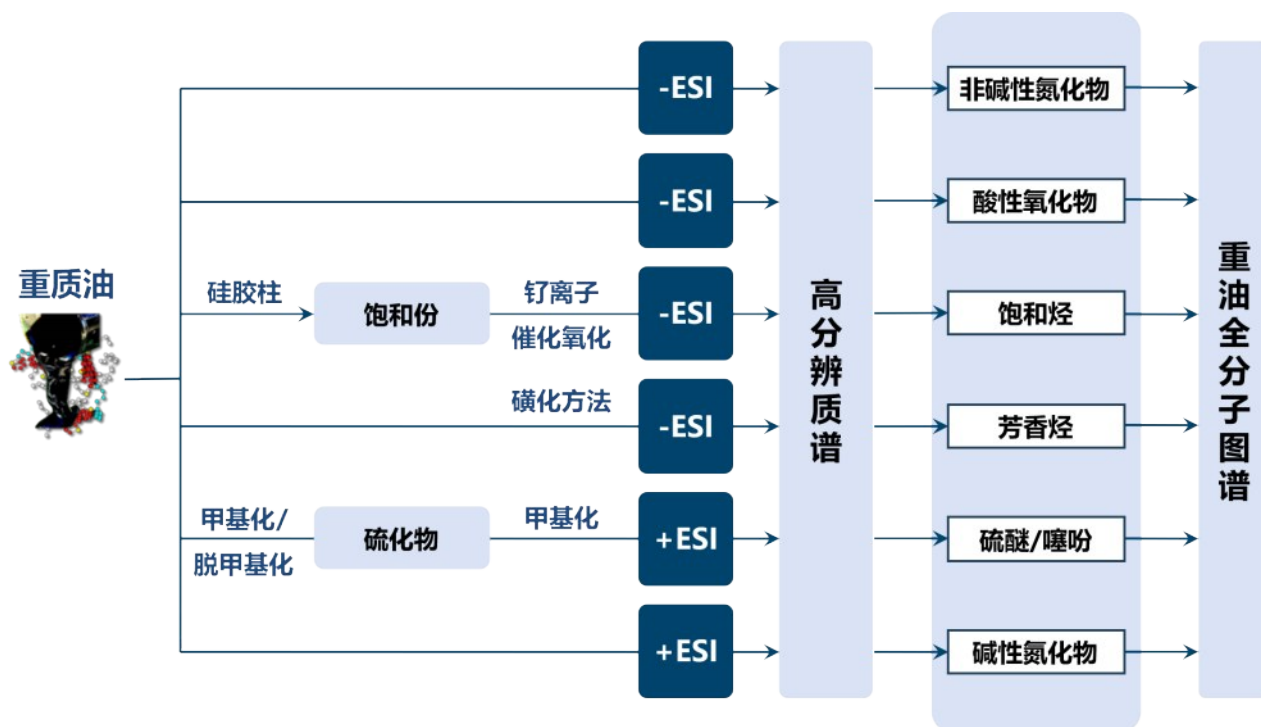
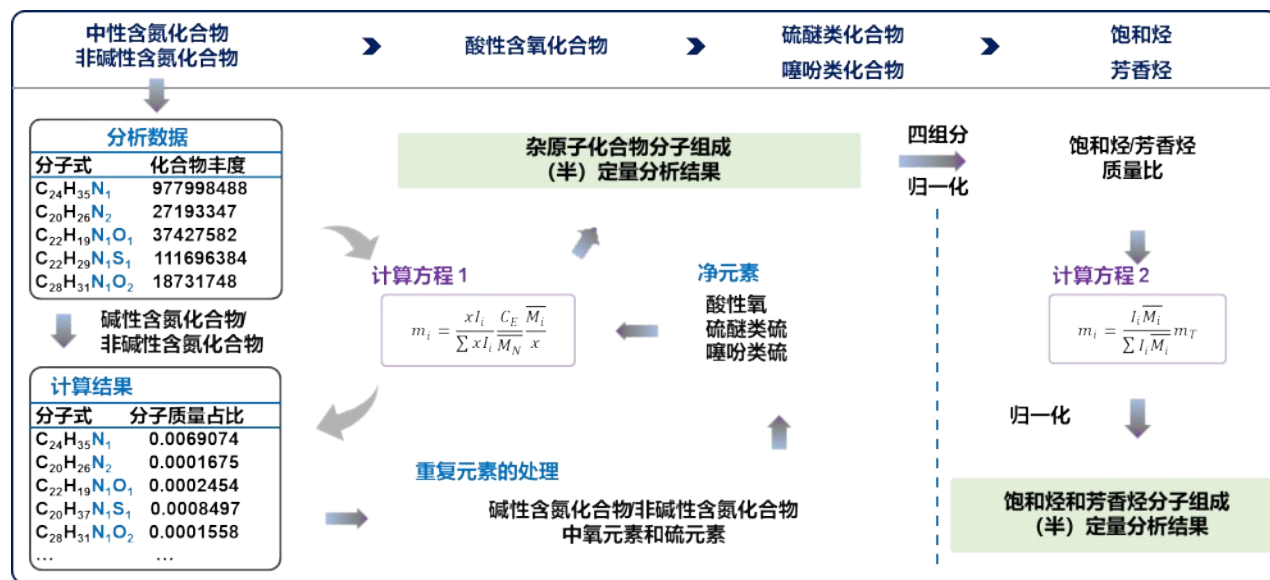
Fig.1 Core functions and overall architecture of the petroleum molecular engineering database and process simulation platform. (a) Core functions; (b) Overall architecture

质谱联用可直接表征中性氮化物和酸性氧化物^[34, 35], +ESI结合高分辨质谱可直接表征碱性氮化物^[36]。除了极性化合物, 石油中还存在大量的弱极性和非极性化合物, 因不具有质子亲和性而无法带上电荷, 导致其难以在高分辨质谱中响应, 这为石油全馏分的分子组成表征带来挑战。针对这一挑战, 开发了一系列创新性的组分分离和石油组成分析方法, 实现了不同类型化合物在高分辨质谱上的分子表征, 如图2。代表性的方法有: 将饱和烃选择性转化为醇类的钨离子催化氧化方法^[14], 将芳香烃转化为磺酸盐的固相可调控磺化方法^[13], 将含硫化物转化为甲基磺盐的甲基化方法^[12]。通过这些方法的组合, 可在同一电离源下, 实现从非极性烃类到强极性杂原子化合物的全组分定性分析。

提出的方法虽然实现了石油中各类化合物的分子表征, 但是, 不同类型化合物的分子表征数据往往来源于多次独立实验。如何对这些分散获得的分子数据进行统一定量与有效整合, 是实现石油全组分分子组成定量分析的关键。与针对单一类型化合物的内标定量不同, 全组分定量不仅需要获得单次分析中目标化合物各分子的含量, 还需将多次分析得到的不同类型化合物数据统一整合, 在确保各类化合物得到量化表征的同时避免同一分子

被重复计算。为此, 提出了基于宏观组成约束的归一化整合方法^[37], 核心思路是通过分子组成表征结果与可准确测定的组分质量和元素含量相互验证, 来实现全组分分子组成的统一定量, 如图3。具体而言, 该算法以组合式表征方法得到的分子式及相对丰度为输入, 并根据化合物类型将其划分为含氮、含氧、含硫化合物以及饱和烃和芳香烃等。对于含氮、含氧、含硫等杂原子化合物, 可用相应的元素含量约束, 以计算各分子的含量。对于饱和烃和芳香烃等烃类化合物, 则以组分质量或质量占比为依据进行归一化定量。考虑到多杂原子化合物可能同时存在硫、氮、氧等元素的问题, 在定量过程中需逐步核算其中交叉元素的贡献, 并在后续归一化处理中予以扣除, 从而保证不同类型化合物定量结果的独立性、完整性和一致性。该方法实现了复杂重油分子体系的(半)定量表征, 为原油全组分分子表征、石油分子信息数据库构建及后续分子级建模提供了分析方法支撑。

基于前述重油分子表征方法的创新, 进一步发展了结合气相色谱和高分辨质谱的原油“分子”评价方法^[38], 如图4(a)所示。“分子”评价是指在分子表征的基础上, 结合实验测定或模型计算得到的宏观性质, 解析油品的组成特征, 进而对其加工方案开

图2 基于ESI的重油组式分子表征方法^[37]Fig.2 A combined molecular characterization method for the heavy oil based on an ESI source^[37]图3 重油分子组成定量整合算法^[37]Fig.3 Quantitative integration algorithm for heavy oil molecular composition^[37]

展综合评估。该方法首先通过微蒸馏将原油切割为汽油、柴油和重油等不同馏分,随后分别采用一维/二维气相色谱和高分辨质谱,对各馏分开展定量分子组成表征。在此基础上,结合各馏分收率对分子组成数据进行整合,获得实测原油分子组成的定量结果,并进一步基于分子混合规则计算原油宏观性质,最终形成宏观性质评价报告。相较于耗样量

大、分析周期长的传统原油“组分”评价方法,该方法仅需不超过 50 mL 原油样品,即可在 5 天内获得近 10,000 种分子的含量信息以及 40 余项宏观性质参数,显著提高了原油评价的精度和效率。

基于该方法对国内某原油样品开展的评价结果表明,不同馏分中化合物组成呈现出不同的分布规律,如图 4(b)所示。从石脑油到减压渣油(VR),

各馏分的平均碳数和等效双键数(DBE)不断增加,饱和烃含量逐渐降低,而芳烃和杂原子化合物含量则持续升高。其中,多杂原子化合物主要富集于减压渣油馏分,这也是石油加工过程中组成最复杂、转化难度最大的组分之一。上述结果证明,原油

“分子”评价方法能够从分子水平揭示原油不同馏分的分子分布规律,首次实现了原油全分子图谱的获取。单个原油样品可定量鉴定分子超过 10,000 种,含量覆盖百分级至 ppb 级,跨越 7 个数量级,显著提升了复杂石油体系的分子认知能力。

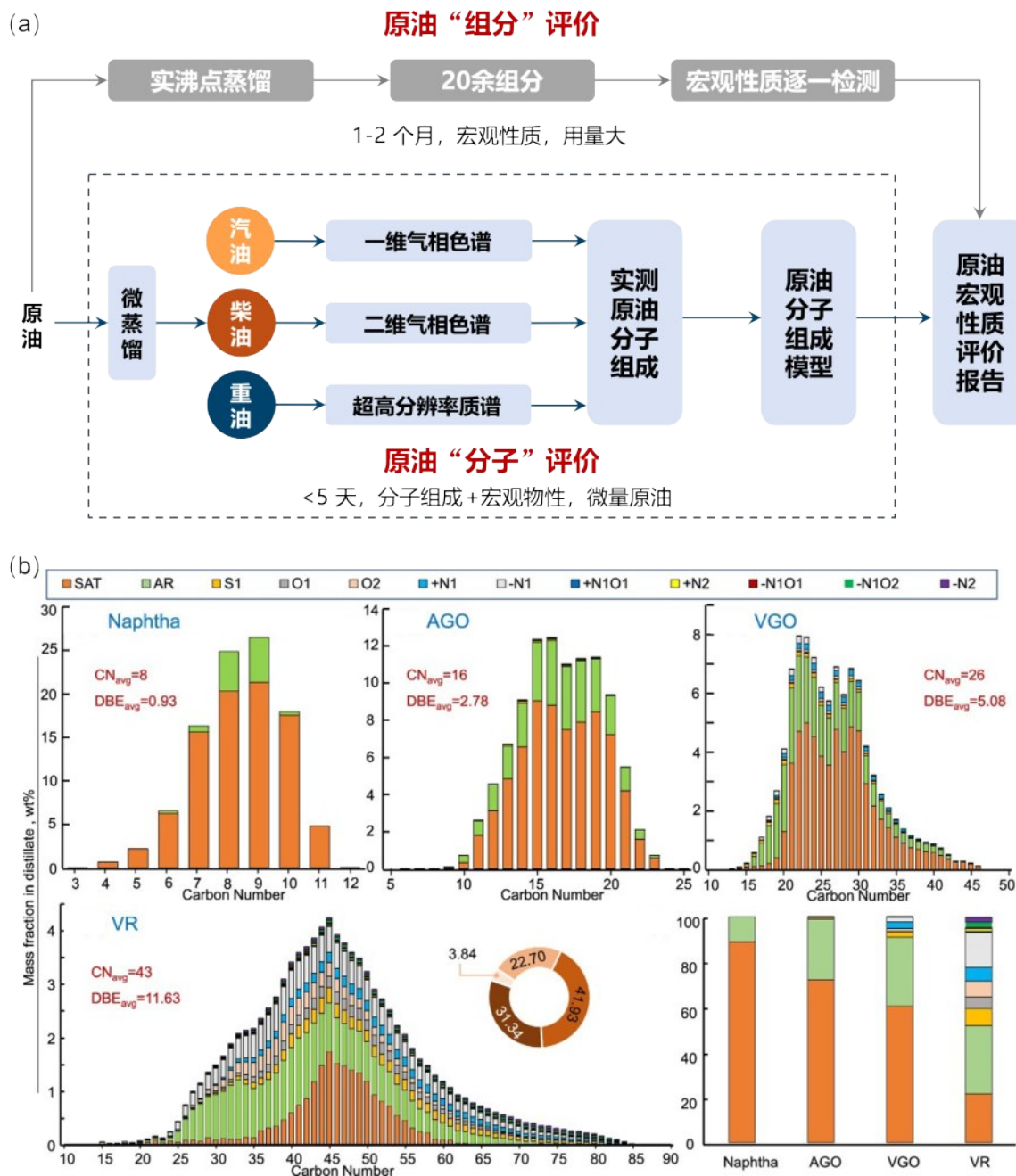


图4 原油“分子”评价。(a)分子评价技术路线;(b)某原油的分子评价结果^[38]

Fig.4 Molecular evaluation method for crude oil. (a) Schematic diagram of molecular evaluation method; (b) Molecular characterization results for a specific crude oil^[38]

3 石油分子信息数据库

基于石油分子评价平台,面向128套不同来源的原油和重油样品,系统开展了分子组成与性质表征,并建立了国际首个原油/稠油性质与分子组成数据库、原油色谱指纹数据库和石油硫化物数据库,如图5所示。其中,原油/稠油性质与分子组成数据库收录了超过5,000种分子、6大类26小类化合物以及30余项性质与组成信息,并提供在线检索、数据查看、样品比对和二次加工性能测算等功能。原油色谱指纹数据库包含500余组原油色谱指纹数据,对每个可识别化合物均进行了标注,并集成了化合物性质和谱图等信息,可服务于海上溢油、土壤污染等场景下的原油示踪与油源诊断。石油硫化物数据库则通过甲基化/脱甲基化方法实现硫化物分离富集^[12],并结合色谱与质谱手段表征其组成与结构,目前,数据库中收录了900余种单体硫化物的色谱保留指数和质谱数据,为复杂硫化物的鉴定提供了重要基础。

三套数据库的搭建思路相似,以石油硫化物数据库为例,通过对硫化物的气相色谱和质谱数据进

行标准化处理,在开源的网页端构建了在线网络数据库^[39],其整体架构如图5所示。数据库以MySQL作为数据存储核心,利用Python Flask框架实现服务器的管理与运行。数据库中的数据管理主要分为基础信息和色谱信息两大部分。基础信息包括硫化物的中英文名称、CAS号、分子式、分子量以及SMILES等信息,采用结构化的二维数据表进行存储。色谱信息则包括GC-FID和GC-MS两类数据,GC-FID数据为二维数据,以保留时间为横坐标、分子含量信息为纵坐标,可通过二维数据表存储并借助Python Pandas进行调用。GC-MS数据则具有三维的信息特征,每个特征离子均可单独提取形成色谱图。针对这类数据,采用了两种存储与访问策略:一是依据硫化物类型手动建立特征离子列表,并以.csv格式存储,二是完整保留原始三维质谱数据,将各保留时间点对应的质谱信息以字典形式转换为JSON字符串,并嵌入色谱二维数据中。通过上述方法的应用,石油分子信息数据库实现了石油复杂分子信息的系统积累与标准化组织,为分子级模型开发和工艺优化提供了高质量的数据支撑。

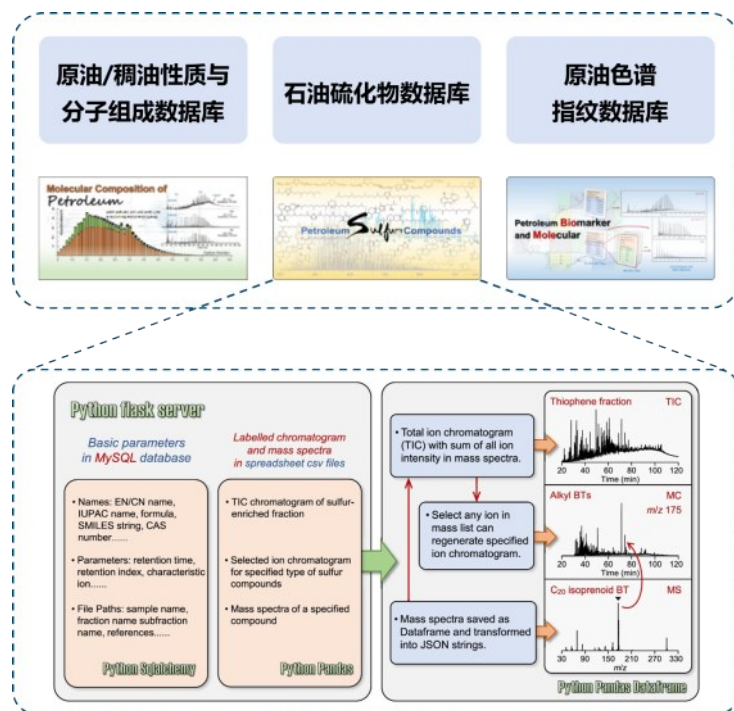


图5 石油分子信息数据库主要内容及硫化物数据库架构^[39]

Fig.5 Main contents of the petroleum molecular information database and architecture of sulfur database^[39]

4 石油加工分子级过程模拟平台

复杂石油分子体系组成高度复杂、反应数目多,导致其精细化过程模拟面临极大挑战,具体表现为分子层次基础建模理论不足和模型框架缺失。为此,石油分子工程中心经过10余年的持续攻关,在解决基础理论的同时完成了石油分子过程模拟平台的构建^[40]。该平台包括四大核心模块,分别是

分子数字化及物性预测模块、油品分子特征化模块、分子层次反应工程模块和分子层次分离单元模块,如图6所示。基于该平台构建的分子级模型在分子数和反应数方面均有跨越式提升,能够处理的组分数和反应数由传统的几百量级提升至上万量级,为石油加工过程的精细化模拟与调控提供了新一代计算工具。

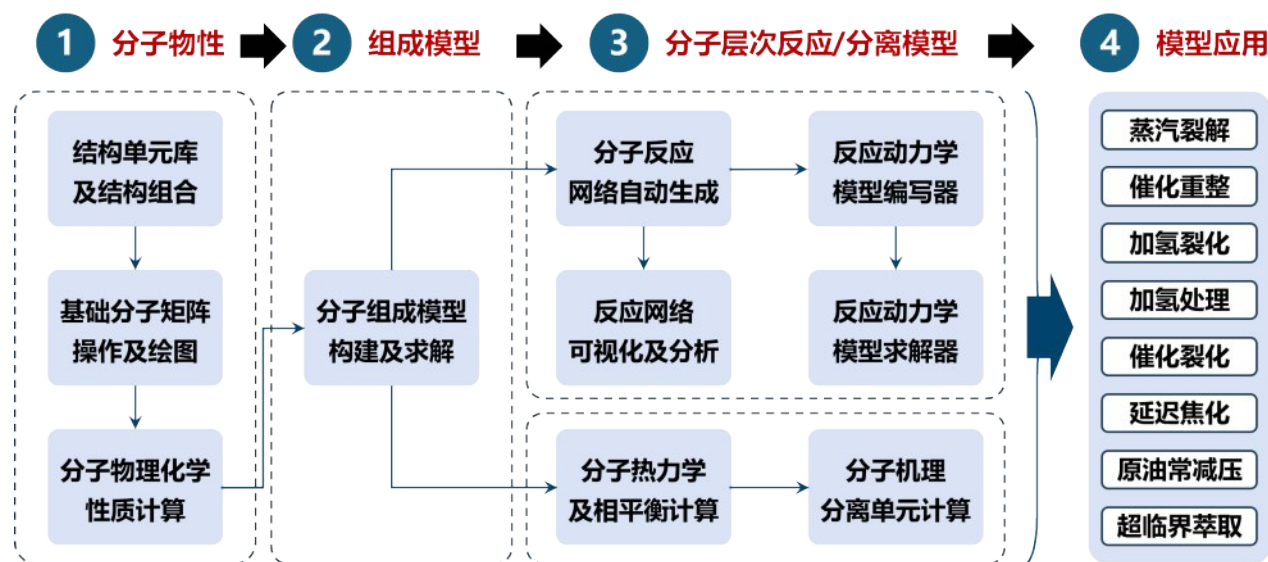


图6 石油加工分子级过程模拟平台整体架构^[40]

Fig.6 Overall architecture of the molecular-level process simulation platform for petroleum refining^[40]

4.1 分子数字化及物性预测模块

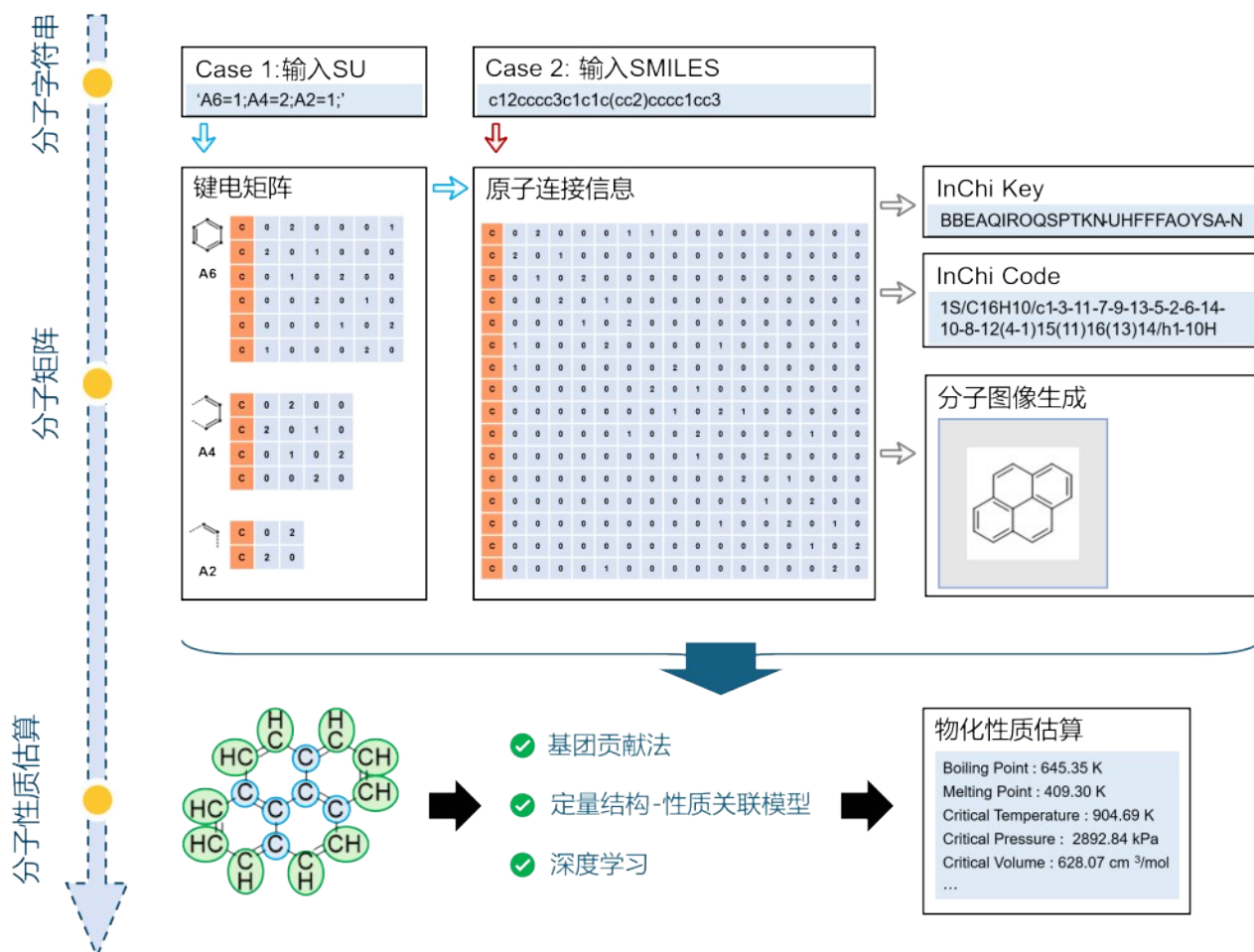
对石油加工过程开展精细化模拟的前提是将海量的分析表征数据转化为计算机可识别、可处理的数字化分子。为此,结合高分辨质谱提供的分子组成信息和原子力显微镜揭示的分子结构特征,提出了SU-BEM石油分子数字化表示框架^[32],如图7所示。该框架采用结构单元描述共性分子片段,用键电矩阵描述原子连接关系与电子信息,兼顾了易用性和化学可解释性,构成了面向复杂石油体系的分子数字化统一底座。

在该数字化框架中,分子表示方式具有较强的可扩展性。除采用结构单元与键电矩阵相结合的基本形式外,其上层结构单元还可扩展为SOL中的结构向量、面向聚合物的结构单元(Polymer-SU)以及SMILES等分子语言,底层则用于表征分子拓扑信息,既可以采用键电矩阵/布尔邻接矩阵,也可以采用各类化学标记语言。在此基础上,采用实验室积累的分子物性数据集,结合基团贡献法或深度学习算法构建定量结构—性质关联模型(QSPR),实现

了 C_1 - C_{150} 烃类、含硫及含氮等杂原子化合物的热力学、结构、能量、产品性质等40多种关键物性准确估算^[41, 42],如表1所示,为石油馏分宏观性质计算、反应行为模拟和分离行为预测提供了可靠的分子物性。

4.2 油品分子特征化模块

为实现石油馏分分子分布的定量估算及宏观性质的准确计算,进一步开发了油品特征化和宏观物性预测模块,如图8(a)。该模块将表征得到的关键核心分子映射为数字化分子,通过侧链扩展获得石油馏分预置分子库,并采用概率密度函数组合的方式对石油中不同类型的化合物进行约束,从而实现复杂石油分子的特征化描述^[32, 43]。在此基础上,结合分子混合规则完成了油品宏观性质的估算,实现了超40种宏观性质的准确计算,全面支撑了化工过程模拟及石化产品质量评估的需求(如表2)。针对传统方法宏观性质重构分子组成面临的多解问题,创新性的提出了以实测分子表征数据为参比的分子组成重构方法^[44],实现超5,000个烃类及非烃类

图7 基于SU-BEM的石油分子数字化方法及物性预测框架^[32]Fig.7 Petroleum molecular representation and property prediction based on the SU-BEM framework^[32]

分子分布的有效约束,从根本上提升了分子分布的真实性和重复性。基于建立的油品特征化模块,对柴油、减压馏分油和原油分别构建了分子组成模型^[45-47],如图8(b)所示。结果表明,模型计算得到的宏观性质与实验数据一致,所得分子分布呈现典型伽马分布特征,为后续分子层次反应及分离模型提供可靠的分子分布信息。该方法将复杂石油馏分的特征化方法从“组分”层面推进到“分子”层次,是连接分子表征与过程模型的关键环节。

4.3 分子层次反应工程模块

石油加工不同工艺过程涉及不同的反应机理、反应路径和反应器形式,从分子层次对其直接进行分子级模拟与优化,一直是化学反应工程领域的重点与难点。为实现复杂分子反应体系的高效建模与求解,提出了基于计算机辅助的复杂反应网络自动生成方法及分子级模型自动构建与求解技术,如图9(a)。其核心思想是将复杂的反应机理数字化

为描述反应结构单元变换的反应规则,并基于反应路径自动推理算法,在短时间内生成大规模反应网络,进而构建对应的反应动力学模型。在此基础上,开发分子级反应动力学模型和反应器模型的耦合方法,建立包含反应速率方程以及质量、热量和动量传递方程的各类反应器模型。为实现复杂分子反应体系的高效求解,提出了基于可检测分子的反应网络简化方法以及质量—能量解耦离散化求解策略^[48,49],在保持分子转化精度的前提下,将分子级动力学模型的求解时间从小时级缩短至分钟级,既能满足工程计算需求,又实现了产品分子组成的准确预测^[50]。

以加氢过程为例,通过对加氢饱和、加氢脱硫和加氢脱氮等关键反应机理解析,自动构建了柴油加氢精制反应网络,并建立了反应动力学模型与气—液—固三相滴流床反应器的耦合模型,实现了反应过程中各类物质转化行为的准确模拟^[51],如图9

表1 平台中可预测的分子性质列表
Table 1 Predictable molecular properties in the molecular-level process simulation platform

性质类型	分子性质名称	分子性质名称
物理性质	临界性质(温度、压力、体积)	Watson K 值
	熔点(凝点)	辛烷值(MON 和 RON)
	吉布斯自由能	十六烷值
	生成焓	浊点
	熔化焓	倾点
	辛醇-水分配系数	苯胺点
	闪点	沸点
	蒸发焓(298 K 及沸点)	Reid 蒸汽压
	蒸发熵(沸点)	密度(288K, 293K 及 298 K)
	Hansen 溶解度参数	比重
结构性质	Hilderbrand 溶解度参数	API
	偏心因子	运动黏度
	摩尔体积(298 K)	黏度指数
	碳原子数	芳香碳数
	氢原子数	环烷碳数
	硫原子数	侧链碳数
	氧原子数	芳香碳率
	氮原子数	环烷碳率
	芳香环数	侧链碳率
	环烷环数	氢碳比
	噻吩环数	分子量
	总环数	等效双键(DBE)
	元素组成	SMILES

(b)。目前,该方法已应用至蒸汽裂解^[52]、催化重整^[53]、加氢精制^[46]、加氢处理^[54]、催化裂化^[55]及延迟焦化^[56]等典型石油加工过程,形成了从“反应数字化—反应网络生成—模型高效求解”的全链条计算理论与方法体系,为分子级过程模拟提供了关键的反应模块支撑。

4.4 分子层次分离单元模块

分子级过程模拟要从理论研究走向工程计算,除了反应过程的计算,还必须突破大规模分子级热力学计算和分离模型构建。现阶段,面向复杂分子体系的分离过程建模仍采用虚拟组分方法,且主要集成于商用流程模拟软件之中,难以与分子组成模型和反应模型有效衔接,从而限制了全流程分子级计算与优化。为此,面向实际石油体系,构建了从“热力学基础物性—相平衡计算—分离模型构建—工程过程优化”的分子级分离模型计算框架^[57],如图10(a)。该框架首先基于分子结构与机器学习结合的分子性质预测方法,完成了复杂石油分子热力学

参数的估算。在此基础上,构建了以立方状态方程为核心的热力学计算引擎,实现了近1,0000个分子体系的平衡组成以及泡点温度、逸度系数和平衡常数等关键热力学性质的准确计算。进一步地,针对闪蒸和精馏塔等典型分离单元,开发了严格的机理计算模块,可实现操作型和设计型的稳健计算及收敛。应用结果表明,自主开发的分离模型与国际主流商业流程模拟软件计算结果一致,还能提供更细致的塔板物料及分离产物的分子分布信息。

以重油催化裂化过程为例,展示了组成—反应—分离的分子级耦合建模过程,如图10(b)。首先,基于油品特征化模块重构了重油分子组成,根据碳正离子机理,构建了20余条催化裂化反应规则,自动生成了超8,000个反应的催化裂化反应网络,并建立了提升管反应器与流化床再生器的耦合模型^[58]。在此基础上,将反应产物分子组成进一步输入分离模型,结合实验数据完成动力学参数拟合,最终实现了产物分布的准确预测,该案例为推动石油分子工程理念走向工业应用提供了建模思路与模型基础。

5 应用案例

集成上述分析方法、数据库和模型化方法,形成了石油分子工程数据库及过程模拟平台。针对不同石油加工过程的特征,逐步构建了覆盖炼厂主要加工装置的分子层次过程模拟平台(见表3),代表性的模型有:模拟催化重整的移动床模型^[53],催化裂化的反应—再生模型^[58],加氢处理的滴流床模型^[51],延迟焦化的焦化炉模型^[56]以及溶剂脱沥青的超临界萃取模型^[59]等,实现了复杂石油分子体系在转化、分离和传递过程中的定量计算,为复杂加工过程的精细化模拟提供了系统支撑。基于该平台,面向石油化工及煤化工过程开展了工业软件研发及应用推广,可为用户提供定制化的表征与建模服务。截至目前,受中石油、中石化、国家管网等大型央企项目委托,先后开发了汽油调合、渣油加氢、重芳烃轻质化、重油分子组成、原油分子组成等多个过程模型及软件,均实现了成功交付及验收。同时,研究团队还与企业合作,联合研发了4套大型工业装置分子层次过程模拟系统,累积模拟优化加工量超过500万吨。

以湖南石化70万吨/年催化重整装置为例,通

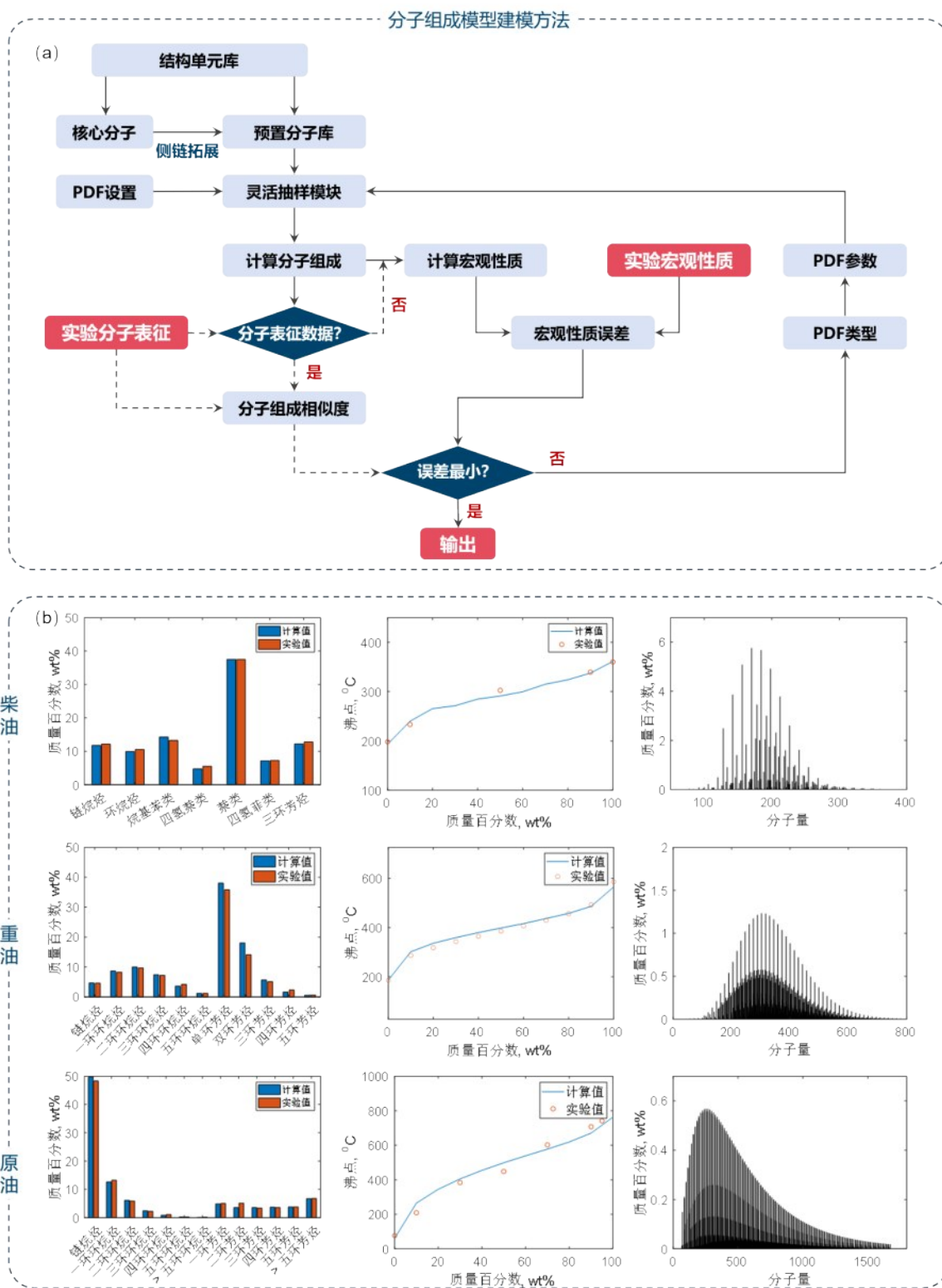


图8 石油分子组成模型及其应用。(a)组成模型建模框图;(b)典型石油馏分及原油的分子组成模型构建结果^[45-47]

Fig.8 Petroleum molecular compositional model and applications. (a) Schematic diagram of molecular compositional model; (b)

Molecular composition model for various petroleum fractions and crude oil^[45-47]

过现场装置取样,采用分子评价平台中的气相色谱和对应的分析方法对现场各物料进行分子表征,将表征得到的分子信息输入分子信息数据库,获得包

含 149 个分子的基础数据集。在此基础上,调用反应网络生成模块,自动生成了包含 256 个反应的催化重整反应网络,进而构建了催化重整分子级反应

表2 平台中可预测的宏观性质列表

Table 2 Predictable bulk properties in molecular-level process simulation platform

性质类型	宏观性质名称	宏观性质名称
物理性质	临界性质(温度、压力、体积)	Watson K 值
	熔点(凝点)	辛烷值(MON 和 RON)
	吉布斯自由能	十六烷值
	生成焓	浊点
	熔化焓	倾点
	辛醇-水分配系数	烟点
	闪点	残炭值
	蒸发焓(298K 及沸点)	苯胺点
	蒸发焓(沸点)	蒸馏曲线(模拟蒸馏及 ASTM D86)
	Hansen 溶解度参数	Reid 蒸汽压
	Hilderbrand 溶解度参数	折光率(20℃及 70℃)
	偏心因子	密度(288K, 293K 及 298 K)
	摩尔体积(298 K)	比重
	API	运动黏度
结构性质	平均沸点	黏度指数
	平均碳原子数	平均芳香碳数
	平均氢原子数	平均环烷碳数
	平均硫原子数	平均侧链碳数
	平均氧原子数	芳香碳率
	平均氮原子数	环烷碳率
	平均芳香环数	侧链碳率
	平均环烷环数	氢碳比
	平均总环数	分子量
	元素组成	烃族组成
	四组分含量	PIONA 含量

动力学模型。根据实际工艺流程,依次构建了闪蒸和精馏塔模型,形成覆盖反应与分离全过程的分子级模拟优化系统。该系统包含4个反应器、2个闪蒸罐和7个精馏塔,经过6个月的工业采样测试验证,芳烃收率的平均误差为0.85%,实现了产品分子组成的准确预测。基于该系统形成的优化方案,使总芳烃流量提升14.4吨/天,脱戊烷塔燃气消耗降低1.5%,在取得显著经济效益的同时实现了节能降碳。该应用案例表明,基于平台搭建的分子级流程模拟系统不仅能实现产物分子分布的准确预测,还可进一步为工艺条件优化和产物调控提供支撑,证明了平台在实际工业生产过程中的应用价值。

6 结 论

本文系统梳理了石油分子工程数据库及过程

模拟平台的发展背景、整体架构、关键技术及应用进展。该平台围绕“表征—数据库—计算”三个核心环节,形成了石油分子评价平台、石油分子信息数据库和分子级过程模拟平台三大部分,在分子评价方面,突破了复杂石油体系全组分识别与定量表征的瓶颈,发展了基于高分辨质谱的组合式表征方法,实现了基于同一电离源的重油全组分(半)定量表征,首次获得原油全分子图谱。单个原油样品可定量鉴定分子超过10,000种,检测含量范围跨越7个数量级,显著提升了复杂石油体系的分子认知能力。在数据库建设方面,面向不同来源原油和重质油样品,系统开展了128套原油/重质油的分子组成与性质表征,建立了原油/稠油性质与分子组成数据库、原油色谱指纹数据库和石油硫化物数据库,实现了复杂分子信息的系统积累与标准化组织。在过程模拟方面,构建了涵盖分子数字化与物性预测、油品分子特征化、分子层次反应工程和分离单元模块的分子级过程模拟平台,具备上万量级组分与反应/分离过程的处理能力,实现了从分子表征、基础数据库到过程模拟的全链条贯通。工业应用表明,该平台可有效支撑石油加工过程的分子级模拟与优化,对提升目标产物收率、降低能耗与碳排放、推动石化过程向精细化、低碳化和高值化发展具有重要意义。未来,平台将进一步通过生成式人工智能,推动先进表征仪器、分子数据库和工业过程模型的深度融合,将离线数据和模型嵌入具体工业场景,构建“在线感知—分子数据库—分子级模型—工业装置”协同建模新范式,形成新一代数智融合的石油分子工程平台,为石油分子工程理念的深化应用以及石化过程的智能决策与优化调控提供更有有力支撑。

符号说明

- A_j ——反应j的指前因子
- C_E ——元素含量,wt%
- C_i ——物质i的浓度,mol/L
- Ea_j ——反应j的活化能,KJ/mol
- I_i ——物质i的峰强度
- K_{ads_i} ——物质i的吸附常数
- k_j ——反应j的反应速率常数
- M_i ——物质i的相对分子量
- m_i ——物质i的质量分率
- m_N ——氮原子的相对分子量
- m_T ——饱和烃与芳香烃总质量分数

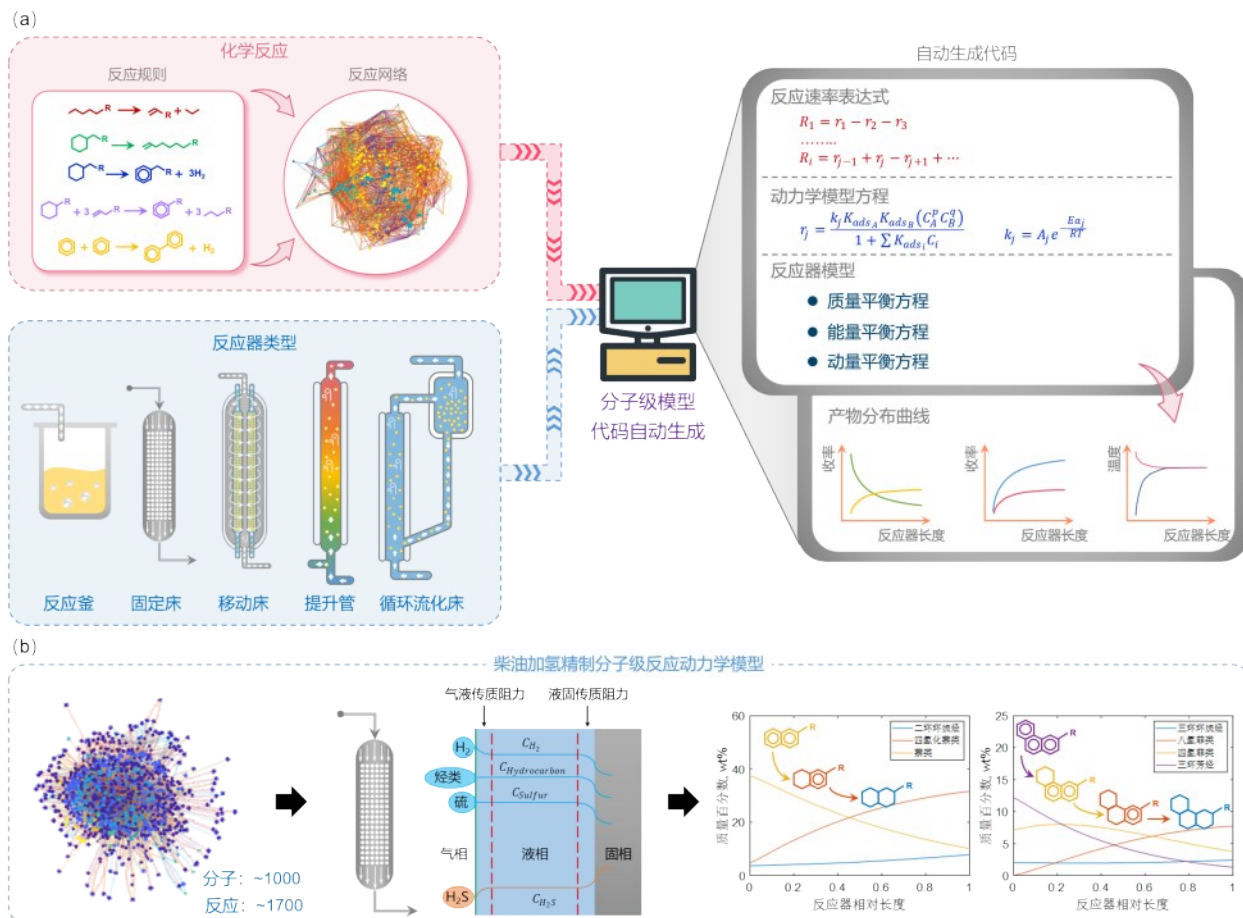


图9 复杂反应网络及模型代码自动生成。(a)分子级反应动力学模型自动生成方法;(b)在柴油加氢精制中的应用^[46, 47]

Fig.9 Automatic generation of complex reaction networks and model code. (a) Auto-generation method for molecular-level kinetic model; (b) Case study in diesel hydrofining^[46, 47]

R ——理想气体常数, J/(mol·K)

R_i ——物质*i*的净反应速率, mol/(L·s)

r_j ——反应*j*的反应速率, mol/(L·s)

T ——反应温度, K

x ——氮原子数

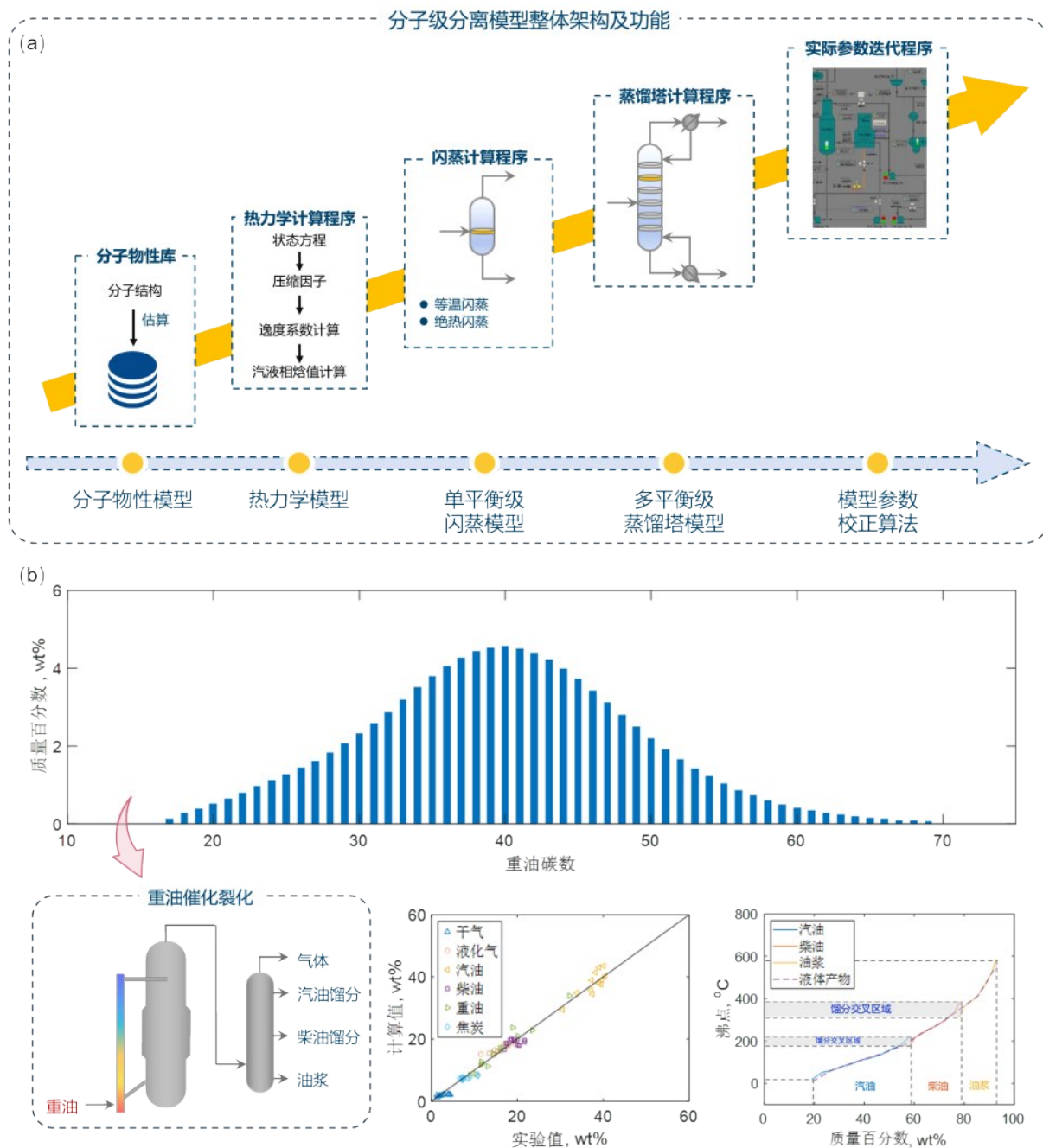


图10 分子层次分离模型包含的模块及应用案例。(a)分子层次分离模型总览;(b)重油催化裂化中的反应-分离耦合建模^[58]

Fig.10 Modules and application examples of the molecular-level separation model. (a) Overview for molecular-level separation model; (b) Reaction-separation coupling modeling in heavy oil FCC process^[58]

表3 基于平台构建的分子级过程模型

Table 3 Developed molecular-level process models based on the platform

模型类型	工艺过程	模型描述
油品调和模型	汽油调和	建立了包含300多个分子的汽油分子数据库,提出了基于气相色谱实测分子的汽油调和模型,为炼厂汽油调和提供了优化的配方 ^[60] 。
	柴油调和	构建了包含1,500个分子柴油分子组成模型和调和模型,实现了柴油调和配方的预测与优化 ^[61] 。
分离模型	原油常减压蒸馏	提出了基于集总—反集总的分子级分离模型构建方法,实现了常减压蒸馏中各馏分收率、性质、分子分布的预测 ^[62] 。
	重油溶剂脱沥青	建立了基于严格热力学机理的溶剂脱沥青模型,实现了产物收率和性质的准确计算 ^[59] 。
反应模型	轻烃蒸汽裂解	发展了耦合裂解炉模型的蒸汽裂解分子级反应动力学模型,实现了轻烃蒸汽裂解产物分布的准确计算与优化 ^[52] 。
	轻烃催化裂解	建立了包含74个分子,469个反应的轻烃催化裂解反应网络,提出了分子级反应动力学模型与催化剂性质耦合建模方法 ^[63] 。
	石脑油催化重整	构建了包含149个分子,256个反应的重整反应网络,建立了包含质量、能量、动量衡算的重整反应器模型,并实现工业应用 ^[53] 。
	柴油加氢精制	建立了包含660个分子,1,224个反应的柴油加氢精制反应动力学模型,准确描述了多环芳烃的加氢反应路径 ^[46] 。
	重油催化裂化	建立了超8,000个反应的重油催化裂化反应网络,提出了分子级反应动力学模型与催化裂化反应—再生系统的耦合建模方法 ^[58] 。
	渣油焦化过程	提出了耦合气液相分离模型的减压渣油焦化分子级反应动力学模型,定量描述了焦化过程中的复杂气液分离—反应机制 ^[56] 。
	渣油加氢处理	构建了上万分子与反应的重油加氢处理分子级反应动力学模型,四个反应器出口的分子分布规律与高分辨质谱实测数据一致 ^[54] 。
	原油催化裂解	构建了原油分子组成模型,生成了上万反应的原油催化裂解反应网络,实现了原油裂解制化学品过程分子分布的准确计算 ^[47] 。
	费托蜡催化裂化	基于实测分子组成,构建了700个分子,2,029个反应的费托蜡催化裂解反应网络,实现了产物收率和性质的准确预测 ^[64] 。
	甲醇制烯烃	建立了甲醇制烯烃的分子级反应动力学模型和基于流化床的反应—再生模型,实现了甲醇制烯烃工业长周期产物分布预测 ^[65] 。

参考文献

- [1] 柯晓明, 张硕, 乞孟迪, 等. 从规模驱动到价值重塑: 中国炼油业引领全球产业新范式[J]. 当代石油石化, 2025, **33**(6): 1–7.
Ke X M, Zhang S, Qi M D, et al. From scale-driven to value reshaping: China's oil refining industry pioneers a new global industry paradigm[J]. Petroleum & Petrochemical Today, 2025, **33**(6): 1–7.
- [2] Fenn J B, Mann M, Meng C K, et al. Electrospray ionization for mass spectrometry of large biomolecules[J]. Science, 1989, **246**(4926): 64–71.
- [3] Marshall A G, Rodgers R P. Petroleomics: the next grand challenge for chemical analysis[J]. Accounts of Chemical Research, 2004, **37**(1): 53–59.
- [4] Qian K N, Rodgers R P, Hendrickson C L, et al. Reading chemical fine print: resolution and identification of 3000 nitrogen-containing aromatic compounds from a single electrospray ionization Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrum of heavy petroleum crude oil[J]. Energy & Fuels, 2001, **15**(2): 492–498.
- [5] Qian K N, Robbins W K, Hughey C A, et al. Resolution and identification of elemental compositions for more than 3000 crude acids in heavy petroleum by negative-ion microelectrospray high-field Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry[J]. Energy & Fuels, 2001, **15**(6): 1505–1511.
- [6] Barrow M P, McDonnell L A, Feng X D, et al. Determination of the nature of naphthenic acids present in crude oils using nanospray Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry: the continued battle against corrosion[J]. Analytical Chemistry, 2003, **75**(4): 860–866.
- [7] Panda S K, Schrader W, al-Hajji A, et al. Distribution of polycyclic aromatic sulfur heterocycles in three Saudi Arabian crude oils as determined by Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry[J]. Energy & Fuels, 2007, **21**(2): 1071–1077.
- [8] Kim S, Stanford L A, Rodgers R P, et al. Microbial alteration of the acidic and neutral polar NSO compounds revealed by Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry[J]. Organic Geochemistry, 2005, **36**(8): 1117–1134.
- [9] Cho Y, Kim Y H, Kim S. Planar limit-assisted structural interpretation of saturates/aromatics/resins/asphaltenes fractionated crude oil compounds observed by Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry[J]. Analytical Chemistry, 2011, **83**(15): 6068–6073.
- [10] Wang W, Dong M, Song C X, et al. Structural information of asphaltenes derived from petroleum vacuum residue and its

- hydrotreated product obtained by FT-ICR mass spectrometry with narrow ion isolation windows[J]. *Fuel*, 2018, **227**: 111–117.
- [11] Liu P, Xu C M, Shi Q, et al. Characterization of sulfide compounds in petroleum: selective oxidation followed by positive-ion electrospray Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry[J]. *Analytical Chemistry*, 2010, **82**(15): 6601–6606.
- [12] Wang M, Zhao S Q, Chung K H, et al. Approach for selective separation of thiophenic and sulfidic sulfur compounds from petroleum by methylation/demethylation[J]. *Analytical Chemistry*, 2015, **87**(2): 1083–1088.
- [13] Li H D, Li S F, Wu J X, et al. Molecular characterization of aromatics in petroleum fractions by combining silica sulfuric acid sulfonation with electrospray ionization high-resolution mass spectrometry[J]. *Fuel*, 2022, **317**: 123463.
- [14] Zhou X B, Shi Q, Zhang Y H, et al. Analysis of saturated hydrocarbons by redox reaction with negative-ion electrospray Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry[J]. *Analytical Chemistry*, 2012, **84**(7): 3192–3199.
- [15] Zhang Y, Huang C, Kong F G, et al. Selective molecular characterization of olefins in hydrocarbon mixtures by Ag⁺ complexation ESI high-resolution mass spectrometry[J]. *Fuel*, 2022, **319**: 123760.
- [16] Li H D, Zhang Y H, Xu C M, et al. Quantitative molecular composition of heavy petroleum fractions: a case study of fluid catalytic cracking decant oil[J]. *Energy & Fuels*, 2020, **34**(5): 5307–5316.
- [17] Muller H, Adam F M, Panda S K, et al. Evaluation of quantitative sulfur speciation in gas oils by Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry: validation by comprehensive two-dimensional gas chromatography[J]. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2012, **23**(5): 806–815.
- [18] Dente M, Ranzi E, Goossens A G. Detailed prediction of olefin yields from hydrocarbon pyrolysis through a fundamental simulation model (SPYRO) [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1979, **3**(1/2/3/4): 61–75.
- [19] Ramage M P, Graziani K R, Schipper P H, et al. Kinpr (Mobil's Kinetic Reforming Model): A Review Of Mobil's Industrial Process Modeling Philosophy[M]//Wei J, Anderson J L, Bischoff K B, et al. *Advances in Chemical Engineering*. New York: Academic Press, 1987: 193–266.
- [20] Quann R J, Jaffe S B. Structure-oriented lumping: describing the chemistry of complex hydrocarbon mixtures[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1992, **31**(11): 2483–2497.
- [21] Quann R J, Jaffe S B. Building useful models of complex reaction systems in petroleum refining[J]. *Chemical Engineering Science*, 1996, **51**(10): 1615–1635.
- [22] Chen J C, Fang Z, Qiu T. Molecular reconstruction model based on structure oriented lumping and group contribution methods[J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2018, **26**(8): 1677–1683.
- [23] Tian L D, Shen B X, Liu J C. Building and application of delayed coking structure-oriented lumping model[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2012, **51**(10): 3923–3931.
- [24] Broadbelt L J, Stark S M, Klein M T. Computer generated pyrolysis modeling: on-the-fly generation of species, reactions, and rates[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1994, **33**(4): 790–799.
- [25] Wei W, Bennett C A, Tanaka R, et al. Computer aided kinetic modeling with KMT and KME[J]. *Fuel Processing Technology*, 2008, **89**(4): 350–363.
- [26] Zhou X, Hou Z, Wang J G, et al. Molecular-level kinetic model for C12 continuous catalytic reforming[J]. *Energy & Fuels*, 2018, **32**(6): 7078–7085.
- [27] Horton S R, Zhang L Z, Hou Z, et al. Molecular-level kinetic modeling of resid pyrolysis[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2015, **54**(16): 4226–4235.
- [28] PENG B. *Molecular modelling of petroleum processes*[D]. UK: University of Manchester, 1999.
- [29] WU Y. *Molecular management for refining operations*[D]. UK: University of Manchester, 2010.
- [30] Hudebine D, Verstraete J, Chapus T. Statistical reconstruction of gas oil cuts[J]. *Oil & Gas Science and Technology - Revue D'IFP Energies Nouvelles*, 2009, **66**(3): 461–477.
- [31] 陈政宇. 重油催化裂化/裂解过程分子级过程模型开发[D]. 北京: 中国石油大学(北京), 2023.
- Chen Z Y. *Molecular-level process model for heavy oil fluid catalytic cracking and catalytic pyrolysis*[D]. Beijing: China University of Petroleum (Beijing), 2023.
- [32] Feng S, Cui C, Li K Y, et al. Molecular composition modelling of petroleum fractions based on a hybrid structural unit and bond-electron matrix (SU-BEM) framework[J]. *Chemical Engineering Science*, 2019, **201**: 145–156.
- [33] Chen Z Y, Zhao X Y, Wu J, et al. Recent progress toward molecular-level kinetic model for complex hydrocarbon conversion processes[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2024, **487**: 150462.
- [34] Zhang T, Zhang L Z, Zhou Y S, et al. Transformation of nitrogen compounds in deasphalted oil hydrotreating: characterized by electrospray ionization Fourier transform-ion cyclotron resonance mass spectrometry[J]. *Energy & Fuels*, 2013, **27**(6): 2952–2959.
- [35] Orrego-Ruiz J A, Gomez-Escudero A, Rojas-Ruiz F A. Combination of negative electrospray ionization and positive atmospheric pressure photoionization Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry as a quantitative approach of acid species in crude oils[J]. *Energy & Fuels*, 2016, **30**(10): 8209–8215.
- [36] Zhang L Z, Xu Z M, Shi Q, et al. Molecular characterization of polar heteroatom species in Venezuela Orinoco petroleum vacuum residue and its supercritical fluid extraction subfractions[J]. *Energy & Fuels*, 2012, **26**(9): 5795–5803.
- [37] Li S F, Wu J X, Wang Y D, et al. Semi-quantitative analysis of molecular composition for petroleum fractions using electrospray ionization high-resolution mass spectrometry[J]. *Fuel*, 2023, **335**: 127049.
- [38] Li S F, Wu J X, Chen J Y, et al. Semiquantitative molecular characterization of crude oil[J]. *Energy & Fuels*, 2024, **38**(5): 3769–3783.
- [39] Wang Y F, Chen J Y, Wu J X, et al. PetroSulfur: a gas chromatography and mass spectrometry database of organic sulfur compounds in petroleum[J]. *Energy & Fuels*, 2024, **38**(19): 18431–18440.
- [40] 张霖宙, 陈政宇, 吕文进, 等. 石油加工分子管理平台构建[J]. *中国科学(化学)*, 2018, **48**(4): 411–426.
- Zhang L Z, Chen Z Y, Lyu W J, et al. Development of petroleum

- refining molecular management modeling platform[J]. SCIENTIA SINICA Chimica, 2018, **48**(4): 411–426.
- [41] Cai G Q, Liu Z F, Zhang L Z, et al. Systematic performance evaluation of gasoline molecules based on quantitative structure–property relationship models[J]. Chemical Engineering Science, 2021, **229**: 116077.
- [42] Cai G Q, Liu Z F, Zhang L Z, et al. Quantitative structure – property relationship model for hydrocarbon liquid viscosity prediction[J]. Energy & Fuels, 2018, **32**(3): 3290–3298.
- [43] Cui C, Billa T, Zhang L Z, et al. Molecular representation of the petroleum gasoline fraction[J]. Energy & Fuels, 2018, **32**(2): 1525–1533.
- [44] Guan D, Cai G Q, Zhang L Z. Dual-objective optimization for petroleum molecular reconstruction based on property and composition similarities[J]. AIChE Journal, 2023, **69**(8): e18108.
- [45] Chen Z Y, Wang G, Zhao S Q, et al. A molecular kinetic model for heavy gas oil catalytic pyrolysis to light olefins[J]. AIChE Journal, 2023, **69**(8): e18116.
- [46] Chen Z Y, Zhao X Y, Wu J, et al. A molecular-level kinetic model for high-efficient aromatic-enriched oil conversion *via* the catalytic cracking and hydrofining processes[J]. Chemical Engineering Journal, 2024, **500**: 157127.
- [47] Chen Z Y, Dang F L, Zhao X Y, et al. A molecular-level kinetic model for one-step catalytic conversion of crude oil to light olefins [J]. Chemical Engineering Science, 2025, **316**: 121971.
- [48] Chen Z Y, Guan D, Zhang X J, et al. A mass-temperature decoupled discretization strategy for large-scale molecular-level kinetic model[J]. Chemical Engineering Science, 2022, **249**: 117348.
- [49] Chen Z Y, Wang Y C, Li Y F, et al. Explicit molecule-based reaction network simplification: Theory and application on catalytic reforming[J]. Chemical Engineering Science, 2023, **277**: 118833.
- [50] Chen Z Y, Xie Y Q, Xu C M, et al. Scale-up of complex molecular reaction system by hybrid mechanistic modeling and deep transfer learning[J]. Nature Communications, 2025, **16**: 8905.
- [51] Chen Z Y, Feng S, Zhang L Z, et al. Molecular-level kinetic modelling of fluid catalytic cracking slurry oil hydrotreating[J]. Chemical Engineering Science, 2019, **195**: 619–630.
- [52] Xu D Y, Zhang X J, Chen Z Y, et al. Molecular-level kinetic model for light hydrocarbon steam cracking based on the SU-BEM framework[J]. ACS Omega, 2024, **9**(13): 14849–14859.
- [53] Wu J, Chen G X, Chen A Q, et al. Molecular-level modeling of naphtha continuous catalytic reforming process[J]. Chemical Engineering Science, 2025, **309**: 121430.
- [54] Guan D, Chen Z Y, Chen X, et al. Molecular-level heavy petroleum hydrotreating modeling and comparison with high-resolution mass spectrometry[J]. Fuel, 2021, **297**: 120792.
- [55] Chen Z Y, Feng S, Zhang L Z, et al. Molecular-level kinetic modeling of heavy oil fluid catalytic cracking process based on hybrid structural unit and bond-electron matrix[J]. AIChE Journal, 2021, **67**(1): e17027.
- [56] Chen Z Y, Yao X H, Guan D, et al. Vacuum residue coking process simulation using molecular-level kinetic model coupled with vapor-liquid phase separation[J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2022, **41**: 301–310.
- [57] 高照, 吴熙, 夏丹, 等. 石油加工分子管理平台热力学及分离单元模块开发[J]. 化工学报, 2025, **76**(7): 3212–3225.
- Gao Z, Wu X, Xia D, et al. Development of thermodynamics and separation unit modules of petroleum refining molecular management platform[J]. CIESC Journal, 2025, **76**(7): 3212–3225.
- [58] Chen Z Y, Wang G, Zhao S Q, et al. Prediction of molecular distribution and temperature profile of FCC process through molecular-level kinetic modeling[J]. Chemical Engineering Science, 2022, **264**: 118189.
- [59] Gao Z, Xu Z M, Zhao S Q, et al. Heavy petroleum supercritical fluid deasphalting process simulation based on the saturate, aromatic, resin, and asphaltene composition[J]. Energy & Fuels, 2022, **36**(16): 8818–8827.
- [60] 蔡广庆. 汽油分子性能预测及其应用 [D]. 北京: 中国石油大学(北京), 2022.
- Cai G Q. Gasoline Molecular Performance Prediction and its Application [D]. Beijing: China University of Petroleum (Beijing), 2022.
- [61] Guan Y M, Guan D, Zhang C, et al. Diesel molecular composition and blending modeling based on SU-BEM framework[J]. Petroleum Science, 2022, **19**(2): 839–847.
- [62] 封松. 石油分子层次组成及分离过程的模型构建[D]. 北京: 中国石油大学(北京), 2019.
- Feng S. Molecular modeling of composition and separation process of petroleum fractions[D]. Beijing: China University of Petroleum (Beijing), 2019.
- [63] Chen Z Y, Lyu W J, Wang R P, et al. A molecular kinetic model incorporating catalyst acidity for hydrocarbon catalytic cracking [J]. AIChE Journal, 2023, **69**(7): e18060.
- [64] Yang M, Zhang L Z, Wang G, et al. Fischer-Tropsch wax catalytic cracking for the production of low olefin and high octane number gasoline: Experiment and molecular level kinetic modeling study [J]. Fuel, 2021, **303**: 121226.
- [65] 赵翔宇, 徐东宇, 陈政宇, 等. 甲醇制烯烃反应-再生过程分子级模型构建及优化[J]. 化工进展, 2025, **44**(8): 4785–4794.
- Zhao X Y, Xu D Y, Chen Z Y, et al. Development and optimization of a molecular-level model for methanol-to-olefins (MTO) reaction-regeneration process[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2025, **44**(8): 4785–4794.