油气资源分子工程与分子管理的核心技术与主要应用进展

吴青*

中国海洋石油集团有限公司科技发展部, 北京 100010

*通讯作者, E-mail: wuqing@cnooc.com.cn

收稿日期: 2019-09-24; 接受日期: 2020-01-02; 网络版发表日期: 2020-01-21

摘要 石油与天然气资源极其宝贵, 如何使油气资源价值最大化是炼油化工行业发展的最高目标. 本文综述了油气资源分子工程与分子管理的概念及相应的技术架构与体系, 并按照所提出的理念, 总结了在开展、指导智能炼化建设, 分子级先进计划管理系统, 产品质量与产品结构转型升级等新催化剂、新工艺的开发与应用方面的研究进展.

关键词 油气资源, 分子工程, 分子管理, 资源价值最大化, 应用与进展

1 基本概念与技术构架

我国油气加工工业通过几十年的发展, 已在产业布局、催化剂与加工工艺等方面取得了长足的进步, 特别是近年来随着分析表征、数字化等技术的快速发展, 使得“分子炼油”、“石油组学”、“油气资源分子工程与分子管理”等概念已渐获广大炼油化工行业的科研、生产、管理人员所接受和普遍关注, 但学术界、企业界对这些说法、名称、概念的真实内涵了解、理解得并不很清晰, 影响了技术的发展和应用^[1-4].

自1956年von Hippel^[5]提出分子工程概念以来, 分子工程概念在很多研究或学科建设中被采纳, 其内涵也在不断变化和发展中^[6-9]. 其中, 石油组学^[10-12]是指通过石油分子表征技术, 研究石油分子组成与其物理、化学反应性能之间相互关系的技术, 其最基础、核心和关键的技术是可用于石油特别是重油组成与结

构分析的仪器分析表征技术.

“分子炼油”的说法通俗易懂, 最早由何鸣元、白春礼提出, 但他们并没有对分子炼油这一概念做出清晰、明确的定义^[1]. 徐春明等提出了“分子组合与转化”(MCC)概念, 认为MCC是“石油组学”在炼油和化工领域的具体实践, 是实现“分子炼油”的技术途径, 且认为相对“石油组学”“分子炼油”两个概念, MCC概念更侧重技术层面, 但不单纯是一项技术, 而是解决方案, 即从分子水平实现炼化增效的组合技术方案^[1].

徐春明等^[13,14]对石油炼化分子管理技术的概念和理论基础进行了阐述. 吴青等^[15-18]综合分析了各学科对分子工程以及石油组学、分子炼油包括MCC等相关概念、定义, 结合石油炼制与相关领域有关技术的进展及其从业实践与经验体会, 提出了油气资源分子工程与分子管理的明确定义与概念, 并据此建立了相应的技术构架, 而其主要的核心技术则包括三大方面:

引用格式: Wu Q. Core techniques of the molecular engineering and molecular management of petroleum resources and its application. *Sci Sin Chim*, 2020, 50: 173-182, doi: 10.1360/SSC-2019-0121

“分子信息获取技术”、“分子信息加工技术”和“分子信息应用技术”。

2 核心技术进展

2.1 分子信息获取技术进展

油气资源分子信息的获取技术包括两个方面: 油气资源的分子表征技术和分子重构技术。

2.1.1 分子表征技术及其进展

本文所说的分子表征技术是指采用仪器分析方法对油气资源进行组成、结构等的分析化验技术。得益于油气加工催化剂、工艺、设备以及分析表征技术的进步, 现在不仅可以科学地加工和利用石油, 对油气资源的认知水平和程度也达到了前所未有的高度和深度。现在, 油气分析表征技术已经从最初对石油较为朴素的感性认识, 发展到目前“系统严谨、层次清晰”的交叉学科^[19-21], 并向分子水平表征加速发展中^[22]。

石油分析包括单体烃化合物分析和分子组成分析两个层面。目前的技术水平, 天然气、炼厂气、汽油等较轻的产品采用气相色谱或质谱就可以较为方便地获得单体化合物的分析数据。分子组成分析通常是指对馏分油包括其杂原子化合物进行组成的分析。从广义角度来讲, 分子组成分析包括元素组成及分子结构分析。其对仪器分析表征技术要求高, 所得信息十分复杂和丰富。可以采用的仪器分析方法大致包括: 电化学分析法、原子吸收光谱法、红外光谱法、紫外-可见光谱法、核磁共振波谱法、质谱分析法、气相色谱法、高效液相色谱法等。每一类仪器及其组合(集成)后对石油进行组成、结构的分析均有大量的报道, 图1为分离与仪器分析技术在石油组成研究中的应用示意图。

采用气相色谱在线分离、高分辨飞行时间质谱相结合, 能同时得到柴油的烃类化合物和含硫、含氮化合物类型分布和碳数分布。重油馏分的分子水平表征技术可以通过石油样品预处理技术, 采取高分辨率分析仪器与高选择性的检测器优化组合并辅以分子识别、定量分析数据处理技术后方能实现。例如, 蜡油馏分采用固相萃取技术分为饱和烃和芳烃组分后, 可鉴定出饱和烃和芳烃的化合物类型按照沸点和碳数分布的分子信息, 并可对芳烃组分中菲、芘等常见多环芳

烃及其取代产物进行定性分析^[23]。图2是蜡油中含硫化物按照碳数分布的结果。Mahé等^[24]通过样品预处理技术结合核磁共振自动分析方法对蜡油结构族组成也进行了详细的分析。

对于渣油馏分, 则通常需要先采取预分离, 然后分析其部分烃类和含杂原子化合物类型和碳数分布。对于全馏分的原油, 也需要通过适当的前处理或选择性电离, 对石油中大量存在且容易识别的烃类(正构烷

图1 分离与仪器分析技术在石油组成研究中的应用示意图(SARA: 饱和烃、芳烃、胶质和沥青质; GC: 气相色谱; MS: 质谱; FPD: 火焰光度检测器; ICP: 等离子谱; GC×GC TOF-MS: 全二维气相色谱-飞行时间质谱; FT-ICR-MS: 傅里叶变换-电子回旋质谱; LC: 液相色谱; MALDI: 基质辅助激光解吸电离)(网络版彩图)

Figure 1 Separation and instrumental analysis techniques used for molecular composition analysis of petroleum fractions (SARA: saturate, aromatic, resin, asphaltene; GC: gas chromatography; MS: mass spectrometry; FPD: flame photometric detector; ICP: inductive coupled plasma; GC×GC TOFMS: comprehensive two-dimensional gas chromatography/time-of-flight mass spectrometry; FT-ICRMS: Fourier transform-ion cyclotron resonance-mass spectrometry; LC: Liquid Chromatography; MALDI: matrix assisted laser desorption/ionization) (color online).

图2 蜡油中含硫化物的碳数分布(网络版彩图)

Figure 2 Carbon number distribution of sulfur compounds in VGO (color online).

烃、芳烃等)、非烃类(硫化物、氮化物、氧化物等)进行分子鉴别. 对生物标记物和烃指纹化合物进行分子鉴别, 以适应地球化学、石油成因、石油勘探开发、溢油应急、石油炼制过程研究与生产目的.

2.1.2 分子重构技术及其进展

虽然采用合适的预处理技术并结合多种仪器分析方法, 如全二维气相色谱-质谱、气相色谱飞行时间质谱以及傅里叶变换离子回旋共振质谱等, 可以得到各种烃类和非烃类化合物详细的分子组成信息^[25]. 但是, 即使目前最先进的分析技术也依然存在许多问题, 如高分辨质谱通过精确的质量解析能确定石油分子的分子式, 得到不同分子缺氢数以及总碳数的分布, 但其仍难以准确解析分子的具体结构, 不能有效区分各类同分异构体, 并且石油的分子组成依然很难实现准确定量^[26]. 为了解决石油分子组成有效模拟的问题, 基于计算机模拟技术的组成模拟方法——分子重构法诞生了, 并在石油分子组成的研究中发挥了越来越重要的作用.

分子重构法是基于“结构决定性质”这一化学学科中的普遍适用规则, 从石油的一些有限的常规分析数据出发, 利用各种数学工具经过模拟计算得到一套等效的虚拟分子来表示石油的分子组成. 为了准确模拟石油分子的组成, 如何选定合适方法来表示石油中大量组成复杂的分子尤其是重油分子非常重要, 此外, 如何准确地计算各石油分子的物理性质、选取合理的混合规则以确定石油各项宏观平均物理性质以及如何对石油的分子组成进行合理和准确的定量计算, 实现从物理性质到分子组成的转变, 是分子重构必须考虑的重点. 陈俊武、田松柏等^[27-29]据此提出了表征因子, 对蜡油、渣油的族组成、结构族组成进行了关联公式的开发.

目前, 分子重构方法主要包括分子同系物矩阵(MTHS)法、结构导向集总(SOL)法、数学统计法(包括随机重构(SR)法、概率密度函数(PDF)和蒙特卡洛(Monte Carlo)模拟法或统计模拟法、随机抽样技术以及随机模拟法或统计实验法等)、熵最大化分子重构法(REM)等^[16].

上述几种分子重构法各有特点和侧重, 故合理组合可能更好, 如将SOL结构基团进行抽样并重构的SOL-SR法、将SR法和REM法相结合的SR-REM两步

法以及将SR法中PDF的思想引入MTHS矩阵的分子组成计算法等, 都能进一步提高分子重构的准确性和实用性.

如果分子组成的构建是基于分子组成的性质预测模型而获得的, 则必须注意性质预测模型的准确性问题. 此外, 分子重构不仅是完善分子信息, 也需要根据计算能力的情况, 在反映分子组成、结构信息的完整性与简化之间寻求平衡.

2.2 分子信息库、化学反应规则库

石油及其馏分的分子组成从根本上决定了其化学和物理性质及反应性能, 其分子信息、物理性质估算与组成结构关联信息以及反应性与转化规律等信息, 辅以数字化、计算机信息化技术, 就可以发挥巨大作用. 但必须对石油及其馏分的分子信息进行处理以便被计算机所识别、应用. 将石油分子信息按照一定规则进行命名、编码、与物理性质以及热力学数据等关联即为建设石油分子信息库. 此时, 再与化学反应规则库、分子动力学库或一些算法库等结合, 从而构成油气资源分子水平加工与优化的综合集成信息化平台. 因此, 分子信息库是油气资源分子工程与分子管理的基础与核心.

采用数据库技术对石油分子信息进行管理是目前最有效的方式, 所形成的石油分子信息库包含了石油及其馏分的化合物(分子)信息, 如名称、分子结构、分子物理性质等. 受仪器分析技术、纯化合物实验数据等的限制, 不可能获得石油及其馏分的所有化合物的基础物理性质. 因此, 石油分子信息库也提供分子重构以及预测的物理性质数据.

为方便使用, 除了要高效地体现分子信息之间的对应关系外, 分子信息数据库与配套使用的其他系统如化学反应库等之间, 其相关的接口程序应方便数据的批量提取、修改及动态展示、可视等.

图3为分子信息库的顶层设计示意图, 图4为分子信息库的主要模块示意图.

石油炼制过程主要化学反应与反应机理名称汇总^[16]见表1, 图5为化学反应规则的分类与分级示意图^[30].

2.3 分子动力学建模与计算

由于石油炼制过程的原料组成和反应网络极为复

图 3 分子信息库的顶层设计(网络版彩图)
Figure 3 Top-level design of molecular information database (color online).

杂, 建立反应动力学模型来指导炼厂流程优化, 降低加工能耗, 增加高附加值产品收率, 一直是石油炼制领域的研究热点, 而这也是石油分子工程转向应用环节的关键, 是实现智能炼化建设“模型化、可视化”的核心基础. 实现分子水平模拟可以采用以下两种技术: (1) 借助于化学分析表征技术的发展, 直接或至少间接地表征复杂原料中分子的组成与结构; (2) 依托信息技术的发展和计算机性能的提高, 在反应和分离过程中追踪分子层面的变化. 因此, 建模策略、分析表征手段、分子重构和计算机技术的发展共同促进了复杂过

图 4 石油分子信息库的主要模块示意图(网络版彩图)
Figure 4 The main module of the petroleum molecular information database (color online).

程分子水平反应动力学的模拟与应用. 不同建模层次的石油加工过程反应动力学模型如表2所示. 在集总反应动力学模型中, 所有的原料、反应网络、产品都以馏分集总为基础, 缺少基本动力学信息, 因此预测能力有一定的局限性. 而建立分子水平的反应动力学模型需要提供反应路径和反应机理方面的化学信息. 反应路径层面的模型包括大多数可明确观察

表 1 石油炼制过程主要化学反应与反应机理名称汇总表
Table 1 List of major chemical reactions and mechanisms in petroleum refining process

反应路径名称	反应机理名称
异构化反应(isomerization)	键断裂(bond fission)
环化反应(cyclization)	自由基夺氢(radical hydrogen abstraction)
氢解反应(hydrogenolysis)	自由基 β -位断链(radical β -scission)
裂化反应(cracking)	自由基加成(radical addition)
双键转移反应(double bond shift)	自由基终止(radical termination)
加氢反应(hydrogenation)	离子异构化(ionic isomerization)
加氢脱硫反应(hydrodesulfurization)	离子型氢化物转移(ionic hydride shift)
脱氮反应(denitrogenation)	离子型甲基转移(ionic methyl shift)
环饱和反应(ring saturation)	离子 β -位断链(ionic β -scission)
脱烷基反应(dealkylation)	离子夺氢(ionic hydrogen abstraction)
侧链裂解反应(side chain cracking)	离子质子化(ionic protonation)
闭环反应(ring closure)	离子脱质子化(ionic deprotonation)
开环反应(ring opening)	离子闭环(ionic ring closure)
环异构化反应(ring isomerization)	离子扩环(ionic ring expansion)
	离子加成(ionic addition)
	加氢(hydrogenation)
	脱氢(dehydrogenation)
	氢解(hydrogenolysis)

图 5 化学反应规则的分类与分级示意图(网络版彩图)

Figure 5 Classification of chemical reaction rules (color online).

表 2 不同建模层次的石油加工过程反应动力学模型

Table 2 Kinetic model of petroleum refining process with different modeling levels

建模层次	模型类型	描述对象	特点
馏分水平	馏分集总模型	成批表征, 馏分集总	依赖反应原料, 缺乏预见能力
分子水平	反应路径水平	可检测的分子	不依赖反应原料, 近似速率常数方程求解时间短
	反应机理水平	中间体和分子	不依赖反应原料, 基础速率常数方程求解时间长

到的物种, 描述反应中分子之间的变化. 在反应机理层面的模型包括对反应机理详细明确的描述, 涉及分子和中间体物种, 如离子和自由基. 这类模型很少需要预先假设, 因为在原理上反应速度常数是更加基础的. 但是, 相应的数学模型较难建立、求解, 所以可以从反应机理层面来建立反应网络和反应速率公式的模型, 而反应路径层面的反应速率通过预先的假设, 如速率控制步骤, 可以快速建立相应的数学模型. 基于分子的反应动力学建模策略可以用图6来描述.

分子反应动力学研究和过程模拟的关键技术问题是反应网络生成的技术路线选择以及反应动力学参数求解方法, 可参见文献[20]的专门章节.

3 主要应用

3.1 MAPS系统

原油资源的敏捷优化是炼化企业一切优化工作的源头和重中之重. 炼化企业的供应链管理与优化, 就是统筹安排原油采购、生产和销售, 提高供应链的敏捷性和灵活性以提高经济效益. 为实现供应链的优化, 吴青^[1,20]提出了分子级先进计划系统MAPS (molecular level advance planning system).

通常, 炼化企业采用AspenTech公司的PIMS软件或者Honeywell公司的RPMS以及Haverly Systems公司的GRTMPS软件作为计划排产软件^[1]. 这些计划应用

图6 基于分子的反应动力学建模策略(网络版彩图)

Figure 6 Modeling strategy of reaction dynamics based on molecular (color online).

软件有效地支撑了炼化企业生产计划优化业务,为石化企业创造了较好的经济效益和管理效益,目前已经成为中国炼化企业生产计划优化的必备工具,但在长期的使用过程中,发现其不太适合中国国情。

利用原油分子信息库(含原油快评)和原油分子重构技术,按照原油分子信息建立的分子级先进计划系统MAPS是基于运筹学线性规划,建立从原料采购、生产加工到产品销售整个流程输转过程基于分子的计划模型,根据企业自身的生产工艺流程、装置基础数据、产品质量要求、产品销售价格等约束条件,制定出效益最大化的生产计划。对于集团企业,通过集成单厂模型及运输网络建立总部模型,以整体效益最大化为目标制定总体计划,根据市场需求合理分配原油资源,有效利用资产能力,优化产品组合,实现总体优化。通过与生产管理系统的集成,实现“计划-生产-统计”闭环管理,提高供应链管理的准确性和可视化。

实施的基于石油分子工程的炼厂计划排产协同优化系统建设^[20],涵盖原油选择和调和、装置加工、物料平衡、公用介质平衡、产品调和及出厂等方面,主要包括:原油分子调和模块;各装置反应机理模型;桌面炼厂模型。

3.2 产品质量与产品结构转型升级

3.2.1 产品质量升级中的应用

在汽油质量升级过程中,通过研究汽油的分子组成、转化规律,提出满足汽油质量升级目标要求的新工艺或新催化剂开发要求。研究表明,同碳数异构烷烃随着支链增加,研究法辛烷值(RON)逐渐提高;同碳

数烯烃,异构烯烃RON高于直链烯烃,且随着支链增加, RON提高;带支链芳烃的RON均高于100。因此,可以通过异构化,将正构烯烃转化成异构烯烃、正构烷烃转化为异构烷烃,或发生烯烃的双键转移,从而弥补由于烯烃饱和所造成的辛烷值损失。

以上思路为指导,中国海洋石油集团有限公司(中海油)成功开发了骨架异构技术用于全馏分催化汽油的选择性加氢CDOS-FRCN技术^[31,32],并在中海油惠州石化、海南东方石化等炼厂得到了工业应用。采用新型纳米TiO₂催化材料为载体的钛基催化剂,在达到脱硫效果的同时,促进烯烃的异构化反应,减少辛烷值损失。该技术的优势在于,以全馏分催化汽油为原料,无需进行轻、重馏分的切割,所使用的催化剂体系同时具备了较高的脱硫性能,以及一定的烯烃饱和、烯烃异构功能,有助于在降低烯烃含量的同时减少辛烷值损失。中试结果表明,采用该技术的二段加氢工艺,全馏分催化汽油脱硫率达到97.7%,控制烯烃饱和率为25%左右, RON损失仅0.7个单位。

中海油依据本理论,还开发了汽油组分的异构-醚化组合技术以及具有一定孔道结构和酸分布的纳米ZSM-5沸石催化剂以及相应的苯烷基化技术,用于乙苯或国VI汽油的生产,相关技术已经完成了中试开发。

3.2.2 在产品结构转型升级中的应用示例

中海油依据本理论,开发了基于石油分子工程的催化柴油提质升值新工艺^[33],其中催化柴油精准分离SAA技术在山东滨化集团实现了工业化与技术转让。图7为相应技术构成的示意图,而图8是该技术SAA技术路线示意图,表3为实验结果。

SAA技术的核心是吸附剂。该吸附剂在低温低压,并满足原料要求(硫含量<50 μg/g, 碱氮含量<1 μg/g, 胶质<0.5 mg/100 mL)的条件下,芳烃脱除率大于80%,吸附剂的使用寿命达到2年以上。

3.3 数字化智能化转型升级

流程工业智能炼化建设是当今炼化产业发展的趋势和热点、焦点,且炼化企业向数字化、智能化发展^[1],中海油惠州石化、宁波大榭石化在计划排产、生产工艺优化等专业模块进行了试点,并在中捷石化等企业推广。炼化企业的数字化智能化转型主要聚焦于:(1)在供应链协同优化方面,实现供应链的计划优

图 7 基于分子信息和分子工程的催化柴油提质升值流程简图(网络版彩图)

Figure 7 Diagram of LCO upgrading based on molecular information and molecular engineering (color online).

图 8 中海油开发的催化柴油吸附分离(SAA)技术路线示意图(网络版彩图)

Figure 8 Schematic of LCO adsorption and separation (SAA) technology (color online).

表3 中海油开发的催化柴油的吸附分离结果

Table 3 The adsorption and separation results of LCO

类别 (wt%)	高十六烷值组分	低十六烷值组分
非芳烃	57.9	8.4
烷烃	26.7	3.1
环烷烃	31.2	5.3
总芳烃	42.1	91.6
单环芳烃	37.0	—
烷基苯	—	11.2
萘系物	—	50.1
多环芳烃	5.1	30.3

(2) 在智能运营方面, 建设生产调度指挥中心, 对生产过程、设备运行、能源、HSE等信息进行全面分析, 并基于智能化的数据挖掘和预测模型支持智能决策;

(3) 在生产过程优化方面, 建设生产运营模型体系、专

家知识库形成系统,并基于模型体系,实现生产过程最优化,包括计划优化、调度优化、操作与控制优化等,实现贯穿整个炼油过程的更加经济的决策;(4)在能源和设备综合管理方面,强化能源规范管理,实现贯穿各个运行点的监控跟踪;实现用能系统优化,支撑节能减排;同时,强化设备资产运营管理,并实现基于大数据的设备预测性维护;(5)在智能销售方面,实现智能销售,支持以客户、市场为导向的销售服务信息化能力的提升,包括建设智能(智慧)加油站、数字化销售平台、CRM(客户关系管理)系统等。

3.4 新型催化剂与工艺研究

油气资源分子信息应用技术就是应用油气资源分子信息库、化学反应规则库,开展反应过程模拟,指导催化剂和工艺技术的开发.

中海油在开发汽油和柴油加氢改质催化剂过程中, 首先建立汽柴油分子信息库, 以及化学反应规则库, 并通过对不同催化材料反应性能的裂化及开环反应的差异性评价对比, 优选出最适合反应环境的分子筛催化剂, 图9是A和B两种分子筛催化剂的对比示意图. 中海油据此理念开发了相应的催化裂化汽油和柴油脱硫用的催化剂^[34].

对于新工艺开发来说,采用石油分子工程与分子管理的理念也是非常合适的.例如,中海油针对海洋原油低硫高氮的最大特点,开发了劣质催化柴油反序加氢改质工艺.之所以采用反序工艺,是为了保证裂化段不接触高含量的硫氮(尤其是有机氮),因此可以

图 9 两种分子筛催化剂的反应性能比较示意图(网络版彩图)

Figure 9 Comparison of the reaction performance over two zeolite catalysts (color online).

更好地发挥分子筛型加氢裂化催化剂的性能, 提高单程转化率; 而贵金属催化剂对硫氮具有更高的脱除深度, 可以生产出真正的无硫汽柴油。这种工艺较一段串联通过式可以降低25%反应压力, 可以更好地保证芳烃选择性开环, 降低氢耗。因此, 这种工艺对原料适用性强, 生产灵活性大, 可以适当提高柴油的终馏点, 提高装置加工劣质原料的能力。表4为中海油开发的裂化剂与工业参比剂对比的结果。

4 结论

如何使油气资源价值最大化是炼油化工行业发展的最高目标。本文综述了油气资源分子工程与分子管理的概念及相应的技术架构与体系, 并按照所提出的理念, 总结了在开展、指导智能炼化建设、分子级先进计划管理系统、产品质量与产品结构转型升级等新催化剂、新工艺的开发与应用方面的研究进展。未来, 得益于对油气资源分子水平基础上的深入认识, 特别是对油气及其分子组成转化规律的深入研究, 同时借助计算机与信息化新技术在算法与算力等方面的进步, 以及油气资源分子工程与分子管理, 一方面可以优化原料组成、有针对性地开发最适合的催化剂并设计一系列合理反应路径和反应条件, 达到原料、催化剂、工艺以及反应器的最佳匹配; 更重要的是, 可以实现包括原油在内的资源敏捷优化与决策优化协同,

表 4 中海油裂化剂的对比评价结果^{a)}

Table 4 Comparison of the reaction performance over CNOOC hydrocracking catalysts^{a)}

催化剂	自制剂	工业参比剂
C ₅ +液收 (wt%)	98.5	93.2
总芳烃 (wt%)	76.2	72.8
汽油馏分 (<205℃)	—	—
收率 (wt%)	44.7	40.5
S (μg/g)	6.5	7.2
N (μg/g)	4.3	5.1
芳烃 (wt%)	47.5	41.3
柴油馏分 (>205℃)	—	—
收率 (wt%)	53.8	52.7
密度 (kg/m ³)	881	890
S (μg/g)	8.9	9.6
十六烷值指数	40.1	38.9

a) 工况6.0 MPa, 400℃, 1.0 h⁻¹, 600:1

原油选择、加工、销售全产业链在内的协同优化, 以及全产业链过程质量、安全、环保的监管与溯源, 进而达到全流程整体协同优化下的管控与决策智能一体化, 从而真正实现超越传统石油粗放认知体系、进入“分子水平”层次的精细和精准石油炼制, 推动炼化工业产业跨越式高质量发展, 实现“资源高效转化、能源高效利用、过程绿色低碳”目标。

参考文献

1 Wu Q. *Intelligent Refining and Chemical Construction: from Digital to Intelligent*. Beijing: China Petrochemical Press Co., Ltd., 2018 (in Chinese) [吴青. 智能炼化建设——从数字化迈向智慧化. 北京: 中国石化出版社, 2018]

2 Wu Q. *Inorgan Chem Ind*, 2018, 50: 1–6+12 (in Chinese) [吴青. 无机盐工业, 2018, 50: 1–6+12]

3 Wu Q. *Petrol Refinery Eng*, 2018, 48: 59–64 (in Chinese) [吴青. 炼油技术与工程, 2018, 48: 59–64]

4 Wu Q. *Petrol Refinery Eng*, 2018, 48: 49–54 (in Chinese) [吴青. 炼油技术与工程, 2018, 48: 49–54]

5 von Hippel A. *Science*, 1956, 123: 315–317

6 Horváth IT, Kiss G, Cook RA, Bond JE, Stevens PA, Rábai J, Mozeleski EJ. *J Am Chem Soc*, 1998, 120: 3133–3143

7 Lewandowski B, De Bo G, Ward JW, Papmeyer M, Kuschel S, Aldegunde MJ, Gramlich PME, Heckmann D, Goldup SM, D'Souza DM, Fernandes AE, Leigh DA. *Science*, 2013, 339: 189–193

8 Barth JV, Costantini G, Kern K. *Nature*, 2005, 437: 671–679

9 Ciesielski A, Palma CA, Bonini M, Samori P. *Adv Mater*, 2010, 22: 3506–3520

10 Marshall AG, Rodgers RP. *Acc Chem Res*, 2004, 37: 53–59

11 Marshall AG, Rodgers RP. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2008, 105: 18090–18095

12 Mi Saine Aye M, Zhang N. *Chem Eng Sci*, 2005, 60: 6702–6717

13 Xu CM. *Basis of Molecular Management in Petroleum Refining*. Beijing: Science Press, 2019 (in Chinese) [徐春明. 石油炼化分子管理基础. 北

京: 科学出版社, 2019]

- 14 Shi Q, Zhang LZ, Zhao SQ, Xu CM. *Petrol Sci Bull*, 2016, 2: 270–278 (in Chinese) [史权, 张霖宙, 赵锁奇, 徐春明. 石油科学通报, 2016, 2: 270–278]
- 15 Wu Q, Wu JJ. *The Proceedings of 16th Annual Conference on Crude Oil Evaluation and Processing*. Nanning, 2016. 1–7 (in Chinese) [吴青, 吴晶晶. 原油评价及加工第十六次年会论文集. 南宁, 2016. 1–7]
- 16 Wu Q. Transformation and upgrading, technological innovation, promote the sustainable development of the refining industry. Beijing: China Petrochemical Press Co., Ltd., 2016. 1–17 (in Chinese) [吴青. 转型升级 技术创新 推动炼化产业可持续发展: 中海石油炼化有限责任公司第四次科技大会论文集. 北京: 中国石化出版社, 2016. 1–17]
- 17 Wu Q. *Petrol Refinery Eng*, 2017, 47: 1–9 (in Chinese) [吴青. 炼油技术与工程, 2017, 47: 1–9]
- 18 Wu Q. *Petrol Refinery Eng*, 2017, 47: 1–14 (in Chinese) [吴青. 炼油技术与工程, 2017, 47: 1–14]
- 19 Wu Q. Construction of smart refinery based on molecular engineering & management. In: *10th Symposium on Heavy Petroleum Fractions: Chemistry, Processing and Utilization*. Qingdao, 2018
- 20 Wu Q. *Petroleum Molecular Engineering*. Beijing: Chemical Industry Press Co., Ltd., 2019 (in Chinese) [吴青. 石油分子工程. 北京: 化学工业出版社, 2019]
- 21 Cai XH, Zhang SH, Long J, Liu YR, Liu ZL, Wang W, Tian SB. *Acta Petrol Sin (Petrol Proc Sect)*, 2014, 30: 957–966 (in Chinese) [蔡新恒, 张书红, 龙军, 刘颖荣, 刘泽龙, 王威, 田松柏. 石油学报(石油加工), 2014, 30: 957–966]
- 22 Tian SB, Liu J, Liu ZL. *Acta Petrol Sin (Petrol Proc Sect)*, 2015, 31: 282–292 [田松柏, 龙军, 刘泽龙. 石油学报(石油加工), 2015, 31: 282–292]
- 23 Zhu XY, Liu ZL, Tian SB, Liu YR. *Acta Petrol Sin (Petrol Proc Sect)*, 2012, 28: 426–431 [祝馨怡, 刘泽龙, 田松柏, 刘颖荣. 石油学报(石油加工), 2012, 28: 426–431]
- 24 Mahé L, Dutriez T, Courtiade M, Thiébaud D, Dulot H, Bertoncini F. *J Chromatogr A*, 2011, 1218: 534–544
- 25 Mäkelä V, Karhunen P, Siren S, Heikkinen S, Kilpeläinen I. *Fuel*, 2013, 111: 543–554
- 26 Shi Q, Zhang YH, Xu CM, Zhao SQ, CHUNG KH. *Sci China Chem*, 2014, 44: 694–700 (in Chinese) [史权, 张亚和, 徐春明, 赵锁奇, CHUNG KH. 中国科学: 化学, 2014, 44: 694–700]
- 27 Chen JW, Cao HC. *Catalytic Cracking Process and Engineering*. Beijing: China Petrochemical Press Co., Ltd., 1995 (in Chinese) [陈俊武, 曹汉昌. 催化裂化工艺与工程. 北京: 中国石化出版社, 1995]
- 28 Liu SB, Tian SB, Liu YR. *Chin Petrol Proc Petrochem Technol*, 2007, 38: 18–22 (in Chinese) [刘四斌, 田松柏, 刘颖荣, 王京. 石油炼制与化工, 2007, 38: 18–22]
- 29 Liu SB, Tian SB, Liu YR, Wang J, Huang WX. *Acta Petrol Sin (Petrol Proc Sect)*, 2008, 24: 95–100 (in Chinese) [刘四斌, 田松柏, 刘颖荣, 王京, 黄蔚霞. 石油学报(石油加工), 2008, 24: 95–100]
- 30 Klein MT, Hou G, Bertolacini RJ, Broadbelt LJ, Kumar A. *Molecular Modeling in Heavy Hydrocarbon Conversions*. Abingdon: Taylor & Francis, 2006
- 31 Wu Q, Peng CH, Zhao CX, Zhong R, Fu YM, Yang F, Li J. *Shandong Chem Ind*, 2015, 44: 122–124 (in Chinese) [吴青, 彭成华, 赵晨曦, 钟瑞, 付玉梅, 杨峰, 李捷. 山东化工, 2015, 44: 122–124]
- 32 Zhao CX, Wang X, Peng CH, Fu YM, Yang F, Li J. *Modern Chem Ind*, 2013, 33: 100–104 (in Chinese) [赵晨曦, 王旭, 彭成华, 付玉梅, 杨峰, 李捷. 现代化工, 2013, 33: 100–104]
- 33 Wu Q, Wu JJ. “*Chemical Engineering, Metallurgy and Materials*” Frontier and Innovation. Beijing: Chemical Industry Press Co., Ltd., 2016 (in Chinese) [吴青, 吴晶晶. “化工、冶金、材料”前言与创新, 中国工程院化工、冶金与材料工程第十一届学术会议论文集. 北京: 化学工业出版社, 2016]
- 34 Wu Q, Li Y, Hou Z, Xin J, Meng Q, Han L, Xiao C, Hu D, Duan A, Xu C. *Fuel Processing Tech*, 2018, 172: 55–64

Core techniques of the molecular engineering and molecular management of petroleum resources and its application

Qing Wu^{*}

Department of Science and Technology Development, China National Offshore Oil Corporation, Beijing 100010, China

**Corresponding author (email: wuqing@cnooc.com.cn)*

Abstract: Petroleum resources are extremely valuable, and how to maximize the value of petroleum resources is the ultimate aim of the development of refining and chemical industry. The concept of molecular engineering and molecular management of petroleum resources, the corresponding technical architecture and system were reviewed. In accordance with the proposed concept, intelligent refining construction and molecular level advance planning system (MAPS) were introduced. Then the product quality, product structure transformation, upgrading, and development of new catalysts and process were summarized.

Keywords: petroleum resources, molecular engineering, molecular management, resources value maximization, application and progress

doi: [10.1360/SSC-2019-0121](https://doi.org/10.1360/SSC-2019-0121)