

研究论文

催化裂解过程分子尺度的反应动力学模拟：原料油分子尺度的模拟

[欧阳福生](#) [王胜](#) [江洪波](#) [翁惠新](#)

(华东理工大学 石油加工研究所, 上海 200237)

摘要 以工业实测数据为基础, 运用结构导向集总方法构造分子, 对催化裂解原料油进行了分子尺度上的蒙特卡罗模拟。结果表明, Monte Carlo方法可以在分子尺度上实现对催化裂解原料很好的模拟。两种工况下原料的平均分子量、饱和烃、芳烃、胶质沥青、碳、氢、硫、氮含量等性质的计算值与实际值吻合, 且由此产生的分子矩阵将为后续反应网络的建立打下基础。

关键词 [催化裂解](#); [复杂反应体系](#); [分子尺度](#); [原料性质](#); [蒙特卡罗模拟](#)

收稿日期 2007-2-24 修回日期 2007-8-3

通讯作者 欧阳福生 ouyfish@ecust.edu.cn

DOI 分类号 TE624.3

