

渣油加氢原料组分 解析模型的构建

Construction of Component Analysis Model for
Residue Hydrogenation Raw Materials

参考资料：王鑫磊等. 渣油加氢原料组分解析模型的构建, 石油学报
(石油加工), 2025, 41 (1) : 104-113

整理推荐：中国化工学会烃资源评价加工与利用专委会 田松柏



公众号：烃资源评价加工与利用

目录

Content

- 1 研究背景与意义
- 2 数据整理与分析
- 3 渣油加氢原料组分解析模型的构建
- 4 模型计算结果分析
- 5 结论与展望



公众号· 烃资源评价加工与利用



01

研究背景与意义

Research background and significance



公众号 · 烃资源评价加工与利用

◆ 渣油加氢原料特点

原料组成对加氢过程的影响

不同原油种类和切割馏分对渣油加氢过程中的反应化学规律和最终产物分布有显著影响。

渣油加氢原料复杂性

渣油加氢原料包括常压渣油、减压渣油等，是多种烃类化合物的复杂体系，具有沸点高、杂原子多、结构复杂等特点。



现有分析方法的局限性

传统分析方法难以反映原料中胶质和沥青质的具体特征，制约了对不同渣油加氢原料炼制性能差异的认识。



公众号 · 烃资源评价加工与利用

◆ 研究目的

1.构建分子水平解析模型

研究旨在基于常规分析数据和高分辨质谱表征数据，构建能够快速解析渣油加氢原料分子组成的模型。

2.提高原料利用率和模型适应性

通过模型优化渣油加氢原料的利用，提升渣油加氢模型的适应性，实现重质油品的快速分析和性质计算。

3.降低分析成本

模型的应用有助于在低成本下实现重质油品的详细分析，提高企业经济效益。





02

数据整理与分析

Data organization and analysis



公众号· 烃资源评价加工与利用

◆ 渣油加氢原料特点

表 1 渣油加氢原料油性质

Table 1 Properties of residue hydrotreating feedstocks

Feed No.	Density (20 °C)/ (g · cm ⁻³)	Viscosity (100 °C)/ (mm · s ⁻¹)	w(Carbon residue)/%	w/%				w/(mg · g ⁻¹)		w(Fe+Ca+ Na)/ (mg · g ⁻¹)	M_{avg}	w/%				$n(C)/n(H)$
				C	H	S	N	Ni	V			Saturates	Aromatics	Resin	Asphaltene	
1 #	0.9739	67.5	11.9	85.25	11.04	3.49	0.21	11.68	31.64	4.19	634	29.8	48.0	18.3	3.9	7.72
2 #	0.9812	80.4	13.0	84.36	10.97	4.42	0.23	23.82	83.08	6.71	614	30.2	47.2	19.5	3.0	7.69
3 #	0.9811	120.3	12.6	84.66	11.03	4.03	0.27	29.59	81.34	6.72	631	26.1	47.2	22.7	4.0	7.67
4 #	0.9643	105.0	9.3	86.41	11.60	1.60	0.38	26.61	25.60	12.65	602	33.6	49.8	14.0	2.6	7.45
5 #	1.0022	141.3	13.2	84.58	10.51	4.60	0.30	29.00	90.31	5.40	643	25.5	47.1	19.7	7.7	8.05
6 #	0.9916	61.4	11.2	84.22	10.60	4.95	0.22	21.72	78.46	5.50	640	27.0	46.5	18.7	7.8	7.95
7 #	0.9807	103.6	13.0	84.37	10.86	4.54	0.21	24.47	78.03	4.20	635	28.3	48.4	17.2	6.1	7.77

M_{avg} 数据收集 average molecular mass

数据预处理

收集了来自中国石化各炼油厂的渣油加氢原料油数据, 包括密度、黏度、硫含量、氮含量等常规性质分析数据。

通过归一化处理消除样本数据分析误差, 确保数据的准确性和一致性。

数据分析与相关性研究

1.原料油性质相关性

分析了原料油密度、黏度、残炭值、金属含量等性质之间的相关性，揭示了原料油组成结构的特点。

2.金属元素存在形式

研究表明金属元素多以卟啉类化合物的形式存在于原料油中，与氮含量高度相关。

3.硫元素与不饱和度的关系

硫元素多存在于不饱和度较高的稠环芳烃结构中，与C/H摩尔比呈正相关。

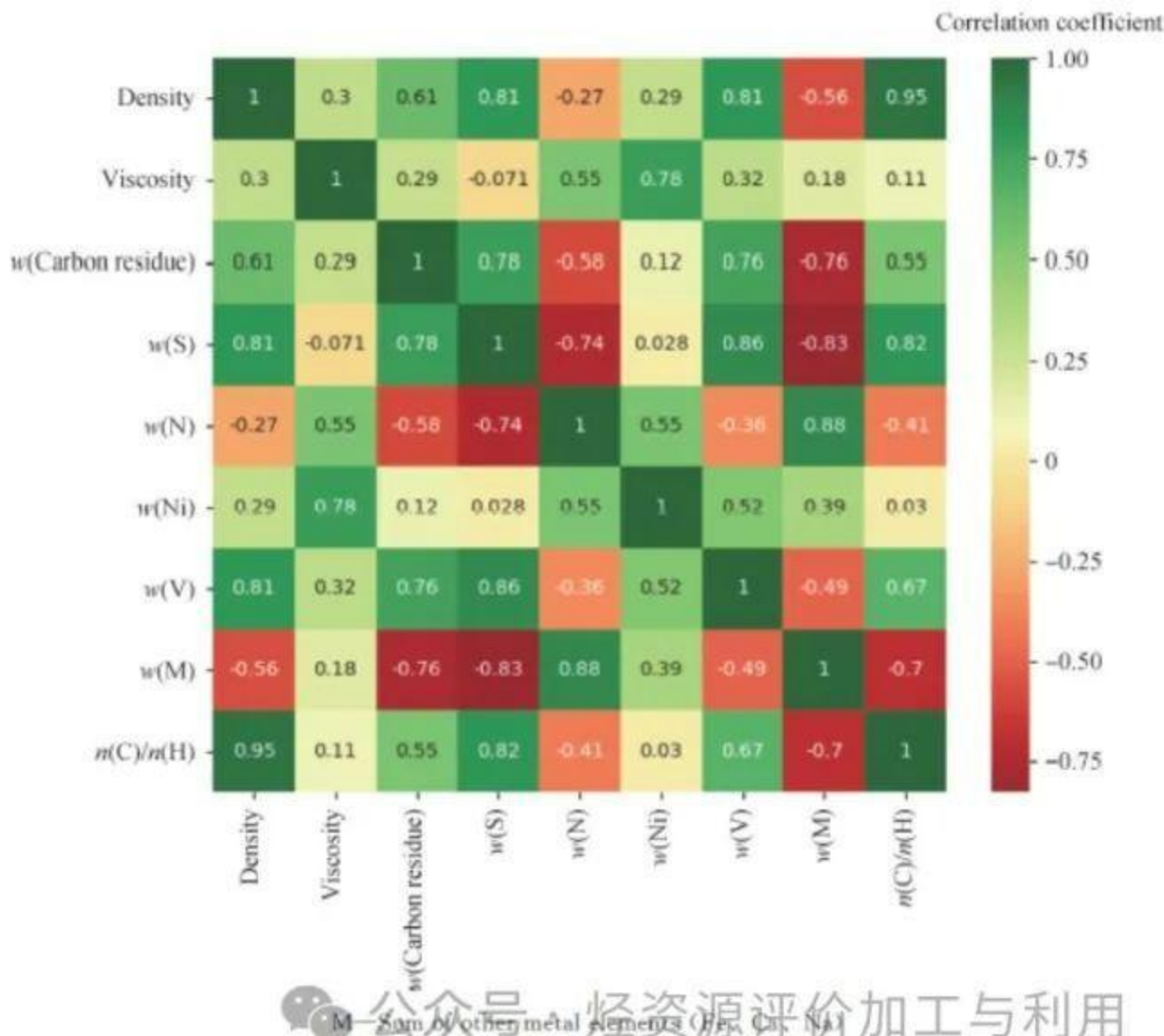


图1 渣油加氢原料油各性质相关性热图



数据分析与 相关性研究

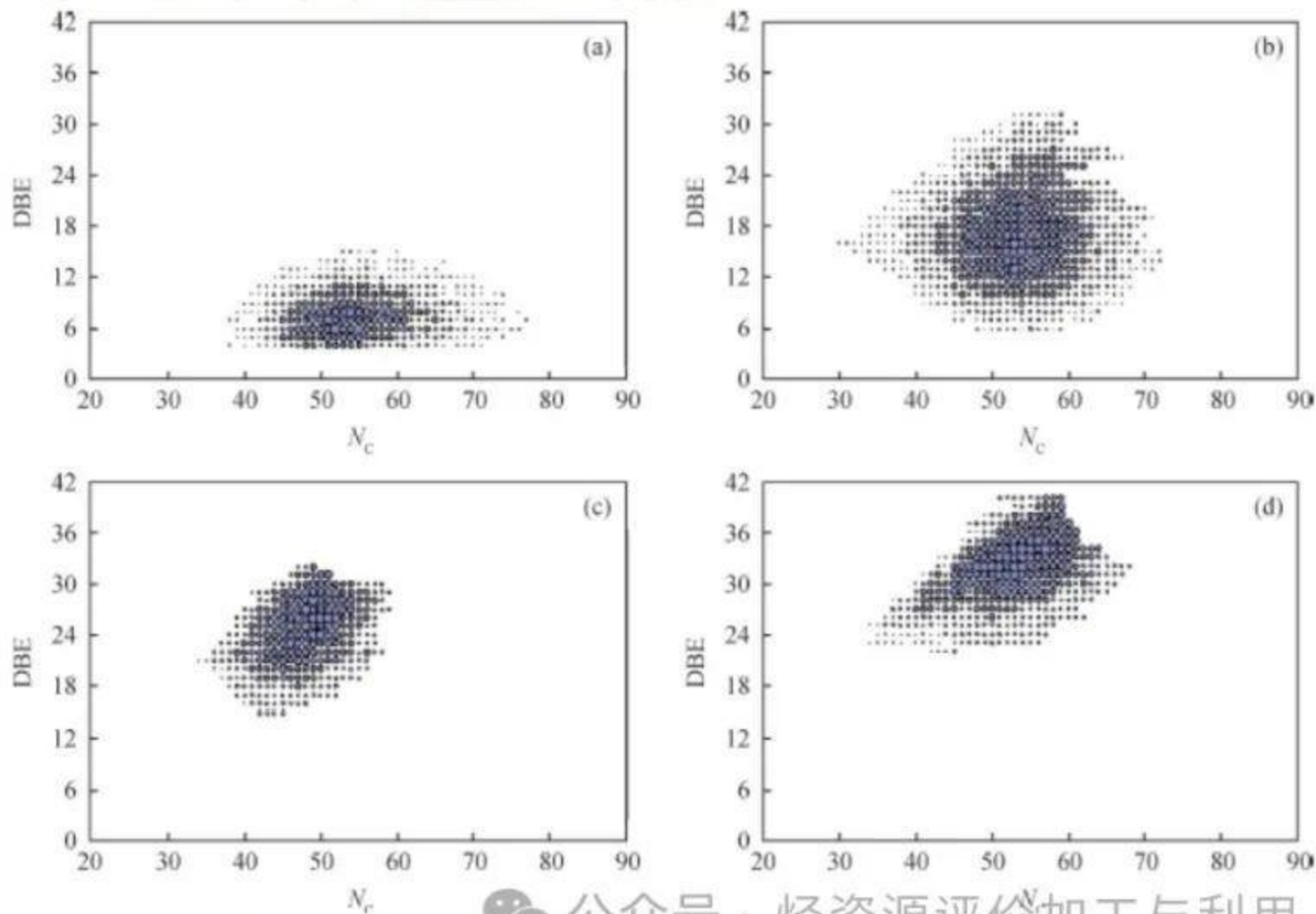


图2 芳烃类化合物四组分碳数(N_c)-等价双键数(DBE)分布气泡图

03

渣油加氢原料组分解析模型的构建

Construction of Component Analysis Model for Residue Hydrogenation Raw Materials



公众号· 烃资源评价加工与利用

◆ 虚拟分子组分集确定

1. 虚拟组分划分依据

基于质谱分析结果和原料油分子不饱和度、碳数等特性，将虚拟组分划分为不同碳数区间和族组成结构。

2. 模型化合物选择

为每种虚拟组分选择分子式和结构明确的模型化合物作为代表，确保模型化合物的代表性。

3. 含氧化合物处理

由于渣油加氢原料氧元素含量极低，模型化合物的构建忽略含氧化合物的参与。

表 3 各组分模型化合物结构图

Table 3 Representative molecular structure diagrams of each component in the model compound

Type	VR	VG0VR	VGO	DSL	Naph
P					
N					
NA					
A					
S					
Nu					
M					

VR—Vacuum residues; VG0VR—Atmospheric residues; VGO—Wax oil; DSL—Diesel oil; Naph—Naphtha

◆ 组分解析模型建立

1. 宏观性质计算方法

建立了基于虚拟分子组成的宏观性质计算方法，包括碳含量、氢含量、硫氮含量等的计算。

2. 四组分分布矩阵

通过考察典型渣油芳香烃化合物的四组分与碳数-DBE分布规律关系，给出渣油四组分的分布矩阵。

3. 模型优化算法

采用GA遗传算法和SQP优化算法对分子组成解析初值进行调整，确保解析结果的准确性。

表 4 渣油四组分(SARA)的碳数(N_c)-等价双键数(DBE)分布矩阵

Table 4 Matrix of carbon number (N_c)-double bond equivalents (DBE) distribution for SARA in residua oil

Type	Name	DBE	N_c	wt%			
				Saturates	Aromatics	Resin	Asphaltene
M	PYR% ₆	10	64	0	0	0.20	0.80
	PYRV	10	64	0	0	0.20	0.80
	PYRM	10	64	0	0	0.20	0.80
Na	R% ₆₄	10	64	0	0.20	0.70	0.10
	V% ₄₈	17	48	0.05	0.10	0.85	0.20
	H% ₃₂	10	32	0.10	0.20	0.70	0
	M% ₁₆	5	16	0.20	0.50	0.30	0
S	BS% ₄	10	64	0	0.05	0.40	0.55
	VS% ₈	20	48	0.10	0.35	0.50	0.05
	HS% ₁₂	17	32	0.25	0.35	0.40	0
	MS% ₁₆	9	16	0.15	0.60	0.25	0
	LS% ₈	0	8	1.00	0	0	0
A	VA% ₈	15	48	0.20	0.55	0.25	0
	HA% ₁₂	7	32	0.40	0.20	0.10	0
	MA% ₁₆	7	16	0.80	0.20	0	0
	LA% ₈	4	8	1.00	0	0	0
NA	R% ₆₄	10	64	0	0.35	0.40	0.25
	V% ₄₈	17	48	0.20	0.70	0.10	0
	R% ₃₂	8	32	0.40	0.60	0	0
	M% ₁₆	5	16	1.00	0	0	0
V	V% ₄₈	4	48	0.40	0.60	0	0
	H% ₃₂	3	32	0.60	0.40	0	0
	M% ₁₆	1	16	1.00	0	0	0
	LS% ₈	1	8	1.00	0	0	0
P	HP% ₁₂	2	32	0.90	0.20	0	0
	MP% ₁₆	2	16	1.00	0	0	0
	LP% ₈	0	8	1.00	0	0	0





04

模型计算结果分析

Analysis of Model Calculation Results



公众号 · 烃资源评价加工与利用

◆ 虚拟组分分布

1. 虚拟组分摩尔分数分布

计算得到的各虚拟分子组分摩尔分数与质谱分析的碳数分布相一致，验证了模型的准确性。

2. 环烷烃类和烷烃类分布特点

环烷烃类和烷烃类等缺氢数较低的分子碳数分布趋于向碳数较低方向移动。

表 5 模型计算得到的各渣油加氢原料虚拟分子组分分布

Table 5 Distribution of virtual components of residue hydrotreating feedstocks calculated by the model

x/%

Feed No.	PYR% PYRV	PYRM	EN%64	VN%48	HN%32	MN%18	RS64	VS48	HS32	MS18	LS8	VA48	HA32	
1*	0.01	0.04	0.00	0.38	1.93	0.02	0.02	1.71	12.58	2.04	0.65	0.00	14.91	0.20
2*	0.02	0.10	0.01	0.52	1.86	0.02	0.01	0.56	17.91	4.62	1.15	0.01	8.45	0.38
3*	0.03	0.10	0.01	0.42	2.49	0.02	0.02	1.59	16.13	2.44	0.61	0.00	12.76	0.21
4*	0.03	0.03	0.01	1.05	2.96	0.04	0.02	0.23	6.30	1.59	0.44	0.00	10.32	0.51
5*	0.03	0.11	0.01	0.67	2.61	0.02	0.01	6.51	11.41	2.70	2.32	0.00	7.97	0.19
6*	0.02	0.10	0.01	0.42	1.95	0.01	0.01	6.74	12.62	2.12	1.76	0.01	6.21	0.18
7*	0.03	0.10	0.00	0.31	1.94	0.01	0.01	4.49	13.73	2.46	1.59	0.01	5.49	0.24

Feed No.	MA18	LA8	EN%64	VN%48	HN%32	MN%18	VN%48	HN%32	MN%18	LN8	HP32	MP18	LP8
1*	0.05	0.01	3.27	10.26	4.38	0.19	32.58	0.58	0.10	0.02	11.59	1.41	0.07
2*	0.04	0.01	2.06	9.31	7.15	0.23	30.56	1.39	0.25	0.04	9.73	3.51	0.07
3*	0.05	0.01	2.54	7.77	3.99	0.19	32.62	0.77	0.14	0.02	13.04	1.95	0.07
4*	0.06	0.01	3.04	11.44	8.55	0.34	36.01	1.50	0.24	0.05	11.20	3.96	0.09
5*	0.05	0.01	1.93	18.03	8.70	0.21	28.86	0.71	0.12	0.02	4.95	1.79	0.04
6*	0.05	0.01	1.37	12.60	8.97	0.22	30.85	0.93	0.12	0.02	6.43	2.29	0.05
7*	0.04	0.01	1.34	12.44	7.99	0.15	36.80	0.91	0.16	0.02	6.32	2.28	0.05

◆ 元素分析与四组分分析对比

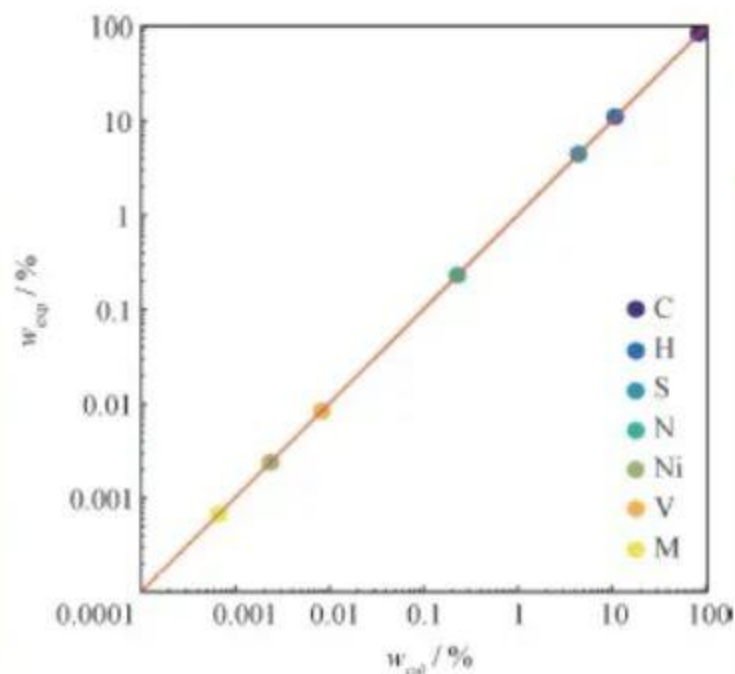


图3 元素分析结果计算值(w_{cal})与实验值(w_{exp})对比

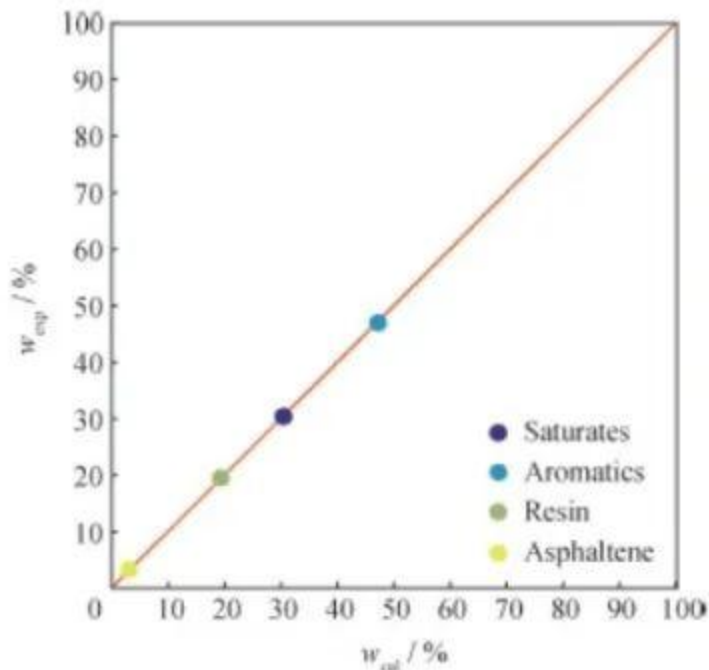


图4 四组分分析结果计算值(w_{cal})与实验值(w_{exp})对比

通过模型解析得到的油品元素分析数据与实验值高度一致，各预测值的相对偏差均小于1%。四组分分析结果对比模型解析得到的油品四组分分布数据与实验值相符，证明了模型的准确性。

◆ 混合油验证

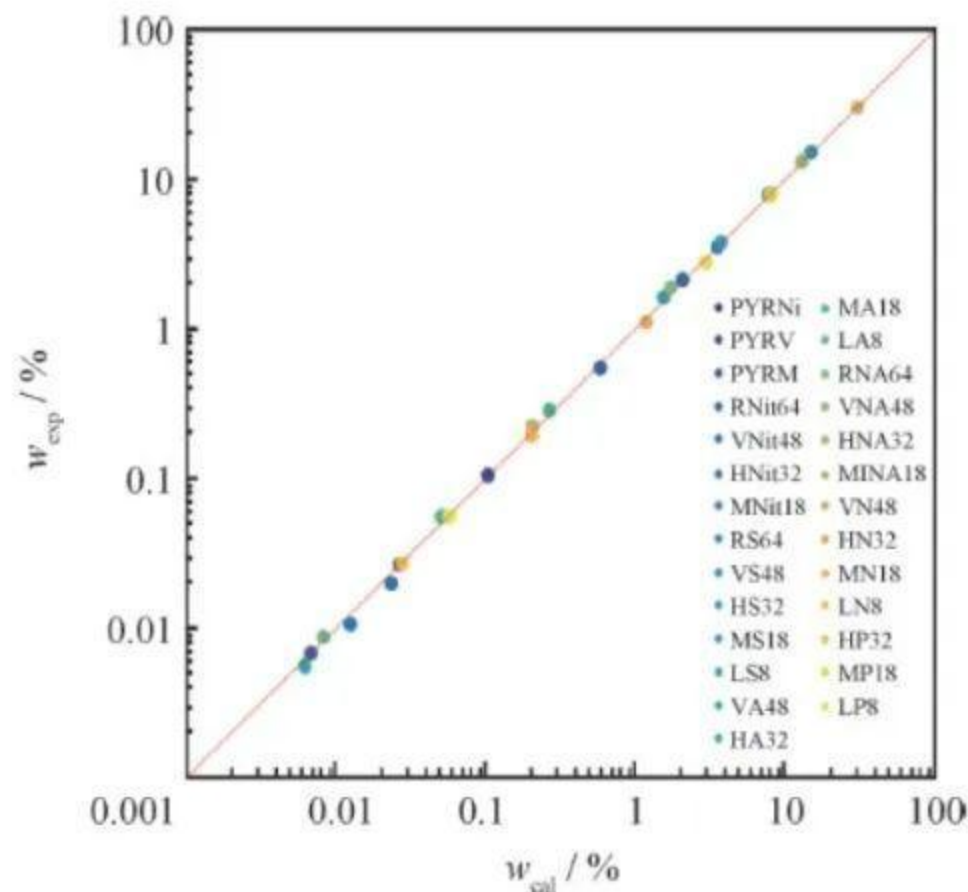


图 5 各虚拟组分计算值(w_{cal})与实验值(w_{exp})对比

1

混合油分子组成解析

对随机筛选的混合油进行分子组成解析，计算得到的虚拟分子组成数据与实验值偏差小于3%。

2

方法可行性验证

混合油验证结果进一步证明了该方法在解析渣油加氢原料分子组成方面的可行性。



公众号 · 烃资源评价加工与利用



05

结论与展望

Conclusion and Prospect



公众号 · 烃资源评价加工与利用

◆ 研究总结

1.模型构建成功

研究成功构建了基于虚拟分子组分的渣油加氢原料组分解析模型，实现了对渣油加氢原料分子组成的快速解析。

2.模型准确性高

模型解析得到的油品组成数据与实验值高度一致，分子组成的分布规律与高分辨质谱分析数据相一致。

3.应用前景广阔

模型在渣油加氢原料合理优化利用、渣油加氢模型升级等方面具有广泛的应用前景。



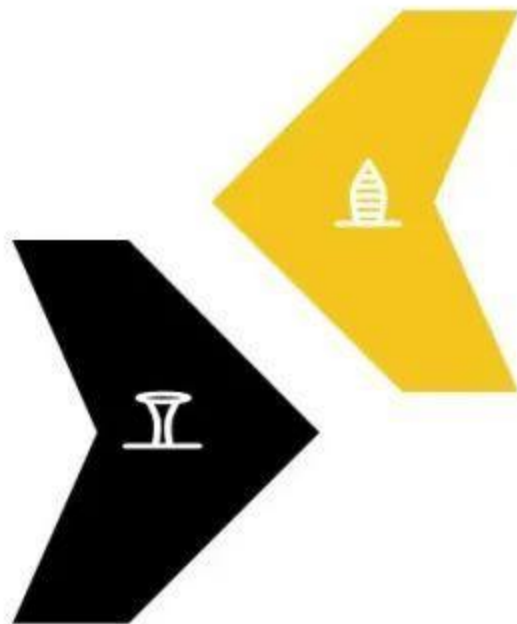
◆ 未来展望

深化模型研究

未来可进一步深化对模型的研究，提高模型的精度和适应性，满足更多实际工业应用需求。

拓展应用领域

可将模型拓展应用于其他重质油品的分子组成解析，为石油炼制行业提供更多技术支持。



公众号 · 烃资源评价加工与利用



THANK YOU

参考资料：王鑫磊等. 渣油加氢原料组分解析模型的构建, 石油学报 (石油加工), 2025, 41 (1) : 104-113

整理推荐：中国化工学会烃资源评价加工与利用专委会 田松柏



公众号 · 烃资源评价加工与利用