



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 101903765 B

(45) 授权公告日 2014.06.25

(21) 申请号 200880121685.8

G06F 19/00(2011.01)

(22) 申请日 2008.12.17

(56) 对比文件

(30) 优先权数据

61/015,490 2007.12.20 US

US 2006/0199743 A1, 2006.09.07,

CN 1427254 A, 2003.07.02,

JP 特开 2002-334293 A, 2002.11.22,

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2010.06.18

B. Basu 等. Prediction of Oxidation Stability of Inhibited Base Oils from Chemical Composition using an Artificial Neural Network (ANN). 《Lubrication Science》. 1998, 第 10 卷 (第 2 期),

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/US2008/087180 2008.12.17

Brajendra K. Sharma 等. Pressure Viscosity Coefficient of Lubricant Base Oils As Estimated by Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. 《Ind. Eng. Chem. Res.》. 2002, 第 41 卷

(87) PCT国际申请的公布数据

W02009/085834 EN 2009.07.09

A. S. Pensado 等. Relationship between Viscosity Coefficients and Volumetric Properties: Measurements and Modeling for Pentaerythritol Esters. 《Ind. Eng. Chem. Res.》. 2006, 第 45 卷

(73) 专利权人 雪佛龙美国公司

地址 美国加利福尼亚

审查员 宋光

(72) 发明人 A·R·普拉德翰 J·M·罗森鲍姆

N·J·伯特兰 D·C·克雷默

A·G·希 M·I·常

(74) 专利代理机构 中国国际贸易促进委员会专

利商标事务所 11038

代理人 赵冰

(51) Int. Cl.

G01N 24/08(2006.01)

G01R 33/30(2006.01)

权利要求书1页 说明书6页 附图23页

(54) 发明名称

原油特性专家系统

(57) 摘要

用于预测润滑剂原油混合物的特性的方法, 包括生成至少两种润滑剂原油的混合物的样本的 NMR 光谱、HPLC-UV 光谱和 FIMS 光谱和由所述光谱确定样本的至少一个组成物结构分子参数的步骤。然后生成样本的 SIMDIST 和 HPO 分析结果, 以由这样的分析结果确定样本的组成物沸点分布和分子重量。组成物结构分子参数、组成物沸点分布和组成物分子重量被加到神经网络上进行训练, 将组成物结构分子参数与组成物沸点分布和组成物分子重量进行相关, 以预测样本的组合物特性。所述特性包括在 40℃ 下的运动粘滞系数、在 100℃ 下的运动粘滞系数、粘滞度指数、始凝点、氧化性能等等。

支持证据: 表1: 用于建模的输入结构参数

分析技术	缩写	输入参数
NMR	SIC	每个分子的谱峰面积
	PIromax	每个分子的芳基/烷基碳
	PIrom	末端甲基
	PI2-mb	2-甲基
	PI3-mb	3-甲基
	PI4-mb	4-甲基
	PI5-mb	5-甲基
	PI6-mb	6-甲基
	PI7-mb	7-甲基
	PI8-mb	8-甲基
	PI9-mb	9-甲基
	PI10-mb	10-甲基
	PI11-mb	11-甲基
	PI12-mb	12-甲基
	PI13-mb	13-甲基
	PI14-mb	14-甲基
	PI15-mb	15-甲基
PIromCH2	每个分子的芳基的甲基碳	
PIromCH	C-碳	
PIromC	每个分子的芳基的碳	
NCH2	每个分子的芳基的亚甲基	
NCH	每个分子的芳基的亚甲基	
NCH	每个分子的芳基的亚甲基	
Aromenub	非芳基的芳基碳	
Aromenub	非芳基的芳基碳	
Aromenub	非芳基的芳基碳	
is	分支指数	
SP	分支指数	
FCl	FCl	
HPLC	HPLC1R	HPLC-UV 1 峰
	HPLC2R	HPLC-UV 2 峰
	HPLC3R	HPLC-UV 3 峰
SIMDIST	TBP/50%	SIMDIST TBP 在 50 wt% F
	FIMS	通过 FIMS 的峰数 (在 50%)
FIMS	FIMS1	通过 FIMS 的 1-本峰 (在 50%)
	FIMS2	通过 FIMS 的 2-本峰 (在 50%)
	FIMS3	通过 FIMS 的 3-本峰 (在 50%)
	FIMS4	通过 FIMS 的 4-本峰 (在 50%)

CN 101903765 B

1. 一种用于预测润滑剂原油混合物的特性的方法,该方法包括以下步骤:
 - a. 生成至少两种润滑剂原油的混合物的样本的 NMR 光谱、HPLC-UV 光谱和 FIMS 光谱中的任一光谱;
 - b. 由所述任一光谱确定样本的至少一个组成物结构分子参数;
 - c. 生成样本的 SIMDIST 和 HPO 分析结果;
 - d. 由所述分析结果确定样本的组成物沸点分布和分子重量;
 - e. 把所述至少一个组成物结构分子参数、组成物沸点分布和组成物分子重量加到经过训练的神经网络上进行训练,与所述至少一个组成物结构分子参数、组成物沸点分布和组成物分子重量进行相关,以预测所述样本的组合物特性,其中所述特性包括在 40°C 下的运动粘滞系数、在 100°C 下的运动粘滞系数、粘滞度指数、始凝点和氧化性能。
2. 权利要求 1 的方法,还包括提供神经网络和训练所述神经网络以提供所述经过训练的神经网络的步骤。
3. 权利要求 2 的方法,其中所述训练步骤包括以下步骤:
 - a. 得到一组润滑剂原油样本;
 - b. 对于所述一组润滑剂原油样本,生成 NMR、HPLC-UV 和 FIMS 光谱中的任一光谱以及 SIMIST 和 VPO 数据;
 - c. 测量所述一组润滑剂原油样本的所希望的特性,包括在 40°C 下的运动粘滞系数、在 100°C 下的运动粘滞系数、粘滞度指数、始凝点和氧化性能,以提供已知的特性;
 - d. 确定每个所述润滑剂原油样本的至少一个结构分子参数、沸点分布和分子重量;
 - e. 对于已知的润滑剂原油特性,构建对于所述一组润滑剂原油样本的至少一个组成物结构分子参数、沸点分布和分子重量以及已知的特性的矩阵,由此得到针对每个润滑剂原油特性的模型;以及
 - f. 用所述至少一个结构分子参数、沸点分布和分子重量以及每个润滑剂原油特性矩阵来训练神经网络,得到在所述至少一个结构分子参数、沸点分布和分子重量输入与润滑剂原油特性输出之间的相关性,以提供所述经过训练的神经网络。

原油特性专家系统

[0001] 版权声明和授权

[0002] 本专利文献包含受版权保护的材料。

[0003] © Copyright 2007. Chevron USA Inc. All rights reserved.

[0004] 对于这个受版权保护的材料,拥有者美国雪佛龙石油公司不反对从如在专利商标局专利文件或任何国家的记录中出现的专利公开内容的任一项的传真复制,而在其它情况下将保留所有的权利。

技术领域

[0005] 本发明涉及用于预测原油特性的基于计算机的专家系统。

背景技术

[0006] 当前,在润滑工业中需要一种允许预测原油特性的改进的方法,更具体地,允许描述基本组分和具有特定特性的润滑剂。现在,还没有允许预测原油特性的可用的方法。当前,原油通过 ASTM、API 和 DIN 方法被表征。这些方法是费时的,且需要大量的样本量。已经有许多从通过 NMR 分光术得到的结构信息进行预测原油特性方面的工作。例如,Shea 等 (1) 使用 NMR 分光术和神经网络用于这个目的。B. K. Sharma 等 (2) 把润滑剂原油的粘滞系数与通过 NMR 分光术得到的结构参数相关联。Gatto 等 (3) 把加氢裂解的原油和聚 α 烯烃的物理特性和抗氧化反应与由质谱仪确定的化学组成相关联。然而,这些研究中的大多数研究限于特定的样本组或特定的分析技术。除了 NMR 以外,没有报告使用各种分析技术来改进原油模型的预测能力的知识。更重要地,还没有可允许描述具有特定特性的原油和润滑剂的可用的方法。

[0007] 原油预测器最好具有用户友好的界面。人们可以从多达例如来自在美国混合单位处可提供的约 40 种原油中的四种原油的菜单中进行选择。通过单击,可以预测混合物的原油特性,包括 VI、Vis40、Vis100、OxBN、灌注点、始凝点和 NOACK 挥发性。在优选实施例中,它包括更多的原油。

[0008] 测试是通过以下步骤完成的:测试具有已知特性的混合物的模型,准备已知的组成中的两种、三种和四种原油的混合物,并提交混合物用于以上的测试以及 NMR 分析。

[0009] 在该文献中报告的各种研究 (1-3) 认识到,大多数原油的大量特性是从原油中的碳氢化合物型分布得出的。在最近 60 年间,NMR 分光术变为用于确定碳氢化合物的结构的主要的工具之一。用于碳氢化合物的特征表征的其它技术是 MS 和 HPLC。在本发明中,原油的结构参数通过诸如 NMR、HPLC-UV 和 FIMS 那样的这些分析技术被确定。原油通过使用 SIMDIST 和 VPO 而被进一步表征,分别得到沸点分布和分子重量。这些结构参数然后按照初始的原油组的实验观察的物理特性进行建模。人工神经网络被用来开发这样的模型。多种可被建模的特性包括但不限于:在 40°C 下的运动粘滞系数、在 100°C 下的运动粘滞系数、粘滞度指数、灌注点、始凝点、氧化性能等等。作为初始研究的一部分,从组 I、II 和 III 中选择 20 种原油样本。对于通过 NMR 分光仪进行的特征表征,每种原油通过使用定量的

^{13}C NMR 技术被表征。一旦获取光谱,就记录下在几个区域中的积分,以便区分不同的类型的碳。所有这些样本通过使用上述的分析技术被进一步表征,通过使用这些技术所确定的结构参数在表 1 给出。这些结构参数通过使用来自 Ward System Group 的 NeuroShell 预测器 Release 2.2 软件进行建模。所有的模型通过使用后向传播算法被构建。针对每一种特性构建一个单独的独特模型。在模型被开发出来后,得到相关系数。对于粘滞度指数、在 40°C 下的运动粘滞系数、在 100°C 下的运动粘滞系数、灌注点、始凝点和氧化性能等的预期的数值和估计的数值的比较结果分别在表 3, 4 和 5 中给出。对于各种模型得到的相关系数建议:从各种分析技术得到的结构特性可以针对原油的各种物理特性精确地建模。这种技术在以下方面具有价值:1) 预测将与希望的性能相匹配的原油混合物,2) 操控原油的流水线改变,3) 识别合成的目标分子以改进性能,4) 减轻实验室测试的工作量,和 5) 设计新的催化剂以使得关键的属性最大化。进一步改进模型和包括具有更多不同特性的原油在内的更多的工作正在进行中。

发明内容

[0010] 本发明包括对润滑油产品的定量测试进行仿真和优化的方法,该方法包括以下步骤:用于预测润滑剂原油混合物的特性的方法,包括生成至少两种润滑剂原油的混合物的样本的 NMR 光谱、HPLC-UV 光谱和 FIMS 光谱以及由所述光谱确定样本的至少一个组成物结构分子参数的步骤。然后生成样本的 SIMDIST 和 HPO 分析结果,以便从这样的分析结果中确定样本的组成物沸点分布和分子重量。组成物结构分子参数被应用,加到经过训练的神经网络上的组成物沸点分布和组成物分子重量被训练,把组成物结构分子参数与组成物沸点分布和组成物分子重量进行相关,以便预测样本的组合物特性。所述特性包括在 40°C 下的运动粘滞系数、在 100°C 下的运动粘滞系数、粘滞度指数、始凝点、氧化性能等等。

[0011] 通过考虑本发明的优选实施例的以下详细说明,将更加清楚本发明的这些和其它特性和优点。在说明过程中将经常参考附图。

附图说明

具体实施方式

[0012] 在所述文献中报告的各种研究 (1-3) 认识到,大多数原油的大量特性是从原油中的碳氢化合物型分布得出的。在最近 60 年间,NMR 分光术变为用于确定碳氢化合物的结构的主要工具之一。用于碳氢化合物的特征表征的其它技术是 MS 和 HPLC。在本发明中,原油的结构参数通过诸如 NMR、HPLC-UV 和 FIMS 这样的分析技术确定。

[0013] 原油还通过使用 SIMDIST 和 VPO 进一步表征,分别得到沸点分布和分子重量。这些结构参数然后按照初始原油组的实验观察的物理特性进行建模。人工神经网络被用来开发这样的模型。可被建模的多种特性包括但不限于:在 40°C 时的运动粘滞系数、在 100°C 时的运动粘滞系数、粘滞度指数、灌注点、始凝点、氧化性能等等。

[0014] 作为初始研究的一部分,从组 I、II 和 III 中选择 20 种原油样本。对于通过 NMR 分光仪进行的特征表征,每种原油通过使用定量 ^{13}C NMR 技术来表征。一旦获取光谱,就记录下在几个区域中的积分,以区分不同类型的碳。所有这些样本通过使用上述的分析技术

被进一步表征,通过使用这些技术确定的结构参数在表 1 中给出。这些结构参数通过使用来自 Ward System Group 的 NeuroShell 预测器 Release 2.2 软件进行建模。所有的模型通过使用后向传播算法构建。针对于每种特性构建一个独立的独特模型。

[0015] 在模型被开发出来后,得到相关系数。对于粘滞度指数、在 40°C 下的运动粘滞系数、在 100°C 下的运动粘滞系数、灌注点和氧化性能等的预期的数值和估计的数值的比较结果分别在表 2、3、4 和 5 中给出。针对各种模型得到的相关系数建议:由各种分析技术得到的结构特性为原油的各种物理特性精确地建模。这种技术在以下方面具有价值:1) 预测将与希望的性能相匹配的原油混合物,2) 处理原油的流水线改变,3) 识别合成的目标分子以改进性能,4) 减轻实验室测试的工作量,和 5) 设计新的催化剂以使得关键的属性最大化。进一步改进模型和包括具有更多不同特性的原油在内的更多的工作正在进行中。

[0016] A. 序言

[0017] 以下的讨论和附图包括其中可以实施本发明的适当的计算环境的一般说明。虽然本发明可以在系统和在操作系统上结合通用计算机、互联网和网络应用以及电子邮件服务器和客户端运行的应用程序上下文进行总结描述,但本领域技术人员将会理解,本发明也可以与其它程序模块组合地实现。通常,程序模块包括子程序、程序、部件、数据结构等等,执行特定的任务或实施特定的抽象数据类型。

[0018] 而且,本领域技术人员将会理解,本发明可以用包括手持设备、微处理器系统、基于微处理器的或可编程的消费电子设备、微计算机 / 服务器、工作站、大型计算机等等在内的其它计算机系统配置来实现。

[0019] 本发明也可以在分布式计算环境下被实施,其中任务由通过通信网链接的远端处理设备执行。在分布计算环境下,程序模块可被放置在本地和远端存储器存储装置中。

[0020] 本发明总体上涉及仿真系统。本发明的处理方面是整体或部分地利用这里的系统及其变体的一系列处理步骤。正如本领域技术人员将会清楚的,处理步骤可以部分被体现为用于在常规的编程的数字计算机、诸如客户机与服务器上运行的计算机程序的代码。该程序代码可被体现为在计算机可读的存储介质上的计算机程序或在通过网络发送的载波中的计算机数据信号。

[0021] B. 本发明的说明性利益

[0022] 该系统帮助解决所涉及的以下问题:

[0023] C. 说明性实施环境

[0024] 说明性的实施环境包括:支持所有 Java 软件部件的 Java 虚拟机(例如, JDK 1.3)。所有的系统部件任选地以全部 Java 编写,除了外部库以外。用来解译由 JSP 页面生成的 http 代码的 web 服务器(例如, Apache) 在系统伪部件 GUI 内。Servlet 引擎(例如, Resin 或 Tomcat) 执行系统伪部件 GUI 的 Java 服务器页面。数据库(例如, ORACLE) 处理在系统内使用的所有持久性的数据。

[0025] 对系统内的数据的实际访问由唯一的部件 (DAT) 控制,这种访问通过使用 JDBC API 来执行。第三方软件部件或库,诸如用于神经网络的 STORM™(来自软件供应商 Elseware) 和用于 Bayesian 网络的 HUGIN™(来自软件供应商 HUGIN) 和 Blaze Advisor™(来自软件供应商 Fair Isaac),作为实际规则引擎的代码。例如通过商标为 Informatica 的软件构建的外部的提取 / 变换 / 加载 (“ETL”) 过程负责用从过去的物理量测试数据库和其

它来源提取和变换的数据填充系统数据库。ETL 工具被用来从一个或多个源 DB 提取数据、变换数据,并把它加载到目标 DB。

[0026] D. 算法

[0027] 适当的算法包括 Bayesian 和神经网络。有关每个网络的细节可以在这些领域的出版物中找到。

[0028] E. 系统结构的概述

[0029] 该系统的功能性结构在下面的图中概述。该系统由五个主要功能性部件组成:数据代表(也称为数据坍塌(collapsing))、模型构建、模型执行、一致性评估和仿真。这些部件不一定必须对应于软件模块,取决于系统是如何实施的。例如,数据坍塌功能任选地可以在系统中的几个软件模块中使用。这种分解是最适合于理解系统如何工作,而不用进入潜在的实施细节。

[0030] F. 用户观点

[0031] G. 数据代表

[0032] H. 模型构建

[0033] I. 用户输入和模型执行

[0034] J. 一致性评估

[0035] K. 程序仿真

[0036] L. 附图详细说明

[0037] 现在参照附图描述本发明及其示例性实施例。图 1 示出在一个实施例中用于本发明的示意性系统图。输入来源。

[0038] 系统的最后输出包括。

[0039] 本发明可被构建在任何常规的计算机平台上运行,但最好是任何授权用户可访问的基于 web 的应用,该用户具有被连接到互联网或公司内部的内网、其上有包含本发明的应用服务器的 web 浏览器。

[0040] 本发明可以通过使用常规的软件工程方法被构建。本发明的潜在用户将通过一个软件利用本发明的系统。

[0041] 图 3 示出在一个实施例中用于本发明的一个说明性实施方案的示意性的分层系统视图。这些层是客户层 300、呈现服务器层 310、应用服务器层 330、数据服务器层 370 和生产数据服务器层 380。客户层 300 包括导航器程序 305,其包括用户界面,优选地为图形用户界面(“GUI”),可选地还包括 web 浏览器。呈现服务器层 310 包括功能连接到导航器程序 305 的 GUI(可选地为 Java 服务器页面)315;功能连接到系统 QUI(可选地为 Java 包)320 的 GUI(可选地为增强型 Java 服务器页面)315,该系统 QUI 功能连接到报告(可选地为 Java 部件)325。

[0042] 应用服务器层 330 包括模型构建器(可选地为 Java 部件)335,其功能连接到以下的每个部件:Bayesian 网络软件(例如,Hugin 商标)(可选地为外部 Java API)340;神经网络软件(例如,Storm 商标)(可选地为外部 Java API);和数据管理(可选地为 Java 部件)350。数据管理 350 功能连接到系统基础包(可选地为 Java 包)355。

[0043] 这里使用的术语目录仅仅作为例子,用来表示用于组织数据、文件或记录的任何可用的编程构建或其它方法。更高级别的目录包括共同的工作空间对象 405 和用户工作空

间对象 410。在每个相应的工作空间下是石油对象 415、部件对象 420、程序对象 425 和变量对象 430。在程序对象 425 下是策略对象 435。在系统启动模块 445 上的负载公共对象和应请求保存对象模块 440 提供由每个模块的名字表示的功能。

[0044] 图 5 示出在一个实施例中用于本发明的一个说明性实施方式的用户界面部件的更详细的示意性系统图。图 5 重复在图 1、3 或 4 中显示的模块，并附加地显示在各用户与系统之间的接口点。数据管理器 505 的作用包括保持数据库和保持实践代码。数据管理器 505 经由 ETL 过程模块 385 与系统接口。

[0045] 图 6 在一个实施例中示出用于本发明的一个说明性实施方式的、带有数据逻辑视图的示意性处理过程流程图。

[0046] 图 9 示出用于总的策略执行的处理逻辑流程。

[0047] 图 10 示出用于各个流水线处理的处理逻辑流程。

[0048] M. 其它实施方案细节

[0049] 1. 术语

[0050] 这里包含的详细说明部分按照由常规的计算机和 / 或有线或无线网络进行的处理和操作的符号表示给出的。由计算机执行的处理和操作包括由处理器操控信号和在驻留在存储器存储装置内的一个或多个介质中的数据分组和数据结构内的这些信号的维护。通常，“数据结构”是施加到数据或对象的组织方案，以使得可以对于该数据或数据模块执行特定的操作，这样在数据结构的经过组织的各部分之间建立特定的关系。

[0051] “数据分组”是具有一个或多个相关字段的数据结构类型，这些字段被共同定义为从一个设备或程序模块发送到另一个设备或程序模块的信息单元。因此，操作的符号表示是由计算机编程和计算机结构领域技术人员使用的、用来把指导和发现最有效地输送给本领域其它技术人员的手段。

[0052] 为了讨论的目的，处理通常被设想为是导致想要的结果的一系列计算机执行的步骤。这些步骤通常需要对物理量进行物理操控。通常，但不一定是必须的，这些量为电、磁或光信号的形式，能够被存储、传送、组合、比较或被另外操控。通常，本领域技术人员把这些信号表示称为比特、字节、字、信息、数据、分组、节点、数、点、项、对象、图像、文件等等。然而应当记住，这些和类似的术语是与用于计算机操作的适当的物理量相关联的，并且这些术语仅仅是被施加到在计算机的运行中和运行期间存在的物理量的惯用的标签。

[0053] 应当理解，在计算机内的操控常常涉及到诸如发布、发送、改变、添加、禁止、确定、比较、报告等术语，它们常常是与操作员执行的人工操作相关联的。这里描述的操作是结合由与计算机进行交互的操作员或用户提供的各种输入而执行的机器操作。

[0054] 2. 硬件

[0055] 应当理解，这里描述的程序、处理、方法等不涉及或不限于任何特定的计算机或设备，它们也不涉及到或不限于除如所述以外的任何通信结构。而是可以结合任何程序模块和本发明的任何其它方面使用各种类型的通用机器、传感器、发射机、接收机、收发信机和网络物理层。同样，可以证明构建专门的设备借助于专用计算机系统在具有硬线连接的逻辑块或存储在诸如只读存储器那样的非易失性存储器中的程序的特定的网络结构中执行这里描述的方法步骤是有利的。

[0056] 3. 程序

[0057] 在本发明的任何步骤以机器执行的指令被体现的优选实施例中,指令可被用来使得用指令编程的通用或专用处理器执行本发明的步骤。作为替代,本发明的步骤也可以由包含用于执行步骤的硬线逻辑的特定的硬件部件,或由编程的计算机部件和定制硬件部件的任何组合执行。

[0058] 上述的系统可以用基于在本说明书中的附图和说明的程序或程序模块方便地实现。为了实现上述的各种程序过程不需要特定的编程语言,因为考虑到已充分揭示以上描述的和在附图中显示的操作、步骤和过程,允许本领域技术人员实现本发明。

[0059] 而且,有许多计算机、计算机语言和操作系统可被用来实现本发明,所以可以不用提供可应用于所有这些许多不同系统的详细的计算机程序。特定的计算机的每个用户将知道对于用户的需要和目的最有用的语言和工具。

[0060] 本发明因此可以由没有许多经验的本领域普通程序员在了解这里的说明后实施。

[0061] 4. 产品

[0062] 本发明由硬件和计算机程序产品组成,它可包括其上存储可用来对计算机(或其它电子设备)进行编程以执行按照本发明的处理的指令的机器可读介质。机器可读介质可包括但不限于:软盘、光盘、CD-ROM、磁-光盘、ROM、RAM、EPROM、EEPROM、磁卡或光卡、或适用于存储电子指令的其它类型的介质/机器可读介质。另外,本发明的软件部分也可以被下载作为计算机程序产品,其中程序可以借助于在载波或其它传播介质中体现的数据信号经由通信链路(例如,调制解调器或网络连接)从远端计算机(例如,服务器)被传送到请求的计算机(例如客户机)。

[0063] 5. 部件

[0064] 本发明的系统和方法的主要组成部件(也可互换地被称为方面、子系统、模块、功能、服务)及其提供的优点的例子在这里参照附图进行描述。对于包括处理/装置块的附图,每个块(分开地或组合地)是可选地由计算机实施的、计算机辅助的和/或由人实施的。计算机实施方案可选地包括一个或多个常规的通用计算机,具有处理器、存储器、存储装置、输入设备、输出设备和/或常规的联网设备、协议和/或常规的客户机-服务器硬件和软件。在任何块或块的组合是计算机实施的场合下,它可选地由常规的装置完成,由此计算机实施方案领域的技术人员可以利用常规的算法、部件和设备来实施这里提供的本发明的要求和设计。然而,本发明也提供任何新的、非常规的实施装置。

[0065] 6. Web 设计

[0066] 该系统的任何网站方面/实施方案包括对于有经验的网站开发人员熟知的惯用的网站开发考虑。这样的考虑包括内容、内容清除、内容呈现、结构、数据库链接、外部网址链接、页数、总的尺寸和存储要求、维护、访问速度、图形的使用、元标签的选择,以便易于实现命中、隐私考虑和弃权声明。

[0067] 7. 其它实施方案

[0068] 从以上的详细说明,本发明的其它实施方案及其各个部件对于本领域技术人员将变得清楚。正如将会看到的,本发明能够实现其它的和不同的实施例,并且它的几个细节在各个明显的方面能够加以修改,但全部都不背离本发明的主旨和范围。因此,附图和详细说明被认为事实上是说明性的,而不是限制性的。因此,本发明不意图受限,除了由所附权利要求指示的。

支持证据:

表1: 用于建模的输入结构参数

分析技术	缩写	输入参数
NMR	# C	每个分子的碳的总数
	P/sumAlk	每个分子的总的甲基/烷基碳
	P/t-me	末端甲基
	P/2-me	2-甲基
	P/3-me	3-甲基
	P/4-me	4-甲基
	P/5+me	5+甲基
	P/adj-me	相邻的甲基
	P/int-eth	内部的乙基
	P/int-pro	内部的丙基
	P/sumCH2	每个分子的总的甲基碳
	P/ε CH2	ε 碳
	P/CH	烷族的次甲基 (通过DEPT)
	N/sumC	每个分子的总的环烷碳
	N/CH2	环烷甲撑 (通过DEPT)
	N/CH	环烷次甲基 (通过DEPT)
	A/sumC	每个分子的总的芳香族碳
	A/nonsub	非替换的芳香族的
	A/bridged	桥接的芳香族的
	A/sub	替换的芳香族的
	BI	分支指数
	BP	分支临近
FCI	FCI	
HPLC	HPLC1R	HPLC-UV 1-环
	HPLC2R	HPLC-UV 2-环
	HPLC3R	HPLC-UV 3-环
SIMDIST	TBP/50%	SIMDIST TBP @ 50 wt.%, F
FIMS	FIMSa	通过 FIMS 的烷烃 (面积%)
	FIMS1u	通过 FIMS 的 1-未饱和 (面积%)
	FIMS2u	通过 FIMS 的 2-未饱和 (面积%)
	FIMS3u	通过 FIMS 的 3-未饱和 (面积%)

表2: 粘滞指数的实际值和预测值

样本代码	实际值	预测值
4R (WOW9448)	128	125.5
5R (WOW9767)	115	115.9
7R (WOW9449)	134	133.4
Chev100R (WOW9246)	101	102.0
Chev220R (WOW9558)	104	103.1
EHC-45 (WOW8793)	118	118.9
EHC-90 (NGQ99120)	113	108.1
Star 4 (WOW9418)	106	105.5
Star 8 (WOW9279)	102	102.7
PC VHV14 (PGQ0446)	127	125.5
PC VHV16 (BST00172)	129	128.2
PC VHV18 (NGQ2211)	126	126.7
Pennzoil100 (WOW9495)	100	100.2
Pennzoil230 (WOW9281)	101	102.1
GBO L (WOW9776-1)	145	144.3
GBO M (WOW9779)	160	158.4
GBO H (WOW9780)	161	159.9
SCH L (WOW9786-2)	146	149.3
SCH M (WOW9801-2)	162	162.1
SCH H (WOW9802-1)	161	161.2
Visom 4 (PGQ3509)	138	138.5
Yubase 4 (WOW8460)	122	123.2
UCBO 4R (WOW9448)	126	126.2
回归方根		0.994
平均误差		1.1

表3: 在40℃下运动粘滞系数的实际值和预测值

样本代码	实际值	预测值
4R (WOW9448)	18.63	17.9
5R (WOW9767)	23.77	22.3
7R (WOW9449)	41.62	41.0
Chev100R (WOW9246)	20.55	20.0
Chev220R (WOW9558)	41.34	42.6
EHC-45 (WOW8793)	23.29	23.2
EHC-90 (NGQ99120)	36.45	39.8
Star 4 (WOW9418)	19.45	19.4
Star 8 (WOW9279)	56.98	56.8
PC VHV14 (PGQ0446)	21.38	22.9
PC VHV16 (BST00172)	33.79	34.0
PC VHV18 (NGQ2211)	51.79	51.0
Pennzoll100 (WOW9495)	20.09	19.7
Pennzoll230 (WOW9281)	42.85	40.8
GBO L (WOW9776-1)	17.2	19.1
GBO M (WOW9779)	30.5	29.1
GBO H (WOW9780)	42.19	42.0
SCH L (WOW9786-2)	17.13	16.4
SCH M (WOW9801-2)	42.35	43.6
SCH H (WOW9802-1)	108.4	108.0
Visom 4 (PGQ3509)	17.35	15.8
Yubase 4 (WOW8460)	18.96	20.0
UCBO 4R (WOW9448)	18.63	19.1
回归方根		0.996
平均误差		0.97

表4: 在100℃下运动粘滞系数的实际值和预测值

样本代码	实际值	预测值
4R (WOW9448)	4.14	4.29
5R (WOW9767)	4.69	4.87
7R (WOW9449)	7.15	7.03
Chev100R (WOW9246)	4.14	4.05
Chev220R (WOW9558)	6.42	6.64
EHC-45 (WOW8793)	4.64	4.36
EHC-90 (NGQ99120)	6.08	6.76
Star 4 (WOW9418)	4.05	4.03
Star 8 (WOW9279)	7.84	7.92
PC VHV14 (PGQ0446)	4.53	4.59
PC VHV16 (BST00172)	6.10	6.09
PC VHV18 (NGQ2211)	8.06	7.85
Pennzoil100 (WOW9495)	4.07	4.01
Pennzoil230 (WOW9281)	6.49	6.02
GB0 L (WOW9776-1)	4.10	4.00
GB0 M (WOW9779)	6.24	5.96
GB0 H (WOW9780)	7.90	8.02
SCH L (WOW9786-2)	4.10	4.13
SCH M (WOW9801-2)	7.93	8.19
SCH H (WOW9802-1)	16.24	16.09
回归方根		0.993
平均误差		0.147

表5: 灌注点的实际值和预测值

样本代码	实际值	预测值
4R (WOW9448)	-18	-18.0
5R (WOW9767)	-17	-16.9
7R (WOW9449)	-18	-18.3
Chev100R (WOW9246)	-13	-13.6
Chev220R (WOW9558)	-14	-13.7
EHC-45 (WOW8793)	-18	-18.0
EHC-90 (NGQ99120)	-18	-18.2
Star 4 (WOW9418)	-21	-21.1
Star 8 (WOW9279)	-16	-16.0
PC VHV14 (PGQ0446)	-23	-22.9
PC VHV16 (BST00172)	-12	-12.0
PC VHV18 (NGQ2211)	-13	-13.0
Pennzoll100 (WOW9495)	-14	-13.7
Pennzoll230 (WOW9281)	-14	-13.8
GB0 L (WOW9776-1)	-20	-20.6
GB0 M (WOW9779)	-20	-19.9
GB0 H (WOW9780)	-14	-13.9
SCH L (WOW9786-2)	-24	-23.9
SCH M (WOW9801-2)	-20	-19.5
SCH H (WOW9802-1)	-10	-10.1
回归方根		0.995
平均误差		0.18

表6: 氧化稳定性的实际值和预测值

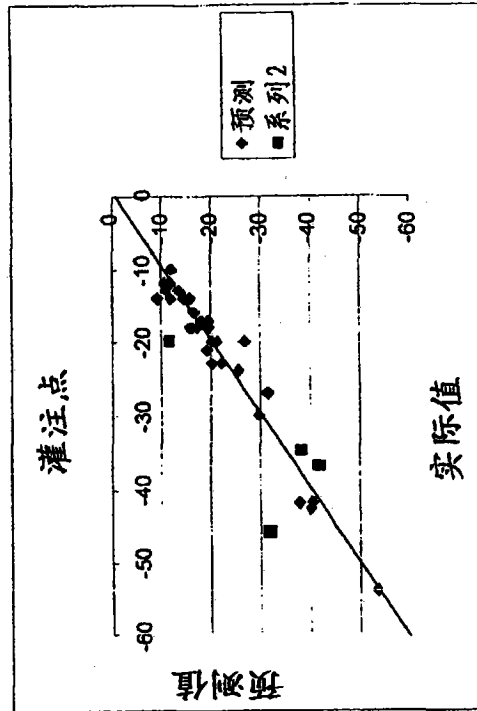
样本代码	实际值	预测值
4R (WOW9448)	21.2	21.18
GB0 L (WOW9776-1)	16.9	16.88
GB0 H (WOW9780)	21.1	21.06
Nexbase 3043 (NGQ9754)	19.1	19.21
Visom 4 (PGQ3509)	16.4	16.44
Yubase 4 (WOW8460)	21.9	21.75
UCBO 4R (WOW9448)	21.2	21.24
Yubase 8 (EBO0198)	17.3	17.25
Nexbase 3080 (EBO0200)	20.8	20.84
回归方根		0.998
平均误差		0.06

通过NMR的混合物的结构参数
(对于新的MW)

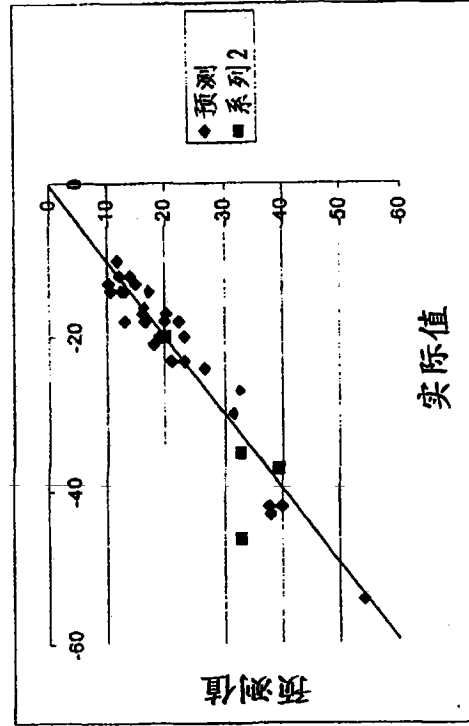
ID	ABC0049	EOB2182	ABBS1	EOB2183	ABBS2	BOB2184	ABBS3	EST0472
StarLab容器ID			75		50		25	
MW	758.0	546.0	553.6	452.0	436.0	354.0	359.6	306.0
碳的数目	54.1	39.0	39.5	32.3	31.1	25.3	25.7	21.9
NMR分析								
每个分子的总的甲基/烷基碳	7.7	6.8	6.9	6.4	6.3	5.6	5.8	5.3
末端甲基	1.5	1.7	1.5	1.7	1.4	1.5	1.4	1.3
2-甲基	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.4
3-甲基	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3
4-甲基	0.8	0.5	0.7	0.5	0.6	0.6	0.5	0.5
5+甲基	1.9	1.7	1.3	1.4	1.0	1.0	0.8	0.7
相邻的甲基	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
内部的乙基	0.7	0.7	0.6	0.5	0.5	0.4	0.4	0.4
内部的丙基	0.0	0.1	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0
每个分子的总的甲基碳	38.4	26.7	25.7	21.2	19.3	16.7	15.4	12.9
ε 碳	12.4	8.8	6.3	6.4	4.2	4.4	3.2	2.6
烷族的水甲基(通过DEPT)	2.6	1.3	2.1	1.6	1.8	0.6	1.6	1.4
每个分子的总的环烷碳	8.0	5.5	6.2	4.0	5.1	3.1	4.3	3.7
环烷甲基(通过DEPT)	5.6	4.7	4.6	3.2	3.9	2.3	3.4	3.0
环烷次甲基(通过DEPT)	2.4	0.8	1.5	0.7	1.1	0.8	0.8	0.7
每个分子的总的芳香族碳	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
非替换的芳香族的	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
桥接的芳香族的	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
替换的芳香族的	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
总计	54.1	39.0	38.8	31.6	30.6	25.3	25.5	21.9
分支指数	21.7	20.7	23.5	25.3	25.7	26.4	28.4	31.7
分支临近	22.9	22.6	16.3	20.0	13.8	17.2	12.5	11.7
FCI	12.4	8.8	6.3	6.4	4.2	4.4	3.2	2.6
通过质子NMR的%烯烃	1.9	0.7		0.0		0.0		0.0

灌注点的预测
(对于新MW)

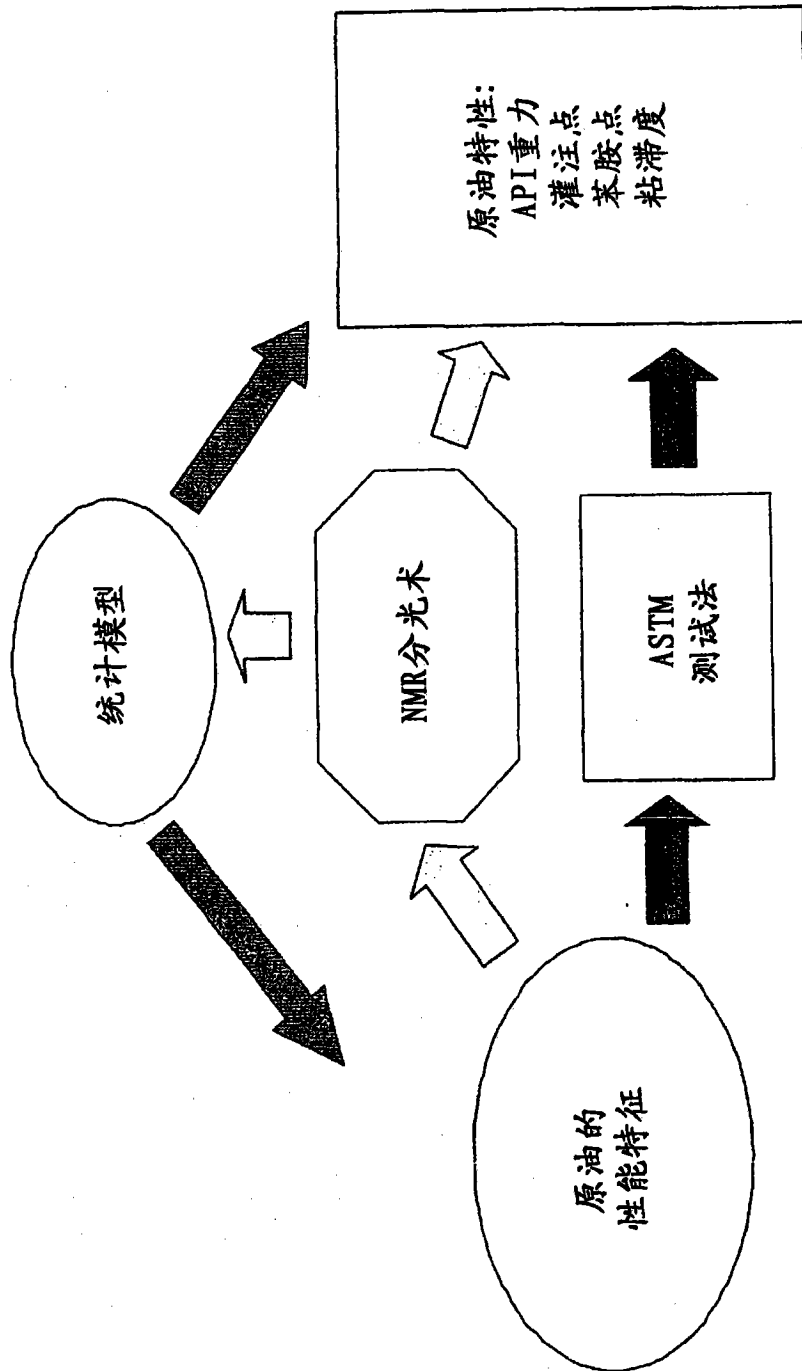
老的模型



新的模型



用于原油特性的预测的统计模型开发



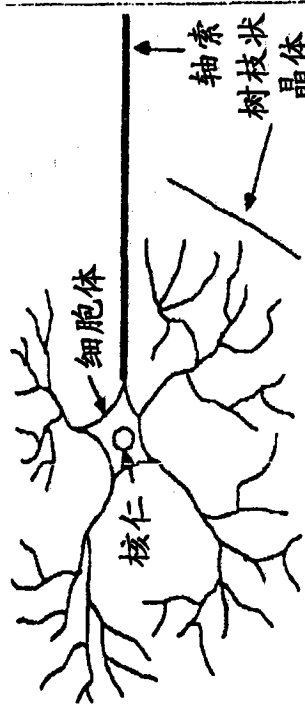
投影值

- 分析
 减小实验室测试量
- 原油管理
 原油的流水线处理改变
- 催化/异构化除蜡过程
 设计新的催化剂以使得关键属性最大化
- PAO设计
 识别合成的"目标"分子
- 新产品开发
 识别将匹配于希望的性能特性的原油混合物

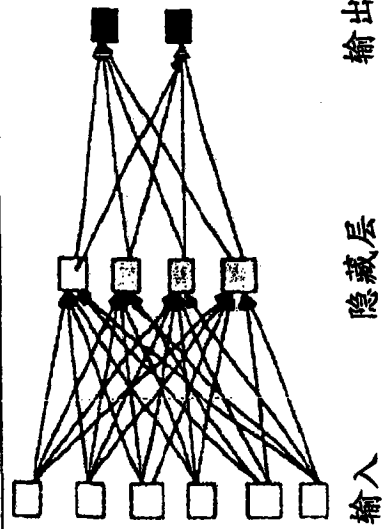
使用NMR分光和神经网络为原油特性建模

神经网络

由神经系统激起的神经网络信息处理范例



简单的前馈网络



- 自适应学习
- 自组织
- 实时操作
- 经由冗余信息编码的故障容忍

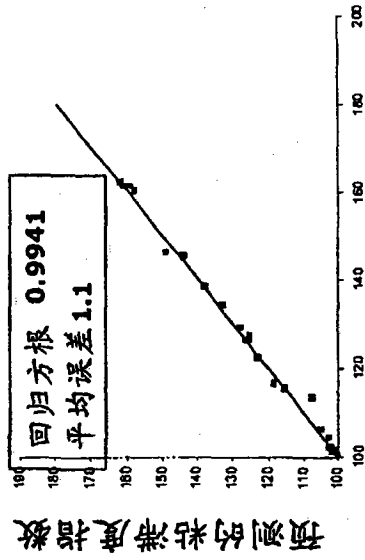
输入参数

隐藏层	输入参数
# C	每个分子的碳的总数
P/sumAlk	每个分子的总的甲基/烷基碳
P/t-me	末端甲基
P/2-me	2-甲基
P/3-me	3-甲基
P/4-me	4-甲基
P/5+me	5+甲基
P/adj-me	相邻的甲基
P/int-eth	内部的乙基
P/int-pro	内部的丙基
P/sumCH2	每个分子的总的甲基碳
P/ε CH2	ε 碳
P/CH	烷碳的次甲基 (通过DEPT)
N/sum C	每个分子的总的烷碳
N/CH2	环烷甲撑 (通过DEPT)
N/CH	环烷次甲基 (通过DEPT)
A/sum C	每个分子的总的芳香族碳
A/nonsub	非替换的芳香族的
A/bridged	桥接的芳香族的
A/sub	替换的芳香族的
Bi	分支指数
BP	分支临近
FCI	FCI
HPLC1R	HPLC-UV 1-环
HPLC2R	HPLC-UV 2-环
HPLC3R	HPLC-UV 3-环
TBP/50%	SIMDIST IBP @ 50 wt.%, F
FIMSa	通过FIMS的烷烃 (面积%)
FIMStu	通过FIMS的1-未饱和 (面积%)
FIMStu	通过FIMS的2-未饱和 (面积%)
FIMStu	通过FIMS的3-未饱和 (面积%)

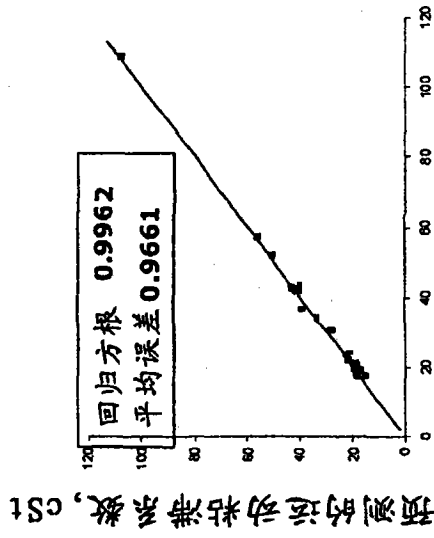
模型原油

样本代码	来源	类型
4R (WOW9448)	Chevron UCBO	Gr. III
5R (WOW9767)	Chevron 5R, 在 02/07/05 从 RDC 收到的	Gr. III
7R (WOW9449)	Chevron UCBO 7R,	Gr. III
Chev100R (WOW9246)	Chevron 100R, 在 9/30/02 从 RDC 收到的	Gr. II
Chev220R (WOW9558)	Chevron 220R, 参考石油, 从 RDC 收到的	Gr. II
EHC-45 (WOW8793)	ExxonMobil EHC 45 (Baytown 生产)	Gr. II
EHC-90 (NGQ9912)	EHC-60 oil received 2/14/02 from Exxon	Gr. II
Star 4 (WOW9418)	STAR 4	Gr. II
Star 8 (WOW9279)	STAR 8	Gr. II
PC VHV14 (RGQ0446)	Petro-Canada VHV1-4, 批号#651-1553, 7/5/02 收到的	Gr. III
PC VHV16 (BST00172)	Petro-Canada VHV1-6, 批号#652-0184	Gr. III
PC VHV18 (NGQ2211)	PetroCanada VHV1 8	Gr. III
Pennzoil100 (WOW9495)	Pennzoil 100-HC, 4/30/04 收到的	Gr. II
Pennzoil230 (WOW9281)	Pennzoil 230-HC	Gr. II
GBO L (WOW9776-1)	重新加氢精制的和除去的 WOW9608 (LN-C4 从 PP201-5 塔顶流出的)	Gr. III
GBO M (WOW9779)	重新加氢精制的和除去的 WOW9761 (MN-C5 从 PP201-5 塔顶流出的)	Gr. III
GBO H (WOW9780)	重新加氢精制的和除去的 WOW9762 (MN-C5 从 PP201-5 塔顶流出的)	Gr. III
SCH L (WOW9786-2)	重新加氢精制的和除去的 LN, 来自 PP201-58	Gr. III
SCH M (WOW9801-2)	MN 重新加氢精制的 OVHD 蒸馏分离的产品 (WOW9788) 从 PP114 馈送的	Gr. III
SCH H (WOW9802-1)	HN 重新加氢精制的 BTMS 蒸馏分离的产品 (WOW9789) 从 PP114 馈送的	Gr. III
Nexbase 3043 (NGQ9754)	Nexbase 3043, 12/21/01 抽取的, ID AN 00015.01	Gr. II
Visom 4 (PGQ3509)	Visom 4, 从 Chevron Gronite, France 接收的, ID # C 70449, 04/15/0 收到的	Gr. III
Yubase 4 (WOW8460)	YUKONG 100N (YUBASE 4) 样本, 3/04/99 收到的	Gr. III
UCBO 4R (WOW9448)	Chevron UCBO 4R, 灌注日期?	Gr. III

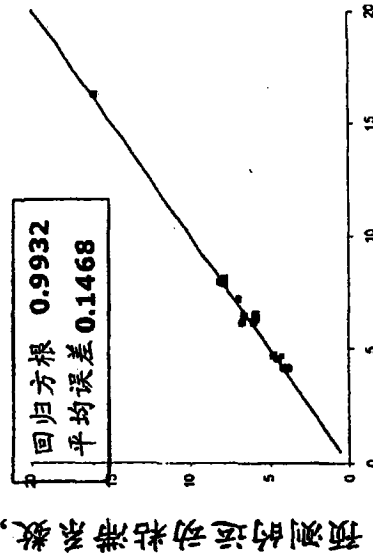
通过模型 2006C 预测的原油特性



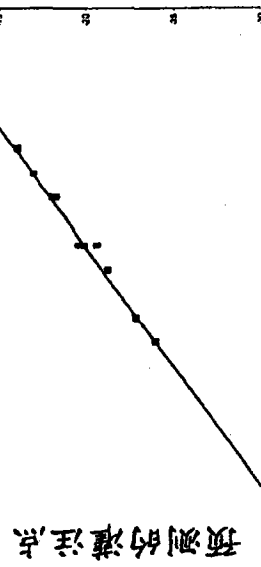
实际的粘滞度指数



实际的运动粘滞系数, cSt

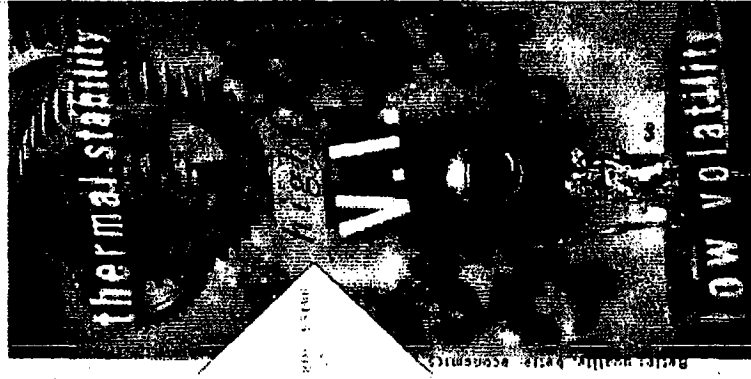


实际的运动粘滞系数, cSt



实际的凝注点

预测未知的原油和混合物的特性



对于模型 2006N 使用的原油

样本代码	来源	类型
4R (WOW9448)	Chevron UCBO	Gr. III
5R (WOW9767)	Chevron 5R, 在 02/07/05 从 RDC 收到的	Gr. III
7R (WOW9449)	Chevron UCBO 7R,	Gr. III
Chev100R (WOW9246)	Chevron 100R, 在 9/30/02 从 RDC 收到的	Gr. II
Chev220R (WOW9558)	Chevron 220R, 参考石油, 从 RDC 收到的	Gr. II
EHC-45 (WOW8793)	ExxonMobil EHC 45 (Baytown 生产)	Gr. II
EHC-90 (NGQ9912)	EHC-60 oil received 2/14/02 from Exxon	Gr. II
Star 4 (WOW9418)	STAR 4	Gr. II
Star 8 (WOW9279)	STAR 8	Gr. II
PC VHV14 (PGQ0446)	Petro-Canada VHV1-4, 批号#651-1553, 7/5/02 收到的	Gr. III
PC VHV16 (BST00172)	Petro-Canada VHV1-6, 批号#652-0184	Gr. III
PC VHV18 (NGQ2211)	Petro-Canada VHV1-8	Gr. III
Pennzoil100 (WOW9495)	Pennzoil 100-HC, 4/30/04 收到的	Gr. II
Pennzoil230 (WOW9281)	Pennzoil 230-HC	Gr. II
GB0 L (WOW9776-1)	重新加氢精制的和除去的 WOW9608 (LN-C4 从 PP201-5 塔顶流出的)	Gr. III
GB0 M (WOW9779)	重新加氢精制的和除去的 WOW9761 (MN-C5 从 PP201-5 塔顶流出的)	Gr. III
GB0 H (WOW9780)	重新加氢精制的和除去的 WOW9762 (MN-C5 从 PP201-5 塔顶流出的)	Gr. III
SCH L (WOW9786-2)	重新加氢精制的和除去的 LN, 来自 PP201-58	Gr. III
SCH M (WOW9801-2)	重新加氢精制的和除去的 OVDH 蒸馏分离的产品 (WOW9788) 从 PP114 精制的	Gr. III
SCH H (WOW9802-1)	HN 重新加氢精制的 BTMS 蒸馏分离的产品 (WOW9789) 从 PP114 精制的	Gr. III
Nexbase 3043 (NGQ9754)	Nexbase 3043, 12/21/01 抽取的, ID AN 00015. 01	Gr. II
Visom 4 (PGQ3509)	Visom 4, 从 Chevron Oronite, France 接收的, ID # C 70449, 04/15/0 收到的	Gr. III
Yubase 4 (WOW8460)	YUKONG 100N (YUBASE 4) 样本, 3/04/99 收到的	Gr. III
UCBO 4R (WOW9448)	Chevron UCBO 4R, 灌注日期?	Gr. III
WOW9669	PP201-58 C3 OVHD, ON-01-09-2005 04:30 OFF-01-11-2005	Gr. III
WOW9714	PP201-58 C3 OVHD, ON-01-16-2005 15:30 OFF-01-17-2005	Gr. III
WOW9844	FSL 单元 114 底料, 从来自购买的 WAX 的 XLN 原油提取的	Gr. III
WOW9836	FSL 单元 114 塔顶流出物, 从来自购买的 WAX 的 XLN 原油提取的	Gr. III
WOW9681	PP201-58 C3 OVHD, OR-01-07-2005	Gr. III
WOW9680	PP201-58 C3 OVHD, ON-01-06-2005	Gr. III
BOB2182	25% GTL XXL (BST00472) 和 75% GTL H (ABQ0049)	Gr. III
BOB2183	50% GTL XXL (BST00472) 和 50% GTL H (ABQ0049)	Gr. III
BOB2184	75% GTL XXL (BST00472) 和 25% GTL H (ABQ0049)	Gr. III
ABQ0049	PP201-61 CSB, 1016-1280 HN, FT SASSOL WAX 混合的产品	Gr. III
BST0472	PP201-61-STO-1304-1736 XXLN GTL 原油, 8/15/2006	Gr. III

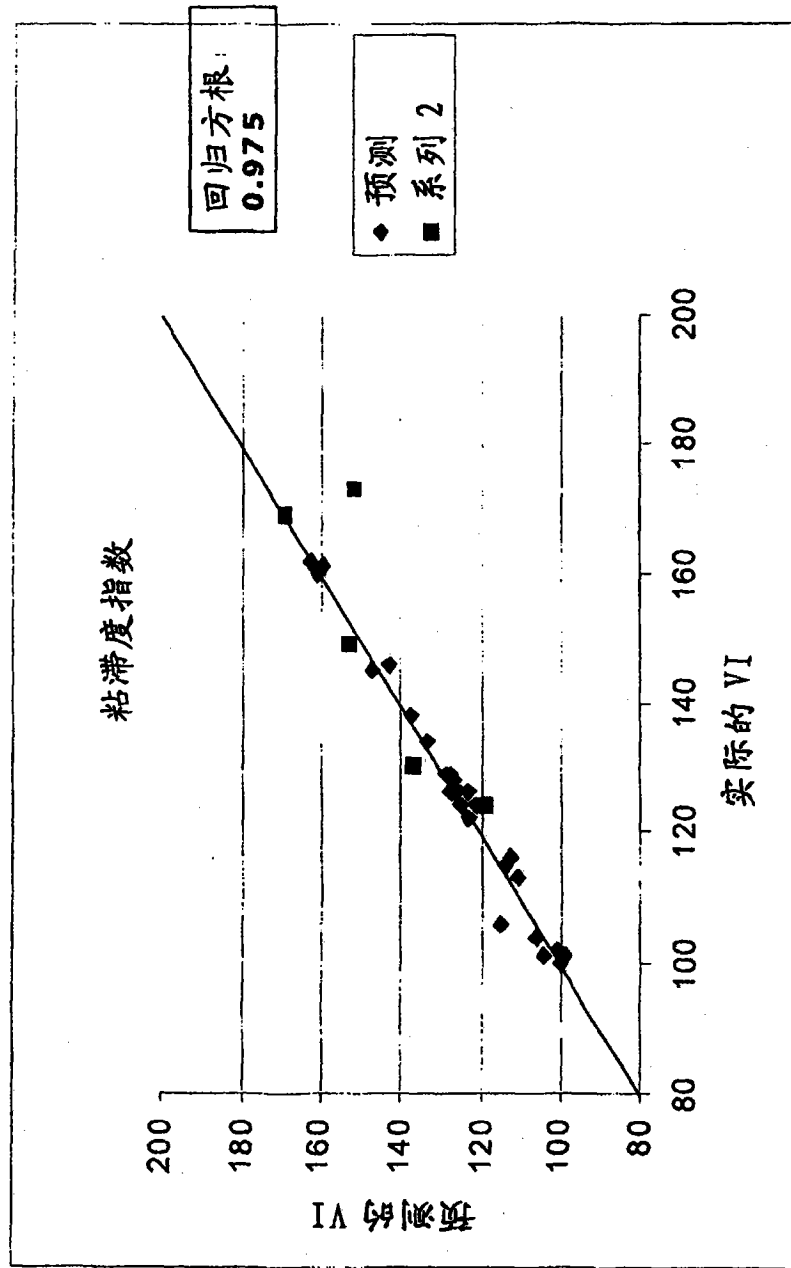
通过 NMR 的混合物的结构参数

ID	StarLab 容器 ID	ABQ0049	BOB2182	BOB2183	BOB2184	BST0472
MW		697	598	464	363	378
碳的数目		49.79	42.71	33.14	25.93	27.00
NMR 分析						
每个分子的总的甲基/烃基碳		7.04	7.41	6.56	5.70	6.56
末端甲基		1.41	1.85	1.72	1.53	1.66
2-甲基		0.23	0.29	0.31	0.27	0.44
3-甲基		0.27	0.36	0.33	0.32	0.40
4-甲基		0.69	0.56	0.54	0.63	0.62
5+甲基		1.77	1.91	1.41	0.98	0.85
相邻的甲基		0.00	0.00	0.00	0.00	0.04
内部的乙基		0.65	0.75	0.54	0.43	0.48
内部的丙基		0.00	0.13	0.10	0.00	0.00
每个分子的总的甲基碳		36.32	29.26	21.79	17.09	15.91
ε 碳		11.39	9.65	6.61	4.47	3.16
烷族的次甲基 (通过 DEPT)		2.36	1.41	1.69	0.60	1.72
每个分子的总的烷族碳		7.39	6.04	4.07	3.14	4.57
环烷甲基 (通过 DEPT)		5.17	5.18	3.31	2.37	3.74
每个分子的总的环烷族碳		2.22	0.87	0.75	0.77	0.83
非替换的芳香族的		0	0	0	0	0
桥接的芳香族的		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
替换的芳香族的		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
总计		49.76	42.71	32.41	25.93	27.03
分支指数		21.66	20.68	25.25	26.39	31.75
分支临近		22.88	22.59	19.96	17.24	11.70
FCI		11.39	9.65	6.61	4.47	3.16
通过质子 NMR 的%烯烃		1.79	0.75	0.00	0.00	0.00

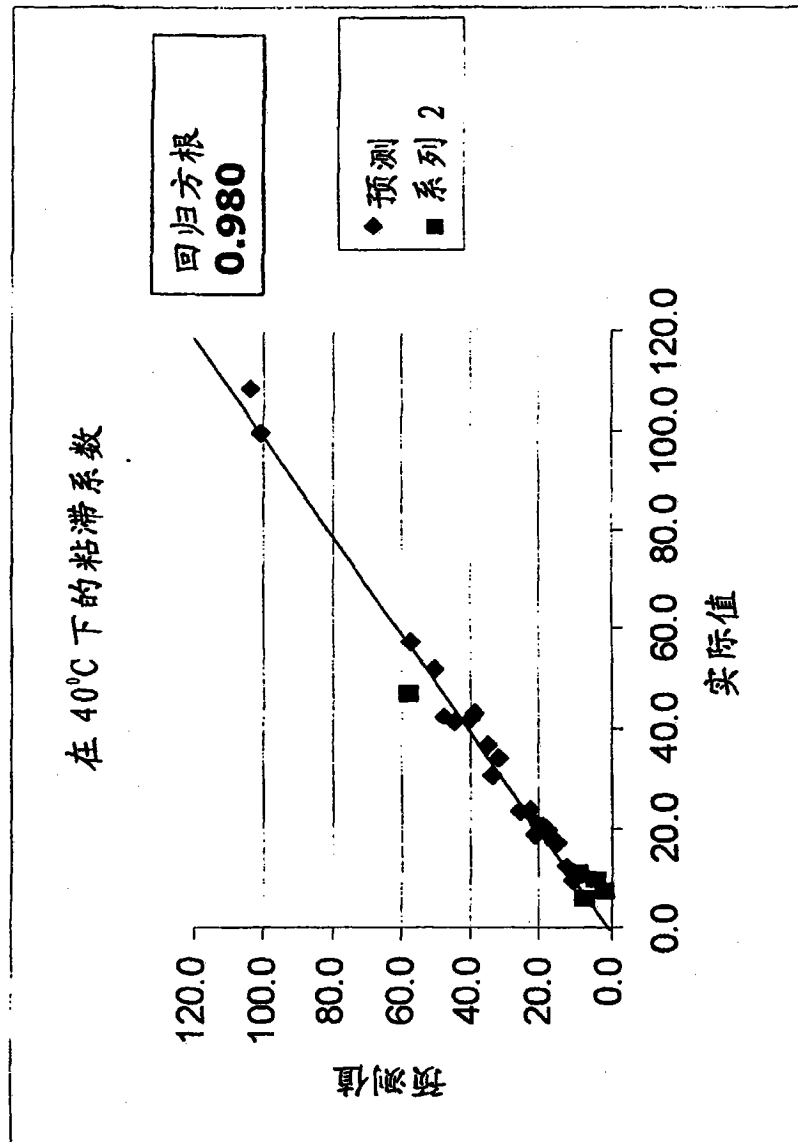
通过模型 2006N 估计的原油特性

ID	ABQ0049		BOB2182		BOB2183		BOB2184		BST0472	
	实际值	预测值	实际值	预测值	实际值	预测值	实际值	预测值	实际值	预测值
VI		213	169	169.2	173	152	149	153		101.2
在 40°C 下的粘滞系数	99.4	100.3	47.5	58	23.6	23.7	12	12.4	6.2	7.6
在 100°C 下的粘滞系数	14.8	14.4	8.9	9.1	5.4	5.7	3.3	3.5	2	2.5
凝固点	-12	-10.7	-20	-11.7	-30	-29.9	-42	-40.4	-54	-53.5
始凝点	15	16.9	7	29	2	-6.9	-5	11.2	-33	-32
氧化 BN		46.2								83.1

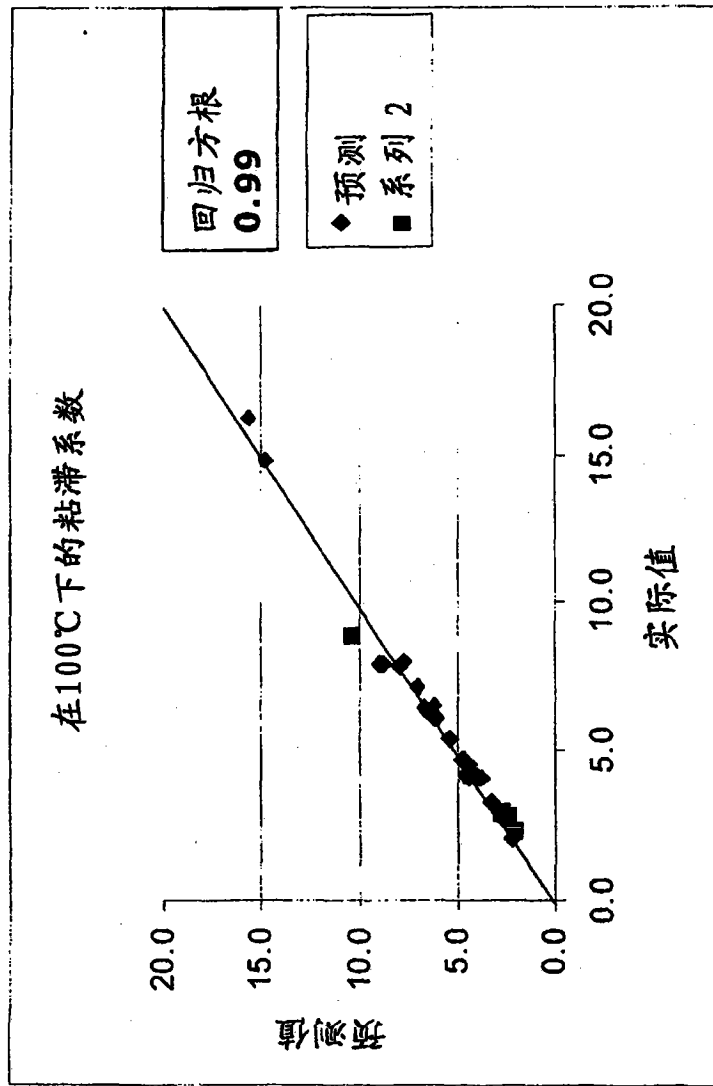
粘滞度指数



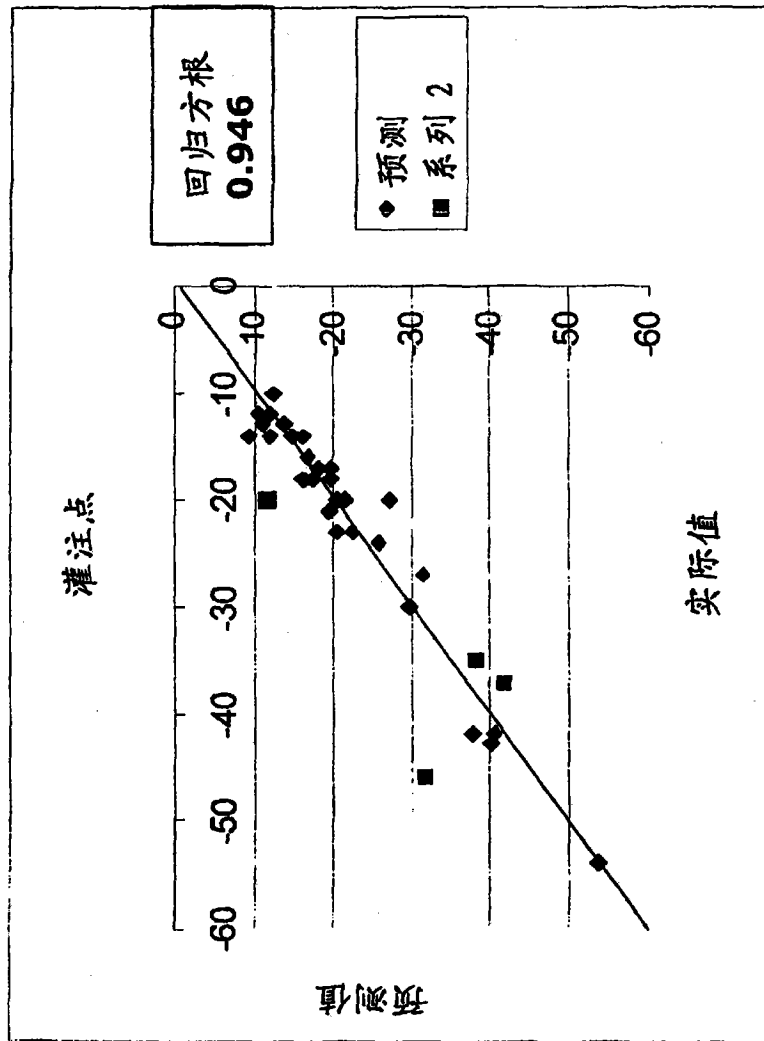
在 40°C 下的粘滞系数



在100℃下的粘滞系数



灌注点



始凝点

