

人工神经网络-基团键贡献耦合模型预测 煤液化油的偏心因子

毛学锋^{1,2,3}

(1. 煤炭科学技术研究院有限公司 煤化工分院,北京 100013;2. 煤炭资源开采与洁净利用国家重点实验室,北京 100013;
3. 国家能源煤炭高效利用与节能减排技术装备重点实验室,北京 100013)

摘要:为探索预测煤直接液化油窄馏分的偏心因子的新方法,建立了基于人工神经网络-基团键贡献耦合模型(ANN-GBC),以煤直接液化油包含的 45 个基团键和常压沸点(T_b)共 46 个参数作为该模型的输入参数,研究了煤直接液化油 15 个窄馏分的偏心因子与分子结构之间的相关性。结果表明,通过计算 20 个模型化合物的偏心因子,表明 ANN-GBC 模型具有较好的模拟推算功能,计算值与理论值平均相对误差均在 2.5% 以下。偏心因子 ω 随蒸馏切割馏分温度的升高而增大,ANN-GBC 模型预测值普遍高于 Watanasiri、NEDOL 关联式的计算值。 <380 °C 馏分 ω 小于 1,相对偏差较小; >380 °C 馏分 ω 偏差较大;针对 >420 °C 馏分,因仅能定性定量分析其中 20% 物质,不同物质的含量差异导致个别结果的跳跃, ω 偏差较大。

关键词:煤直接液化油;人工神经网络-基团键贡献耦合模型;窄馏分;偏心因子;常压沸点

中图分类号:TQ529 文献标志码:A 文章编号:1006-6772(2017)03-0039-06

Prediction of acentric factor of direct coal liquefaction oil by artificial neural network and group bond contribution coupled model

Mao Xuefeng^{1,2,3}

(1. Research Institute of Coal Chemistry, CCTEG Coal Research Institute, Beijing 100013, China;

2. State Key Laboratory of Coal Mining and Clean Utilization, Beijing 100013, China;

3. National Energy Technology and Equipment Laboratory of Coal Utilization and Emission Control, Beijing 100013, China)

Abstract: In order to explore a new method to predict the acentric factor of narrow fractions from direct coal liquefaction oil (DCLO), artificial neural network and group bond contribution coupled model(ANN-GBC) were established. The coupled model used 45 group-bonds and atmospheric boiling point (T_b) of DCLO as input parameters, the relevance between acentric factor and molecular structure of 15 coal liquefaction narrow fractions was investigated. By calculating the acentric factors of 20 model compounds, the ANN-GBC model presents good simulation calculation function, and the average relative error between the calculated value and the theoretical value is less than 2.5%. These comparative data show that acentric factor increases with the increasing of the distillation temperature. The predicted value of ANN-GBC model is higher than that from Watanasiri and NEDOL. In terms of <380 °C fractions, ω is less than 1, and the deviation is relatively small, nevertheless, the deviation of >380 °C fractions is larger. The >420 °C fraction can be qualitatively and quantitatively analyzed, because only 20% substances is derived from coal liquefaction narrow fractions. In addition, the actual differences in specific substances could induce a larger deviation, the deviation is very large.

Key words: direct coal liquefaction oil; artificial neural network and group bond contribution coupled model; narrow fractions; acentric factor; atmospheric boiling point

收稿日期:2017-01-10;责任编辑:白娅娜 DOI:10.13226/j.issn.1006-6772.2017.03.008

基金项目:国家重点研发计划资助项目(2016YFB0600303)

作者简介:毛学锋(1980—),男,湖北荆州人,副研究员,硕士,从事煤直接液化、煤油共炼和煤焦油加氢技术工作。E-mail:13810146171@qq.com

引用格式:毛学锋.人工神经网络-基团键贡献耦合模型预测煤液化油的偏心因子[J].洁净煤技术,2017,23(3):39-44,50.

Mao Xuefeng. Prediction of acentric factor of direct coal liquefaction oil by artificial neural network and group bond contribution coupled model [J]. Clean Coal Technology, 2017, 23(3): 39-44, 50.

0 引言

偏心因子 ω 作为物质分子几何形状和极性复杂性的度量,是煤炭直接液化工程放大设计、工艺流程优化的重要热力学性质参数^[1-3]。偏心因子无法直接测定,只能通过其临界参数和分子结构性质等进行关联推算,主要有基于 Pitzer 定义的对态蒸气压关联方程法^[4]、图论及分子拓扑法^[5-6]和对对应态基团贡献法 CSGC-Riedel 方程法^[7],对于高沸点化合物(>300 °C)因热稳定性差,导致临界参数和偏心因子缺乏可靠性。由于煤结构和直接液化反应过程的复杂性,煤直接液化油的组成、结构和性质与石油差异显著。同时煤直接液化油中存在相当数量的大分子量、高沸点的热敏性物质,其偏心因子数据文献报道极少,仅有数据精度不能满足工程设计要求^[8-9]。Watanasiri 等^[10]利用逐步回归的方法,以煤直接液化油中 115 个模型化合物为基础,建立了估算偏心因子关联式,与 Riazi 等^[11]建立的经验关联式结果进行对比。Hidenobu 等^[12]、Masaki 等^[13]、Jorge 等^[14]分别对日本新能源开发机构(NEDO)开发的 1、150 t/d 两套煤直接液化示范装置进行了全流程模拟,按照石油馏分偏心因子的经验关联式估算偏心因子。朱肖曼^[3]研究了 11 个煤直接液化油窄馏分的偏心因子,分别采用了不同经验关联式,如 Edmister 法、Lee-Kesler 关联式、Watanasiri 法、NED-OL 法等计算神华煤和胜利煤 2 种煤直接液化油的偏心因子,并进行了数据对比,推荐采用 Watanasiri 关联式。上述方法主要借鉴成熟的石油馏分计算方法,对于种类繁多、结构复杂的煤直接液化油,缺乏适宜的热力学方程参数,估算偏心因子的可靠性和精确度难以保证。因此,探索一种偏心因子计算新方法,成为当前国内外学者研究的热点。以第 2 代专家系统而著称的人工神经网络,以模拟人的神经活动过程为基础,具有较强的人工智能功能和模拟多元非线性体系的能力^[15]。煤直接液化油虽然结构组成复杂,同分异构体众多,实际的主基团却只有 50 个^[16-17],通过定性定量分析煤直接液化油中物质,关联出为数不多的基团键贡献的参数,利用基团贡献法和规则预测包含这些基团的大量物质的偏心因子。笔者尝试利用基团键贡献法原理,结合应用较为广泛的人工神经网络方法,创新性建立了人工神经网络-基团键贡献耦合模型,首次对煤直接液化油 15 个煤直接液化油窄馏分的偏心因子进行了

估算研究,以期为其他复杂体系中偏心因子的预测提供可借鉴的有效方法。

1 原理与方法

1.1 人工神经网络模型

反向传播(back propagation, BP)算法是目前较为实用的人工神经网络算法(图 1)^[18]。采用 3 层网络结构,即输入层、隐含层和输出层。其中,输入层接受外界数据输入,隐含层对输入数据进行处理和转换,输出层则产生输出结果,层与层之间采用全互连方式,同一层单元间不存在相互连接。网络中的每一层都包含若干神经元,其中输入层和输出层的神经元数由模型中变量数决定,隐含层神经元数则通过试差法确定。

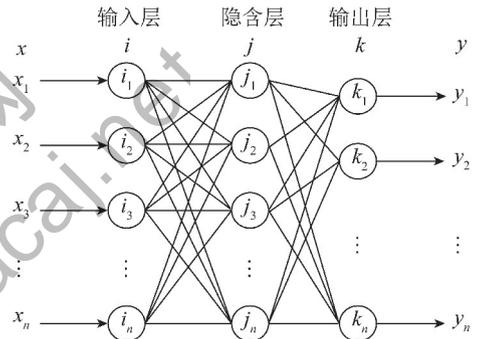


图 1 人工神经网络结构模型

Fig. 1 Artificial neural network model

1.2 基团键贡献法

基团贡献法已广泛应用于根据已有的分子结构估算有机物相关性质^[19-20],因仅考虑分子中基团的贡献,未考虑基团与基团、化学键与化学键之间的相互作用,对同分异构体的区分能力较差,仅用基团无法区分其结构差别,而基团键贡献法^[21]则能弥补这些不足。基团键贡献法既考虑分子中基团的特性又考虑其连接性(化学键),故可更有效地区分同分异构体。同时,考虑到有机物分子中各基团键的相互作用是高度非线性的,若采用简单的数学回归方法来获得各基团键的相互作用权,不能很好地反映同一基团键在不同分子中对物化性质数值贡献的差异,使得预测精度较低,且应用范围受到限制。而人工神经网络由于其高度的非线性功能能很好地表现各基团键之间的相互作用,具有较好的预测精度。

2 试验

2.1 煤直接液化油窄馏分蒸馏切割

以典型的陕北烟煤作为煤直接液化原料煤样,

在 0.1 t/d 煤直接液化连续试验装置上,将高分油与低分油按物料平衡比例混合,因考虑高分油含 20%~40% 固体残渣,蒸馏过程易结焦,试验直接采用脱残渣后的高分油与低分油,按物料平衡比例混合后作为煤直接液化油原料。在 5 L 实沸点蒸馏装置(图 2)上进行实沸点蒸馏馏分切割,蒸馏试验按照 ASTM D 2892—2011《原油蒸馏用标准试验方法》操作,其回流比选定为 5:1。本文将煤直接液化油切割成 15 个窄馏分,分别为 IBP(初馏点)~110、110~150、150~180、180~200、200~220、220~240、240~260、260~280、280~300、300~320、320~340、340~360、360~380、380~420、>420 ℃。

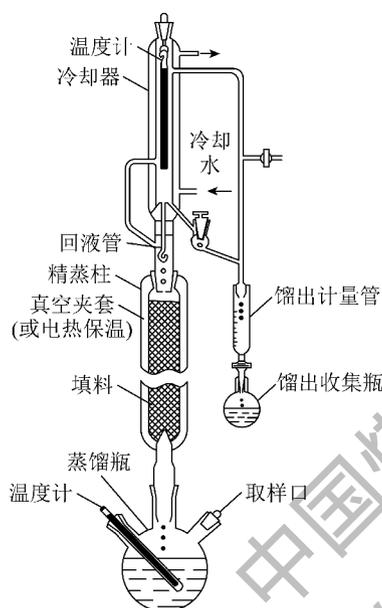


图 2 实沸点蒸馏装置

Fig. 2 True boiling point distillation equipment

2.2 煤直接液化油窄馏分的基团键分子结构测定

将上述 15 个煤直接液化油窄馏分,借助傅里叶红外变换 FTIR 和气相色谱/质谱 GC/MS 联用等现代仪器检测手段,进行相应谱图解析,获得其基团键分子结构组成^[22]。

Bio-Rad FT165 傅里叶红外变换 FTIR 光谱仪,操作条件为:KBr 片涂层,分辨率为 2 cm^{-1} ,扫描次数为 16。气相色谱/质谱仪 (GC6890/MS5973) GC/MS 联用仪,操作条件为:色谱柱为 HP5-MS,进样口温度 200~250 ℃,柱温 80~285 ℃(升温速率 5 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$),质谱扫描范围 10~550。

3 人工神经网络-基团键贡献耦合模型建立

构建人工神经网络与基团贡献键的耦合模型

(ANN-GBC),应用 Matlab 软件和基于误差 BP 算法自编程序进行求解。

3.1 构建网络拓扑结构

构建 3 层网络拓扑结构,网络输入层由 15 个煤直接液化油窄馏分中不同的基团键类型和常压沸点 (T_b) 2 部分组成,网络输入的基团键类型是所有学习样本所包含的基团类型组成,每一种基团键对应一个节点,根据《石油化工基础数据手册》中链烷烃、环烷烃、芳烃、一元醇等 278 个不同类型物质包含的 45 个基团键作为本次网络的基团键输入,基团键划分见表 1,再加上常压沸点 (T_b) 共 46 个输入节点。对每一种有机物,简化网络的输入为所包含的基团键的基团键数,不包含的基团键为 0。如新戊烷 (CH_3)₄C 包含 2 种基团键:4 个 CH_3- ,1 个 C, $T_b=9.503$ ℃,其余的输入均为 0。

表 1 C、H、O、N、S 化合物基团键划分

Table 1 Group-bonding allocation of carbon, hydrogen, oxygen, nitrogen and sulfur compounds

CH_3-	$-\text{CH}_2-$	$>\text{CH}-$	$>\text{C}<$	$-(\text{CH}_2)_{\text{RC}}$
$-(\text{CH}_2)_{\text{RC}}$	$-(\text{CH}_2)_{\text{R}}$	$>(\text{CH})_{\text{R}}$	$-(\text{CH}=\text{C})_{\text{R}}$	$\text{CH}_2=$
$-\text{CH}=\text{C}$	$>\text{C}=\text{C}$	$-\text{C}=\text{C}$	$\text{CH}\equiv$	$-\text{C}\equiv$
$\text{OH}-$	$-(\text{CH}=\text{C})_{\text{A}}$	$>(\text{C}=\text{C})_{\text{A}}$	$-(\text{CH}_2)_{\text{AC}}$	$-(\text{CH}_2)_{\text{AC}}$
$>(\text{CH})_{\text{AC}}$	$>(\text{C}<)_{\text{AC}}$	$(\text{HO})_{\text{AC}}$	$-(\text{O})_{\text{AC}}$	$-\text{O}-$
$>\text{C}=\text{O}$	$>(\text{C}=\text{O})_{\text{RC}}$	$-(\text{COO})_{\text{AC}}$	$-(\text{COO})_{\text{AC}}$	$-(\text{COOH})_{\text{M}}$
$-(\text{COOH})_{\text{AC}}$	$-\text{COOH}$	$-\text{CHO}$	$-\text{SH}$	$-\text{S}-$
$-(\text{S})_{\text{R}}$	$-\text{NH}_2$	$>\text{NH}$	$>(\text{NH})_{\text{R}}$	$>\text{N}-$
$>(\text{N})_{\text{R}}$	$-\text{NO}_2$	$-\text{NO}$	$-\text{CN}$	$=\text{N}-$

注:A 为芳环;AC 为与芳环相连;R 为非芳环;RC 为非与芳环相连;M 为甲酸酯。

网络隐含层节点数通过 Matlab 软件内置的人工神经网络模块,自编程序算法进行试差法优化确定。网络输出层为偏心因子 ω ,共 1 个节点。

3.2 样本集数据选择与处理

样本集选择主要根据《石油化工基础数据手册》,结合煤直接液化油结构组成特点,只考虑 C、H、N、S、O 混合物,共 278 个样本,样本集的分布见表 2。

以样本集中的样本进行学习估算,在样本集中选择一些作为训练(检测)样本,剩下的都作为学习样本。因训练样本的数据差别较大,如常压沸点为 10^2 数量级,而偏心因子为 10^{-1} 数量级,两者相差 10^3 数量级。数量级差别悬殊有可能影响网络训练,因而将样本数据映射到 $[-1.0, 1.0]$ 上,映射过

表2 人工神经网络的样本分布

Table 2 Distribution of artificial neural network examples

序号	类型	数量/个	序号	类型	数量/个
1	链烷烃	19	14	杂醇类	2
2	环烷烃	10	15	多元醇	8
3	单烯烃	22	16	醚类	15
4	二烯烃	10	17	醛类	8
5	环烯烃	5	18	酮类	7
6	芳烃	17	19	酸类	14
7	酯类	36	20	芳香族羧酸	3
8	胺类	31	21	酸酐	4
9	酰胺类	8	22	酚类	11
10	腈类	10	23	稠环化合物	2
11	含氮化合物	5	24	杂环化合物	5
12	硫化物	6	25	环氧化合物	5
13	一元醇	15		合计	278

程为

$$x_i = \frac{2x' - x_{i,max} - x_{i,min}}{x_{i,max} - x_{i,min}}$$

式中, $x_{i,max}$ 和 $x_{i,min}$ 为训练数据的最大值和最小值; x' 为原始数据; x_i 为映射后的数据。

4 结果与讨论

4.1 煤直接液化油窄馏分收率分布

煤直接液化油实沸点蒸馏切割试验的结果见表3。

表3 煤直接液化油实沸点蒸馏结果

Table 3 Results of true boiling point distillation of coal liquefaction oil

切割温度/℃	窄馏分收率/%	累计收率/%
IBP ~ 110	1.72	1.72
110 ~ 150	0.90	2.62
150 ~ 180	1.49	4.11
180 ~ 200	2.41	6.52
200 ~ 220	7.07	13.59
220 ~ 240	12.28	25.87
240 ~ 260	17.10	42.97
260 ~ 280	10.33	53.30
280 ~ 300	9.67	62.97
300 ~ 320	5.39	68.36
320 ~ 340	3.46	71.82
340 ~ 360	4.40	76.22
360 ~ 380	2.50	78.72
380 ~ 420	3.26	81.98
>420	18.02	100

由表3可知, 240 ~ 260 ℃ 馏分最为集中, 占总收率的 17.10%, 其余馏分分布较均匀; 200 ~ 300 ℃ 馏分累计收率高达 56.45%, <180 ℃ 石脑油馏分收率较低为 4.11%; 180 ~ 380 ℃ 馏分收率较高, 为 74.61%; <420 ℃ 窄馏分累计收率高达 81.98%, >420 ℃ 馏分收率为 18.02%。

4.2 网络拓扑结构参数确定

隐含层从单个节点开始, 用训练集进行训练, 再用检验集的样本进行预测, 预报误差与隐含层节点数的关系如图3所示。由图3可知, 误差先随节点数的增加而迅速下降; 在节点数为 25 ~ 50 时, 误差趋于稳定, 表明在此范围内, 隐含层节点数的改变对误差的影响不大; 在节点数为 25 ~ 50 时, 误差随节点数的增加而增加。

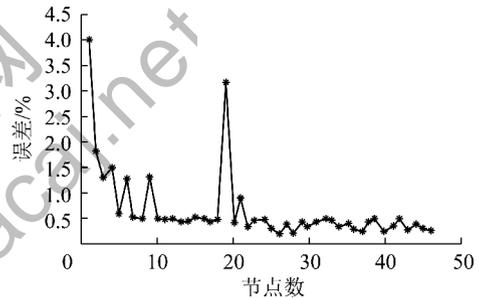


图3 隐含层节点数与误差的关系

Fig. 3 Relationship between nodes number in the hidden layer and error

网络的拓扑结构参数确定为: 输入层 47 个节点, 隐含层 40 个节点, 输出层 4 个节点。神经网络程序框架如图4所示。

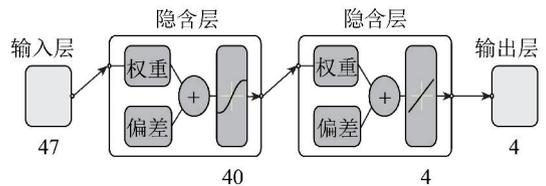


图4 神经网络程序框架

Fig. 4 Neural network program framework

4.3 ANN-GBC 模型训练与检验

根据煤直接液化油结构组成特点, 选取其中 20 个代表性模型化合物, 作为训练(检测)样本, 学习样本为剩下的 258 个样本。利用构建的 ANN-GBC 模型模拟计算偏心因子, 得到的计算值与理论值比较, 对比结果见表4。样本拟合平均相关系数和均方根误差如图5所示。

表4 纯物质偏心因子计算值与理论值对比

Table 4 Comparisons of predicted values and real values of acentric factor of pure compounds

名称	偏心因子 ω		
	理论值	计算值	相对误差/%
2-甲基庚烷	0.377 6	0.375 7	-0.51
甲基环戊烷	0.239 5	0.239 4	-0.05
甲基环己烷	0.233 3	0.233 4	0.03
乙基环戊烷	0.282 6	0.282 6	0.01
乙基环己烷	0.242 6	0.242 6	0.01
正丙基环戊烷	0.335 0	0.335 1	0.02
正丙基环己烷	0.257 7	0.257 7	-0.01
环戊烯	0.201 0	0.201 0	-0.02
邻二甲苯	0.313 6	0.314 5	0.27
间二甲苯	0.331 1	0.326 4	-1.41
对二甲苯	0.324 3	0.328 1	1.18
正丙苯	0.344 4	0.344 6	0.05
邻甲酚	0.443 0	0.444 0	0.22
间甲酚	0.464 0	0.469 7	1.23
对甲酚	0.515 0	0.508 3	-1.30
2,3-二甲酚	0.462 0	0.466 3	0.93
2,4-二甲酚	0.507 0	0.495 1	-2.34
2,5-二甲酚	0.401 0	0.406 0	1.25
2,6-二甲酚	0.456 0	0.444 8	-2.45
吡啶	0.240 0	0.240 2	0.07

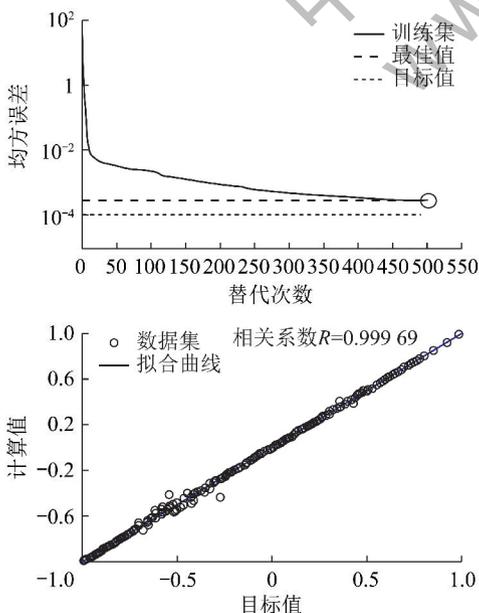


图5 样本拟合平均相关系数和均方根误差

Fig. 5 Average correlation coefficient and root mean square error of sample fitting

由表4和图5可知,ANN-GBC模型具有较好的模拟推算功能,20种纯物质的偏心因子计算值与理论值符合良好,平均相对误差均在2.5%以下,预测精度较好。对于2,3-二甲酚、2,4-二甲酚、2,5-二甲酚和2,6-二甲酚4种同分异构体,虽然主基团类型和数量完全相同,但ANN-GBC模型因考虑到了基团键的相互作用,也能精确区分计算。拟合相关系数高达0.999 69,进一步说明构建的ANN-GBC模型预测偏心因子的方法可靠,而且准确度较高。

4.4 煤直接液化油窄馏分偏心因子计算

利用构建的人工神经网络与基团贡献键的耦合模型(ANN-GBC),将煤直接液化油15个窄馏分对应的常压沸点与基团键组成作为输入层,所求的偏心因子作为输出层。输入层、隐含层、输出层的节点数分别为47、40、4,经迭代后收敛,预测结果与文献[8]半经验关联式的计算结果进行对比分析,结果见表5。

表5 ANN-GBC模型偏心因子计算值与各种关联式对比

Table 5 Comparison of acentric factor derived from ANN-GBC and various correlation

窄馏分/℃	偏心因子 ω		
	计算值	Watanasiri ^[3]	NEDOL ^[3]
IBP ~ 110	0.253 3	0.257 0	0.278 0
110 ~ 150	0.351 2	0.297 5	0.327 0
150 ~ 180	0.394 4	0.286 1	0.353 0
180 ~ 200	0.431 2	0.334 3	0.351 0
200 ~ 220	0.498 8	0.367 8	0.377 0
220 ~ 240	0.525 5	0.388 6	0.409 0
240 ~ 260	0.584 6	0.397 0	0.443 0
260 ~ 280	0.626 0	0.412 3	0.472 0
280 ~ 300	0.665 0	0.438 8	0.495 0
300 ~ 320	0.703 2	0.471 4	0.517 0
320 ~ 340	0.770 8	0.512 7	0.542 0
340 ~ 360	0.583 2	0.585 0	0.563 0
360 ~ 380	0.872 1	0.656 4	0.786 0
380 ~ 420	1.663 1	0.297 5	1.233 0
>420	2.858 2	0.286 1	4.726 0

由表5可知,3种方法得到窄馏分的偏心因子 ω 均随蒸馏切割馏分温度的升高总体升高,主要因为偏心因子 ω 的变化实际与各馏分段不同的组成结构有关。一般来说, ω 数值反映了分子的形状

和分子的极性大小,对于球形非极性分子, ω 为0。 ω 随着分子结构的复杂程度和极性的增加而增加,<380℃馏分 ω 小于1;>380℃馏分是煤直接液化油中重质馏分,平均相对分子质量>300以上,分子结构基本单元为2~4环的稠环芳香结构及其取代物^[23],分子结构复杂,相应 ω 也偏高,分别为1.66和2.86。

与其他关联式对比结果表明,ANN-GBC模型计算得到的偏心因子 ω 普通高于Watanasiri、NEDOL关联式的计算值,<380℃馏分内, ω 小于1时,偏差相对较小;>380℃馏分 ω 偏差较大,>420℃馏分, ω 偏差非常大,分析产生误差的原因为:ANN-GBC模型基于煤液化油组成结构特点,既考虑煤液化油窄馏分分子中基团的特性又考虑其连接性(化学键)相互作用,更能有效区分同分异构体和反映煤直接液化油分子结构和极性,因此 ω 偏高。另外,不同半经验关联式是基于煤直接液化油的基本组成性质进行关联推算,而煤直接液化油中物质种类复杂,且不同研究者由于采用的试验装置、试验煤种和方法不同导致所得煤液化油组成和含量不同,个别重质油窄馏分的GC-MS分析,如380~420℃>420℃馏分仅能定性定量分析其中20%物质,实际不同物质的含量差异导致个别结果的跳跃,剖析提取的分子结构描述尚不能全面描述各个窄馏分的分子结构特征,有待进一步研究。

5 结 论

1)根据煤直接液化油的组成结构特点,建立了人工神经网络-基团键贡献耦合模型(ANN-GBC),该模型既考虑了煤直接液化油中45个基团的特性,又考虑了各基团之间的化学键作用。

2)ANN-GBC模型所得偏心因子的预测值普通高于Watanasiri、NEDOL关联式的计算值,<380℃馏分内, ω 都小于1时,偏差相对较小;>380℃馏分 ω 偏差较大,针对>420℃馏分,因仅能定性定量分析其中20%物质,实际不同物质的含量差异导致个别结果的跳跃, ω 偏差非常大。

3)作为一种全新预测煤直接液化油的偏心因子,本文方法具有一定的优越性。ANN-GBC模型可以不断扩充新的学习样本,提高预测精度,不断增加新的基团键为新的输入节点,扩展预测范围。因此人工神经网络-基团键贡献耦合模型在应用与物性估算方面具有很好的前景。

参考文献(References):

- [1] 吴家全,徐煜,衣守志,等.改进对应态基团贡献法用于纯物质偏心因子估算[J].化学工程,2010,38(5):59-62.
Wu Jiaquan, Xu Yu, Yi Shouzhi, et al. Estimation of eccentric factor for pure substances by improved corresponding state group contribution method [J]. Chemical Engineering (China), 2010, 38(5):59-62.
- [2] 马沛生.石油化工基础数据手册(续编)[M].北京:化学工业出版社,1993.
- [3] 朱肖曼.煤直接液化油基本性质的研究[D].北京:煤炭科学研究总院,2006.
- [4] Chen D H, Dinivahim V, Chang Y J. New acentric factor correlation based on the antoine equation [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 1993, 32(1):241-244.
- [5] 罗北平.用图论方法预测饱和烷烃的偏心因子[J].化学工程,2001,29(2):62-65.
Luo Beiping. Prediction of paraffin acentric factors by graph theory [J]. Chemical Engineering (China), 2001, 29(2):62-65.
- [6] 刘国杰,虞大红,胡英.饱和烷烃的偏心因子与分子的拓扑 [J].化工学报,1991,42(1):1-6.
Liu Guojie, Yu Dahong, Hu Ying. Acentric factor and molecular topology for paraffins [J]. Journal of Chemical Industry and Engineering (China), 1991, 42(1):1-6.
- [7] Yi Shouzhi, Jia Yuanyuan, Ma Peisheng. Estimation of acentric factor of organic compounds with corresponding states group contribution method [J]. Chinese Journal of Chemistry Engineering, 2005, 13(5):709-712.
- [8] 杨春雪.神华煤直接液化油窄馏分的临界性质[J].燃料化学学报,2008,36(5):534-539.
Yang Chunxue. Critical properties of lower temperature fractions of Shenhua coal liquefaction oil [J]. Journal of Fuel Chemistry and Technology, 2008, 36(5):534-539.
- [9] Wilson G M, Johnston R H, Hwang S C, et al. Volatility of coal liquids at high temperatures and pressures [J]. Industrial & Engineering Chemistry Process Design & Development, 1981, 20(1):94-104.
- [10] Watanasiri S, Owens H V, Starling E K. Correlations for estimating critical constants, acentric factor, and dipole moment for undefined coal-fluid fractions [J]. Industrial & Engineering Chemistry Process Design & Development, 1985, 24(2):294-296.
- [11] Riazi M R, Daubert T E. Simplify property predictions [J]. Hydrocarbon Processing, 1980, 59(3):115-116.
- [12] Hidenobu Itoh, Masatake Hiraide, Akira Kidoguchi, et al. Simulator for coal liquefaction based on the NEDOL process [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2000, 40(1):210-217.
- [13] Masaki Onozaki, Yasuki Namiki, Hirohito Ishibashi, et al. A process simulation of the NEDOL coal liquefaction process [J]. Fuel Processing Technology, 2000, 64(1/2/3):253-269.

(下转第50页)

3 结 论

1) 气化剂高速射流在气化炉床层中的发展分为2部分,一部分是沿气化剂喷嘴安装角度延长线发展;另一部分受到床层压差的影响,射流迹线发生转折并沿床层向上发展。

2) 射流的穿透深度与喷嘴口径大致呈二次方的关系,主要因为射流动量与气化剂喷嘴的口径为二次方关系。

3) 随着喷嘴安装角度的增大,高速射流区的深度呈现先增大后减小的趋势,建议喷嘴安装倾斜角度为 $17^{\circ} \sim 20^{\circ}$ 。

参考文献 (References) :

[1] 陈贵锋,李振涛,罗腾. 现代煤化工技术经济及产业链研究[J]. 煤炭工程,2014,46(10):68-71.
Chen Guifeng, Li Zhentao, Luo Teng. Research on technology economic and industrial chain of modern coal chemistry industry[J]. Coal Engineering, 2014, 46(10):68-71.

[2] 赵锦波,王玉庆. 煤气化技术的现状及发展趋势[J]. 石油化工,2014,43(2):125-131.
Zhao Jingbo, Wang Yuqing. Present situation and development tendency of coal gasification technology[J]. Petrochemical Technology, 2014, 43(2):125-131.

[3] 胡志浩. 煤制工业燃气的应用前景和发展趋势[J]. 煤炭加工与综合利用,2011(4):51-54.

[4] 段超. 固定床加压气化技术的发展现状[J]. 煤质技术,2014(1):65-68.

Duan Chao. Pressurized fixed bed coal gasification technology[J]. Coal Quality Technology, 2014(1):65-68.

[5] 苏炼,刘志盛. BGL 气化炉下渣口挂渣堵塞问题分析[J]. 中氮肥,2013(5):15-17.

[6] Lacey J A. Gasification of coal in a slagging pressure gasifier[J]. Advances in Chemistry, 1967, 69:31-49.

[7] 何优优. 移动床层中颗粒物料流动的研究[D]. 重庆:重庆大学,2014.

[8] 张生富,温良英,白晨光. 高炉风口回旋区影响因素的冷态实验分析[J]. 重庆大学学报,2008,31(7):804-808.
Zhang Shengfu, Wen Liangying, Bai Chenguang. A cold model analysis of factors influencing a blast furnace raceway[J]. Journal of Chongqing University, 2008, 31(7):804-808.

[9] 张生富,白晨光,温良英. 高炉回旋区影响因素的冷态模型研究[J]. 系统仿真学报,2008,20(19):5365-5369,5373.
Zhang Shengfu, Bai Chenguang, Wen Liangying. Cold model study on effect factors of blast furnace raceway size[J]. Journal of System Simulation, 2008, 20(19):5365-5369,5373.

[10] Sastry G S S R K, Gupta G S, Lahiri A K. Void formation and breaking in a packed bed[J]. ISIJ International, 2003, 43(2):153-160.

[11] 汪家铭. BGL 碎煤熔渣气化技术及其工业应用[J]. 化学工业,2011,29(7):34-39.
Wang Jiaming. BGL pulverized coal slag gasification technology and its industrial application[J]. Chemical Industry, 2011, 29(7):34-39.

[12] 李小亮,车永芳,张进华. 两种加压固定床煤气化方式的对比[J]. 煤质技术,2016(1):39-42.
Li Xiaoliang, Che Yongfang, Zhang Jinhua. Comparison of two pressurized fixed-bed coal gasification processes[J]. Coal Quality Technology, 2016(1):39-42.

(上接第44页)

[14] Jorge Marrex-Morejon, Eadio Pardillo-Fontdevila. Estimation of pure compound properties using group-interaction contributions[J]. AIChE Journal, 1999, 45(3):615-621.

[15] Hou Zhaoyin, Dai Qinglian, Wu Xiaoqun, et al. Artificial neural network aided design of catalysts for propane ammoxidation[J]. Chinese Journal of Catalysis, 1997, 18(2):152-156.

[16] 郭天民. 多元气-液平衡和精馏[M]. 北京:石油工业出版社,2002.

[17] 史士东. 煤加氢液化工程学基础[M]. 北京:化学工业出版社,2012.

[18] 窦英. 人工神经网络—近红外光谱法用于药物无损非破坏定量分析的研究[D]. 长春:吉林大学,2006.

[19] 旷戈,赵素英,赵之山,等. 人工神经网络基团贡献法估算纯有机物的临界参数[J]. 计算机与应用化学,2001,18(4):396-399.
Kuang Ge, Zhao Suying, Zhao Zhishan, et al. Prediction of critical properties for organic compound by group-contribution artificial neural network method[J]. Computers and Applied Chemistry,

2001, 18(4):396-399.

[20] 潘勇,蒋军成. 基于人工神经网络的脂肪醇闪点预测[J]. 石油化工高等学校学报,2007,20(1):85-89.
Pan Yong, Jiang Juncheng. Prediction of flash points of fatty alcohols based on artificial neural networks[J]. Journal of Petro Universities, 2007, 20(1):85-89.

[21] 王克强. 预测烷烃密度的新方法——基团键贡献法[J]. 有机化学,1999,19(3):304-308.
Wang Keqiang. A new method for predicting the densities of alkanes from the information of molecular structure: Group bond contribution method[J]. Organic Chemistry, 1999, 19(3):304-308.

[22] 毛学锋. 煤炭直接液化体系高温高压气液相平衡研究[D]. 北京:煤炭科学研究总院,2008.

[23] 谷小会,周铭,史士东. 神华煤直接液化残渣中重质油组分的分子结构[J]. 煤炭学报,2006,31(1):76-80.
Gu Xiaohui, Zhou Ming, Shi Shidong. The molecular structure of heavy oil fraction from the Shenhua coal direct liquefaction residue[J]. Journal of China Coal Society, 2006, 31(1):76-80.