

# 基于结构导向集总的石油馏分分子重构模型

邱 彤, 陈金财, 方 舟

(清华大学 化学工程系, 北京 100084)

**摘 要:** 为了对石油馏分进行分子层面的研究, 从而实现炼油过程的分子管理, 该文在结构导向集总模型的基础上提出了一种新的石油馏分分子重构模型。首先, 模型选取了22个基本结构并对相关约束条件进行了设定。然后, 利用Monte Carlo方法随机生成1 000个虚拟分子。最后, 根据信息熵最大化原则调整虚拟分子含量。将此模型应用于石油馏分的分子重构, 各项性质的计算结果与实验标定数据的相对误差小于3%。

**关键词:** 结构导向集总; 石油馏分; 分子重构; Monte Carlo 模拟

中图分类号: TE 622

文献标志码: A

文章编号: 1000-0054(2016)04-0424-06

DOI: 10.16511/j.cnki.qhdxxb.2016.24.014

## Molecular reconstruction model for petroleum fractions based on structure oriented lumping

QIU Tong, CHEN Jincai, FANG Zhou

(Department of Chemical Engineering,  
Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract:** A molecular reconstruction method is given based on a structure oriented lumping model to predict petroleum fractions at the molecular level to achieve molecular management of refining processes. 22 basic structures were selected with relevant constraints. Then, 1 000 virtual molecules were constructed by the Monte Carlo method. Finally, the virtual molecules were adjusted according to the entropy maximization principle. The molecular reconstruction method predicts the petroleum fractions with relative errors between the properties and calibration data less than 3%.

**Key words:** structure oriented lumping; petroleum fraction; molecular reconstruction; Monte Carlo simulation

公众对环保问题的重视与新环保法的实施, 使燃油标准的提升成为必然趋势, 从而对炼油过程提出了开展分子水平精细化管理的要求。从分子水平认识石油馏分是建立分子尺度油品转化过程模型的前提, 也是实现炼油过程分子管理的基础。当前针对石油馏分的分子层次表征方法主要有以

下3种:

1) 同分异构分子重构模型(MTHS): 模型由Peng<sup>[1]</sup>在1999年提出, 将石油馏分按照碳数、结构特征(同分异构体)进行分类, 使用矩阵来表述各组分, 矩阵的行和列分别代表碳数和特征结构, 矩阵的每个元素视为一个虚拟组分。Gomez-Prado等<sup>[2]</sup>利用MTHS对重油馏分进行了分子重构, 模拟计算结果与实测值吻合较好。但该模型需要预先建立虚拟组分库, 如果组分选择不当, 将会对计算的精度产生很大影响。

2) 统计重构模型: 该模型利用特定属性或官能团(芳环数、侧链数、侧链长度、环烷环数等)区分石油馏分中的分子, 并利用概率密度函数表达组分分布。Hudebine等<sup>[3]</sup>对该模型进行了完善和扩展, 提出了最大熵值统计重构模型(REM), 利用虚拟组分的信息熵最大化原则, 使模拟混合物的微观特性也趋近所要表征的石油馏分。彭辉等<sup>[4]</sup>利用此方法对乙烯裂解原料进行分子重构, 产生的等效分子的常规物性计算值与标定值吻合较好。该模型考虑了宏观性质和微观特性, 也达到了不错的计算精度, 但不易表征含杂原子较多的石油馏分。

3) 结构导向集总模型(SOL): 该模型用向量来表示分子, 向量的元素代表了分子中结构的个数。这种方法是分子尺度上的集总, 这样利于降低模型的复杂性, 将体系中的分子由数以百万计减少到几千。虚拟分子不但包括烷烃、环烷烃和芳烃结构, 还包括作为中间产物或一次反应产物的烯烃及环烯烃, 同时考虑了含硫、氮等杂原子的化合物。

收稿日期: 2015-08-28

基金项目: 国家自然科学基金重点资助项目(U1462206)

作者简介: 邱彤(1971—), 女(汉), 河北, 副教授。

E-mail: qutong@mail.tsinghua.edu.cn

Ghosh 和 Jaffe<sup>[5-6]</sup>利用 SOL 模型估算了 203 种柴油的十六烷值和 1 471 种汽油的辛烷值,结果表明预测误差均小于 2%。该模型利用随机生成分子的形式,不需要预先建立分子库,同时基本结构中有若干杂原子结构,非常适用于含杂原子较多的石油馏分的表征。

本研究采用基于结构导向集总模型的方法,选取 22 个特征结构表征石油馏分,通过 Monte Carlo 模拟产生虚拟分子,同时借鉴统计重构模型中的信息熵值最大化思想,用优化的方法调整虚拟分子的含量,使得重构分子不仅在宏观性质上反映实际原料特性,在微观特性上也趋近所表征原料。

## 1 石油馏分宏观性质

石油馏分种类很多,此处选取减压蜡油(VGO)进行表征。表 1 为 2 种减压蜡油的宏观性质,其中各元素、残炭和族组成的百分数均指质量分数。

表 1 本文 2 种减压蜡油的性质

石油馏分	密度 $\rho^{20}$	运动粘度 $\nu^{80}$	平均	残炭质量分数	元素组成及其质量分数/%				族组成及其质量分数/%		
	$\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	分子量 $M$	%	C	H	S	N	链烃	环烷烃	芳烃
大连 VGO	0.922 6	22.98	407.1	0.30	86.91	12.33	0.54	0.17	9.9	47.1	43.0
苏丹 VGO	0.926 1	15.21	346.0	0.04	86.93	12.37	0.26	0.19	12.7	48.6	38.7

表 2 虚拟分子的结构向量

原子种类	A6	A4	A2	N6	N5	N4	N3	N2	N1	R	br	me	IH	AA	NS	RS	AN	NN	RN	NO	RO	KO
C	6	4	2	6	5	4	3	2	1	1	0	0	0	0	-1	0	-1	-1	0	-1	0	0
H	6	2	0	12	10	6	4	2	1	2	0	0	2	-2	-2	0	-1	-1	1	-2	0	0
S	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0
N	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0
O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1

### 2.1.1 芳环结构

**A6:** 表示芳环的主要成环结构,可以单独存在,当其他分量为 0 时代表一个单体苯。

**A4:** 表示含 4 个碳的芳环,不能单独存在,只能连接在 **A6** 或另一个 **A4** 结构上。

**A2:** 表示含 2 个碳的芳环,不能单独存在,只能依附于 **A6** 和 **A4**,用来连接相邻的缩合芳环,是形成稠环芳烃的主要部分。

### 2.1.2 脂环结构

**N6** 和 **N5:** 脂环的主要成环结构,可以单独存在,当其他分量为 0 时分别代表环己烷和环戊烷。

## 2 结构导向集总模型的建立

结构导向集总方法构建虚拟分子的核心是选用一些结构来表达分子中的关键模块,然后使用这些结构拼装分子。构建的分子用向量表示,向量的分量是各个特征结构的数量。Jaffe<sup>[7]</sup>认为,这样模拟得到的虚拟分子有可能在真实的原料油中并不存在,但是大量虚拟分子的宏观性质表现出与真实原料的高度相似性,证明这种方法是正确可行的。

### 2.1 虚拟分子结构的选择

VGO 中除了碳、氢这 2 种主要元素外,还含硫、氮、氧等杂原子和重金属。根据表 1 中的标定数据,可以对问题进行适当的简化,只考虑碳、氢、硫、氮和氧这 5 种元素。最终选取包含以上 5 种元素的 22 个结构表达虚拟分子<sup>[7]</sup>,各结构的表示符号以及结构中各个原子的计量个数表 2 所示。

**N4、N3、N2、N1:** 分别表示含 4、3、2、1 个碳的脂环,不能单独存在,在分子结构中连接在芳环或者脂环上的附属脂环。

### 2.1.3 烷基结构

**R:** 表示除芳环和脂环之外的烷基总碳数。

**br:** 表示烷基侧链的个数。

**me:** 表示直接连在环结构上的甲基数目,但 **R**=1 时, **me**=0。

### 2.1.4 辅助结构

**IH:** 表示不饱和度(芳环除外),每增加一单位 **IH**,分子中减少 2 个氢。无脂环时, **IH** 为 1 代表链

烷烃, **IH** 为 0 代表单烯, **IH** 为 -1 代表双烯; 有脂环时, **IH** 为 0 代表脂环, **IH** 为 -1 代表环烯。

**AA**: **A6**、**N6** 和 **N5** 之间的桥键。

### 2.1.5 杂原子结构

**NS**、**NN**、**NO**: 表示脂环或烷烃上的硫、氮和氧原子。

**RS**、**RN**、**RO**: 表示碳氢原子间的硫、氮和氧原子。

**AN**: 表示芳环上的氮原子。

**KO**: 表示羰基或醛基上的氧原子。

## 2.2 各结构存在条件、约束条件以及取值范围的规定

从上述结构描述中可以看出, 并不是所有结构向量都能表示有意义的分子, 各结构的数量需要符合一定的条件, 结合相关资料<sup>[8-9]</sup>中对 VGO 性质的描述, 本文作如下规定:

**A6**: 最小值为 0, 最大值为 3。

**A4**: 当  $A6 \geq 1$  时存在, 最小值为 0, 最大值为 3。

**A2**: 当  $A4 \geq 2$  时存在, 最小值为 0, 最大值为  $A4 - 1$ 。

同时, 还规定  $A6 + A4 + A2 \leq 5$ , 即分子中芳环总数不大于 5。

**N6**、**N5**: 最小值均为 0, 最大值均为 3。

**N4**: 当  $A6 + N6 \geq 1$  时存在, 最小值为 0, 最大值为 3。

**N3**: 当  $A6 + N6 + N5 \geq 1$  时存在, 最小值为 0, 最大值为 3。

**N2**: 当  $A4 + N4 + N3 \geq 1$  时存在, 最小值为 0, 最大值为  $A4 + N4 + N3$ 。

**N1**: 当  $A4 + N4 + N3 \geq 2$  时存在, 最小值为 0, 最大值为  $A4 + N4 + N3 - 1$ 。

同时, 还规定  $N6 + N5 \leq 3$ , 即分子中单独的五六元环总数不大于 3;  $N6 + N5 + N4 + N3 + N2 + N1 \leq 8$ , 即分子中脂环总数不大于 8。

**R**: 当  $A6 + N6 + N5 = 0$  (无环结构) 时, 最小值为 6, 最大值为 40; 当  $A6 + N6 + N5 > 0$  (有环结构) 且环结构碳数  $\geq 40$  时,  $R = 0$ ; 当  $A6 + N6 + N5 > 0$  (有环结构) 且环结构碳数  $< 40$  时, 最小值为 6, 最大值为  $40 - \text{环结构碳数}$ 。

**br**: 当  $R \leq 3$  时,  $br = 0$ ; 当  $R = 4$  时, 最小值为 0, 最大值为 1; 当  $R > 4$  时, 最小值为 0, 最大值为  $R - 4$  和 4 中的小值, 即  $\min(R - 4, 4)$ 。

**me**: 当  $A6 + N6 + N5 > 0$  时存在。当  $R \leq 1$  时,  $me = 0$ ; 当  $R = 2$  时, 最小值为 0, 最大值为 1; 当  $R = 3$  时, 最小值为 0, 最大值为 2; 当  $R \geq 4$  时, 若  $br = 0$  则最小值为 0, 最大值为  $\min(R - 1, 4)$ , 若  $br \geq 1$  则最小值为 0, 最大值为  $\min(R - br - 3, 4)$ 。

**IH**: 当  $A6 + N6 + N5 > 0$  时为 0; 当  $A6 + N6 + N5 = 0$  时为 1。

**AA**: 当  $A6 + N6 + N5 \geq 2$  (有 2 个以上独立的环结构) 时存在,  $AA = A6 + N6 + N5 - 1$ 。

**NS**、**NN**: 当  $A6 \geq 2$  时存在, 最小值均为 0, 最大值为  $\min(A6 - 1, AA)$ 。

**RS**、**RN**: 最小值为 0, 最大值为 3。

**AN**: 当  $A6 \geq 1$  时存在, 最小值为 0, 最大值为  $A6 + A4 + A2$ 。

**NO**、**RO**、**KO**: 最小值均为 0, 最大值均为 1。

同时, 还规定单个分子中硫、氮、氧原子不同时出现, 且除羧酸外, 杂原子总数不大于 1。

各结构的相关规定是以实际原料为依据进行的, 可以根据实际情况进行相应调整。

## 2.3 虚拟分子 Monte Carlo 抽样

一般认为在 22 个基本结构中, 除 **IH** 和 **AA** 这 2 个辅助结构外, 其余 20 个结构在每个分子中的数量均服从  $\chi^2$  分布且相互独立。 $\chi^2$  分布的概率密度函数为:

$$p(x) = \frac{(x - x_{\min})^{\frac{r}{2}-1} \cdot e^{-\frac{x-x_{\min}}{2}}}{\Gamma\left(\frac{r}{2}\right) \cdot 2^{\frac{r}{2}}}; \quad r = \mu = \frac{\sigma^2}{2}. \quad (1)$$

其中  $\Gamma(\alpha)$  为 Gamma 函数, 即

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} t^{\alpha-1} e^{-t} dt. \quad (2)$$

令式(3)成立, 有

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{(x - x_{\min})^{\frac{r}{2}-1} \cdot e^{-\frac{x-x_{\min}}{2}}}{\Gamma\left(\frac{r}{2}\right) \cdot 2^{\frac{r}{2}}} dx = Q. \quad (3)$$

则可以对每个分子中各个结构的数量进行抽样, 抽样公式如式(4)所示, 即

$$\int_{x_{\min}}^x \frac{(x - x_{\min})^{\frac{r}{2}-1} \cdot e^{-\frac{x-x_{\min}}{2}}}{\Gamma\left(\frac{r}{2}\right) \cdot 2^{\frac{r}{2}}} dx = RN. \quad (4)$$

其中:  $x$  为每次抽样得到的样本值;  $x_{\min}$ 、 $x_{\max}$  分别为结构数量的最小值、最大值;  $r$  为  $x$  的数学期望;  $\mu$  为  $\chi^2$  分布的自由度;  $RN$  是随机数, 服从  $[0, Q]$  内的均匀分布。

为了确保得到的抽样值在设定的最大值和最小值之间,每个分子中各结构数量的具体抽取方法如下:首先给定各结构所服从的 $\chi^2$ 分布的参数(自由度);然后根据式(3)计算出各结构数量最大值和最小值的分布函数值之差 $Q$ ;最后随机抽取 $RN$ ,根据式(4)进行逆 $\chi^2$ 分布计算得到抽样值 $x$ 。上述过程每循环一次即可得到一个结构的数量,用22个结构的数量便可表示一个虚拟分子,如此循环抽样 $N$ 次则生成 $N$ 个虚拟分子。

由于实际生产中往往难以得到VGO的所有性质,因此对比性质应从可获得的标定数据中选择,如选取以下8项:C、H、S、N的质量分数,芳烃、环烃、链烃的质量分数以及平均分子量。

抽样得到若干虚拟分子之后,由于已知每个分子的结构特性,因此可以计算出每个分子的上述性质,从而得到全部虚拟分子的混合性质。相关性质计算值与标定值的相对偏差平方和为:

$$y = \sum_{i=1}^4 \left( \frac{\text{ELE}_{i,\text{cal}} - \text{ELE}_{i,\text{exp}}}{\text{ELE}_{i,\text{exp}}} \right)^2 + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\text{PIONA}_{i,\text{cal}} - \text{PIONA}_{i,\text{exp}}}{\text{PIONA}_{i,\text{exp}}} \right)^2 + \left( \frac{M_{\text{cal}} - M_{\text{exp}}}{M_{\text{exp}}} \right)^2. \quad (5)$$

其中:脚标cal和exp分别表示计算值和标定值;ELE表示元素(C、H、S、N)的质量分数;PIONA表示各族组成(链烃、环烃、芳烃)的质量分数; $M$ 表示平均分子量。因为是初步估算分子结构以及组成,可通过优化 $r$ 使 $y$ 小于阈值 $\delta$ ,从而得到大致能表现实际原料宏观特性的虚拟分子。优化方法采用模拟退火法,基于Matlab编程实现,最终得到各结构对应的 $r$ 值见表3和表4。

表3 优化得到的结构分布参数(大连VGO)

结构	$r$	结构	$r$
A6	0.8503	br	1.3242
A4	0.8588	me	1.3296
A2	0.8506	NS	0.1826
N6	1.2117	RS	0.1858
N5	1.2075	AN	0.1100
N4	1.2118	NN	0.1052
N3	1.2136	RN	0.1041
N2	1.2167	NO	0.1319
N1	1.2083	RO	0.1310
R	16.7010	KO	0.1296

表4 优化得到的结构分布参数(苏丹VGO)

结构	$r$	结构	$r$
A6	0.7196	br	1.2098
A4	0.7201	me	1.3296
A2	0.7203	NS	0.0835
N6	1.1158	RS	0.0845
N5	1.1162	AN	0.1136
N4	1.1200	NN	0.1141
N3	1.1150	RN	0.1140
N2	1.1157	NO	0.1202
N1	1.1161	RO	0.1189
R	13.2000	KO	0.1222

### 3 基于信息熵理论的分子含量调整

1948年,Claude Shannon<sup>[10]</sup>把熵的概念引入到信息论里,称为信息熵。信息熵是对不确定性的测量,通常用来表示系统的不确定度,在信息熵最大的时候随机变量的不确定性也越大,即更符合随机的情况。信息熵可用式(6)来表达,即

$$S(z) = - \sum_{i=1}^N z_i \ln z_i. \quad (6)$$

其中: $S$ 表示信息熵; $z_i \geq 0$ , ( $i = 1, 2, \dots, N$ ),  $\sum_{i=1}^N z_i = 1$ 。

在2.3节所提出的构造虚拟分子体系来表征原料油的模型中,虚拟分子是按照等摩尔处理的。根据信息熵最大化原理,最合理的分子组成,应使得信息熵最大。基于此,可在上节结果的基础上进一步优化,调整分子量。将预测的石油烃的分子组成 $z_i$ 的信息熵作为目标函数,宏观性质计算值与标定值偏差平方和小于阈值 $\sigma_j$ 作为约束条件,即

$$\max S(z) = - \sum_{i=1}^N z_i \ln z_i;$$

$$\text{s. t. } \left( f_j - \sum_{i=1}^N f_{i,j} z_i \right)^2 \leq \sigma_j, j = 1, \dots, J. \quad (7)$$

其中: $S(z)$ 表示熵值; $z_i$ 表示分子摩尔分数,  $0 \leq z_i \leq 1$  ( $i = 1, \dots, N$ ),  $\sum_{i=1}^N z_i = 1$ ;  $f_j$ 表示可以获得的各常规物性数据,如元素质量分数、族组成质量分数等, $j$ 表示对比的性质数量。 $\sum_{i=1}^N f_{i,j} z_i$ 表示通过重构产生的分子组成的总物性,而 $\sigma_j$ 为预测物性的允许误差。相较于阈值 $\delta$ ,阈值 $\sigma_j$ 要求各项性质计算值与标定值偏差更小。约束条件一般根据可获得的原料物性数据来决定。本文中使用的约束项如式(8)~式(10)所示,即

$$\left( E - \sum_{i=1}^N E_i z_i \right)^2 \leq \sigma_1, \quad E \in (C, H, S, N). \quad (8)$$

$$\left( L - \frac{\sum_{i \in L} M_i z_i}{\sum_{i=1}^n M_i z_i} \right)^2 \leq \sigma_2, \quad L \in (P, N, A). \quad (9)$$

$$\left( M - \sum_{i=1}^N M_i z_i \right)^2 \leq \sigma_3. \quad (10)$$

其中:  $E$ 、 $L$  和  $M$  分别表示实际原料油的元素组成质量分数、结构族组成质量分数和平均分子量;  $E_i$  和  $M_i$  分别表示虚拟分子的元素质量分数和分子量。

这个优化问题是有约束非线性规划问题, 可使用罚函数法将该有约束问题转化为无约束问题来处理, 将约束条件加到目标函数中, 新的目标函数如式(11)所示, 即

$$F(z, c) = -S(z) + c \cdot g(z),$$

$$g(z) = \sum_{j=1}^J \left( f_j - \sum_{i=1}^N f_{i,j} z_i - \sigma_j \right)^2. \quad (11)$$

其中  $c$  为惩罚因子。此步优化仍然选取模拟退火法, 利用 Matlab 编程实现。基于信息熵理论的分子组成求解方法的框图如图 1, 调整分子量后得到的原料的标定值与计算值的对比见表 5 和表 6。从表 5 和表 6 可以看出得到了很好的计算结果。

至于抽取的分子数, 由于样本量过小会影响模拟结果的准确性, 而样本量过大会使程序运行的时间大大增加, 因此需要进行综合考虑。现有研究<sup>[11-13]</sup>模拟的分子数基本在 1 000~5 000 个。

本研究分别在相同精度下模拟了 1 000、2 000 和 5 000 个分子, 结果显示, 随着分子数的增加, 程序运行时间成倍增加, 从几小时上升至几天。当虚拟分子数为 1 000 时, 模拟得到的结果精度与程序运行时间可以得到较好的平衡。本文所列出的结果均为虚拟分子数为 1 000 时的运算结果。

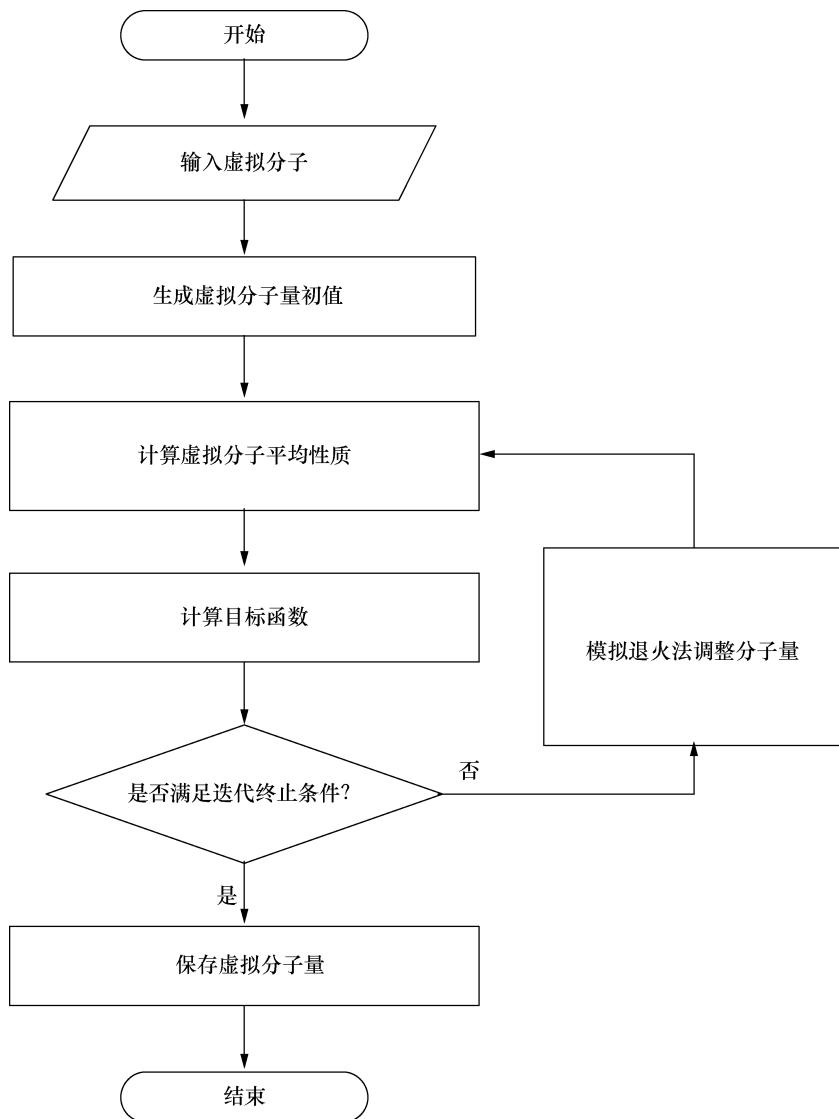


图 1 基于信息熵理论的分子组成求解框图



表 5 标定值和计算值的对比(大连 VGO)

结果	平均分子量 $M$	元素组成及其质量分数/%				族组成及其质量分数/%		
		C	H	S	N	链烃	环烷烃	芳烃
标定值	407.10	86.91	12.33	0.54	0.17	9.90	47.10	43.00
计算值	403.03	86.68	12.30	0.54	0.17	9.97	47.91	42.12
相对误差/%	-1.01	-0.27	-0.24	0	0	0.70	1.69	-2.09

表 6 标定值和计算值的对比(苏丹 VGO)

结果	平均分子量 $M$	元素组成及其质量分数/%				族组成及其质量分数/%		
		C	H	S	N	链烃	环烷烃	芳烃
标定值	346	86.93	12.37	0.26	0.19	12.7	48.6	38.7
计算值	348.74	86.79	12.43	0.26	0.19	12.35	49.01	38.64
相对误差/%	0.79	-0.16	0.49	0	0	-2.76	0.82	-0.16

## 4 结 论

本文借鉴结构导向集总模型中对分子的表示方法,选取了包含杂原子硫、氮和氧的 22 个基本结构,使得分子的元素构成更加符合实际。同时使用 Monte Carlo 方法随机抽取虚拟分子,并利用信息熵最大化原则对各虚拟分子的质量分数进行了调整,使得模拟得到的分子不但在宏观性质上与原料很好地吻合,在微观特性上也趋于实际原料。计算值与标定值的相对误差不超过 3%,说明此方法对于复杂反应体系的原料重构是可行的。

另外,本文通过优化分布参数和调整分子量,对 2 套不同的石油馏分进行了分子重构。计算得到的平均性质均能和标定数据很好地拟合,说明此方法能够广泛地适用于重构各种不同性质的复杂馏分原料。

## 参考文献 (References)

- [1] PENG Bin. Molecular Modeling of Petroleum Processes [D]. Manchester, UK: Institute of Science and Technology of the University of Manchester, 1999.
- [2] Gomez-Prado J, ZHANG Nan, Theodoropoulos C. Characterization of heavy petroleum fractions using modified molecular-type homologous series (MTHS) representation [J]. *Energy*, 2008, **33**(6): 974-987.
- [3] Hudebine D, Verstraete J J. Molecular reconstruction of LCO gasoils from overall petroleum analyses [J]. *Chemical Engineering Science*, 2004, **59**P(22-23): 4755-4763.
- [4] 彭辉,张磊,邱彤,等. 乙烯裂解原料等效分子组成的预测方法 [J]. 化工学报, 2011(12): 3447-3451.  
PENG Hui, ZHANG Lei, QIU Tong, et al. Method of predicting equimolecular mixture of ethylene cracking feedstock [J]. *CIESC Journal*, 2011(12): 3447-3451. (in Chinese)
- [5] Ghosh P, Hickey K J, Jaffe S B. Development of a detailed gasoline composition-based octane model [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2006, **45**(1): 337-345.
- [6] Ghosh P. Predicting the effect of cetane improvers on diesel fuels [J]. *Energy & Fuels*, 2008, **22**(2): 1073-1079.
- [7] 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.
- [8] 韩崇仁. 加氢裂化工艺与工程 [M]. 第一版. 北京: 中国石化出版社, 2006.  
HAN Chongren. The Craft and Engineering of Hydrocracking [M]. 1st Ed. Beijing: China Petrochemical Press, 2006.
- [9] 方向晨. 加氢裂化 [M]. 第一版. 北京: 中国石化出版社, 2012.  
FANG Xiangchen. Hydrocracking [M]. 1st Ed. Beijing: China Petrochemical Press, 2012.
- [10] Shannon C E. A mathematical theory of communication [J]. *Bell System Technical Journal*, 1948, **27**(3): 379-423.