

На правах рукописи



Васильева Елена Вячеславовна

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ВЫХОДА ОСНОВНЫХ ХИМИЧЕСКИХ
ПРОДУКТОВ КОКСОВАНИЯ УГЛЕЙ КУЗБАССА МЕТОДОМ
НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ**

по специальности 05.17.07–Химическая технология топлива и
высокоэнергетических веществ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Кемерово 2018

Работа выполнена на кафедре «Химическая технология твердого топлива»
ФГБОУ ВО «Кузбасский государственный технический университет
имени Т.Ф. Горбачева».

Научный руководитель: доктор химических наук, профессор
Черкасова Татьяна Григорьевна
директор института химических и нефтегазовых технологий
ФГБОУ ВО «Кузбасский государственный технический университет имени
Т.Ф. Горбачева»

Официальные оппоненты: доктор химических наук, профессор
Гюльмалиев Агаджан Мирзоевич
главный научный сотрудник лаборатории химии нефти и нефтехимического синтеза Института нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева Российской академии наук
кандидат химических наук, доцент
Семенова Светлана Александровна
старший научный сотрудник лаборатории научных основ технологий обогащения угля
Федерального государственного бюджетного научного учреждения
Федерального исследовательского центра угля и углехимии
Сибирского отделения Российской академии наук (Института угля СО РАН)

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Сибирский государственный
индустриальный университет»

Защита диссертации состоится «05» июня 2018 г. в 11:00 часов на заседании Диссертационного совета Д212.204.08 при Российском химико-технологическом университете имени Д.И. Менделеева по адресу 125047, Москва, Миусская пл., д. 9, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-библиотечном центре Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева, а также на официальном сайте: diss.muctr.ru/author/231.

Автореферат диссертации разослан «___»___2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.204.08



С.В. Вержичинская

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Современное состояние сырьевой базы коксования проявляет тенденцию к ухудшению за счет уменьшения запасов коксующихся углей, закрытия шахт и разрезов в связи с истощением запасов. Угли новых предприятий не всегда имеют свойства, требуемые современной коксохимической промышленностью. В этих условиях в процессе коксования возрастает значение оценки ресурсов химических продуктов в углях и шихтах. Большое значение прогнозирование приобретает и при нестабильности и разнородности сырьевой базы коксования, что характерно для концентратов углеобогадательных фабрик.

В связи с этим разработка научно обоснованных методов подбора углей для коксования с целью получения заданного количества конечных продуктов, а также экономичного расхода ценных марок углей, определяет проведение дальнейших исследований по созданию метода прогнозирования выхода химических продуктов коксования – кокса, каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа – на основе характеристик качества углей.

Данный вопрос достаточно хорошо изучен при составлении зависимостей на основе одного-двух показателей, однако можно отметить недостаточную точность прогноза выхода продуктов коксования. Вопрос составления зависимостей на основе большего количества параметров и выбора их для прогноза недостаточно изучен и требует дальнейшего исследования.

Решение этих вопросов, выполненное в данной работе, определяет ее актуальность. Работа выполнялась в рамках проектной части государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации №10.782.2014К.

Степень разработанности темы

Анализ современного состояния исследований в области расчета выходов химических продуктов коксования показывает, что тема прогноза выхода основных химических продуктов коксования полно разработана в применении к отдельным продуктам коксования и практически полностью отсутствуют работы по прогнозу их совместного выхода. Начало исследованиям в данной области положено Лейбовичем Р.Е., Обуховским Я.М. и Сатановским С.Я., Ароновым С.Г. Математические

зависимости выхода химических продуктов коксования от химического потенциала углей предложены Гагариным С.Г. Возможность прогнозирования по данным элементного и петрографического анализов углей указана М.Б. Головкин, И.Д. Дроздников, Д.В. Мирошниченко, Ю.С. Кафтаном.

Объект исследования: концентраты углей Кузнецкого бассейна и их смеси.

Предмет исследования: зависимость выхода химических продуктов коксования от характеристик качества углей и их смесей.

Цель работы: разработка нового научно обоснованного метода прогноза выхода химических продуктов коксования из углей и их смесей, применяемых для процесса высокотемпературного коксования.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

1. Проведение исследований по определению свойств исходных углей Кузнецкого бассейна и их смесей и выхода из них химических продуктов коксования (на примере кокса, каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа), математический анализ полученных данных.

2. Выбор основных параметров качества углей и их смесей, влияющих на выход основных химических продуктов коксования.

3. Разработка нейросетевой математической модели прогноза выхода основных химических продуктов коксования.

Научная новизна работы:

1. Определены основные параметры качества углей Кузнецкого бассейна от газового до отощенно-спекающегося и их смесей, оказывающие наибольшее влияние на выход химических продуктов коксования: выход летучих веществ на сухую и сухую беззольную массу, индекс вспучивания по методу ИГИ-ДМетИ, толщина пластического слоя, содержание витринита, сумма отощающих компонентов, общий углерод на сухую беззольную массу, показатель степени молекулярной ассоциированности вещества угля, степень ароматичности структуры органической массы угля.

2. Впервые на основе экспериментальных значений показателей качества исходных углей и их смесей разработан метод прогноза выхода основных химических продуктов коксования на основе искусственных нейронных сетей. Разработана

ны математические модели и на их основе выведены системы уравнений, адекватно описывающие экспериментальные данные.

3. Показана применимость нейросетевой математической модели при прогнозировании выхода основных химических продуктов коксования для угольных шихт коксохимических производств.

Теоретическая значимость работы заключается в том, что показана принципиальная возможность применения метода искусственных нейронных сетей к оценке взаимосвязи выхода основных химических продуктов коксования и показателей качества углей и их смесей.

Практическая значимость работы: разработан метод прогноза выхода основных химических продуктов коксования на примере кокса, каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа по параметрам качества углей и их смесей, обладающий высокой точностью, на основе которого создана компьютерная программа.

Методология работы и методы исследования. Для достижения поставленной цели и решения задач проведено определение показателей качества углей и угольных концентратов, выхода из них химических продуктов коксования, математическое моделирование выхода химических продуктов коксования методом нейронных сетей. Для возможности применения полученных математических зависимостей выхода химических продуктов коксования от показателей качества исходных углей в практике промышленных производств, для исследований применялись стандартные методы определения показателей технического анализа углей, спекаемости, элементного и петрографического анализов. Математический анализ проводился методами кластерного, канонического, корреляционного и регрессионного анализов, математическое моделирование – методом искусственных нейронных сетей.

Положения, выносимые на защиту:

1. Результаты экспериментальных исследований по определению показателей качества углей и их смесей, выхода из них химических продуктов коксования.

2. Основные значимые факторы, оказывающие влияние на выход продуктов коксования при построении математической модели на основе искусственных нейронных сетей. Факторами, оказывающими наибольшее влияние, являются: для

кокса – V^d , y , ΣOK , C^{daf} ; для каменноугольной смолы – V^{daf} , ИВ, Vt , ΣOK , C^{daf} , сА; для сырого бензола – V^{daf} , ИВ, Vt , сА, fa ; для коксового газа – V^{daf} , ИВ, Vt , fa .

3. Метод прогноза выхода основных химических продуктов коксования на основе показателей качества исходных углей и угольных концентратов с применением искусственных нейронных сетей. Средняя относительная ошибка прогнозирования разработанного метода составляет: для кокса – $0,64 \pm 0,23$ %; для каменноугольной смолы – $19,53 \pm 5,25$ %; для сырого бензола – $10,02 \pm 2,83$ %; для коксового газа – $5,11 \pm 1,34$ %.

4. Возможность применения нейросетевой математической модели при прогнозировании выхода основных химических продуктов коксования для угольных шихт коксохимических производств.

Степень достоверности результатов исследования. Подтверждается использованием стандартных методов анализа, обоснованностью допущений при построении разработанной модели, а также удовлетворительной согласованностью качественных и количественных результатов расчетов, полученных на основе модели, с известными эмпирическими данными.

Реализация результатов работы. Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Интеллектуальная информационная система прогнозирования выхода продуктов коксования» № 2017662199 от 01.11.2017, в период с 26.09.2017 г. до 08.11.2017 г. проведена опытная эксплуатация вышеуказанной программы, по результатам которой ПАО «Кокс», г. Кемерово выдан протокол № 1, зарегистрированный под номером 15.00-1758 от 16.11.2017 г. Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Комплексная характеристика углей и их смесей» № 201661230 от 08.06.2016 г., предназначенной для хранения данных о качестве углей и угольных концентратов.

Апробация работы. Основные положения работы доложены и обсуждены на всероссийских и международных научно-практических конференциях: «Международная научно-практическая интернет-конференция «Современные актуальные проблемы естественных наук»», АРГУ (Актобе, Республика Казахстан, 2014 г.); «Всероссийская научно-практическая конференция молодых ученых с международным участием «Россия молодая»», КузГТУ (Кемерово, 2015–

2017 гг.); «Международная научная конференция «Полифункциональные химические материалы и технологии»», НИ ТГУ (Томск, 2015 г.); III Всероссийская научно-практическая конференция «Современные проблемы производства кокса и переработки продуктов коксования», КузГТУ (Кемерово, 2015 г.); «X Всероссийская научная конференция с международным участием «Аналитика Сибири и Дальнего Востока»», АлтГУ (Барнаул, 2016 г.); «XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии», УрФУ (Екатеринбург, 2016 г.); «XXI Международный научный симпозиум студентов и молодых ученых имени академика М. А. Усова «Проблемы геологии и освоения недр»», НИ ТПУ (Томск, 2017 г.).

Публикации. Основные положения диссертации опубликованы в 24 печатных работах, в том числе 5-и статьях в изданиях, рекомендованных ВАК и 2 – в зарубежных и переводных рецензируемых изданиях. Получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ «Комплексная характеристика углей и их смесей» № 2016616230 от 08.06.2016 г., «Интеллектуальная информационная система прогнозирования выхода продуктов коксования» № 2017662199 от 01.11.2017 г.

Личный вклад автора. Диссертант, совместно с научным руководителем, принимал активное участие в постановке задач теоретических и экспериментальных исследований, планировании эксперимента, обработке и анализе полученных результатов, формулировании научных положений, выносимых на защиту, выводах, и написании статей по теме диссертации. Результаты, приведенные в диссертационной работе, получены либо самим автором, либо при его участии.

Объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, 4 глав, заключения, выводов, списка литературных источников и приложений, изложена на 168 страницах машинописного текста, содержит 34 рисунка, 32 таблицы и библиографию, состоящую из 150 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность и степень разработанности исследования, определены цель и задачи работы, сформулированы положения, выноси-

мые на защиту, показана научная новизна и практическая значимость полученных результатов.

В первой главе проведен анализ литературных данных, где рассмотрены закономерности термических превращений угля в процессе высокотемпературного коксования, выход химических продуктов и его зависимость от различных факторов, а также современное состояние вопроса прогнозирования и расчета выхода химических продуктов коксования. Для оценки выхода кокса, каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа из углей и их смесей, как правило, используют классические зависимости. Данные зависимости были выведены более 30 лет назад и не в полной мере отражают существенно изменившиеся свойства сырья, а также не обладают достаточной точностью.

Основными показателями качества углей, оказывающими влияние на выход химических продуктов коксования, являются выход летучих веществ, мацеральный состав, произвольный показатель отражения витринита, содержание основных элементов органической массы углей и показатели спекаемости. По всем показателям предложены общие зависимости выхода химических продуктов. Однако на практике наблюдается различный выход химических продуктов коксования при одинаковых значениях некоторых характеристик исходных углей или их смесей. Например, имеются угли с одинаковым выходом летучих веществ, но различающиеся по количеству химических продуктов, и, наоборот, угли с одинаковым выходом химических продуктов имеют разный выход летучих веществ.

Во второй главе приведены методы исследования, значения характеристик качества исходных углей, методология работы. Исследованы 47 образцов концентратов углей Кузнецкого бассейна марок от газового до отощенно-спекающегося, а также смеси вышеуказанных марок. При выборе определяемых показателей качества исходных углей исходили из возможности применения полученных математических моделей для определения выхода химических продуктов коксования в практике угледобывающих и углеперерабатывающих производств. В связи с этим применены стандартные методы определения показателей качества углей, такие как технический, петрографический и элементный анализ, а также анализ показа-

телей спекаемости. Для экспериментальных исследований выхода химических продуктов коксования выбран метод, указанный ГОСТ 18635-73, так как он обеспечивает создание условий, близких к условиям промышленного коксования, и в то же время постоянных для всех определений.

В третьей главе, содержащей 5 разделов, приведены результаты определения параметров качества углей и их смесей и результаты их математического анализа.

В разделе 3.1 приведены результаты исследований углей и их смесей и определен перечень входных и выходных параметров для математического анализа. Группа выходных параметров включает основные химические продукты коксования (кокс, каменноугольная смола, сырой бензол, коксовый газ). В качестве входных параметров взяты основные параметры оценки свойств исходных углей и их смесей: A^d , V^d , V^{daf} , Ив, у, $R_{o,r}$, V_t , I, $\sum OK$, S_t^d , SI, C^{daf} , H^{daf} , Н/С, Саp, сА, fa.

В разделе 3.2 представлены результаты кластерного анализа, показывающие, что элементы выборки образуют четыре естественных кластера. Такое разбиение данных на кластеры объясняется тем, что выборка охватывает практически все основные марки углей, пригодных для коксования.

В разделе 3.3 представлены результаты канонического анализа, показывающего зависимость между группой входных и группой выходных параметров и однородность выборки без значительных одиночных выбросов.

В разделе 3.4 представлены результаты корреляционного анализа, из которых видно, что некоторые параметры сильно коррелируют друг с другом, поэтому один из параметров пары в дальнейшем анализе можно не учитывать. Такими параметрами являются I (коррелирует с V_t (значение коэффициента корреляции составляет -0,993) и $\sum OK$ (0,996)), SI (коррелирует с Ив (0,953)), Н/С (коррелирует с H^{daf} (0,986)), Саp (коррелирует с V^{daf} (-0,890) и C^{daf} (0,989)). В связи с тем, что коэффициент корреляции для пары V^d и V^{daf} близок к 1, в дальнейшем можно использовать V^d или V^{daf} при выявлении наиболее значимых параметров.

В разделе 3.5 представлены результаты регрессионного анализа и построения уравнений регрессии.

На основании того, что в процессе коксования практически вся зольная часть остается в коксе, то целесообразно для расчетов выхода кокса применять значение показателя V^d , а не V^{daf} . Так как каменноугольная смола, сырой бензол и коксовый газ являются компонентами прямого коксового газа, то целесообразно для расчетов их выхода применять значение показателя V^{daf} . Данные предположения подтвердились при построении искусственных нейронных сетей. Для устранения эффекта мультиколлинеарности исключены сильно коррелирующие параметры: для параметра «Сырой бензол» – $\sum OK$ и C^{daf} ; «Коксовый газ» – cA .

В связи с большим разбросом значений между параметрами, данные были приведены к стандартизированному масштабу, после чего для каждого входного параметра был найден модуль бета-коэффициента. Результаты расчетов приведены в Таблице 1.

По результатам регрессионного анализа наибольшее влияние на выходной параметр «Кокс» оказывают показатели: V^d , V_t , $\sum OK$, fa , cA , H^{daf} , y , $Ив$, C^{daf} ; «Каменноугольная смола» – V^{daf} , cA , $Ив$, C^{daf} , $\sum OK$, y , V_t , H^{daf} ; «Сырой бензол» – cA , V^{daf} , $Ив$, $R_{o,r}$, fa , H^{daf} , y , V_t ; «Коксовый газ» – V^{daf} , fa , V_t , $\sum OK$, y , $Ив$, C^{daf} , S^d_t , H^{daf} .

Таблица 1 – Модуль бета-коэффициента

Параметры	Модуль бета-коэффициента			
	Кокс	Смола	Сырой бензол	Коксовый газ
A^d	0,06024	0,17211	0,071930	0,083096
V^d	1,44500	–	–	–
V^{daf}	–	2,16751	0,761394	2,170385
$Ив$	0,20055	0,33221	0,575063	0,299682
y	0,27987	0,12212	0,261898	0,340096
$R_{o,r}$	0,01302	0,14680	0,384730	0,098292
V_t	0,98521	0,39268	0,092945	0,653922
$\sum OK$	0,92944	0,26038	–	0,647822
S^d_t	0,08777	0,03223	0,057888	0,177964
C^{daf}	0,15215	2,54721	–	0,277449
H^{daf}	0,32512	1,21332	0,273849	0,168583
cA	0,45994	2,63689	0,903562	–
fa	0,52790	2,27288	0,308213	0,940332

С параметрами, определенными по итогам канонического и регрессионного анализов, и выходом продуктов коксования составлены уравнения регрессии (формулы 1-4).

$$K = 20,78 - 0,54 \cdot V^d - 0,013 \cdot Ив + 0,15 \cdot y - 0,38 \cdot Vt - 0,38 \cdot \Sigma OK - 0,24 \cdot C^{daf} + 4,67 \cdot H^{daf} + 134,24 \cdot cA - 3,16 \cdot fa; \quad (1)$$

$$T_K = 29,68 + 0,12 \cdot V^{daf} + 0,01 \cdot Ив - 0,02 \cdot y - 0,0033 \cdot Vt + 0,00004 \cdot \Sigma OK + 0,04 \cdot C^{daf} - 1,53 \cdot H^{daf} - 33,11 \cdot cA; \quad (2)$$

$$C_6H_6 = 16,65 - 0,01 \cdot V^{daf} - 0,003 \cdot Ив + 0,0086 \cdot y + 0,51 \cdot R_o - 0,0001 \cdot Vt - 0,32 \cdot H^{daf} - 12,93 \cdot cA - 5,19 \cdot fa; \quad (3)$$

$$G_K = 72,77 + 0,057 \cdot V^{daf} + 0,0092 \cdot Ив - 0,07 \cdot y - 0,12 \cdot Vt - 0,1186 \cdot \Sigma OK - 2,89 \cdot S_t^d - 0,30 \cdot C^{daf} - 0,77 \cdot H^{daf} - 21,53 \cdot fa. \quad (4)$$

Средняя ошибка по расчетной выборке относительно экспериментальных значений определяемых показателей составила: для параметра «Кокс» –0,63 %, «Каменноугольная смола» –18,65 %, «Сырой бензол» – 12,59 %, «Коксовый газ» –6,22 %.

Вышеуказанные показатели качества углей являются значимыми, что также подтверждается результатами регрессионного анализа. Дальнейшее уменьшение количества параметров проведено опытным путем, заключающимся в построении нейронных сетей и отслеживании значения ошибки, получаемой на выходе.

В четвертой главе, включающей 4 раздела, приведены результаты построения интеллектуальной информационной системы прогнозирования выхода продуктов коксования и ее проверки на производственных значениях.

В разделе 4.1 охарактеризована топология искусственной нейронной сети, основанная на сети Ворда (Рисунок 1). Здесь x – значение входного параметра; n – количество входных параметров; m – количество нейронов в первом скрытом слое; t – количество слоев; k – количество нейронов в слое t ; Output – выход нейрона входного слоя; w – вес синапса; $f(x)$ – функция активации; Target – преобразованное значение нейрона выходного слоя; y – значение выходного параметра.

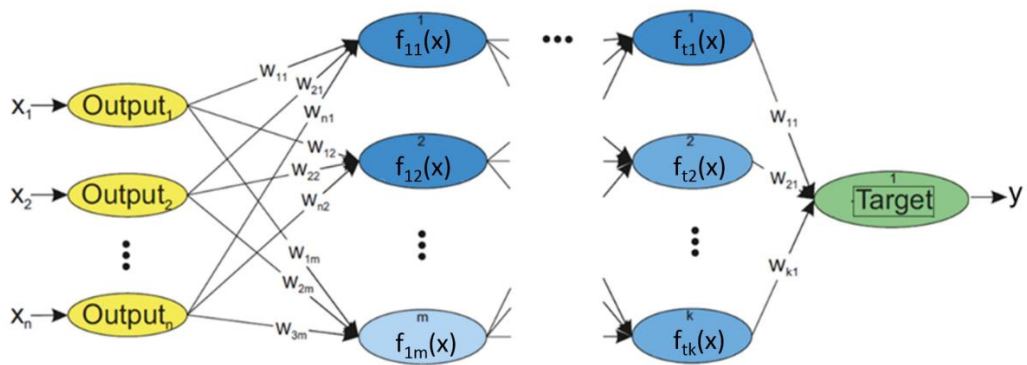


Рисунок 1 – Схема нейронной сети

В разделе 4.2 приведено описание алгоритма обучения сети. Для обучения сети применили стохастический метод, в котором выбирается случайный вес случайного нейрона, после чего он изменяется на случайную величину в интервале $[-0,5; 0,5)$. Далее сеть проверяется на обучающей выборке, если получившаяся средняя относительная ошибка увеличивается, то изменение веса отменяется. Также была добавлена возможность во время обучения сети случайным образом автоматически изменять передаточную функцию случайного нейрона скрытого слоя на одну из других, добавленных в программный код, функций.

В разделе 4.3 приведено описание полученных нейронных сетей и приложения «Интеллектуальная информационная система прогнозирования выхода продуктов коксования», позволяющего создавать нейронные сети и использовать их для прогнозирования выхода основных химических продуктов коксования.

Первая часть приложения предназначена для создания и обучения искусственных нейронных сетей (Рисунок2), вторая часть – для прогнозирования с использованием созданных ранее сетей (Рисунок3).

Первую часть приложения для создания сети можно разбить на 2 части: в верхней находятся поля и кнопки, необходимые для создания, обучения и сохранения нейронной сети, а в нижней – графики, необходимые для визуального контроля обучения сети. В главной форме пользовательского приложения отображена средняя относительная ошибка для выбранной сети, поля для ввода исходных значений и вывода рассчитанных показателей. Характеристика построенных нейронных сетей приведена в Таблице 2.

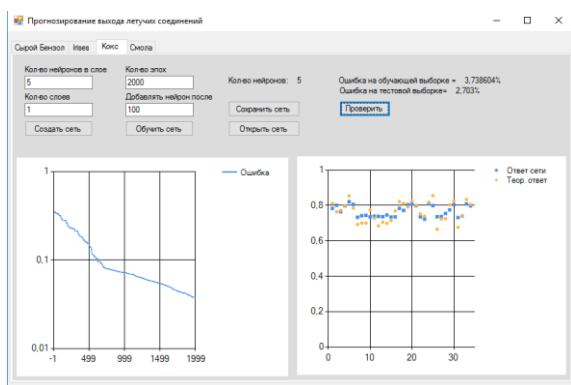


Рисунок 2 – Окно приложения для обучения сети

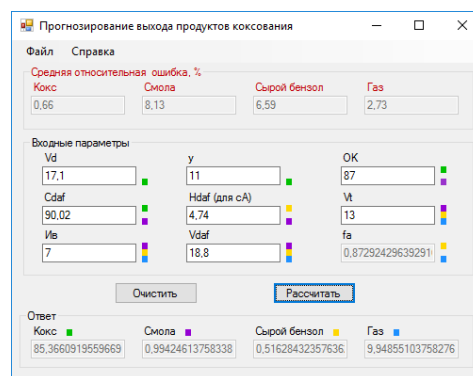


Рисунок 3 – Главная форма пользовательского приложения

Таблица 2 – Характеристика построенных нейронных сетей

Выходной параметр	Входные параметры	Количество скрытых нейронных слоев, шт.	Количество нейронов в слое, шт.	Средняя относительная ошибка сети, %
«Кокс»	$V^d, y, \sum OK, C^{daf}$	1	5	0,64±0,23
«Каменноугольная смола»	$V^{daf}, ИВ, V_t, \sum OK, C^{daf}, cA$	2	5	19,53±5,25
«Сырой бензол»	$V^{daf}, ИВ, V_t, cA, fa$	1	4	10,02±2,83
«Коксовый газ»	$V^{daf}, ИВ, V_t, fa$	1	3	5,11±1,34

В разделе 4.4 приведены результаты проверки адекватности построенной нейросетевой математической модели экспериментальным и производственным данным. Для проверки адекватности моделей экспериментальным данным для обучающей выборки, состоящей из 33 углей и их смесей, применен критерий Фишера. Поскольку соответствующее расчетное значение критерия Фишера ($Fp_{K^d} = 72,95$; $Fp_{T_{K^d}} = 4,35$; $Fp_{C_{\text{сн}}^d} = 1$ 0,00; $Fp_{G_{K^d}} = 5,77$) больше табличного значения для заданного уровня значимости $\alpha=0,05$ ($F_{T_{K^d}} = 2,92$; $F_{T_{T_{K^d}}} = 2,53$; $F_{T_{C_{\text{сн}}^d}} = 2,53$; $F_{T_{G_{K^d}}} = 2,92$), то нейросетевые математические модели адекватны.

Для проверки возможности использования нейросетевой математической модели в практике коксохимических заводов составлены экспериментальные угольные

смеси, состав которых моделирует среднемесячные расходы углей (на основе данных ПАО «Кокс», г. Кемерово) на процесс высокотемпературного коксования.

В Таблице 3 приведены экспериментальные и производственные значения выхода химических продуктов коксования для угольных смесей, а также их прогнозируемые значения, рассчитанные по правилу аддитивности из значений, определенных для отдельных углей с помощью нейросетевой математической модели, и рассчитана средняя относительная ошибка прогнозируемых значений. После знака дроби в столбце « G_K^d » указана сумма выхода коксового газа, пирогазетической воды, сероводорода, углекислого газа и непредельных углеводородов.

Таблица 3 – Экспериментальные и производственные значения выхода химических продуктов коксования для угольных смесей

Значение	K^d , %	T_K^d , %	$C_6H_6^d$, %	G_K^d , %
Январь 2015				
Рассчитанное по модели	75,76	3,09	0,80	14,09
Экспериментальное	76,81	3,45	0,77	13,95/18,34
Производственное	75,99	3,67	1,13	–/18,68
Относительная ошибка (эксп.)	1,37	10,43	3,90	1,00
Относительная ошибка (произв.)	0,30	15,8	29,20	–
Февраль 2015				
Рассчитанное по модели	75,69	3,08	0,75	13,86
Экспериментальное	75,46	3,17	0,75	14,10/19,86
Производственное	76,18	3,62	1,12	–/18,55
Относительная ошибка (эксп.)	0,30	2,84	0,00	1,70
Относительная ошибка (произв.)	0,64	14,92	33,04	–
Март 2015				
Рассчитанное по модели	75,62	3,05	0,78	13,90
Экспериментальное	75,67	3,38	0,75	13,96/19,22
Производственное	76,24	3,61	1,11	–/18,52
Относительная ошибка (эксп.)	0,07	9,76	4,00	0,43
Относительная ошибка (произв.)	0,81	15,51	29,73	–
Апрель 2015				
Рассчитанное по модели	75,78	3,02	0,77	13,83
Экспериментальное	75,91	3,52	0,74	13,91/18,95
Производственное	75,96	3,59	1,11	–/18,84
Относительная ошибка (эксп.)	0,17	14,20	4,05	0,58
Относительная ошибка (произв.)	0,24	15,88	30,63	–
Май 2015				
Расчетное по модели	75,91	3,01	0,77	13,93
Экспериментальное	76,42	3,34	0,74	13,87/18,65

Производственное	75,71	3,74	1,15	–/18,87
Относительная ошибка (эксп.)	0,67	9,88	4,05	0,43
Относительная ошибка (произв.)	0,26	19,52	33,04	–

ВЫВОДЫ

1. С применением стандартных методов исследования проведен комплексный анализ параметров качества углей и их смесей и выхода из них химических продуктов коксования. Установлены основные показатели качества углей Кузнецкого бассейна и их смесей, оказывающие наибольшее влияние на выход основных химических продуктов в процессе коксования: для кокса – V^d , y , $\sum OK$, C^{daf} ; для каменноугольной смолы – V^{daf} , Ив, Vt , $\sum OK$, C^{daf} , сА; для сырого бензола – V^{daf} , Ив, Vt , сА, fa; для коксового газа – V^{daf} , Ив, Vt , fa.

2. Впервые на основе экспериментальных данных разработан метод прогноза выхода основных химических продуктов коксования с применением математических моделей на основе искусственных нейронных сетей. На основе разработанных моделей построены зависимости выхода основных химических продуктов коксования и выведены системы уравнений, адекватно описывающие экспериментальные данные.

3. Сравнительное исследование точности прогнозирования выхода химических продуктов коксования с применением стандартных уравнений, регрессионных зависимостей, построенных на основе экспериментальных данных, и метода с применением искусственных нейронных сетей показало, что точность прогнозирования метода с использованием полученных нейронных сетей выше, так как он характеризуется наименьшей средней относительной ошибкой прогнозирования, составляющей соответственно: для кокса – $0,64 \pm 0,23$ %, для каменноугольной смолы – $19,53 \pm 5,25$ %, для сырого бензола – $10,02 \pm 2,83$ %, для коксового газа – $5,11 \pm 1,34$ %.

4. Показана возможность применения нейросетевой математической модели при прогнозировании выхода основных химических продуктов коксования для угольных шихт коксохимических производств.

ОПУБЛИКОВАННЫЕ РАБОТЫ

Основные положения диссертации опубликованы в 24 печатных работах, в том числе 5-и статьях в изданиях, рекомендуемых ВАК и 2 – в зарубежных и переводных рецензируемых изданиях.

Статьи, опубликованные в рецензированных научных журналах и периодических изданиях, входящих в текущий перечень ВАК России:

1. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г. Исследование влияния качественных характеристик концентратов углей Кузнецкого бассейна на выход химических продуктов коксования // Вестник Кузбасского государственного технического университета. № 4 (110). 2015. С. 105-111.

2. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Субботин С.П., Неведров А.В., Папин А.В. Исследование зависимости выхода химических продуктов коксования из концентратов углей Кузнецкого бассейна от их элементного состава // Ползуновский вестник. № 4. Т.1. 2015. С. 168-171.

3. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Субботин С.П., Неведров А.В., Папин А.В., Колмаков Н.Г., Кошелев Е.А. Прогнозирование выхода кокса на основе определения выхода химических продуктов коксования углей // Кокс и химия. 2015. № 11. С. 14-19.

4. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Субботин С.П., Неведров А.В., Папин А.В., Колмаков Н.Г. Выход химических продуктов коксования из концентратов углей Кузнецкого бассейна в зависимости от их элементного состава // Кокс и химия. 2015. № 11. С. 20-26.

5. Свид. 2016616230 Российская Федерация. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ. Комплексная характеристика углей и их смесей / Е.В. Васильева, Е.В. Васильев, Т.Г. Черкасова, С.П. Субботин, А.В. Неведров, А.В. Папин, Е.А. Кошелев. Заявл. 12.04.2016; опубл. 08.06.2016, реестр программ для ЭВМ. 1 с.

6. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Субботин С.П., Неведров А.В., Папин А.В., Колмаков Н.Г. Оценка показателя коксующести угольных концентратов на основе исследования прочности нелетучего остатка от определения выхода химических продуктов коксования // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2016. № 6. С. 178-184.

7.Свид. 2017662199 Российская Федерация. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ. Интеллектуальная информационная система прогнозирования выхода продуктов коксования / Е.В. Васильева, А.Б. Пилецкая, В.С. Дороганов, Т.Г. Черкасова, С.П. Субботин, А.В. Неведров, Е.А. Кошелев, Н.Г. Колмаков. Заявл. 04.09.2017; опубл. 01.11.2017, реестр программ для ЭВМ. 1 с.

Публикации в материалах конференций, индексируемых в РИНЦ:

1. Васильева Е.В., Неведров А.В, Субботин С.П. Исследование зависимости выхода химических продуктов коксования из угольных концентратов углей Кузнецкого бассейна от показателя отражения витринита и содержания витринита // Сб. материалов Международной научно-практической интернет-конференции «Современные актуальные проблемы естественных наук». Т.1. Актобе. 2014. С. 110-115.

2. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Субботин С.П., Папин А.В., Неведров А.В. Исследование качественных характеристик концентратов углей Кузнецкого бассейна, используемых для коксования // Сб. материалов Международной научной конференции «Полифункциональные химические материалы и технологии». Т.3. Томск: НИ ТГУ. 2015. С. 136-139.

3. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Субботин С.П., Папин А.В., Неведров А.В., Кошелев Е.А., Колмаков Н.Г. Изучение выхода химических продуктов коксования из углей Кузнецкого бассейна // Сб. материалов III Всероссийской научно-практической конференции «Современные проблемы производства кокса и переработки продуктов коксования», [Электронный ресурс] / ФГБОУ ВПО «Кузбас. гос. техн. ун-т им. Т.Ф. Горбачева». Кемерово. 2015. Режим доступа: http://science.kuzstu.ru/wp-content/Events/Conference/Other/2015/koks/pages/Articles/1/Vasilieva_2.pdf.

4. Васильева Е.В., Злобина Е.С. Прогнозирование выхода кокса из концентратов углей Кузнецкого бассейна // Сб. научных трудов «Успехи в химии и химической технологии». М: РХТУ им. Д.И. Менделеева. 2015. Т. XXIX. № 10. С. 89-91.

5. Vasileva E.V, Cherkasova T.G., Kolmakov N.G., Subbotin S.P., Nevedrov A.V., Papin A.V. Dependence of the Yield of Chemical Coking Products from Coal Concentrates on Their Nature // Atlantis Press: The 8th Russian-Chinese Symposium «Coal in the 21st Century: Mining, Processing and Safety». 2016. pp. 342–346.

6. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Субботин С.П., Неведров А.В., Папин А.В. Характеристика углей Кузнецкого бассейна по параметрам выхода химических продуктов коксования // Научные технологии разработки и использования минеральных ресурсов. 2016. № 2. С. 473-476.

7. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Папин А.В., Неведров А.В., Субботин С.П., Кошелев Е.А. Анализ выхода химических продуктов коксования из углей Кузнецкого бассейна // «Аналитика Сибири и Дальнего Востока»: материалы X Всероссийской научной конференции с международным участием. Барнаул: Изд-во АлтГУ. 2016. С. 107.

8. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Колмаков Н.Г., Субботин С.П., Неведров А.В., Папин А.В., Кошелев Е.А. Оценка углей Кузнецкого бассейна по технологическим характеристикам // XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. В 5 т. Т.4. Екатеринбург: УО РАН. 2016. С. 460.

9. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Папин А.В., Неведров А.В., Субботин С.П., Пилецкая А.Б., Дороганов В.С. Регрессионный анализ экспериментальных данных по определению выхода химических продуктов коксования // Сб. материалов IX Всероссийской науч.-практ. конф. молодых ученых с международным участием «Россия молодая». [Электронный ресурс] / ФГБОУ ВПО «Кузбас. гос. техн. ун-т им. Т. Ф. Горбачева». Кемерово. 2017. Режим доступа: <http://science.kuzstu.ru/wp-content/Events/Conference/RM/2017/RM17/pages/Articles/0604001-.pdf>

Автор выражает глубокую признательность за сотрудничество и поддержку д.х.н., профессору Т.Г. Черкасовой; д.т.н., профессору А.Г. Пимонову; к.х.н., доценту Е.А. Кошелеву; к.э.н. С.П. Субботину; А.Б. Пилецкой; В. С. Дороганову; Н.Г. Колмакову.

Автор благодарна сотрудникам ПАО «Кокс» г. Кемерово за помощь и содействие при выполнении работы и предоставленную возможность пользоваться научно-исследовательской базой и приборами лаборатории.