

# 原油直接催化裂解制化学品工艺流程智能建模与代理模型多目标优化

张智博<sup>1</sup>, 周鑫<sup>2\*</sup>, 闫昊<sup>1</sup>, 赵辉<sup>1</sup>, 刘熠斌<sup>1</sup>, 陈小博<sup>1</sup>, 杨朝合<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 中国石油大学(华东)重质油全国重点实验室, 青岛 266580

<sup>2</sup> 中国海洋大学化学化工学院, 青岛 266100

\* 通信作者, xinzhou@ouc.edu.cn

收稿日期: 2024-09-02; 修回日期: 2024-09-30

国家自然科学基金项目(22108307)资助

**摘要** 原油直接制化学品技术涉及将原油通过催化裂解直接转化为化学原料。这一创新工艺绕过了传统的常压蒸馏装置、真空蒸馏装置和加氢装置, 直接降低了设备投资和能耗。因此, 这不仅降低了生产成本, 还带来了显著的经济效益。直接转化方法不仅简化了生产流程, 还减少了对复杂基础设施的需求, 使其成为传统方法的一种更高效的替代方案。随着国家双碳目标——即二氧化碳排放达峰和碳中和——的不断推进, 加速开发原油直接催化裂解制化学品的技术变得至关重要。这项技术有望显著降低过程能耗, 并为减少碳排放做出贡献。通过优化裂解过程, 可以实现更高产率的目标化学品, 同时最小化焦炭等副产品的形成, 这些副产品价值较低且会增加排放。随着对原油直接制化学品技术的建模研究不断深入, 建立智能模型以指导生产过程变得越来越重要。这些模型可以通过实时微调参数来优化操作, 从而实现经济效益和环境可持续性之间的平衡。智能模型利用数据驱动的见解预测结果, 并动态调整变量, 确保生产过程保持高效并符合经济和环境目标。本研究在 Aspen HYSYS 中建立了一个基于工业试验数据的稳健过程模拟模型, 对 4 个关键工艺参数进行详细案例分析和单因素分析: 预热温度、反应温度、再生温度和催化剂平衡活性。每个参数在决定裂解过程的效率和产率方面都起着至关重要的作用。通过系统地变化这些因素, 研究人员可以确定最佳条件, 以最大限度地提高关键化学品(如乙烯和丙烯)的生产, 同时最小化不需要的副产品(如焦炭)。为了增强模型的预测能力, 使用 Python 编程实现了一个神经网络。这个神经网络模型是在从过程模拟中得出的综合数据集上进行训练的。该模型在不同操作条件下预测产品分布的能力经过了严格的测试和验证。此外, 多目标优化算法 NSGA-II 被集成到深度学习框架中。该算法专注于最大化低碳烯烃的产量, 同时最小化焦炭的产生, 为整体过程优化提供了平衡的方法。与传统优化方法相比, 所建立的代理模型具有更高的计算效率和更短的优化解决方案时间。它使多个操作变量的解耦成为可能, 从而允许对过程进行更精确的控制。这种实时优化能力在动态生产环境中特别有益, 其中条件可能会迅速变化。优化结果显示了显著的改进: 焦炭产量减少了 0.23%, 而乙烯和丙烯的产量增加了 1%。总之, 本研究中开发的智能代理模型不仅提高了解决方案效率和预测准确性, 还为指导生产过程提供了宝贵的见解。其应用可能带来更可持续和经济有效的化学品制造过程, 符合经济和环境目标。

**关键词** 原油催化裂解; 流程模拟; 多目标优化; 神经网络

引用格式: 张智博, 周鑫, 闫昊, 赵辉, 刘熠斌, 陈小博, 杨朝合. 原油直接催化裂解制化学品工艺流程智能建模与代理模型多目标优化. 石油科学通报, 2024, 09(06): 1058-1068

ZHANG Zhibo, ZHOU Xin, YAN Hao, ZHAO Hui, LIU Yibin, CHEN Xiaobo, YANG Chaohe. Intelligent modeling and multi-objective optimization of proxy models for the process flow of direct catalytic cracking of crude oil to produce chemicals. Petroleum Science Bulletin, 2024, 09(06): 1058-1068. doi: 10.3969/j.issn.2096-1693.2024.06.081

中图分类号: TQ032.4; TQ021.8

## Intelligent modeling and multi-objective optimization of proxy models for the process flow of direct catalytic cracking of crude oil to produce chemicals

ZHANG Zhibo<sup>1</sup>, ZHOU Xin<sup>2</sup>, YAN Hao<sup>1</sup>, ZHAO Hui<sup>1</sup>, LIU Yibin<sup>1</sup>, CHEN Xiaobo<sup>1</sup>, YANG Chaohe<sup>1</sup>

*1 National Key Laboratory of Heavy Oil, China University of Petroleum (East China), Qingdao 266580, China*

*2 College of Chemistry and Chemical Engineering, Ocean University of China, Qingdao 266100, China*

Received: 2024-09-02; Revised: 2024-09-30

**Abstract** The technology of producing chemicals directly from crude oil involves the direct catalytic cracking of crude oil into chemical raw materials. This innovative process bypasses traditional atmospheric and vacuum distillation units and hydrogenation units, directly reducing both equipment investment and energy consumption. Consequently, this leads to lower production costs and brings significant economic benefits. The direct conversion method not only streamlines the production process but also minimizes the need for complex infrastructure, making it a more efficient alternative to conventional methods. With the continuous advancement of the national dual carbon goals-aiming to peak carbon dioxide emissions and achieve carbon neutrality-accelerating the development of technology for direct catalytic cracking of crude oil to produce chemicals is of paramount importance. This technology holds the potential to significantly reduce process energy consumption and contribute to carbon emission reduction efforts. By optimizing the cracking process, it is possible to achieve higher yields of desirable chemicals while minimizing the formation of by-products like coke, which are less valuable and contribute to increased emissions. As research on the modeling of technology for producing chemicals directly from crude oil deepens, establishing intelligent models to guide process production becomes increasingly crucial. These models can optimize process operations by fine-tuning parameters in real-time, thereby achieving a balance between economic benefits and environmental sustainability. Intelligent models leverage data-driven insights to predict outcomes and adjust variables dynamically, ensuring that the production process remains efficient and aligned with both economic and environmental targets. This study established a robust process simulation model in Aspen HYSYS based on industrial trial data from direct catalytic cracking of crude oil. Through detailed case analysis, single-factor analysis was conducted on four critical process parameters: preheating temperature, reaction temperature, regeneration temperature, and catalyst equilibrium activity. Each of these parameters played a vital role in determining the efficiency and yield of the cracking process. By systematically varied these factors, researchers can identify optimal conditions that maximize the production of key chemicals such as ethylene and propylene while minimizing unwanted by-products like coke. To enhance the predictive capabilities of the model, a neural network was implemented using Python programming. This neural network model was trained on a comprehensive dataset derived from the process simulations. The model's ability to predict product distribution under different operating conditions was rigorously tested and validated. Furthermore, a multi-objective optimization algorithm, NSGA-II, was integrated into the deep learning framework. This algorithm focuses on maximizing the yield of low-carbon olefins while minimizing coke production, providing a balanced approach to optimizing the overall process. Compared to traditional optimization methods, the established surrogate model offers higher computational efficiency and faster optimization solution times. It enables the decoupling of multiple operational variables, allowing for more precise control over the process. This real-time optimization capability is particularly beneficial in dynamic production environments where conditions can change rapidly. The optimization results demonstrated notable improvements: coke yield decreased by 0.23%, while the yields of ethylene and propylene increased by 1%. In conclusion, the intelligent agent model developed in this study not only enhances solution efficiency and prediction accuracy but also provides valuable insights for guiding process production. Its application could lead to more sustainable and cost-effective chemical manufacturing processes, aligning with both economic and environmental objectives.

**Keywords** catalytic cracking of crude oil; process simulation; multi-objective optimization; neural network

doi: 10.3969/j.issn.2096-1693.2024.06.081

在国家提出“双碳”目标的背景下,石化行业将朝着节能减排、降本增效的方向发展<sup>[1]</sup>。新能源汽车数量的不断增加以及公共交通方式的升级导致成品油消费放缓,而我国基本化学品仍面临较大的缺口,且

对基本化工原料的需求在未来仍将平稳增长,由生产传统燃料向生产化学品转型发展是必然趋势<sup>[2-3]</sup>。“十四五”发展规划指出提升石化行业的产业链发展对实现石化行业高效、高值、低碳、绿色发展具有战略意义<sup>[4-5]</sup>。多数学者分析了我国石化行业实现原料低碳化发展的方向与路径<sup>[6-7]</sup>,延长石化行业产业链生产高端化学品、专用化学品对炼厂实现节能减排、降本增效具有重要意义<sup>[8]</sup>。炼化一体化技术通过催化裂化、加氢裂化、催化重整、蒸汽裂解、烷烃脱氢等组合工艺实现增产低碳烯烃和芳烃,降低成品油的收率<sup>[9-10]</sup>。但由于原料劣质化、重质化不断加深,配套工艺流程冗长,装置投资大<sup>[11]</sup>。原油直接生产化学品技术是实现石化行业转型升级的一项重大技术变革,也是我国石化行业的下一个发展方向<sup>[12]</sup>。从原油中直接获得基本化学品,从而在生产过程中绕开传统的常减压装置、加氢装置,直接降低了设备投资与能耗<sup>[13-14]</sup>。由于该技术展现出的巨大优势,在全球范围内都引起了研究热潮与超前布局<sup>[15]</sup>。从目前的研究进展来看,原油直接制化学品技术可以分为两大类,原油直接蒸汽裂解<sup>[16]</sup>与原油直接催化裂解,而原油直接催化裂解又可以进一步分为酸催化与碱催化<sup>[17]</sup>。截至目前,三种技术在我国均实现了工业示范。2021年中国石化在天津石化进行了原油直接蒸汽裂解技术工业试验,是该技术在国内的首次工业化应用。同年中国石化在扬州石化进行了原油直接催化裂解技术工业试验,实现该技术在全球的首次工业化应用。2023年中国海油分别在中捷石化和惠州石化实现了原油直接制化学品碱催化技术(DPC)的工业试验,将专用的DPC催化剂投入到运行的工业装置中,验证了DPC技术的可行性<sup>[18-19]</sup>。DPC技术可以有效抑制焦炭产率,同时化学品收率显著提高。国内进行的工业试验有效验证了原油直接制化学品技术的可行性与潜力。由于炼油过程机理复杂,工业上操作变量之间耦合性较强,优化困难<sup>[20]</sup>,亟需一种高效简便的优化方法实现炼油过程优化问题的简单化。

本研究利用深度学习技术建立了高效、准确的原油直接催化裂解制化学品工艺的智能预测与优化代理模型。创新性在于运用神经网络工具对严格机理模型进行降维,进而将其与优化算法结合进行高效求解。相较于以往的优化方式<sup>[21-26]</sup>,建立的代理模型在计算和优化求解效率上较高,能够实现多操作变量关系解耦与实时在线优化。具体来讲,利用Aspen HYSYS流程模拟软件,依据原油直接催化裂解工业试验数据<sup>[25]</sup>建立了流程模拟模型。在建立模型的基础上,通过改

变反应条件得到不同工况的生产数据,建立数据集。联合Python编程编写了神经网络模型与多目标优化算法<sup>[27]</sup>,以预热温度、反应温度等工业参数为优化变量,以最大化低碳烯烃收率为优化目标,得到最优工艺操作参数。结果表明,通过多目标优化算法得到的优化解要优于通过单变量分析获得的优化解。经过优化后焦炭产率降低0.26%,同时乙烯、丙烯收率增加1%。本研究所建立的原油直接催化裂解制化学品工艺的智能预测与优化代理模型在实现实时优化方面展现出显著的优势。

## 1 原油直接催化裂解工艺模拟

相较于其他流程模拟软件,Aspen HYSYS的优势在于包含了多个炼油过程反应器模块,可以对炼油过程发生的反应进行模拟。在原料油的模拟上,Aspen HYSYS通过虚拟组分的性质来表示一个窄馏分的整体性质,从而在整个馏程范围内能够准确描述原料油的性质。原料油窄馏分的划分使Aspen HYSYS在应用集总动力学时更方便。Aspen HYSYS对于炼油过程反应均采用集总动力学模型,并可以通过工业试验数据对反应动力学参数进行校正,以获得更准确的模型。对于不同的炼油模块,Aspen HYSYS根据原料油性质、反应过程特点以及产物特点等划分了不同数量的集总。对于催化裂化模块,Aspen HYSYS采用了21集总动力学模型,如表1所示<sup>[27]</sup>。该模型中碳数小于5的气体组分均采用实际组分,从C<sub>5</sub>到终馏点为221℃的为汽油集总,馏程为221~343℃的为柴油集总,馏程为343~510℃的为减压重油集总,馏程在510℃以上的为渣油集总。柴油集总、减压重油集总、渣油集总又通过划分不同烃类的结构进一步细分为烷烃、环烷烃、芳烃等集总。焦炭集总也根据失活原因分为了动力学焦炭集总和金属焦炭集总。由于烃类不同结构将进行不同的裂化反应路径,Aspen HYSYS二十一集总动力学这种划分方法能够清晰地对反应过程进行描述,得到准确的结果。该动力学模型对催化裂解过程仍然适用。

本研究根据原油直接催化裂解工业试验数据建立稳态流程模型,具体流程见图1所示。该装置采用了单段提升管反应器,原料油经过预热后在提升管中与高温催化剂发生裂化反应,反应后生成的油气经换热后进入后续分离装置,得到干气、液化气、汽油、柴油、油浆等产品。工业装置所采用的主要工艺参数见表2。需要指出的是,由于严格分离过程收敛性差,

对分离过程进行了适当简化。利用油品分离塔沸点切割的方法对产品进行划分,同时固定产品分割的清晰度。因此,这一简化并不影响模型的结果与适用性。

表 1 Aspen HYSYS 催化裂化二十一集总动力学  
Table 1 Aspen HYSYS 21 lumped kinetics of catalytic cracking

集总描述与馏分范围	详细描述
<C <sub>5</sub> 轻气体	轻气体
汽油集总: C <sub>5</sub> ~221 °C	汽油
柴油集总: 221~343 °C	轻烷烃
	轻环烷烃
	轻单环芳烃
	轻双环芳烃
	轻芳香环取代烃
蜡油集总: 343~510 °C	重烷烃
	重环烷烃
	重单环芳烃
	重双环芳烃
	重三环芳烃
渣油集总: >510 °C	重芳香环取代烃
	渣油中烷烃
	渣油中环烷烃
	渣油中单环芳烃
	渣油中双环芳烃
焦炭集总	渣油中三环芳烃
	渣油中芳香环取代烃
	动力学焦炭
	金属焦炭

以原料油预热温度、提升管出口温度、剂油比为建模基准,根据工业试验数据产品分布对提升管反应器动力学参数进行校正。在本研究中,所采用的方法首先是确立严格的进料物料模型,随后调整反应条件以获得初步收敛的模型。接着,根据产物分布进一步调整反应条件,使得模型预测的产物分布逐渐逼近真实的产物分布。最终,对动力学参数进行精确调校,确保在真实反应条件下模型预测的产物分布与实际产物分布紧密吻合。此时获得的动力学参数即是通过产物分布回归分析所得的动力学参数。产品分布、产品性质的工业试验数据与模拟数据对比见表 3。可以看出,过程模拟数据与工业试验数据误差很小,干气和液化气中主要组分也基本一致。其中汽油和柴油产品的性质如表 4、表 5 所示。初馏点、终馏点基本一致,可以确定所建立的模型能够较好反映装置实际工况。

表 2 主要工艺参数  
Table 2 Main process parameters

项目	值
进料量 /(t·h <sup>-1</sup> )	44.3
沉降器压力 /MPa	0.138
提升管出口温度 /°C	519
预热温度 /°C	217
雾化蒸汽量 /(t·h <sup>-1</sup> )	3.4
汽提蒸汽量 /(t·h <sup>-1</sup> )	2.1
剂油比	7.2
催化剂平衡活性 /%	65.2

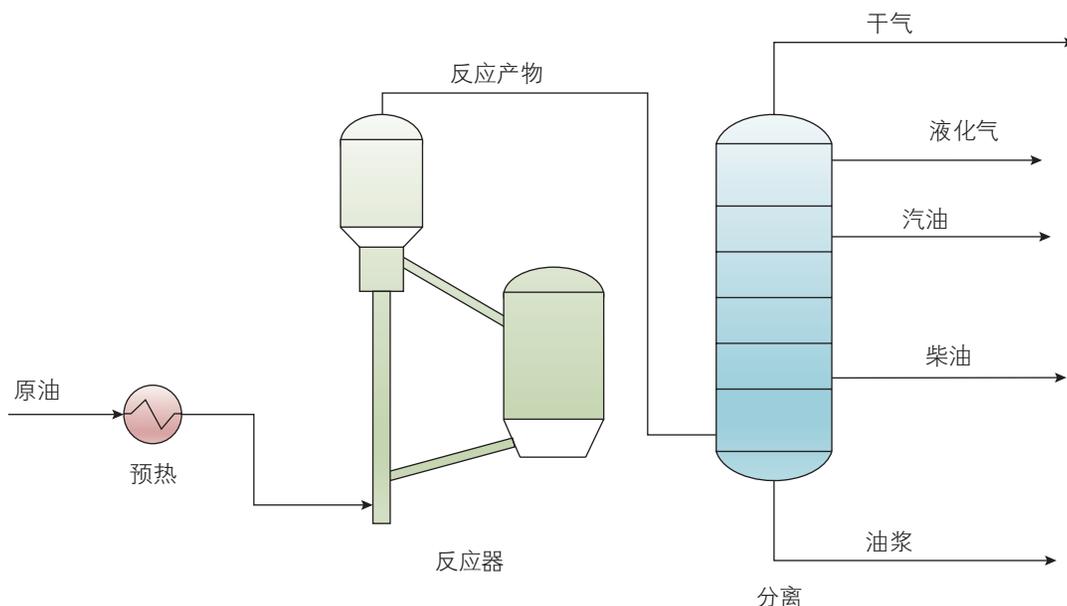


图 1 原油直接催化裂解工艺流程简图  
Fig. 1 Crude oil direct catalytic cracking process diagram

表 3 产品分布模拟结果验证

Table 3 Simulation results verification of product distribution

项目	工业中试数据	过程模拟数据
干气	5.880	5.889
甲烷	0.137	0.136
乙烷	0.054	0.053
乙烯	0.104	0.107
液化气	18.020	18.242
丙烷	0.070	0.060
丙烯	0.470	0.468
异丁烷	0.156	0.154
异丁烯	0.111	0.110
汽油	39.160	39.141
柴油	20.640	20.483
油浆	8.780	8.782
焦炭	7.020	6.963
合计	99.500 <sup>a</sup>	99.500 <sup>a</sup>

a. 不包括 0.5% 的装置损失

表 4 汽油性质模拟结果验证

Table 4 Simulation results verification of gasoline properties

项目	工业中试数据	过程模拟数据
初馏点/°C	30	29.79
10%/°C	48	38.01
50%/°C	95	104.23
90%/°C	170	166.69
终馏点/°C	194	194.96
研究法辛烷值	94	92.04

表 5 柴油性质模拟结果验证

Table 5 Simulation results verification of diesel oil properties

项目	工业中试数据	过程模拟数据
初馏点/°C	182	186.61
10%/°C	227	213.69
50%/°C	268	270.12
90%/°C	322	324.18
95%/°C	332	332.43

## 2 工艺参数分析与多目标优化

### 2.1 工艺参数分析

对于原油直接制化学品技术,在原料油固定的情况下,剂油比是影响整个反应过程的最根本的一个参数,但剂油比并不是一个相对独立的变量。在实际装置中,由于反应—再生系统需要保持热量平衡,预热温度、反应温度、再生器温度等发生改变均能影响剂

油比,从而影响反应过程。因此,本研究对原料油预热温度、反应温度、再生器温度等工艺参数进行了灵敏度分析。此外,催化剂平衡活性也是一个重要的工艺参数,本研究对催化剂平衡活性也进行了分析。各个产物的分布对上述工艺参数的变化结果如图 2 所示。

从图 2(a)中可以看出随着催化剂平衡活性的增加,在反应温度等条件不变的情况下,剂油比逐渐减小。在催化剂平衡活性为 62%~68% 的区间内,汽油、液化气、乙烯+丙烯产率存在最大值,同时柴油产率存在最小值。随着催化剂平衡活性继续增加,活性过强将导致焦炭产率迅速增加。同时由于活性增强,裂解能力的增加,气体产率增加同时油浆产率减小。因此,催化剂平衡活性在 62%~68% 之间存在最优值。从图 2(b)中可以看出,随着反应温度的增加,干气、液化气、乙烯+丙烯、焦炭的产率逐渐增加,柴油、油浆产量逐渐下降。汽油产率在反应温度为 520 °C 附近出现最大值。出现该趋势的主要原因是随着反应温度的增加,剂油比相应增加,裂解反应增强导致气体和焦炭产率增加,中间产物产率下降。从图 2(c)中可以看出,提高预热温度导致液化气、干气和焦炭的产率减小,而油浆和柴油产率呈现相反趋势。汽油产率在预热温度为 200 °C 左右时产生最大值。出现该趋势的主要原因是催化剂活性不变的情况下,剂油比随预热温度的增加而减小,而剂油比减小导致裂解转化率降低从而导致气体和焦炭产率下降,中间产物产率增加。从图 2(d)中可以看出,随着再生温度的增加,干气、液化气产率出现小幅度下降,其中乙烯、丙烯产率以及焦炭产率迅速下降,油浆和柴油产率增加。汽油产率在再生温度为 700~710 °C 之间出现最大值。出现该趋势的主要原因是再生温度的提高导致剂油比逐渐降低,因此导致气体和焦炭产率下降,中间产物增加。总体来看,各个条件与剂油比相互关联产生不同的影响,仅根据单一的变化趋势无法有效找到最优的工艺参数组合。通过单因素分析可以确定的烯烃产率最大化的最优参数组合为:预热温度为 180 °C,提升管出口温度为 540 °C,再生器温度为 695 °C,催化剂平衡活性为 65%。

### 2.2 多目标优化及结果

根据变工况数据建立数据集,使用交叉验证方法保证模型具有较好的泛化性,训练集、验证集、测试集的比例为 0.7 : 0.2 : 0.1。使用 python 编写了深度残差收缩网络模型(DRSN)。DRSN 采用残差块的设置,训练效果不会随着网络深度增加而变差,能够高效处

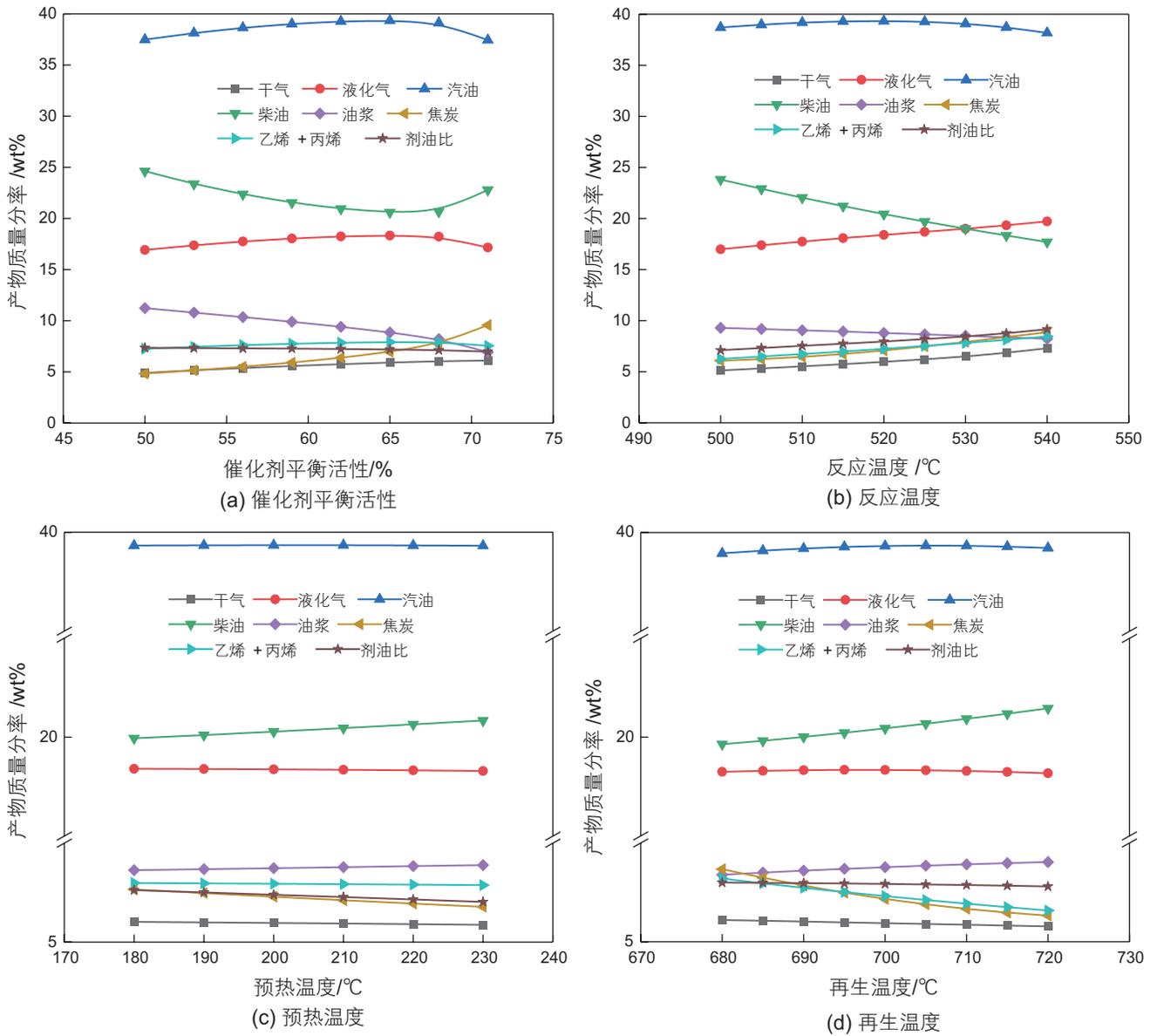


图2 产物分布各变量的变化趋势  
Fig. 2 The variation trend of each variable of product distribution

理复杂数据并减少数据中噪声带来的影响。本研究每个隐藏层设置了5个残差块。优化器采用Adam，可以自适应的调整模型学习率。模型的评价指标采用了均方差。训练好的模型将用于遗传算法中对适应度函数的快速计算。

考虑到实际装置的压力受到现实情况因素约束，且沉降器和再生器之间需要保持压力平衡以维持反应器流化状态，一般不发生变化，因此本研究未对压力进行分析与优化。根据上述工艺参数的分析，对催化剂平衡活性、原料油预热温度、提升管出口温度、再生器温度在一定范围内进行了约束，具体见式(3)~式(6)。同时考虑反应过程的质量平衡和能量平衡，对进

出整个流程的质量和能量进行了约束，具体见式(7)~式(8)。由于传统方法采用Python编程的多目标优化算法与Aspen HYSYS进行联合在线优化，在Aspen HYSYS求解过程中将自动对质量平衡、能量平衡进行约束求解。本研究创新性的编写了神经网络模型作为Aspen HYSYS中机理模型的代理，以加速整个优化过程。定义优化的目标函数为最大化乙烯、丙烯产率及最小化焦炭产率。由于优化算法以最小化的方式求解，因此将乙烯、丙烯产率变为负值转变为最小化问题求解，具体见式(1)~式(2)。

$$\text{目标函数: } \min -OY_{\text{total}} = -C_2^= - C_3^= \quad (1)$$

$$\text{目标函数: } \min \text{Coke}_{\text{yields}} \quad (2)$$

约束:  $62\% \ll MAT \ll 68\%$

$180^\circ\text{C} \ll PT \ll 230^\circ\text{C}$

$500^\circ\text{C} \ll ROT \ll 540^\circ\text{C}$

$680^\circ\text{C} \ll RT \ll 720^\circ\text{C}$

$$\sum_{\eta=1}^{\eta} F_{\eta}^{\text{in}} = \sum_{\mu=1}^{\mu} F_{\mu}^{\text{out}}$$

$$\sum_{v=1}^v E_v^{\text{in}} = \sum_{\tau=1}^{\tau} E_{\tau}^{\text{out}}$$

式中:  $F_{\eta}^{\text{in}}$  和  $F_{\mu}^{\text{out}}$  分别表示进入系统的第  $\eta$  股物流的质量流率和离开系统的第  $\mu$  股物流的质量流率,  $\text{t}\cdot\text{h}^{-1}$ ;

(3)  $E_v^{\text{in}}$  和  $E_{\tau}^{\text{out}}$  分别表示进入系统的第  $v$  股物流或热流的热量和离开系统的第  $\tau$  股物流或热流的热量,  $\text{J}\cdot\text{h}^{-1}$ ;

(4)  $MAT$  为催化剂平衡活性, %;

(5)  $PT$  为原料油预热温度,  $^\circ\text{C}$ ;

(6)  $ROT$  为提升管出口温度,  $^\circ\text{C}$ ;

(7)  $RT$  为再生器温度,  $^\circ\text{C}$ 。

本研究利用以神经网络技术为基础对与 Aspen HYSYS 进行代理, 直接对接多目标优化算法, 实现了联合在线多目标优化。神经网络模型作为一个黑箱模型, 能够快速处理 Aspen HYSYS 模型中的输入数据, 在短短几秒内就能生成精确的输出预测值。具体的优化流程见图 3。本研究采用了 NAGA-II 多目标优化算法, 即带精英策略的快速非支配排序遗传算

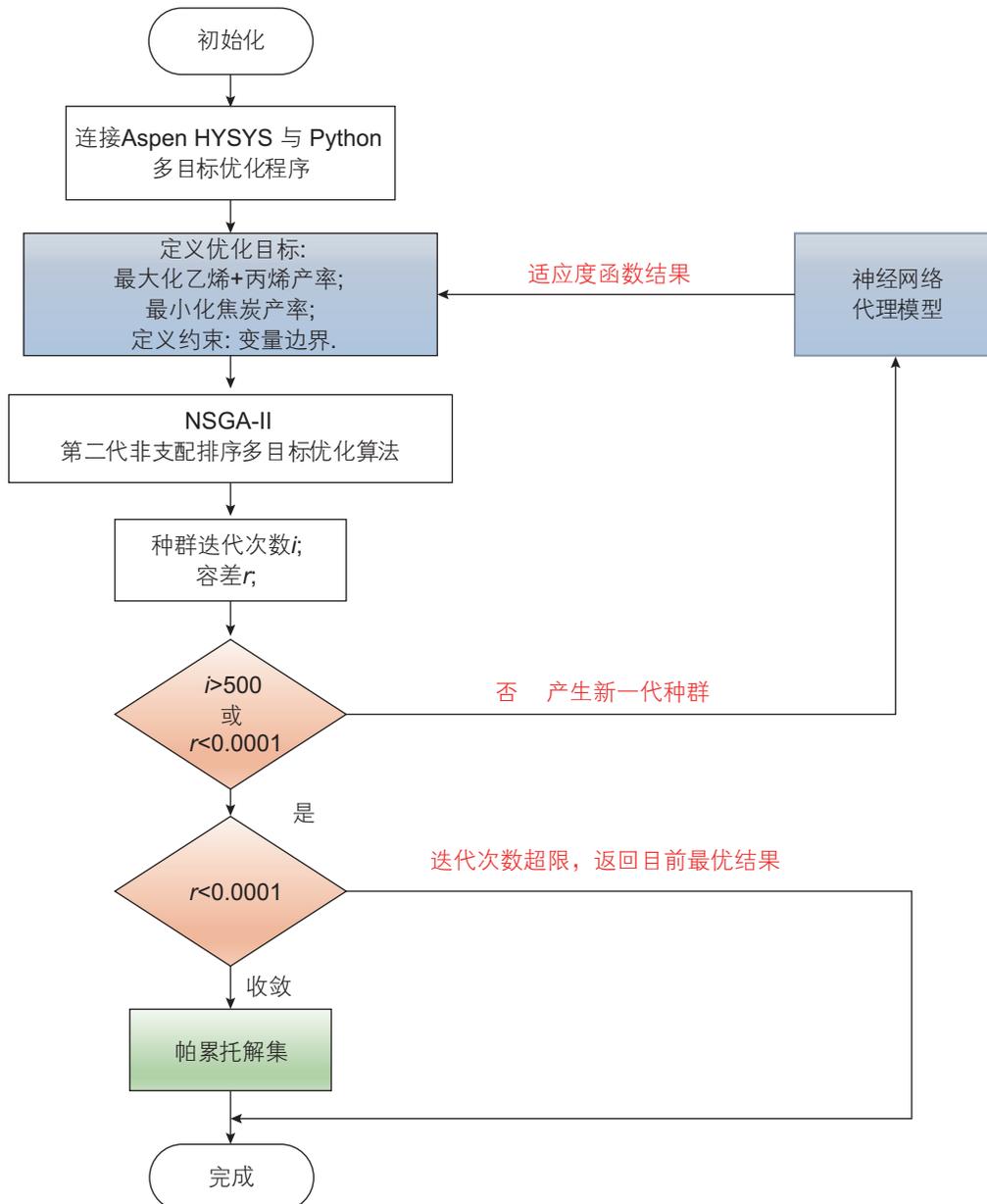


图 3 多目标优化流程图

Fig. 3 Multi-objective optimization flow chart

法。该算法与遗传算法(GA)和粒子群优化算法(PSO)类似,即模仿自然界中“优胜劣汰”法则,不断筛选出更优的个体。对于复杂优化问题能够快速寻找全局最优点。但NSGA-II相较于GA和PSO增加了非支配排序的选择过程,能够使该算法更适用于多目标优化问题。在Python中,将式(1)至式(8)进行编程实现,并将其作为输入传递给NSGA-II算法。NSGA-II初始化中生成的种群数量为50个,种群迭代最大次数设置为500代。目标函数的收敛容差设置为0.0001。在种群的每次迭代中,新产生的个体都会被反馈到神经网络代理模型中进行求解,从而得到目标函数值。每次迭代结束后,会对比目标函数值在迭代前后的残差。当残差 $r$ 小于0.0001时,可以认为找到了最优解,并输出所有种群最终优化结果构成的Pareto解集。如果在设定的迭代次数内仍未找到最优解,则会反馈错误信息。

采用NSGA-II对原油直接催化裂解过程进行多目标优化,得到Pareto可行解集如图4(a)所示,图上的每一个点都是优化设计点。然而,在实际工程应用中,

研究者需要根据目标函数的实际意义和重要性从中选择一个最优方案。本研究采用优劣解距离法(TOPSIS法)。该方法提出理想点的概念,即将所有解的目标函数值进行归一化处理,同时取最优值,从而根据每个解与理想点的距离进行评估<sup>[27]</sup>。Pareto前沿曲线上的点与理想点的距离如图4(b)所示,以最小距离的点作为该Pareto前沿曲线的最优点。可以看出,最优解对应的工艺参数为:预热温度为229.99℃,提升管出口温度为539.51℃,再生器温度为720℃,催化剂平衡活性为62%,此时乙烯+丙烯产率为8.873%,焦炭产率为6.877%。

### 3 讨论与分析

单因素分析仅对烯烃产率最大化进行优化,而多目标优化同时对烯烃产率最大化和焦炭产率最小化进行优化,将单因素分析获得的结果与多目标优化获得的结果进行对比,工艺参数见表6所示。两种方式优化后反应温度均得到提高,说明反应温度提高是烯烃

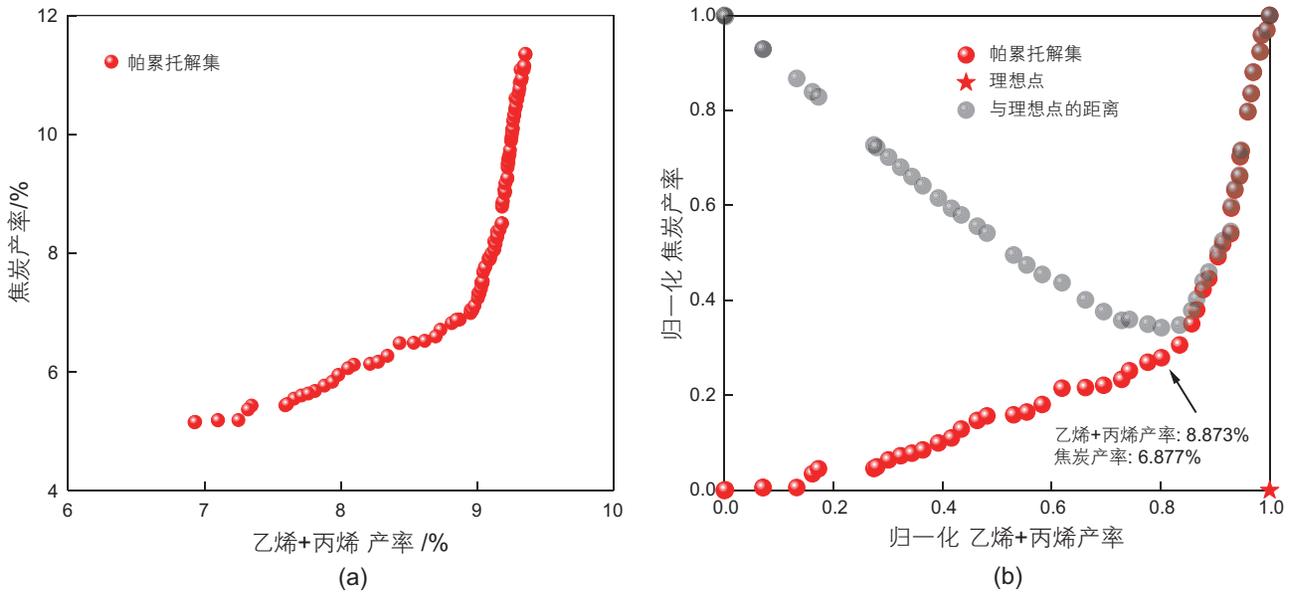


图4 多目标优化结果

Fig. 4 Multi-objective optimization results

表6 工艺参数对比

Table 6 Comparison of process parameters

项目	优化前	单因素分析	多目标优化
预热温度/℃	217	180	229.99
反应温度/℃	519	540	539.51
再生温度/℃	703	695	720
催化剂平衡活性/%	65.2	65	62

收率提高的充分条件。预热温度与再生温度降低在单因素分析中表现为对烯烃产率最大化有利,但从表中可以看出,多目标优化结果中预热温度和再生温度提高了,说明在提高反应温度的前提下,提高预热温度和再生温度对降低焦炭产率具有较大影响,且该操作并不会显著影响烯烃产率。

将两种工况在 Aspen HYSYS 中进行模拟,获得的产物分布如表 7 所示。表 7 中产物分布相较于表 3 去

除了反应损失并进行归一化处理。可以看出,多目标优化工况相较于单因素分析工况焦炭产率明显降低,同时液化气中乙烯、丙烯含量仍保持在 9% 左右,相较于优化前烯烃产率增加 1%。这一研究结果证明了原油直接催化裂解制化学品智能模型在优化方面的有效性。

表 7 产品分布比较

Table 7 Product distribution comparison

项目	优化前	单因素分析/%	多目标优化/%
干气	5.92	7.48	6.87
液化气	18.33	19.68	19.58
汽油	39.34	37.79	38.50
柴油	20.59	16.96	19.12
油浆	8.83	7.91	9.20
焦炭	7.00	10.18	6.74
乙烯	1.94	2.50	2.38
丙烯	5.97	6.77	6.53

## 4 结论

本研究对多操作变量进行解耦分析,对原油直接催化裂解制化学品技术工业生产具有指导意义。此外,建立的神经网络代理模型能够实现产物分布的快速预测与优化,对工艺装置实现实时在线优化具有参考意义。在未来研究中,进一步探寻更加高效、准确的神经网络结构对预测精度的提升具有巨大帮助。目前在

化学工业上的数据集主要以二维表格的数据形式存在,而大多数神经网络算法是将原始数据进行图像格式或序列格式的处理,以发挥神经网络模型的优势。在这一过程中如何将二维表格数据转化成有效的图像格式或序列格式仍然是一个未探明的领域。同时,训练过程的可解释性也有待提升。在未来的研究中,将针对二维表格数据的转化以提高模型准确性,以及模型可解释性方向展开工作。

## 参考文献

- [1] 李明丰, 吴昊, 沈宇, 等. “双碳”背景下炼化企业高质量发展路径探讨[J]. 石油学报(石油加工), 2022, 38(03): 493-499. [LI M F, WU H, SHEN Y, et al. High-quality development path for refining and chemical enterprises under the dual carbon background[J]. Acta Petrolei Sinica(Petroleum Processing Section), 2022, 38(03): 493-499.]
- [2] 徐海丰. 2019 年世界乙烯行业发展状况与趋势[J]. 国际石油经济, 2020, 28(5): 48-54. [XU H F. Global ethylene industry in 2019 and its development trend[J]. International Petroleum Economics, 2020, 28(5): 48-54.]
- [3] 田原宇, 乔英云, 刘欣梅, 等. 碳中和约束下的石油炼制技术与产业发展动向及展望[J]. 中外能源, 2022, 27(7): 9-16. [TIAN Y Y, QIAO Y Y, LIU X M, et al. Development trends and prospects of petroleum refining technology and industry under the constraints of carbon neutrality[J]. Sino-Global Energy, 2022, 27(7): 9-16.]
- [4] 白颀. 以双循环格局提升石化产业链发展水平——“十四五”石化行业高效、高值、低碳、绿色发展的研究和思考[J]. 化学工业, 2021, 39(02): 1-14. [BAI Y. Enhance the development level of petrochemical industry chain with double circulation pattern--“Fourteen Five” petrochemical industry efficient, high value, low carbon, green development of the study[J]. Chemical Industry, 2021, 39(02): 1-14.]
- [5] 李德芳, 索寒生. 加快智能工厂进程, 促进生态文明建设[J]. 化工学报, 2014, 65(2): 374-380. [LI D F, SUO H S. Accelerate the process of smart plant, promote ecological civilization construction[J]. CIESC Journal, 2014, 65(2): 374-380.]

- [6] 于宸, 顾方, 鲁瑛, 等. 低碳烯烃科技发展方向分析[J]. 精细与专用化学品, 2020, 28(10): 1-4. [YU C, GU F, LU Y, et al. Analyzing the direction of technological development for light olefins[J]. Fine and Specialty Chemicals, 2020, 28(10): 1-4.]
- [7] 赵彤阳, 龚华俊, 朱彬彬. 我国石化化工原料低碳化发展路径[J]. 化学工业, 2023, 41(01): 1-12. [ZHAO T Y, GONG H J, ZHU B B. Low-carbon raw materials development route of petrochemical and chemical industry in China[J]. Chemical Industry, 2023, 41(01): 1-12.]
- [8] 张建飞, 林嘉奖, 罗雄麟, 等. 重油催化裂化装置产品分布调控与优化模拟分析[J]. 化工学报, 2022, 73(3): 1232-1245. [ZHANG J F, LIN J J, LUO X L, et al. Modeling analysis for product distribution control and optimization of heavy oil FCCU[J]. CIESC Journal, 2022, 73(3): 1232-1245.]
- [9] 谢朝钢. DCC工艺技术灵活性及其在化工型炼油厂的应用[J]. 石油炼制与化工, 2022, 53(7): 1-5. [XIE C G. Flexibility of DCC technology and its commercial application in chemical-type refinery[J]. Petroleum Processing and Petrochemicals, 2022, 53(7): 1-5.]
- [10] 鞠林青. 浙江石化 40Mt/a 炼化一体化项目规划设计总结[J]. 炼油技术与工程, 2023, 53(1): 31-35. [JU L Q. Summary of planning and design of 40 MM TPY refining and chemical integration project of Zhejiang Petroleum & Chemical Co., Ltd. [J]. Petroleum Refinery Engineering, 2023, 53(1): 31-35.]
- [11] 史权, 张霖宙, 赵锁奇, 等. 炼化分子管理技术: 概念与理论基础[J]. 石油科学通报, 2016, 1(02): 270-278. [SHI Q, ZHANG L Z, ZHAO S Q, et al. Molecular management for petroleum refining: Concepts and fundamentals[J]. Petroleum Science Bulletin, 2016, 1(02): 270-278.]
- [12] 滕霄云. 原油直接制化学品技术变革对我国煤制烯烃的影响分析[J]. 能源科技, 2023, 21(02): 73-76. [TENG X Y. Analysis of the impact of technological transformation in crude oil to chemicals on ccoal to olefins in China[J]. Energy Science and Technology, 2023, 21(02): 73-76.]
- [13] 闫鸿飞, 孙世源, 王龙延, 等. 原油直接制化学品技术进展[J]. 现代化工, 2022, 42(06): 40-42. [YAN H F, SUN S Y, WANG L Y, et al. Technology progress on crude oil direct to chemicals process[J]. Modern Chemical Industry, 2022, 42(06): 40-42.]
- [14] 熊昊, 梁潇予, 张晨曦, 等. 重质油直接制化工品: 多级逆流下行催化裂解技术[J]. 化工学报, 2023, 74(1): 86-104. [XIONG H, LIANG X Y, ZHANG C X, et al. Heavy oil to chemicals: Multi-stage downer catalytic pyrolysis[J]. CIESC Journal, 2023, 74(1): 86-104.]
- [15] 徐海丰, 于晗. 全球原油制化学品项目发展现状及石化产品前景分析[J]. 国际石油经济, 2019, 27(5): 23-30. [XU H F, YU H. Development status of global crude oil-to-chemicals projects and prospects of petrochemical products[J]. International Petroleum Economics, 2019, 27(5): 23-30.]
- [16] 吴青. 原油(重油)制化学品的技术及其进展——I. 原油蒸汽裂解技术[J]. 炼油技术与工程, 2022, 52(4): 1-10. [WU Q. Technology and progress in crude oil to chemicals Part one: crude oil steam cracking technology[J]. Petroleum Refinery Engineering, 2022, 52(4): 1-10.]
- [17] 吴青. 原油(重油)制化学品的技术及其进展——II. 重油催化裂解与DPC碱催化技术[J]. 炼油技术与工程, 2022, 52(8): 1-7, 15. [WU Q. Technology and progress in crude oil to chemicals part two: catalytic cracking technology and DPC basic catalytic cutting technology[J]. Petroleum Refinery Engineering, 2022, 52(8): 1-7, 15.]
- [18] 贺安新, 侯利国, 靳凤英, 等. 原油(重油)直接制化学品(DPC)技术在惠州石化的工业应用[J]. 炼油技术与工程, 2023, 53(4): 34-38. [HE A X, HOU L G, JIN F Y, et al. Industrial application of direct petroleum to chemicals(DPC)technology in Huizhou petrochemical company[J]. Petroleum Refinery Engineering, 2023, 53(4): 34-38.]
- [19] 马致远, 辛利, 田巧巧, 等. 原油/重油直接制化学品碱催化技术的工业应用[J]. 石油炼制与化工, 2023, 54(6): 7-11. [MA Z Y, XIN L, TIAN Q Q, et al. Commercial application of alkali catalytic technology for direct petroleum cut to chemicals&materials[J]. Petroleum Processing and Petrochemicals, 2023, 54(6): 7-11.]
- [20] 李德芳, 蒋白桦, 索寒生, 等. 石化企业能源优化系统设计与应用[J]. 化工学报, 2016, 67(1): 285-293. [LI D F, JIANG B H, SUO H S, et al. Design and application of energy optimization system in petrochemical enterprise[J]. CIESC Journal, 2016, 67(1): 285-293.]
- [21] 周鑫, 闫昊, 赵辉, 等. 原油直接催化裂解过程模拟与工艺参数优化[J]. 石油学报(石油加工), 2021, 37(6): 1216-1224. [ZHOU X, YAN H, Zhao H, et al. Simulation of the crude oil direct catalytic cracking process and optimization of process parameters[J]. Acta Petrolei Sinica(Petroleum Processing Section), 2021, 37(6): 1216-1224.]
- [22] ZHOU X, LI S, WANG Y, et al. Crude oil hierarchical catalytic cracking for maximizing chemicals production: Pilot-scale test, process optimization strategy, techno-economic-society-environment assessment[J]. ENERGY CONVERSION AND MANAGEMENT, 2022, 253: 115149.
- [23] ZHOU X, SUN Z, YAN H, et al. Produce petrochemicals directly from crude oil catalytic cracking, a techno-economic analysis and life cycle society-environment assessment[J]. JOURNAL OF CLEANER PRODUCTION, 2021, 308: 127283.
- [24] ZHAO H, GOU D, YUAN Z, et al. Jumped chemical output of crude oil via one-step leaping over regular routes, an integrated molecular-level process modeling strategy and a many-objective optimization framework[J]. JOURNAL OF CLEANER PRODUCTION, 2023, 411: 137354.

- [25] 周鑫, 张智博, 杨诗棋, 等. 原油直接催化裂解 UPC 工艺过程模拟与反应参数多目标优化[J]. 石油炼制与化工, 2024, 55(1): 226–232. [ZHOU X, ZHANG Z B, YANG S Q, et al. Process simulation and multi-objective optimization of upc process for direct catalytic cracking of crude oil[J]. Petroleum Processing and Petrochemicals, 2024, 55(1): 226–232.]
- [26] 魏彬, 周鑫, 王耀伟, 等. 基于改进 NSGA-II 算法的 FCC 分离系统多目标优化[J]. 化工学报, 2021, 72(5): 2735–2744. [WEI B, ZHOU X, WANG Y W, et al. Multi-objective optimization of FCC separation system based on improved NSGA-II[J]. CIESC Journal, 2021, 72(5): 2735–2744.]
- [27] PASHIKANTI K, LIU Y A. Predictive modeling of large-scale integrated refinery reaction and fractionation systems from plant data. Part 2: fluid catalytic cracking (FCC) process[J]. ENERGY & FUELS, 2011, 25(11): 5298–5319.

(编辑 马桂霞)

**第一作者:** 张智博 (2001 年—), 硕士研究生, 从事石油炼制过程模拟、智能化工等方面研究, s23030088@s.upc.edu.cn。

**通信作者:** 周鑫 (1991 年—), 博士, 副教授, 从事化工系统工程、生命周期评估、智能化工等方面研究, xinzhou@ouc.edu.cn。