田立达, 沈本贤, 刘纪昌. 一种基于结构导向集总的延迟焦化动力学模型[J]. 石化技术与应用, 2012, 30(4):285-293.

摘要：采用22个新结构向量描述渣油分子,构建了7 004种渣油分子集总,结合模拟退火算法提出了一种模拟计算渣油分子组成的方法.制定了92条反应规则用以描述渣油延迟焦化的分子反应行为.在对工业化延 迟焦化工艺进行一定程度简化和假设的基础上,建立了一个用以预测延迟焦化产物分布的结构导向集总模型.比对模型预测结果与小试试验结果发现,用建立的模型 预测不同原料在不同工艺条件下的延迟焦化产物分布可靠性较好.模型计算结果表明,焦化温度上升10℃,液体收率平均提高2.5个百分点,相当于原料 n(H)/n(C)提高0.15;循环比下降0.15,液体收率平均提高3.5个百分点,相当于原料残炭值下降5个百分点；反应压力下降0.03 MPa,液体收率平均提高0.6个百分点.

假设条件

1. 渣油分子组成采用模拟方法（因为分析困难）
2. 忽略侧链碳数，渣油分子由92种单核种子分子和46种多核种子分子组成。
3. 在每种种子分子上添加0~50个侧链亚甲基（排除一些不现实的集总分子）
4. 分子总数7004，任何渣油均由这7004种分子组成。
5. 制定92条反应规则
6. 反应速率常数基于过渡态假设
7. 延迟焦化过程采用多个间歇串联组成
8. 各流股分子组成分布均匀

方法

1. 分子集总含量根据密度、馏程等宏观性质采用模拟退火算法优化。

要点详解

1. 传统集总方法依据分子的性质归类集总。结构导向集总依据相同分子片段划分

总结

1. 构建反应动力学模型的步骤

1.1 根据结构分子片段描述分子组成，包括反应物分子和生成物分子。