

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Кузбасский государственный технический университет им. Т. Ф. Горбачева»

На правах рукописи

Васильева Елена Вячеславовна

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

Специальность 05.17.07 – Химическая технология топлива и
высокоэнергетических веществ

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Научный руководитель
доктор химических наук, профессор
Черкасова Татьяна Григорьевна

Кемерово 2018

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
ГЛАВА 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.....	10
1.1 Анализ современного состояния вопроса выхода химических продуктов в процессе коксования	10
1.1.1 Сырье для процесса высокотемпературного коксования	10
1.1.2 Закономерности термических превращений процесса	11
1.1.3 Современные представления о выходе химических продуктов коксования и его зависимости от различных факторов.....	25
1.1.3.1 Выход химических продуктов коксования.....	25
1.1.3.2 Зависимость выхода химических продуктов коксования от свойств исходных углей.....	29
1.1.3.3 Зависимость выхода химических продуктов коксования от технологических условий процесса коксования.....	36
1.1.4 Современное состояние вопроса прогнозирования выхода химических продуктов коксования.....	56
1.2 Заключение по литературному обзору и постановка цели	74
ГЛАВА 2 ХАРАКТЕРИСТИКА ОБЪЕКТА ИССЛЕДОВАНИЯ,МЕТОДОЛОГИЯ И МЕТОДЫ ДИССЕРТАЦИОННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ.....	76
2.1 Выбор и обоснование объекта исследования.....	76
2.2 Методы определения показателей качества углей	78
2.3 Описание методов математического анализа.....	82
2.4 Описание математического моделирования методом нейронных сетей	93
ГЛАВА 3 МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ИСХОДНЫХ УГЛЕЙ	97
3.1 Определение элементов для последующего анализа	97
3.2 Кластерный анализ.....	97
3.3 Канонический анализ.....	99
3.4 Корреляционный анализ.....	101
3.5 Регрессионный анализ	102

3.6 Построение уравнений регрессии.....	108
ГЛАВА 4 ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ВЫХОДА ПРОДУКТОВ КОКСОВАНИЯ.....	
4.1 Топология сети	111
4.2 Алгоритм обучения сети.....	115
4.3 Описание полученных нейронных сетей.....	116
4.4 Проверка математической модели	124
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	138
ВЫВОДЫ	139
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	140
ПРИЛОЖЕНИЕ А РЕЗУЛЬТАТЫ АНАЛИЗА КАЧЕСТВА УГЛЕЙ	154
ПРИЛОЖЕНИЕ Б КОРРЕЛЯЦИОННАЯ МАТРИЦА	160
ПРИЛОЖЕНИЕ В ГРАФИКИ КОРРЕЛЯЦИИ.....	161
ПРИЛОЖЕНИЕ Г БЛОК-СХЕМА ОБУЧЕНИЯ СЕТИ	166
ПРИЛОЖЕНИЕ Д ПРОТОКОЛ ПОДВЕДЕНИЯ ИТОГОВ ОПЫТНОЙ ЭКСПЛУАТАЦИИ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ	167

ВВЕДЕНИЕ

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 по технологическим свойствам, что характерно для концентратов углеобогажительных 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 не достаточно 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 угля предложены Гагариным С.Г. Возможность прогнозирования по данным элементного и петрографического анализов углей указана М.Б. Головкин, И.Д. Дроздиным, 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 новых научно обоснованных методов 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. Выбор основных параметров качества углей и их смесей, влияющих на выход основных химических продуктов коксования.
2. 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.
3. Разработка нейросетевой математической модели прогноза выхода основных химических продуктов коксования.

Научная новизна:

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. Разработаны 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 решения поставленной цели и 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 нейронных сетей.

Положения, выносимые на защиту:

1. Результаты экспериментальных исследований по определению показателей качества углей и угольных концентратов, 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 %, для каменноугольной смолы – 19,53 %, для сырого бензола – 10,02 %, для коксового газа – 5,11 %.

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 и методиками.

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.

Апробация работы. Основные положения диссертационной работы доложены и обсуждены на следующих конференциях: Международная выставка-

ярмарка «Экспо-уголь»» (г. Кемерово, 2014 г.); «II Всероссийская конференция «Химия и химическая технология: достижения и перспективы»» (г. Кемерово, 2014 г.); «Международная научно-практическая интернет-конференция «Современные актуальные проблемы естественных наук»» (г. Актобе (Республика Казахстан), 2014 г.); «Международная студенческая научно-практическая конференция «Молодежь и наука: региональные и глобальные интересы»» (г. Семей (Республика Казахстан), 2015 г.); «II региональная научно-практическая конференция студентов и школьников «Экология Кузбасса»» (г. Кемерово, 2015 г.); «VII Всероссийская 60 научно-практическая конференция молодых ученых с международным участием «Россия молодая»» (г. Кемерово, 2015 г.); «Международная научная конференция «Полифункциональные химические материалы и технологии»» (г. Томск, 2015 г.); III Всероссийская научно-практическая конференция «Современные проблемы производства кокса и переработки продуктов коксования» (г. Кемерово, 2015 г.); VII Всероссийская научно-практическая конференция «Исследования и достижения в области теоретической и прикладной химии» (г. Барнаул, 2015 г.); «VIII Всероссийская 61 научно-практическая конференция молодых ученых с международным участием «Россия молодая»» (г. Кемерово, 2016 г.); «X Всероссийская научная конференция с международным участием «Аналитика Сибири и Дальнего Востока»» (г. Барнаул, 2016 г.); «XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии» (г. Екатеринбург, 2016 г.); «III Всероссийская конференция «Химия и химическая технология: достижения и перспективы»» (г. Кемерово, 2016 г.); «XXI Международный научный симпозиум студентов и молодых ученых имени академика М. А. Усова «Проблемы геологии и освоения недр»» (г. Томск, 2017 г.); IX Всероссийская, 62-й научно-практическая конференция молодых ученых с международным участием «Россия молодая»» (г. Кемерово, 2017 г.).

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 вышеука-

занной 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.

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.

Публикации. Основные положения диссертации опубликованы в 24 печатных работах, в том числе 5 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.

ГЛАВА 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Анализ современного состояния вопроса выхода химических продуктов в процессе коксования

1.1.1 Сырье для процесса высокотемпературного коксования

Сырьем для процесса высокотемпературного коксования служат сорта каменных углей, способные спекаться – свойство измельченного угля (шихты) при нагреве до определенной температуры без доступа воздуха образовывать спекшийся нелетучий остаток [1].

Угли всех бассейнов, которые идут на коксование, разделены на четыре группы: высокой коксуемости (Ж, КЖ, К), средней коксуемости (ГЖ, ОС, ГЖО, КО), низкой коксуемости (Г, КСН, КС) и некокующиеся (СС, Т, ТС), которые можно использовать, в случае применения традиционной технологии подготовки шихт к коксованию, в составе шихт в ограниченном количестве, либо необходимо применять специальные способы подготовки или коксования этих углей. Первая группа определяет спекаемость шихты. К ней отнесены марки углей, без которых при традиционной технологии подготовки и коксования углей невозможно получить кокс, отвечающий по прочности требованиям современного металлургического производства.

Особенностью сырьевой базы коксования является то, что в настоящее время марочный состав на детально разведанных и освоенных участках месторождений не соответствует марочному составу угольных шихт, обеспечивающих получение кокса заданных параметров. Наблюдается повышенное использование жирных и коксовых углей по сравнению с долями их запасов, и пониженное использование газовых углей [2].

Ввиду дефицитности углей высокой и средней коксуемости перед коксованием обычно составляют смесь углей разных марок (шихту). В шихту могут вводиться значительные количества самостоятельно не коксующихся углей, однако с

таким расчетом, чтобы суммарные свойства шихты обеспечивали нормальный процесс коксования. Основным свойством, определяющим пригодность шихты для коксования, является ее способность образовывать при нагреве пластический слой достаточной толщины, вязкости и с требуемым ходом термического разложения. Кроме того, состав шихты регламентируется по содержанию золы, серы, фосфора, влаги и ряда других примесей [3].

Использование углей различных марок и качественных параметров (свойств) при прочих равных условиях в части производства кокса обуславливается следующими основными причинами [4]:

- ограниченностью запасов углей той или иной марки, хотя и обладающей хорошей спекаемостью и другими необходимыми свойствами, а также их дороговизной;
- требованиями потребителей к качеству кокса;
- отдаленностью коксохимических заводов от поставщиков коксующихся углей, что предопределяет затраты на транспортировку.

1.1.2 Закономерности термических превращений процесса высокотемпературного коксования

Известно, что реакциями деструкции высокомолекулярных соединений называют такие реакции, которые протекают с разрывом связей основной макромолекулярной цепи и приводят к понижению молекулярной массы полимера без изменения его химического состава (если концевыми группами макромолекулы пренебречь) [5].

Применительно к углехимии наибольший практический интерес представляет деструкция углей под влиянием тепловой энергии. Осуществляется она по цепному механизму с промежуточным образованием свободных радикалов. Поэтому при нагревании высокомолекулярных соединений протекающие реакции только условно могут быть названы деструкцией. В действительности же – это сложный процесс, в котором разрыв связей (собственно деструкция) сопровожда-

ется возникновением новых связей и изменением структуры нагреваемого высокомолекулярного соединения (в частности, угля) [6].

Исследователями [7] было установлено, что механизм термического расщепления макромолекулярной структуры веществ разных углей принципиально одинаков (как, впрочем, всех природных и синтетических высокомолекулярных соединений). Поэтому различие спекаемости следует искать, по-видимому, в количественном и качественном различии образующихся при термической деструкции промежуточных продуктов, в их способности вступать между собой и матричной структурой во вторичные взаимодействия.

Процесс высокотемпературного коксования может быть разделен на две стадии: стадию образования первичных продуктов, протекающую в пределах низких температур до 450–500 °С, и стадию образования конечных продуктов коксования. Конечные продукты коксования – смола, бензол, аммиак, газ – образуются в результате вторичных реакций разложения и, возможно, синтеза продуктов первичного разложения. Имеющиеся данные экспериментального и теоретического порядка несколько, но не исчерпывающе, освещают вопрос образования химических продуктов в течение процесса коксования.

1. Стадии образования первичных продуктов коксования. Выделение газов при низких температурах (до 150–200 °С) происходит за счет окклюдированных газов. К числу окклюдированных газов относятся углекислый газ и некоторые углеводороды жирного ряда. Хотя выделение этих газов, безусловно, происходит задолго до выделения газов, образующихся вследствие разложения углей, все же не представляется возможным точно подразделить по времени окончание выделения первых и начало выделения вторых. Однако можно отметить, что чем меньше содержание углерода в исходном угле, тем заметнее разделяются эти два момента.

К выделяющейся внешней влаге добавляется пирогенетическая влага; в особенности это наблюдается у углей с малым содержанием углерода или у окисленных углей. При температурах порядка 300 °С, в зависимости от условий дистилляции, отгоняются масла, которые можно рассматривать не как продукты разложения, а как продукты простой отгонки некоторых угольных компонентов.

Количественные данные, характеризующие результаты сухой перегонки углей при низких температурах, приведены в Таблице 1 [8].

Таблица 1 – Выход продуктов при низкотемпературной сухой перегонке углей

Наименование продукта	Температура сухой перегонки, °C						
	425	450	475	500	525	550	575
Выход смолы, г	1,15	1,94	2,10	2,42	2,40	2,45	2,43
Выход пирогенетической воды, см ³	0,2	0,3	0,4	0,6	0,7	0,85	0,95
Выход полукокса, г	17,62	16,48	16,11	16,46	15,20	14,83	14,65
Выход газа, см ³	210	300	580	815	1000	1340	1440
Теплотворная способность газа, кДж	33,91	44,72	47,31	47,27	40,74	37,85	35,38
Состав газа, масс. %							
H ₂ S	8,6	7,3	6,6	5,9	5,1	4,4	4,2
CO ₂	16,4	11,9	8,2	8,8	6,6	7,0	7,3
C _n H _m	8,9	9,7	8,0	6,8	6,0	5,2	4,0
CO	7,1	6,8	5,8	5,2	5,0	6,2	6,9
H ₂	4,0	5,3	7,3	10,0	13,2	16,7	18,2
N ₂	11,3	7,2	5,5	4,2	3,6	3,1	3,0
CH ₄ с гомологами	40,7	51,8	58,6	61,6	60,5	57,4	55,5

Данные этой таблицы свидетельствуют о следующем:

а) выход смолы растет с повышением температуры перегонки до 550 °C, а затем начинает падать; выход газа и пирогенетической воды непрерывно возрастает, а кокса, естественно, непрерывно снижается. Теплотворная способность газа достигает максимума при 500 °C, после чего уменьшается, что связано с понижением содержания преимущественно тяжелых углеводородов. Первичная смола не содержит ароматических углеводородов и фенолов простейшего вида; в первичной смоле содержатся углеводороды гидроароматического и ароматического ряда, с боковыми цепями, и высшие фенолы. С ростом температуры содержание фенолов в первичной смоле возрастает. Вода, получаемая при перегонке углей в области низких температур, не содержит аммиака;

б) границей, отделяющей процессы полукоксования от процессов обычного коксования, является температура в 500–600 °C. Об этом свидетельствуют данные, полученные Шимомура [8], а именно: смола отгонялась полностью при темпера-

турах до 500–550 °С; полученный при этих температурах полукокс при дальнейшем нагреве не давал смолы.

2. Стадии образования конечных продуктов коксования. Получающиеся в результате первичного разложения продукты подвергаются, до момента выхода их из камеры коксования, значительным изменениям. Изменения эти обуславливаются высокими температурами и контактно-каталитическим действием, оказываемым поверхностью раскаленного кокса и стенками камер.

С повышением температуры коксования выход газа непрерывно растет за счет выхода смолы и некоторого уменьшения выхода кокса. Выход сырого бензола также непрерывно растет, не достигая максимума даже при 1000 °С. При повышении температур коксования от 500 до 1100 °С выход чистого бензола и содержание его в сыром бензоле быстро увеличиваются, так что даже при росте выхода толуола (до 800–900 °С) содержание последнего в сыром бензоле относительно уменьшается.

В исследовательской работе Иенкнера[8] установлено, что выход смолы понижается постепенно при повышении температуры коксования до 850 °С; при более высоких температурах процесса выход смолы остается постоянным. Некоторые исследователи (Уоррен, Сладек, Шимомура и Намура)[8] показали, что повышение выходов смолы, аммиака и бензола имеет место за счет газа и кокса.

Выход продуктов коксования определяется также скоростью нагрева в предпластичном периоде. По данным Уоррена[8] скорость нагрева в период пластического состояния не влияет на выход продуктов коксования. Быстрый нагрев благоприятствует получению водорода, а не метана. Все же скорость нагрева является фактором вторичным, факторами же решающего значения являются температурные условия коксования. Большое значение имеют в связи с этим нагрев и объем подводящего пространства камер коксования. Большое практическое и теоретическое значение имеют данные об изменении состава жидких продуктов коксования (бензола и смолы) с повышением температуры процесса сухой перегонки углей.

Изменение состава дистиляционного газа в зависимости от температуры показано на Рисунке 1 в виде кривых [8].

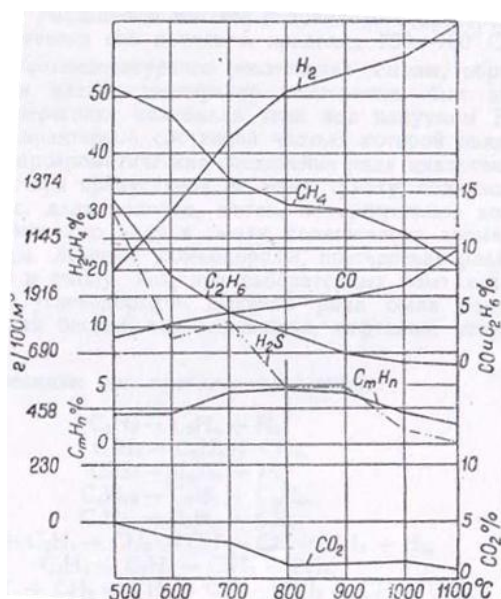


Рисунок 1 – Изменение состава дистиляционного газа в зависимости от температуры

С повышением температуры содержание метана и его гомологов в газе убывает, а содержание водорода возрастает; содержание оксида углерода возрастает, а содержание диоксида углерода снижается; содержание тяжелых углеводородов достигает максимума при температуре 800–900 °C, после чего начинает снижаться.

Изучение изменений выходов продуктов коксования в зависимости от температурных условий было проведено Фоксвеллом[8]. Им были исследованы три угля, в отношении которых уже имелись данные коксования их в производственных условиях. В лабораторных условиях нагревание углей производилось со скоростью 1 °C в минуту; образующиеся продукты коксования подвергались в этих условиях, возможно, малому пирогенетическому разложению. Им были получены следующие результаты. Меньший выход смолы на производстве по сравнению с выходом в лабораторных условиях имел место за счет ее разложения. Разложению смолы соответствует больший выход кокса и газа. Выход аммиака в производственных условиях также склонен к снижению. Меньший выход воды в производственных условиях, по сравнению с лабораторными, может быть объяснен тем,

что пары воды в первом случае реагируют с углеродом кокса, образуя CO и CO_2 , что подтверждается также снижением содержания углерода в коксе.

Эвансом были проведены работы по выявлению влияния быстроты нагрева (скорости коксования) на выход смолы. Полученные им данные приведены в Таблице 2 [8].

Таблица 2 – Влияние скорости нагрева на выход смолы

Время, в течение которого была достигнута температура 1000 °С	Выход смолы, л
18 мин	49,9
40 мин	46,1
100 мин	66,9
195 мин	52,9
13 ч	50,7

Из приведенных данных видно, что имеется оптимальная скорость нагрева, при которой обеспечивается наибольший выход смолы.

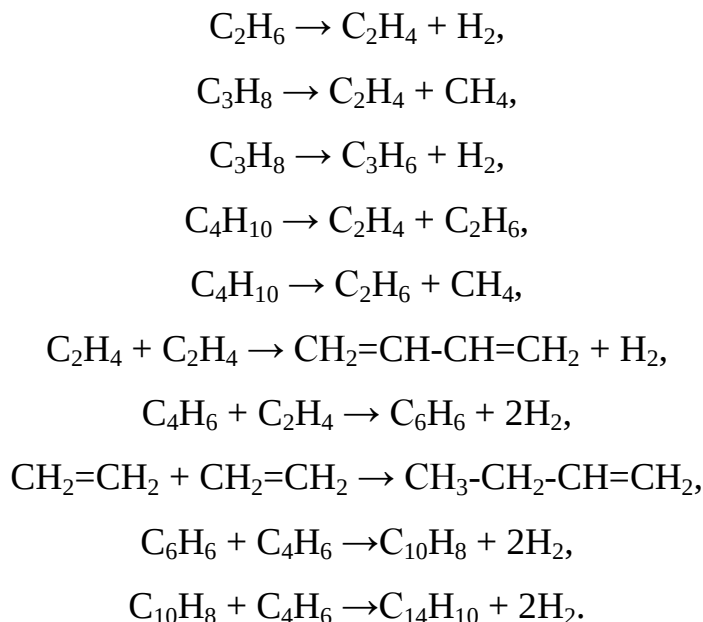
Рау и Ламбриссом [8] было установлено, что выход пирогенетической воды колебался от 4,8 до 7,3 масс. %, в зависимости от того, достигалась ли конечная температура в 1000 °С в течение нескольких минут или за 36 ч.

Совокупность реакций, происходящих до выхода паров и газов в подсводное пространство печей, может дополняться реакциями, протекающими в последнем, в особенности в случае значительной усадки загрузки в процессе коксования и недостаточно полной загрузки камеры шихтой. В этом отношении температура в подсводном пространстве и время пребывания в нем реагирующих компонентов имеют большое значение [9].

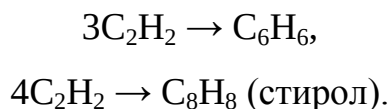
Процесс высокотемпературного разложения смолы, образующейся в области низких температур коксования, был изучен Пикте [8]. При перегонке каменного угля под вакуумом Пикте получил смолу, характерной составной частью которой являются ненасыщенные соединения ряда циклогексана. Вакуумная смола при пропускании ее через трубку, содержащую раскаленный кокс, дала водород, метан, незначительное количество этилена, аммиачную воду и смолу, содержа-

щую ароматические углеводороды. Жирные углеводороды, претерпевая разложение, дали бензол и смолу. Так, при лабораторных опытах крекирования жирных углеводородов высшего ряда была получена смола, содержащая бензол, толуол, ксилол, нафталин, антрацен, фенантрен.

Возможные реакции при крекинге следующие [8]:

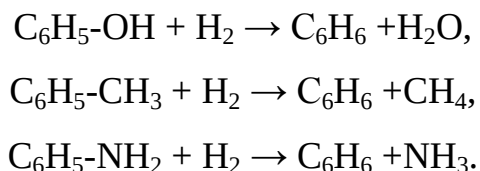


МарселенБертло приписывал большую роль в образовании ароматических углеводородов ацетилену [2]:



Нужно, однако, отметить, что ацетилен не найден в продуктах дистилляции, поэтому теория Бертло[8], справедливая для лабораторных условий опыта, не подтверждена для промышленных условий коксования. В образовании бензола могут принимать участие и радикалы типа $-\text{CH}_3$, $=\text{CH}_2$, $\equiv\text{CH}$.

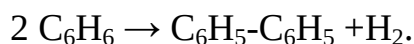
Фр. Фишер, Тау [8] считают, что источником образования ароматических углеводородов являются фенолы, которые содержатся в первичной смоле. По мнению этих ученых, образование бензола может происходить по следующим реакциям:



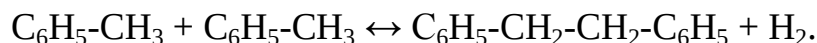
Так как в коксовом газе, в условиях высокотемпературного коксования, всегда содержится водород, то возможность протекания таких реакций вероятна. Эти реакции протекают в области температур 750–800 °С.

Однако гипотезой Фишера, в принципе правильной, нельзя объяснить все стороны процессов, при которых получают ароматические соединения. Исследования Никольского [10] и практика многих коксохимических заводов показали, что возможно одновременное увеличение выхода ароматических углеводородов и фенолов, которое нельзя объяснить гипотезой Фишера [10].

Бензол является устойчивым соединением в присутствии водорода, но при высоком нагреве в отсутствие водорода он переходит в дифенил [2]:



Дифенил превращается в бензол, будучи нагретым в присутствии водорода. При нагреве одного толуола получается дифенилэтан, который может переходить в фенантрен [11]:



Первая из двух последних реакций обратима в присутствии водорода, вторая же реакция необратима. Поэтому толуол и фенантрен (антрацен) присутствуют в каменноугольной смоле, тогда как дифенилэтан в ней отсутствует [8].

По мнению Мирошниченко, ароматические углеводороды могут получаться из самых разнообразных компонентов первичной смолы [10].

Природа происходящей в процессе углефикации эволюции форм связи атомов в составе веществ органической массы углей является одной из причин изменения выхода продуктов при коксовании углей разной степени метаморфизма [11]. В связи с этим представляют интерес данные, объясняющие происходящие при пиролизе угольного вещества процессы, основанные на общих теориях пиролиза. Процесс коксования углей может быть охарактеризован как непрерывный ряд пирогенетических процессов разложения угольного вещества, природа которого, его состав оказывают непосредственное влияние на качество и количество образующихся химических продуктов. Таким образом, химическая природа

углей и условия протекания процесса коксования являются основными факторами, влияющими на ход образования химических продуктов. Природа вещества углей изучалась при помощи химических, микроскопических, петрографических и рентгенографических методов.

Имеющиеся данные свидетельствуют об ароматической природе углей. В вещество углей входят некоторые содержащие кислород активные группы, например, фенольные гидроксилы, карбоксилы; нужно полагать, что наряду с шестичленными кольцами в веществе углей содержатся также пятичленные гетероциклические кольца. Примерное строение угольной молекулы может быть установлено на основании технического, элементарного и рентгеновского анализов углей, по данным определения отдельных групп, по результатам окисления, восстановления и термического разложения углей.

Примерная структурная формула фрагмента молекулы угля некоторыми исследователями представляется в виде, изображенном на Рисунке 2 [8]. Подобного рода предположения и утверждения делаются на основании результатов исследований Бона, Махадевана, Рилей [8] и ряда других ученых.

Махадеван [8] подверг исследованию ряд разновидностей как самих углей, так и их фракций, полученных при обработке углей органическими растворителями. Им было доказано, что если подвергнуть уголь коксованию, то вещество его приобретает все большую компактность строения, переходящую к концу периода коксования в стройную решетку графита.

Рилей [8] в своей работе отмечает, что процесс коксования углей характеризуется ароматической конденсацией их исходного вещества с образованием послойной решетки. Этот автор указывает, что когда органические вещества подвергаются нагреву при высоких температурах, то могут иметь место или процессы крекинга с отделением простейших по своему строению летучих продуктов, или процессы полимеризации с образованием шестиугольных решеток, подобных графиту, то есть может протекать процесс конденсации. Оба эти процесса можно наблюдать и при коксовании углей. В качестве доказательства протекающей при коксовании конденсации Рилей приводит такой пример. Путем окисления исход-

ного угля была получена, в небольшом количестве, меллитовая кислота. В результате процесса коксования из кокса, получавшегося при температуре до 700 °С, можно было получить все возрастающее количество меллитовой кислоты. Из кокса, полученного при 1000 °С, получалось примерно то же количество меллитовой кислоты, что и из кокса, полученного при 700 °С. Образование большего количества меллитовой кислоты из кокса, по сравнению с углем, свидетельствует о происшедшем процессе конденсации. Факт наибольших выходов меллитовой кислоты из коксов, полученных до 700 °С, свидетельствует, что при этой температуре уже произошла наибольшая конденсация. Дальнейшие процессы носили вторичный характер, не сказывающийся на выходах меллитовой кислоты.

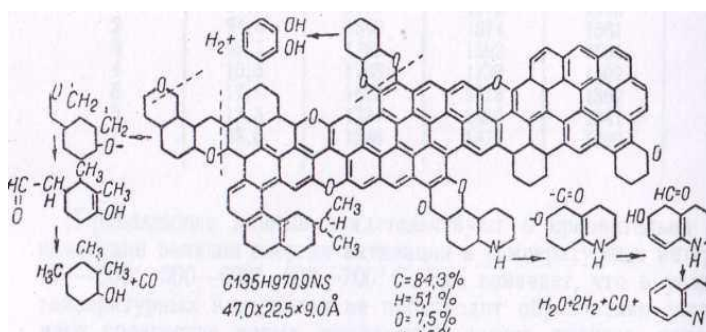


Рисунок 2 – Примерная структурная формула фрагмента угольной молекулы с указанием некоторых возможных процессов пиролиза

Образующиеся в результате процесса коксования большие плоские шестиугольные ингредиенты образуют решетки, подобные решетке графита.

В соответствии с правилом малых молекулярных превращений, разложение веществ под действием тепла происходит таким образом, что протекающие реакции связаны с наименьшей деформацией молекулы. Это означает, что когда в органических соединениях происходит ряд эндотермических или слабо экзотермических реакций при высоких температурах, то структурное строение продуктов реакции будет в известной степени идентично структуре исходного соединения. И действительно, в результате пиролиза угля наблюдается образование в значительном количестве соединений ароматического характера, с большей или меньшей степенью уплотненности.

Согласно данным Гойера[8], в ароматических соединениях $C=C$ связь более устойчива, нежели $C—C$ связь; обратное положение справедливо для подобного рода связей в соединениях жирного ряда. Отсюда следует, что соединения парафинового ряда крекируются при умеренной температуре без образования кокса. У них происходит расщепление связей между атомами углерода, в то время как в соединениях ароматического ряда, вследствие прочности шестичленных колец, происходит химическая конденсация, число связей между атомами углерода в соединениях увеличивается, и в конечном итоге происходит образование кокса при одновременном освобождении водорода и соединений типа метан, этилен и др.

Это положение справедливо для нашего случая – из угля, содержащего структурные групп ароматического характера, в результате пиролиза получается более сконденсированное вещество – коксовый остаток.

Для ряда углей были определены величины энергии активации процессов, имеющих место при пиролизе. При этом получены величины, приведенные в Таблице 3 [8]:

Таблица 3–Величины энергии активации процессов пиролиза

Номер угля лабораторной пробы	Выход летучих, масс. %	Энергия активации, кДж/моль при:			Средняя величина, кДж/моль
		400–500 °C	500–600 °C	600–700 °C	
1	24,3	7,19	4,92	6,04	5,81
2	24,8	7,74	6,59	6,54	6,95
3	25,7	7,40	6,67	6,54	6,87
4	16,5	7,47	7,28	6,29	6,59
5	17,1	6,79	7,17	6,29	6,75
6	17,5	7,26	7,66	7,71	7,54
7	35,0	6,64	5,74	6,30	6,41

Приведенные данные свидетельствуют о сравнительно малом изменении величин энергии активации в температурных интервалах 400–500, 500–600, 600–700 °C. Это означает, что в указанных температурных интервалах не происходит образования значительного количества новых соединений, а весь процесс коксования представляет собой постепенное протекание реакций расщепления, то есть

подтверждается известное положение Моргана и Суле[8]: разложение угольного вещества, подверженного действию тепла, представляет собой прогрессивный процесс постепенного разложения, в котором пирогенетический синтез играет второстепенную роль.

Средние молярные массы летучих промежуточных продуктов постоянно уменьшаются по мере возрастания температуры коксования. Можно принять, что начальное разложение угля, дающее полукокс и полукоксовую смолу, характеризуется: отрывом радикалов, превращением гетероциклов в альдегиды, дающие фенолы, амины и нафтенy, и прогрессивным дегидрированием с отрывом боковых цепей под действием выделяющегося водорода. Конечное разложение протекает максимум между 600 и 800 °C и характеризуется: потерей водорода и других простых газов из полукокса и гидроароматических летучих веществ; гидрированием фенолов в ароматические углеводороды с образованием метана, этана, воды; образованием твердых высших ароматических соединений собственно из полукокса вследствие вторичных пирогенетических синтезов.

Сказанное может быть иллюстрировано Рисунком 3[8].

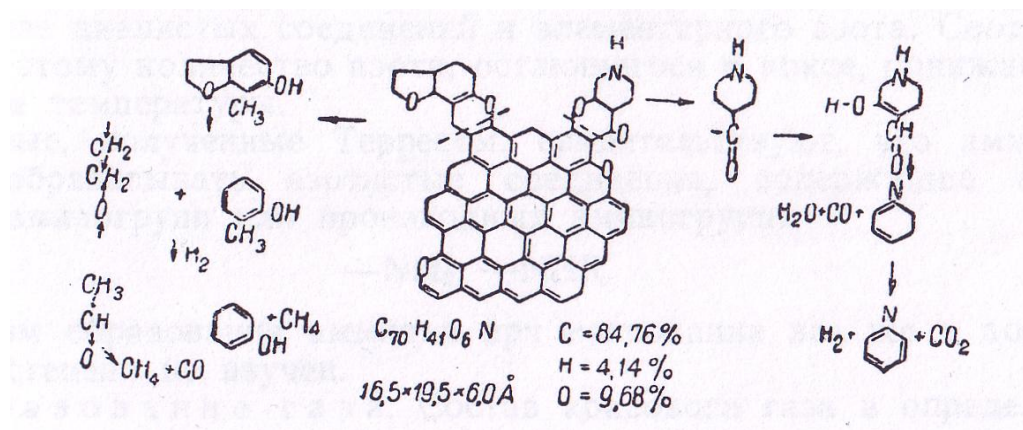


Рисунок 3 – Примерная схема пиролиза угля

Перейдем к рассмотрению условий образования химических продуктов при пиролизе углей, исходя из некоторых предпосылок, связанных с их природой:

- образование коксовой смолы. Общий выход смолы зависит от степени метаморфизма углей и их химической природы. Первичная смола содержит в

себе продукты разложения составных частей угля, а также вещества, находившиеся в угле в готовом состоянии и переходящие в первичную смолу без разложения.

Входящие в состав таких веществ углеводороды переходят в первичную смолу без разложения (парафины, насыщенные циклические и ароматические углеводороды), отчасти же подвергаются гидрогенизации или разложению с образованием газообразных и легкокипящих углеводородов с открытой цепью. В состав выплавляющихся из угля битумов входят смолы, состоящие из смеси веществ ароматического и терпенового ряда; в условиях перегонки смолы они распадаются с образованием фенолов, ароматических и ненасыщенных циклических углеводородов.

В состав нерастворимой в органических жидкостях части углей входят сложные поликарбоновые кислоты, получившиеся в результате полимеризации непредельных жирных кислот и измененных гуминовых веществ. Гумусовая часть угля дает смесь фенолов, среди которых преобладают сложные многоядерные соединения.

Из компонентов, входящих в состав вещества исходных углей, только насыщенные гидроароматические углеводороды и часть парафинов подвергаются превращению при повышенных температурах, отчасти под каталитическим влиянием стенок реторты или накаливаемого кокса (например, ненасыщенные гидроароматические углеводороды уже при 600 °С могут отщеплять водород и переходить в чисто ароматические соединения). Остальные вещества, входящие в состав угля, разлагаются при более низкой температуре и дают пары первичной смолы, которые затем превращаются в составные части коксовой смолы;

- образование бензола и бензольных углеводородов. Компоненты, входящие в состав сырого бензола, в своем основном количестве образуются за счет пирогенетического разложения гумусовой части угля путем отрыва отдельных бензольных ядер от молекул гуминовых веществ. Соотношение между бензолом и его гомологами в сыром бензоле зависит от природы исходного угля;
- образование аммиака. Образование аммиака имеет некоторые отличительные особенности: оно не зависит от химической природы угля и от содер-

жания в нем летучих веществ и азота, кроме того в аммиак превращается не весь азот угля. Данные Таблицы 4 [8] свидетельствуют о распределении азота угля между продуктами коксования.

Таблица 4 – Распределение азота угля между продуктами коксования

Распреде- ление азота, масс. %	Исследователи								
	Фостер	Мак- Лоард	Шорт	Стон	Кноблаух			Зоммер	
	Содержание азота в угле, масс. %								
	1,73	1,93	1,57	1,40	1,55	1,48	1,18	1,90	1,54
В коксе	48,68	58,30	42,31	46,30	30,0	35,6	63,90	72,23	60,32
В виде ам- миака	14,50	17,10	15,16	13,05	11,9	14,1	15,90	17,85	19,10
В виде циа- нидов	1,56	1,20	1,43	1,42	1,8	1,8	4,10	0,47	1,05
В смоле	-	3,90	2,98	-	1,3	1,4		1,63	2,66
В газе- в виде элементарно- го азота (по разности)	35,26	19,50	37,12	46,30	55,0	47,1	16,10	6,82	16,70
Всего	100	100	100	100	100	100	100	100	100

Данные, полученные Терресом [8], свидетельствуют, что аммиак могут образовывать азотистые соединения, содержащие азот в виде аминогрупп или производных аминогрупп: $-NH_2$, $-NHR$.

Механизм образования аммиака при коксовании еще в достаточной степени не изучен;

- образование газа. Состав коксового газа в определенной мере зависит от свойств исходного угля – от содержания в нем летучих веществ и кислорода. В соответствии с данными Дэвилля [8], чем выше содержание в угле кислорода, тем больше в газе паров воды, углекислоты и окиси углерода. У углей с повышенным содержанием кислорода наблюдаются большие (по массе) выходы газа, поскольку плотность газа также выше [8].

В последние годы уделяется внимание полиеновой модели строения углей, поскольку многие экспериментальные данные не находят объяснений с позиций ароматической модели. Принципиальное различие состоит в том, что ароматическая модель является замкнутой системой полисопряжения, а полиеновая модель

представляет собой открытые линейные системы полисопряжения, преимущественно неароматического характера. В рамках данной модели также выдвинуто новое представление о полимерной составляющей углей в виде «сдвоенных» спиралевидных и зигзагообразных цепей, а также сложных ансамблей [12]. С развитием данного представления об угле, возможно, можно будет углубить представления о механизмах пиролиза органической массы углей.

Таким образом, изучение закономерностей выхода химических продуктов коксования из различных углей и их смесей для прогнозирования выхода химических продуктов в процессе коксования является очень важной практической задачей, так как природа углей и условия протекания процесса коксования являются основными факторами, влияющими на выход данных продуктов. Основными показателями, характеризующими природу углей и влияющими на выход химических продуктов коксования, являются выход летучих веществ и показатель отражения витринита, характеризующие степень метаморфизма углей, мацеральный и элементный составы, степень окисленности углей. Основными технологическими условиями процесса коксования, влияющими на выход химических продуктов, являются объем камеры коксования и полнота ее загрузки, температура процесса и равномерность обогрева угольной загрузки, давление в камере коксования и газосборнике, оборот печей, степень измельчения шихты.

1.1.3 Современные представления о выходе химических продуктов коксования и его зависимости от различных факторов

1.1.3.1 Выход химических продуктов коксования

При нагревании угольной шихты в коксовых печах без доступа воздуха под влиянием повышенной температуры происходит ряд физических и химических превращений угольного вещества. Сначала испаряется влага шихты, затем уголь сначала размягчается и плавится, а при более высокой температуре снова затвердевает; при этом происходит разложение вещества угля с выделением из него паров и газов – первичных продуктов разложения. Выделившиеся на этой стадии

коксования первичные продукты, подвергаясь действию высоких температур, претерпевают ряд превращений, в результате которых образуются новые вещества – вторичные продукты разложения.

«В практических условиях высокотемпературного коксования средний выход отдельных продуктов обычно следующий (Таблица 5)» [13]:

Таблица 5 – Средний выход отдельных продуктов коксования

Наименование продукта	Выход, масс. %
Кокс	73–78
Коксовый газ (после выделения из него смолы, аммиака, бензола и др.)	15–18
Смола	2,5–4,5
Пирогенетическая влага	2–4
Сырой бензол	0,8–1,1
Сернистые соединения	0,2–1,5
Аммиак	0,25–0,4

«Основными летучими продуктами высокотемпературного коксования являются: коксовый газ, пары воды, нафталин, аммиак, сероводород (и другие сернистые соединения), цианистые соединения, бензольные углеводороды (сырой бензол), высокотемпературная каменноугольная смола и др.» [14].

«Смесь паро- и газообразных продуктов коксования, выходящих из коксовых камер в газосборники, образует так называемый прямой коксовый газ» [14]. Он имеет темно-бурый, а иногда даже коричневый цвет из-за содержащихся в нем значительных количеств паров смолы. В Таблице 6 приведено примерное содержание в нем химических продуктов [13].

Кроме того, в газе содержится сравнительно незначительное количество легких пиридиновых оснований ($0,4\text{--}0,6\text{ г/м}^3$), различные сераорганические (сероуглерод (CS_2), сероксид углерода (COS), тиофен ($\text{C}_4\text{H}_4\text{S}$) и его гомологи в количестве до $2\text{--}2,5\text{ г/м}^3$), фенолы и иные соединения [13].

Таблица 6 – Примерное содержание химических продуктов в прямом коксовом газе

Наименование продукта коксования	Содержание, г/м ³
Пары воды (пирогенетической и влаги шихты)	250–450
Пары смолы	80–150
Бензольные углеводороды	30–40
Аммиак	8–13
Нафталин	до 10
Сероводород	2,5–40
Цианистый водород	0,5–2,5

«При обработке прямого коксового газа в аппаратуре цеха улавливания из него выделяются основные химические продукты коксования, в результате чего получается очищенный коксовый газ. Он называется обратным, потому что часть его подается на обогрев коксовых печей, и, как бы, возвращается обратно. Обратный коксовый газ состоит в основном из неконденсирующихся в обычных условиях компонентов прямого газа, а также остатков сероводорода, бензольных углеводородов, углеводородов непредельного ряда, незначительных количеств оксидов азота и др.» [14]. Примерный состав обратного коксового газа приведен в Таблице 7 [13].

Таблица 7 – Примерный состав обратного коксового газа

Компонент коксового газа	Содержание, масс. %
Водород H ₂	54–59
Метан CH ₄	23–28
Тяжелые углеводороды C _n H _m	2–3
Оксид углерода CO	5,5–7
Диоксид углерода CO ₂	1,5–2,5
Азот N ₂	3–5
Кислород O ₂	0,3–0,7

Выход коксового газа, приведенного к нормальным условиям (273 К и 101,3кПа), в зависимости от разных факторов колеблется, обычно, в пределах 300–320 м³/т сухой шихты, плотность, благодаря значительному содержанию водорода, в зависимости от состава газа колеблется в пределах 0,45–0,50 кг/м³. Низшая теплотворная способность 1 м³ обратного коксового газа составляет 16,33–17,17 кДж.

Получаемая на коксохимических заводах смола представляет собой смесь большого числа различных веществ. В настоящее время в каменноугольной смоле открыто свыше 300 соединений, большинство которых содержится в незначительном количестве. Большинство компонентов смолы относится к полициклическим и моноциклическим углеводородам с различными боковыми цепями и без них. Кроме того, в смоле имеются кислородсодержащие (фенол, крезолы, ксиленолы) и азотсодержащие соединения (пиридин и его гомологи). Качество смолы характеризуется ее плотностью и содержанием свободного углерода (нерастворимого в органических растворителях остатка), зольностью, так как при переработке зола смолы полностью переходит в пек. Содержание в смоле свободного углерода характеризует степень ее полимеризации. Чем больше содержание свободного углерода и чем больше плотность смолы (обычно оба эти показателя изменяются в одном направлении), тем меньше выход масел при ректификации смолы и тем больше выход твердого остатка – пека.

Плотность смолы, получаемой при коксовании угля, колеблется обычно в пределах 1,15–1,21. Содержание свободного углерода меняется в пределах 4–10 масс. %. Кроме этих показателей, смола дополнительно характеризуется разгонкой на отдельные фракции и содержанием нафталина, антрацена, фенолов и пиридиновых оснований [13].

«Сырой бензол, как и смола, является смесью большого числа соединений. Однако, в противоположность смоле, в сыром бензоле основную массу его составляют всего несколько соединений» [13].

«Основными компонентами сырого бензола являются: бензол, толуол, ксилолы и триметилбензолы, иначе называемые сольвентами. В сумме эти продукты составляют до 90 масс. % всего сырого бензола. Остальная часть приходится, главным образом, на соединения неопределенного характера и на сернистые соединения. Кроме того, в сыром бензоле содержится незначительное количество фенолов и пиридиновых оснований» [13].

1.1.3.2 Зависимость выхода химических продуктов коксования от свойств исходных углей

Исследования углей Кузнецкого бассейна в настоящее время включают в себя различные аспекты его изучения, в том числе генезис углей и разработку, а также совершенствование технологий по их использованию [15]. Угли Кузнецкого бассейна залегают в отложениях пермского периода. Свойства углей резко меняются по простиранию, и угли, поступающие на коксование, представлены всеми группами – от газовых до тощих. Угли кольчугинской свиты клареновые, состоят на 80–90 масс. % из витренизированного вещества, угли балахонской свиты – дюреновые, содержат до 65 масс. % витренизированного вещества.

Выход летучих веществ колеблется в широких пределах (от 13,8 до 40,8 масс. %). В соответствии с этим изменяется и выход химических продуктов: смолы 0,66–6,22 масс. %, сырого бензола 0,33–1,84 масс. %, аммиака 0,22–0,60 масс. %, и газа, приведенного к 273 К и 101,3 кПа, 289–444 м³/т.

«Выход химических продуктов коксования зависит от свойств коксуемой угольной шихты и от технологических условий процесса коксования» [13].

Как известно, выход летучих веществ определяется во всех действующих классификациях каменных углей и является одним из показателей, указывающих на степень их метаморфизма [16].

Выход летучих веществ можно рассматривать как меру термической устойчивости органической массы угля при нагреве до высокой температуры и как суммарную величину химических веществ, образующихся при очень быстром нагреве до 900 °С. Скорость нагрева при пиролизе влияет на ход процесса, но общая закономерность сохраняется. Поэтому выход летучих веществ должен согласовываться с выходом химических продуктов коксования и составом коксового газа.

При исследованиях большинство углей Донбасса и углей Восточных районов установлено, что [17]:

1. Угли с различным содержанием летучих веществ дают различные выходы химических продуктов коксования.
2. Выходы бензольных углеводородов и смолы, как правило, повышаются с уве-

личением выхода летучих веществ в углях. Выходы аммиака дают колеблющиеся результаты.

3. Одни летучие вещества еще не являются достаточным показателем, определяющим выхода химических продуктов из угля, так как имеются угли с одинаковым или близким содержанием летучих веществ, но с разными выходами химических продуктов коксования.

4. Выходы химических продуктов из смеси углей с достаточной для практики степенью точности могут быть подсчитаны как среднестатистические из отдельных углей, составляющих шихту.

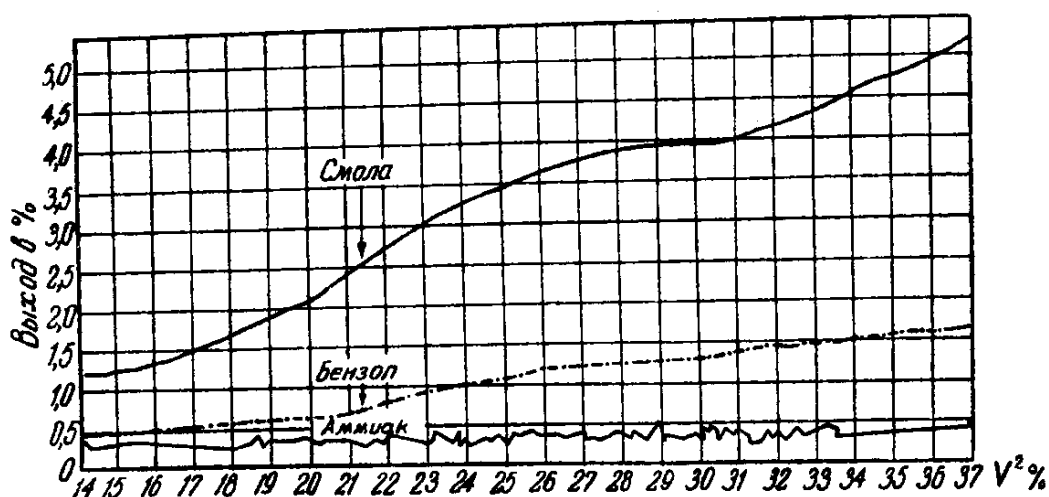


Рисунок 4 – Выход химических продуктов в зависимости от выхода летучих веществ в углях (Донбасс)

Если все изученные угли Донбасса расположить в системе координат, как представлено на Рисунке 4 [17], то выявляется определенная зависимость между содержанием летучих веществ и выходами химических продуктов. Однако прямой зависимости между содержанием летучих веществ и выходами химических продуктов нет, имеются угли с одинаковым количеством летучих веществ, но дающие разные выходы химических продуктов. Имеются также угли, дающие одинаковое количество химических продуктов, но при разных содержаниях летучих веществ.

Установлено [17], что при лабораторном исследовании полной сходимости между расчетными и фактическими показателями нет. Однако, между ними суще-

ствуется определенный параллелизм. Та шихта, которая по расчетным данным должна дать наибольший выход смолы и бензола, обладает такими показателями и фактически. Совершенно очевидно, что в заводских условиях реакции идут совершенно иначе, нежели в условиях лабораторного опыта, и потому лабораторные результаты изучения углей могут служить только для выяснения относительных ресурсов химических продуктов в той или иной шихте. Поскольку наблюдается вышеуказанный параллелизм, можно при подсчете ресурсов химических продуктов в шихте пользоваться данными для индивидуальных углей.

Анализ данных, полученных О.Я. Козиной и Т.П. Некрасовой (ОАО ЗСМК) [18] подтвердил, что изменение выхода смолы, бензольных углеводородов и аммиака зависит от выхода летучих веществ и марочной принадлежности углей (Рисунок 5) [18].

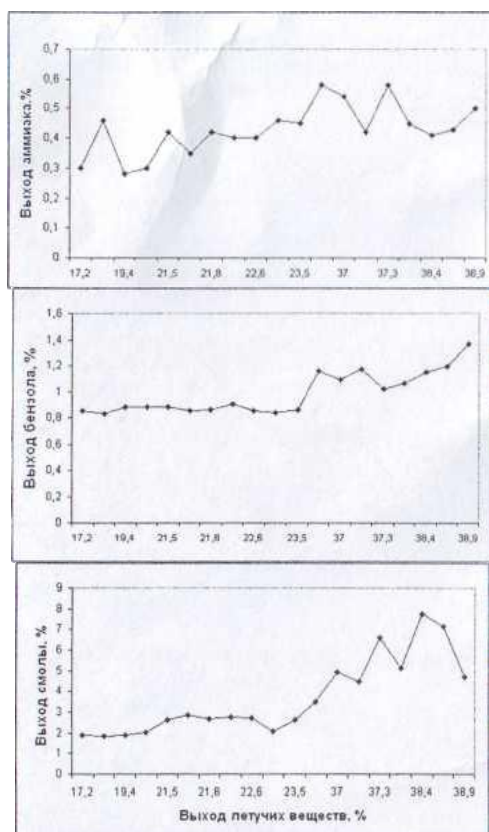


Рисунок 5 – Зависимость выхода аммиака, бензола и смолы от выхода летучих веществ

С увеличением выхода летучих веществ выход смолы и бензольных углеводородов увеличивается, но со значительными колебаниями для одной и той же марки углей. По выходу аммиака такой зависимости не просматривается.

Прямой зависимости между выходом летучих веществ и выходом химических продуктов коксования не наблюдается. Например, имеются угли с одинаковым выходом летучих веществ (ш. «Распадская», ш. «Полосухинская»), но различающиеся по количеству химических продуктов, и, наоборот, угли с одинаковым выходом химических продуктов имеют разный выход летучих веществ (ш. «Зенковская», ш. «Алардинская») [18].

Повышенными ресурсами смолы и бензола характеризуются угли марок Ж, ГЖ и Г, при этом некоторые из этих углей имеют одинаковый выход химических продуктов коксования. Поэтому повышение выхода летучих веществ изменением состава шихты не всегда приводит к росту выхода химических продуктов коксования [1,18].

«Выход коксового газа повышается с увеличением выхода летучих веществ и снижением степени метаморфизма углей» (Рисунок 6)[16], но данное условие может нарушаться. Например, отелные жирные угли имеют более высокой выход газа, чем некоторые газовые. Заметны и значительные колебания внутри отдельных марок. Это объясняется, по-видимому, различиями в происхождении и условиях образования углей [16].

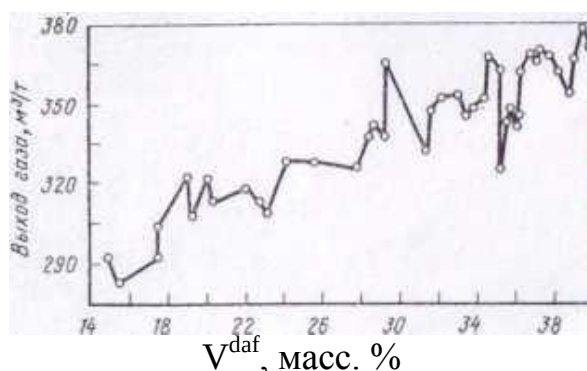


Рисунок 6 – Изменение выхода газа в зависимости от выхода летучих веществ

На основе исследований, приведенных в [16, 18] можно заключить, что выход химических продуктов коксования повышается с увеличением выхода летучих веществ и снижением степени метаморфизма углей. Выход кокса наоборот увеличивается в ряду метаморфизма углей, что обусловливается снижением в нем выхода летучих веществ [19].

Сера шихты в процессе коксования распределяется между коксом, коксовым газом, смолой, сырым бензолом и надсмольной водой. Примерное распределение серы шихты по отдельным продуктам в процессе коксования показано исследователями [20]: значительная часть серы угля остается в коксе (64,3 масс. %) и коксовом газе (30,1 масс. %, преимущественно в виде сероводорода), а в смоле, сыром бензоле и надсмольной воде 5,6 масс. %, что связано с технологическими условиями коксования (конструктивными особенностями коксовых печей), а также с характеристиками сырьевой базы коксования. В шихте увеличилось содержание газовых и жирных углей, уменьшилась доля коксовых, а свойства угля и характер сернистых соединений в нем оказывают влияние на поведение серы при коксовании [21]. Можно предполагать, что выход и состав органических сернистых соединений коксового газа зависят также от степени метаморфизма угля. При коксовании углей в ряду возрастающей степени метаморфизма в газе снижается количество меркаптанов, серооксида углерода, сероуглерода и тиофена; тиофен не образуется при коксовании углей высокой степени метаморфизма (ОС и Т) [22].

Мацеральный состав исходных углей также оказывает влияние на состав и выход химических продуктов коксования. Так выход бензола и смолы из витринита вначале возрастает при переходе от бурых углей (при $R_0 = 0,32\text{--}0,48\%$) к каменным газовым (при $R_0 = 0,73\%$) и жирным углям ($R_0 = 0,93\text{--}1,09\%$), а затем снижается при дальнейшем повышении степени метаморфизма. Количество твердого остатка при увеличении R_0 закономерно возрастает, находясь в обратной корреляции с показателем выхода летучих веществ. Таким образом, при ориентации на получение моноциклических ароматических углеводородов наиболее ценными с химической точки зрения являются витринитовые угли средней стадии метаморфизма (преимущественно угли марки Ж) [23].

Для мацералов группы лейптинита выход моноциклических ароматических углеводородов (на примере бензола) существенно снижается с ростом степени метаморфизма угля, что связано, в основном, с уменьшением содержания водорода в лейптините с постепенным сближением показателей H^{daf} (и других данных элементного состава) с таковыми для витринита [23]. Выход кокса из мацералов данной группы ниже, а выход смолы, сырого бензола и газа выше, чем из мацералов группы инертинита [24].

Данные по выходу моноциклических ароматических углеводородов и смолы мацералов группы инертинита указывают на существенное снижение этого показателя по сравнению с мацералами групп витринита и лейптинита. Это объясняется содержанием в нем большего по сравнению с остальными мацералами количества углерода и меньшего – водорода.

Среди характеристик состава угля с выходом моноциклических ароматических углеводородов (на примере бензола) в наибольшей степени коррелирует содержание водорода H^{daf} . При этом меньшие значения коэффициентов корреляции в случае инертинита в сравнении с другими мацералами обуславливаются не большим изменением значений H^{daf} инертинита при варьировании степени метаморфизма [23].

Изометаморфные гумусовые угли, имеющие близкие петрографические характеристики, нередко существенно отличаются по химическому составу, физическим свойствам и технологическим показателям. В связи с этим в науке об угле возникло понятие о различной степени восстановленности углей. Обычно по степени восстановленности выделяются 3 группы: сильно-, средне- и слабовосстановленные. Сильновосстановленные угли от слабовосстановленных отличаются более высоким выходом летучих веществ, лучшей спекаемостью и растворимостью в органических растворителях [25]. В единой классификации ГОСТ 25543-2013 [26] отличия каменных углей (углей среднего ранга) по восстановленности характеризуются суммарно выходом летучих веществ, указывающим на принадлежность к генетическому типу, и значением толщины пластического слоя, определяющим подтип угля [27].

Более восстановленные угли содержат больше водорода и меньше кислорода в сравнении с изометаморфными менее восстановленными углями [28].

В связи с этим можно предположить, что в общем случае выход моноциклических ароматических углеводородов (на примере бензола) должен быть тем выше, чем большей степенью восстановленности они характеризуются. Этот аспект можно иллюстрировать данными для разновосстановленных углей Кузбасса, рассмотренными в [29, 30]. Из результатов исследований, представленных в [31], можно сделать вывод, что при определенной степени метаморфизма ($R_0 > 1,5\%$) выход моноциклических ароматических углеводородов (на примере бензола) из разновосстановленных углей выравнивается. Однако при $R_0 < 1,5\%$ наблюдаются отличия в значениях данного показателя в зависимости от степени восстановленности [23].

В коксохимическом производстве содержание кислорода O^{daf} в углях и производственной шихте, с одной стороны, обуславливает выход ценных кислородсодержащих органических продуктов – компонентов каменноугольных смол (фенолы и их алкилпроизводные), но с другой – отрицательно влияет на экологию при производстве кокса, так как его количество (вследствие выделения пирогенетической влаги) определяет количество сточных вод, перерабатываемых на очистных сооружениях. Среди мацералов больше всего кислорода в одном и том же угле содержит витринит, а меньше всего – лейптинит [32]. «При прочих равных условиях повышенное значение O^{daf} коррелирует с уменьшением степени метаморфизма углей и соответственно – с увеличением выхода летучих веществ, что ведет к уменьшению валового выхода кокса. В зависимости от распределения форм кислорода в органической массе угольной шихты в коксовом газе могут заметно меняться соотношения оксидов углерода (CO и CO_2) и теплота сгорания газа» [33].

Некоторые авторы утверждают [32], что формирование выхода кокса во многом зависит от содержания инертинита в органической массе углей, а химических продуктов коксования – от содержания витринита и липтинита.

Характеристика состояния углей по степени окисленности также дает данные для прогноза выхода химических продуктов: в зависимости от степени окисленности угля настолько изменяется процесс пиролиза, что конечными продуктами при

максимальной окисленности являются CO , CO_2 и H_2O , если не принимать во внимание содержание в угле азота и серы [2]. Лабораторными и опытно-промышленными исследованиями установлено, что использование окисленных углей в шихтах для коксования приводит к росту их аналитической влажности и насыпной плотности, ухудшению пластично-вязких свойств, снижению содержания углерода и водорода с одновременным увеличением доли кислорода; снижению выхода валового кокса, смолы, бензола и непредельных соединений, увеличению выхода углекислого газа и пирогенетической воды [33, 34].

На ход тех или иных процессов в углях при нагревании существенное влияние оказывает обработка угля растворами соляной кислоты. Она значительно влияет на процесс деструкции угля, что приводит к увеличению выделения из угля жидких продуктов и газа, образуется большее количество водорода и газообразных углеводородов, при этом несколько снижается количество оксидов углерода. Соляная кислота также способствует образованию высокомолекулярных жидкоподвижных нелетучих веществ, которые улучшают конденсационные процессы, приводящие к образованию высокопрочного кокса. Это позволяет заменить в шихте некоторое количество коксующихся углей на слабоспекающиеся и неспекающиеся [25].

1.1.3.3 Зависимость выхода химических продуктов коксования от технологических условий процесса коксования

«Образующиеся в процессе термической деструкции углей газо- и парообразные продукты претерпевают различные превращения, которые связаны как с процессом спекания, так и с пиролизом при эвакуации их. На процесс пиролиза влияет технологический и теплотехнический режим коксования. При коксовании можно создать такой режим, когда выход газа будет повышаться в результате пиролиза смолы, а качество смолы и сырого бензола ухудшаться. Но можно создать режим, который обеспечит повышенный выход смолы и сырого бензола и лучшее их качество по содержанию в них наиболее ценных компонентов. В первую очередь выбираемый режим коксования должен обеспечить требуемое качество кокса, однако следует помнить, что даже при одинаковом теплотехническом режиме

обогрева отдельные моменты технологии могут существенно изменить показатели качества жидких и газообразных продуктов коксования» [35].

Летучие продукты, выделяющиеся из полукокса, направляются преимущественно к стенкам камеры и, поднимаясь вдоль последних, попадают в верхнюю часть камеры – в подсводовое пространство.

Подниматься вверх непосредственно по трещинам в полукоксе и коксе летучие продукты могут только в незначительной степени, так как на этом пути они встречают значительное сопротивление. Еще большее сопротивление для прохода газов создает пластический слой, и поэтому выделяющиеся из полукокса газы практически не попадают к центру угольной загрузки.

Летучие продукты, выделяющиеся из пластической массы, также направляются преимущественно к стенкам камеры. Газовыделение происходит главным образом с горячей стороны пластического слоя, т. е. из области более высоких температур, и, чтобы попасть в среднюю часть коксовой камеры, летучим продуктам приходится преодолевать значительное сопротивление пластического слоя.

Таким образом, образующиеся в процессе коксования летучие продукты проходят вдоль горячей стенки, собираются в подсводовом пространстве и, пройдя его, уходят из камеры через стояк. Пиролиз летучих продуктов осуществляется при их подъеме вдоль горячей стенки и при прохождении через подсводовое пространство. Несмотря на то, что вопрос о преимущественном значении той или иной стадии пиролиза неоднократно являлся предметом дискуссий и исследований, он продолжает оставаться неясным. Температура стенки, вдоль которой поднимаются газы, значительно выше температуры в подсводовом пространстве, однако продолжительность их пребывания в последнем больше, чем продолжительность контакта с горячей стенкой или раскаленным коксом. Именно это обстоятельство и придает значимость обеим стадиям пиролиза, причем, в зависимости от конкретных условий, преимущественное значение может получить та или иная стадия.

В то же время, согласно данным Штекеля и Лоренца [11], значительная часть выделяющихся при коксовании газов и паров избирает путь, как внешний

газ – через раскаленный, уже готовый кокс и вдоль горячей стенки печной камеры, где температура выше, чем в подсводовом пространстве при нормальных условиях. Приносимые с внешним газом химические продукты коксования при поступлении в подсводовое пространство уже, следовательно, подверглись глубоким изменениям. Остальная часть потока газов и паров вместе с парами влаги шихты проходит внутри камеры, между пластическими слоями, через холодную массу измельченного угля. Этот внутренний газ при температуре примерно 500 °С поступает в подсводовое пространство, где происходит его пиролиз и ароматизация.

Состав химических продуктов коксования, содержащихся в общем газе, зависит от соотношения количеств внешнего и внутреннего газов, а также от соотношения температур и времени пребывания газов в подсводовом пространстве. Согласно результатам исследований Штекеля и Лоренцена [11], примерно до начала десятого часа периода коксования из середины угольной загрузки и из частей ее, прилегающих к стенкам, получают два различных по своему составу газа.

По мнению авторов [36], «основной поток образующихся газо- и парообразных продуктов направляется на горячую сторону. Проходя вдоль коксовых отделинностей и поднимаясь у стен вверх, продукты проходят среднее расстояние около 2 м. Далее они объединяются в подсводовом пространстве, где средний путь их до выхода из печи составляет около 6 м (при одностороннем отводе газа). Сопоставляя длину путей, некоторые исследователи приходят к выводу, что определяющим моментом термического преобразования выделяемых продуктов является воздействие на них в подсводовом пространстве».

В течение всего периода коксования температура подсводового пространства непостоянна. После загрузки холодной шихты и при интенсивном выделении водяных паров и летучих веществ она снижается и затем начинает постепенно повышаться, достигая предельного значения в конце периода коксования.

Температура подсводового пространства в значительной степени зависит от конструкции печей и режима обогрева. «Полная загрузка печей, то есть небольшой объем подсводового пространства, является обязательным условием для достижения удовлетворительной температуры независимо от конструкции печей» [13].

Наиболее интенсивно летучие продукты выделяются примерно между четвертым и двенадцатым часом периода коксования. При нормальной загрузке печей температура подсводового пространства в этот промежуток времени составляет 700–750 °С, а при недогрузке 725–810 °С. Ясно, что в последнем случае процессы пиролиза будут проходить более интенсивно, причем эта интенсивность будет обуславливаться не только высокой температурой, но также большим объемом подсводового пространства, а, следовательно, и большей продолжительностью пребывания в нем выделяющихся из угля летучих продуктов коксования [13]. Перегрев подсводового пространства приводит к уменьшению содержания фенолов в смоле, толуола и ксилолов в сыром бензоле, снижению выхода смолы [37].

Обычно высота подсводового пространства составляет после загрузки 200–300 мм; в течение периода коксования в результате усадки она увеличивается до 400–450 мм. В среднем она составит 350–400 мм. При длине камеры 13 м и ширине 0,4 м поперечное сечение подсводового пространства и его объем составят соответственно 0,16 м² и 2,08 м³.

В коксовой камере на 1 см высоты, приходится приблизительно 50 кг шихты. Цифра эта очень приблизительная, так как в верхней части камеры насыпная плотность шихты меньше, чем в нижней. Можно считать, что недогруз 50 кг шихты увеличивает объем подсводового пространства приблизительно на 3–5 % [13]. Применение на планирах специальных приспособлений, уплотняющих шихту, позволяет несколько увеличить загрузку и насыпной вес верхних слоев шихты, что уменьшает вертикальную усадку и, следовательно, объем подсводового пространства [13, 11].

«При недогрузе камеры шихтой или при большой вертикальной усадке шихты увеличиваются объем подсводового пространства и, его температура и соответственно – пиролиз летучих продуктов коксования при прохождении ими подсводового пространства. Наоборот, при достаточно полной загрузке камеры и высокой температуре ее стен преимущественное значение получает пиролиз у

стен камеры. В этом случае специальные меры по охлаждению подсводового пространства не имеют большого значения» [13, 14].

Существенное влияние на состав смолы и сырого бензола оказывает насыпная плотность шихты. Если она мала (например, при тонком помоле шихты), усадка коксового пирога больше, вследствие чего увеличивается как объем подсводового пространства, так и зазор между стенкой камеры и коксовым пирогом. Оба эти фактора «увеличивают продолжительность воздействия высоких температур на выделяющиеся летучие продукты коксования и, следовательно, на углубление степени пиролиза» [13, 14]. Так, например, при периоде коксования 14 ч 30 мин и содержании класса 0–3 мм в шихте 92 % содержание толуола в сыром бензоле составило 14,5 % и нафталина в смоле – 10,8 %. При уменьшении содержания класса 0–3 мм в шихте до 88 % содержание толуола в сыром бензоле выросло до 16 %, а нафталина в смоле снизилось до 9,5 % [13].

На выход и качество химических продуктов, поступающих из коксовых печей, влияет время пребывания их в подсводовом пространстве и влажность коксуемой шихты, поскольку пары воды способствуют охлаждению стен камеры и подсводового пространства и тем самым уменьшают пиролиз смолы [36].

Количество и состав летучих продуктов коксования существенно изменяется во времени. На Рисунке 7 [13, 36, 38] представлена динамика изменения выходов отдельных химических продуктов коксования, из которой видно, насколько непостоянен состав смолы, сырого бензола и газа в течение всего периода коксования. Постоянство состава этих продуктов достигается тем, что большое количество коксовых камер соединяется в одну батарею и состав химических продуктов усредняется в газосборнике, куда выводится прямой газ из всех этих камер [13].

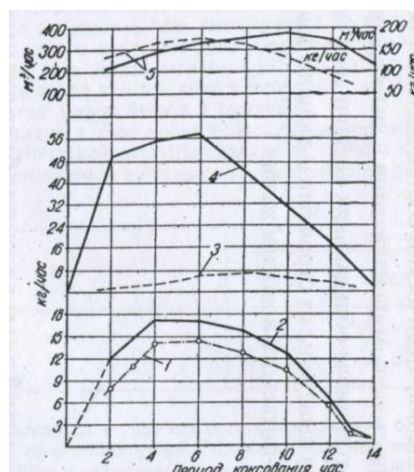


Рисунок 7 – Динамика выходов летучих продуктов коксования:

1 – чистый бензол; 2 – сырой бензол; 3 – нафталин; 4 – смола; 5 – газ

Основное значение для образования химических продуктов коксования имеют процессы, протекающие в угольной загрузке и зависящие от характера распределения температуры в загрузке [38].

На Рисунке 8, а [11] представлены изменения температур в зависимости от времени коксования в середине угольной загрузки в печной камере. На Рисунке 8, б [11] даны изменения давления в подсводовом пространстве. На Рисунке 8, в [11] изображено протекание процессов выделения газа в целом и только сухого газа. Разность площадей, охватываемых обеими кривыми газовыделения, дает количество образовавшихся водяных паров. На диаграмме показано, кроме того, количество полученного в единицу времени сырого бензола.

Заметный максимум газовыделения и образования сырого бензола наступает после смыкания пластических зон в середине печной камеры.

Согласно данным Гребнера и ванн-Аллена [11], количество газа в начале газовыделения быстро возрастает, так как загрузке передается тепло, накопленное стенками печной камеры в течение последних часов коксования предыдущей загрузки шихты. После израсходования накопленного тепла и начала процесса теплопередачи от отопительных каналов к загруженной шихте количество выделяемого газа понемногу уменьшается, временами слегка поднимаясь, и по истечении примерно двух третей периода коксования проходит через отчетливо выраженный максимум. С этого момента и до конца периода коксования кривая газовыделения

в зависимости от температуры стен камеры круто падает вниз. В соответствии с различным по объему газовыделением в разные отрезки времени процесса коксования меняется состав газа. По мере протекания процесса коксования содержание метана в газе падает, в то время как содержание водорода увеличивается.

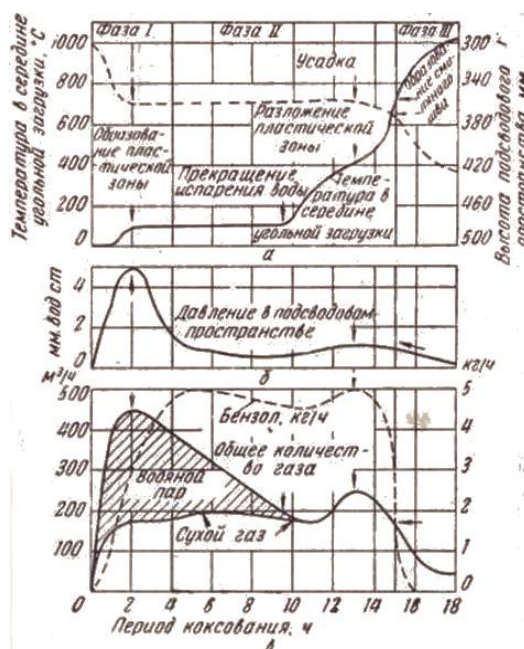


Рисунок 8 – Температурные изменения в середине угольной загрузки печной камеры в зависимости от часа коксования (а); изменение давления в подсводовом пространстве (б); процесс выделения газа – общего и безводного (в)

«С увеличением скорости нагревания углей, как правило, снижается выход твердого остатка, увеличивается выход смолы и несколько снижается выход газов. Это объясняется, в частности, тем, что при медленном нагревании масса угля находится в течение более продолжительного времени на низкотемпературных стадиях процесса. В этом случае реакции термического распада протекают более селективно, с расщеплением в первую очередь менее прочных связей и образование в результате параллельно и последовательно проходящих реакций термосинтеза структур, обладающих большей термической устойчивостью. На высокотемпературной стадии процесса такие структуры разлагаются меньше, чем быстро нагретый уголь, и выход твердого остатка при медленном подводе тепла должен быть выше» [39].

«При чисто “энергетическом” подходе такой эффект объясняется тем, что при одновременном подведении большого количества энергии в процессе термического распада макромолекул должно образовываться больше малых по массе «осколков» и, следовательно, выход низкомолекулярных продуктов будет выше» [39].

«Однако влияние скорости нагрева является неоднозначным, так как на выход продуктов оказывают воздействие процессы термосинтеза, протекающие весьма интенсивно. Например, с увеличением скорости подвода тепла с 3 до 10 °C/мин выход первичных смол из кузнецкого угля технологической группы 1Ж26 снизился с 12,4 до 10,8 %, при этом содержание в ней фенолов уменьшилось на 1,8 %, углеводов – на 3,1 %. Изменение в этих же пределах скорости нагревания угля группы К2 практически не влияло на выход первичной смолы (3,1 %) и содержание в ней углеводов; лишь в смоле с 5,4 до 8,6 % возросло количество фенолов» [39].

«На разных стадиях термической деструкции изменение скорости нагревания оказывает различное действие. Изменение темпа подвода тепла на одной из стадий процесса влияет на его дальнейшее протекание при последующем нагревании. С увеличением степени метаморфизма обнаруживается общая тенденция к снижению влияния режима нагревания на количество образующихся продуктов. Это связано с большей термической устойчивостью макромолекул органической массы твердых горючих ископаемых» [39].

В современной практике обычного коксования в камерах применяют, как правило, низкие скорости нагревания [40].

О влиянии температуры и времени пребывания газа в подсводовом пространстве коксовой камеры на выход химических продуктов коксования сообщено Трефни [11]. Приняв в упрощенном виде условия режима, преобладающие в подсводовом пространстве на основе сети изотерм (Рисунок 9) [11], даются пояснения действия различных способов, влияющих на выход химических продуктов коксования.

Согласно сети изотерм, применение оправдавших себя способов при некоторых определенных условиях может оказаться нецелесообразным. Так как от-

дельные химические продукты коксования могут вести себя весьма различно, рассматривается гипотетический химический продукт коксования, называемый «нормальным». Дать здесь какие-либо количественные соотношения не представляется возможным. Наиболее благоприятный выход достигается только при оптимальной температуре и оптимальном времени пребывания. Каждое превышение или снижение этих оптимальных условий означает ухудшение выхода. Кроме температуры газа, для наиболее благоприятного выхода большое значение имеет также и время воздействия. Высокая температура при коротком времени пребывания может привести к такому же выходу, как и более низкая температура при более длительном пребывании, но не к самому благоприятному выходу [11].

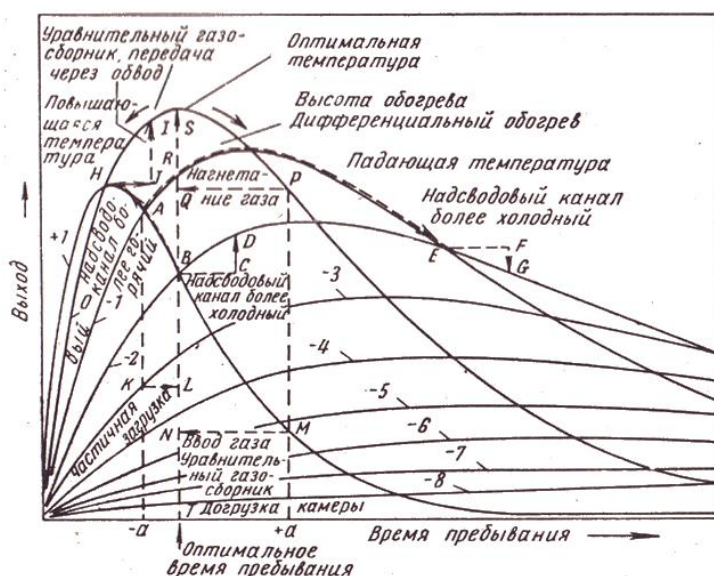


Рисунок 9 – Сеть изотерм, показывающих влияние различных мероприятий на выход химических продуктов коксования

Выход химических продуктов зависит также и от давления в коксовой камере. При недостаточном отсасывании газа в камере развивается повышенное давление, вследствие чего газообразные продукты просасываются в отопительную систему и сгорают.

При разрежении в коксовой камере или давлении меньшем, чем в отопительном простенке, что может явиться результатом слишком интенсивного отсасывания газов, происходит просос газов из отопительной системы и воздуха через

неплотности в загрузочных люках и дверях [13, 14]. Это приводит к сгоранию части химических продуктов внутри камеры, повышению температуры в камере и разбавлению коксового газа продуктами его сгорания. При этом увеличивается содержание в коксовом газе окиси азота NO , которая в большом количестве содержится в продуктах сгорания коксового газа.

Следовательно, и при повышенном давлении и при разрежении часть химических продуктов теряется и качество их ухудшается.

Давление внутри камеры и соотношение между ним и давлением в отопительной системе определяются так называемым гидравлическим режимом. На наших заводах установлен гидравлический режим, при котором в камере в конце периода коксования достигается незначительное избыточное давление, а стенки камеры постепенно заграфичиваются, что предохраняет их от неплотности в швах. При этом избыточное давление в газосборнике, соединяющем стояки коксовых камер, составляет обычно 8–17 мм. вод. ст. [13].

Согласно ПТЭ-68 [41], для обеспечения правильного гидравлического режима давление газов в камерах коксования на протяжении всего периода коксования должно быть положительным и к концу периода коксования за 15 мин до выдачи кокса на уровне пода печей составлять не менее 4,9 Па и не более 29,4 Па. Соблюдение этого требования ПТЭ-68 обеспечивается благодаря поддержанию в газосборниках постоянного давления, устанавливаемого на каждом предприятии технологическим регламентом.

В процессе коксования газовыделение происходит неравномерно. В первые часы, когда объем газов увеличен за счет водяных паров, давление на поду камер достигает 980 Па и более. К концу периода коксования газовыделение резко уменьшается, увеличивается температура газов, меняется его состав и уменьшается плотность.

Как видно из Рисунка 10, газовыделение резко уменьшается только к концу процесса коксования. Следовательно, устанавливаемое в газосборнике постоянное давление совершенно излишне на протяжении почти всего периода коксования и только вызывает потери сырого газа в отопительную систему через неплотности

кладки и в атмосферу через двери и загрузочные люки. Поэтому не раз предлагались различные способы ступенчатого отключения печей от газосборника, например, с помощью двух газосборников, когда в одном из них устанавливается давление 4,9 Па и в него включаются все свежезагруженные печи, а в другом поддерживается давление 98–117,6 Па и в него переключаются печи по истечении примерно трех четвертей периода коксования. При испытании такого режима отсоса газа на одном из заводов выход газа увеличился на 5–6 % при одновременном повышении выхода бензола, толуола и фенолов. Кроме того, снижение давления уменьшает период коксования. Следовательно, дифференцированное регулирование давления в газосборнике без нарушения гидравлического режима коксовых печей, целесообразно. Указанное в ПТЭ-68 положительное давление 4,9 Па на поду камеры (за 15 мин до выдачи кокса) может обеспечиваться за счет естественного подпора горячих газов, выделяющихся из коксуемой массы.



Рисунок 10 – Изменение в процессе коксования температуры газов (1) в подсводовом пространстве коксовых печей и их выхода (2)

Величина давления в газосборнике зависит от расстояния до него от пода камер коксовых печей. С увеличением высоты камер будет меняться и давление в газосборнике. Практически на всех заводах давление в газосборнике устанавливается с большим запасом и составляет 127,4–196 Па (в зависимости от высоты печей) [42].

Общая схема различных мероприятий, влияющих на увеличение выхода химических продуктов коксования, показана на Рисунке 11 [11].

В то время, как часть коксового газа при внутреннем отсосе отводится, чтобы она не подвергалась термическому воздействию подсводового пространства, при нормальном отсосе коксовый газ может быть подвергнут дополнительной

термической обработке – выше, внутри или ниже подсводового пространства. При этом у газа могут меняться температура, время пребывания или концентрация тяжелых углеводородов. Устройство над подсводовым пространством надсводового канала при верхнем отсосе газа будет оказывать влияние преимущественно на время его пребывания. Дополнительный обогрев или охлаждение надсводового канала меняют, кроме того, еще и температуру газа. В подсводовом пространстве температура газа может регулироваться без существенного изменения времени его пребывания за счет уровня обогрева. Изменения полноты загрузки печной камеры шихтой влияют на время пребывания газа и его температуру. Путем дополнительного ввода газа меняется, кроме того, концентрация в нем тяжелых углеводородов (ТУВ). Нагнетание газа через загрузку угольной шихты ниже подсводового пространства меняет только время пребывания газа и концентрацию тяжелых углеводородов.

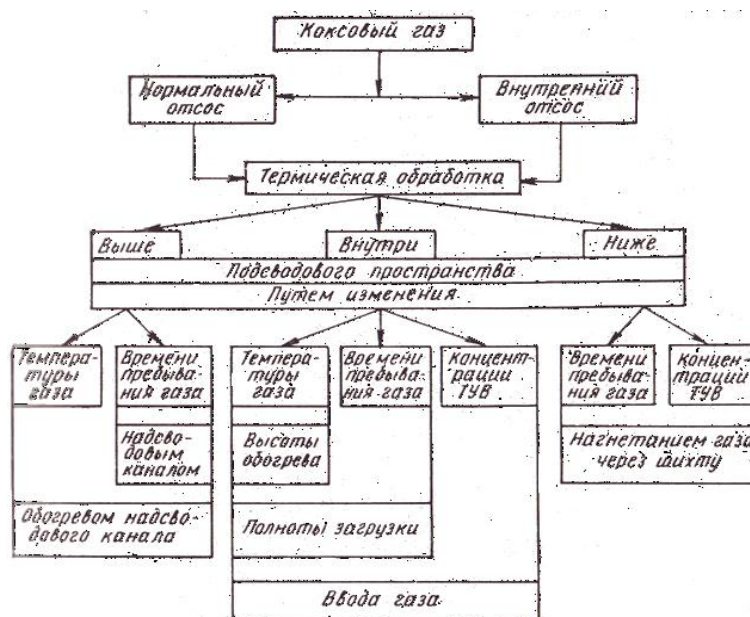


Рисунок 11 – «Мероприятия, влияющие на выход химических продуктов коксования» [11]

«На выход химических продуктов влияют конструктивные особенности коксовых печей (полезный объем камеры, ее ширина и высота), конструкция отопительного простенка, определяющего равномерность обогрева камер по высо-

те» [13]. Изменение геометрических размеров камер коксования и в первую очередь их высоты неразрывно связано с изменением условий пиролиза выделяющихся парогазовых продуктов и, в конечном счете, с составом и выходом образующихся химических продуктов коксования [43].

Создание высокопроизводительных коксовых батарей привело к значительным изменениям объема камер коксования. Как известно, основными факторами, определяющими степень пиролиза химических продуктов коксования, служат температура и продолжительность вторичного пиролиза, происходящего в разных частях камеры коксования. В высоких камерах ($V_k = 41,6 \text{ м}^3$, $H = 6,7 \text{ м}$) газы, выделяющиеся из нижних слоев загрузки, подвергаются воздействию высоких температур стенки и кокса, а также находятся в контакте с коксовой поверхностью более продолжительное время, чем аналогичные газы в печах с объемом камер $21,6 \text{ м}^3$ ($H=4 \text{ м}$). Кроме того, газы с верхних горизонтов загрузки, выделяющиеся в направлении стенок камер, будут значительно быстрее эвакуироваться из пристенного зазора в подсводовое пространство, так как через примерно одинаковое сечение должно пройти в единицу времени на 20–25 % газов больше, чем в низких печах. В большегрузных печах вследствие значительно большей вертикальной усадки шихты в первые часы коксования также выше величина теплоизлучения. Более раннее образование поверхностного слоя кокса в большегрузных печах приводит к увеличению продолжительности контакта с образовавшейся коксовой поверхностью выделяющихся из приосевой плоскости парогазовых продуктов. Это способствует интенсификации реакций образования термически устойчивых ароматических углеводородов средней степени конденсации, в том числе и нафталина и фенолов [43]. Выход каменноугольной смолы с увеличением высоты коксовой камеры снижается, выход газа – увеличивается [13]. Установлено [43], что с увеличением объема камер коксования степень пиролиза образующихся химических продуктов снижается, что видно по увеличению в каменноугольных смолах ароматических углеводородов средней степени конденсации. Это подтверждает также и состав сырого бензола, в котором значительно больше примесей неароматического характера, выше концентрация толуола и ксилола [43].

Интересно отметить, что влияние изменения температур обогрева различно в зависимости от того, используется ли доменный или коксовый газ для обогрева печей коксования [43].

Влияние размеров печных камер на степень пиролиза летучих продуктов коксования до пирографита было определено на Карагандинском металлургическом комбинате. Исследования проводили на коксовых батареях различного объема (41,6; 30,3 и 21,6 м³) при загрузке в них одинаковой шихты и одном и том же периоде коксования (вследствие одинаковой ширины камер). За счет пиролиза летучих продуктов коксования выход валового кокса в печах с объемом камер 41,6 м³ увеличился на 0,05 % по сравнению с печами 30,3 м³ и на 0,15 % по сравнению с печами 21,6 м³. Незначительное изменение припека в большегрузных печах указывает на одинаковый уровень пиролиза газообразных продуктов коксования, несмотря на увеличение скорости эвакуации их. При эвакуации паро- и газообразных продуктов коксования существенно возрастает давление в камерах, что влияет на гидравлический режим коксовых печей [42].

Увеличение ширины камер коксования при одинаковом температурном режиме может давать положительный эффект на выход летучих химических продуктов коксования заключающийся в том, что при одинаковых условиях температура в шихте повышается медленно, то есть скорость коксования становится меньше, и величина внутреннего давления повышается пропорционально квадрату скорости коксования, то есть при более широкой камере внутренне давление меньше [2].

По данным В. Гребнера [36] с повышением температур подсводового пространства и стен камер коксования снижается содержание в газе тяжелых углеводородов и метана и увеличивается количество водорода. Выход газа с тонны коксуемой шихты возрастает, а высшая теплота сгорания снижается.

С повышением температуры простенков печных камер, а отсюда более коротким периодом коксования, выход газа повышается, а теплота сгорания газа понижается [11]. Также на увеличение выхода коксового газа и увеличение со-

держания в нем оксида углерода и метана может оказывать влияние газификация отложений углерода на стенах коксовых камер [44].

Изменение кривых содержания в газе водорода, метана и оксида углерода в зависимости от конечной температуры поверхности стен печной камеры можно видеть на Рисунке 12 [11].

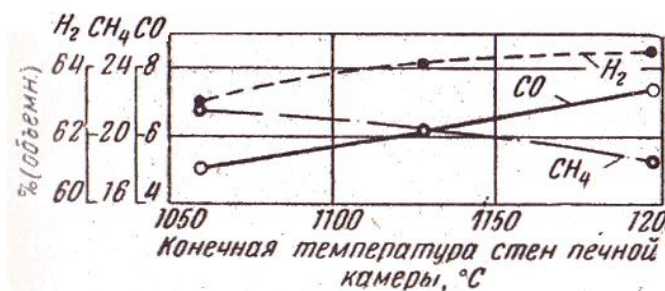


Рисунок 12 – Содержание в газе водорода, метана и оксида углерода в зависимости от конечной температуры стен камеры

Кривые изменения выхода газа, теплоты сгорания и так называемого калорийного числа газа (который представляет собой произведение выхода газа на теплоту его сгорания, отнесенное на 1 кгзагруженного угля) в зависимости от конечной температуры стен камеры представлены на Рисунке 13 [11].

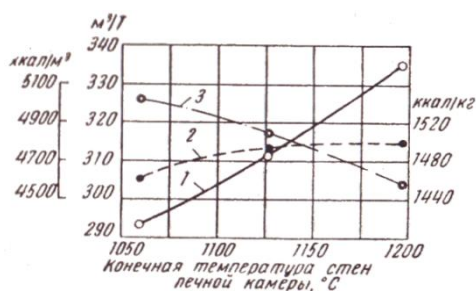


Рисунок 13 – Выход газа, высшая теплота сгорания и калорийное число его в зависимости от конечной температуры стен камеры: 1 – выход газа; 2 – тепловой показатель (калорийное число) по газу; 3– высшая теплота сгорания

Основное влияние на выход кокса оказывает изменение выхода летучих веществ шихты. Так, в принятых обычных условиях высокотемпературного коксо-

вания увеличение V^d в шихте на 1 % приводит к снижению выхода кокса примерно на 0,5–0,6 %. Соответственно, для увеличения выхода кокса необходимо изыскать возможность ввода в угольную шихту значительного количества отошающих углеродистых добавок с низким выходом летучих веществ (типа углей марок Т или СС либо полукокса) [45]. Как видно из сообщений ряда авторов [46], основными технологическими факторами интенсификации производства кокса являются применение термически обработанных (сухих и нагретых) шихт, увеличение скорости коксования путем повышения температур в обогревательных простенках, а также использование установок сухого тушения кокса. Снижение влажности шихты и повышение скорости коксования приводит к уменьшению валового выхода кокса. Суммарное влияние обоих факторов составляет для шихты более 1 % и для газового угля ~ 2 % уменьшения валового выхода кокса в условиях интенсификации коксования сухих углей и шихт.

При одинаковых условиях и снижении влажности шихты с 10,2 % до 2,4 % выход кокса снизился с 79,3 % до 76,7 %, то есть на 2,6 %. Это связано с тем, что влага, по-видимому, оказывает защитное действие на уголь, замедляя протекание реакций деструкции органического вещества угля, особенно в стадии предпластического состояния. Это способствует углублению одновременно протекающих процессов структурирования с образованием твердого остатка – полукокса и кокса. Наряду с этим в условиях постоянной подачи тепла в коксуемый уголь, как это имеет место в современных коксовых батареях, влажность шихты приводит к снижению истинной скорости коксования угля, что также способствует протеканию реакций структурирования с образованием кокса [45].

Увеличение скорости повышения температуры угля при постоянстве остальных условий приводит к уменьшению выхода кокса. Это также связано с различием скоростей реакций разложения и синтеза при термической деструкции угля. По этим же данным, изотермическая выдержка угля при конечной температуре, способствующая углублению реакций деструкции органических веществ твердых остатков коксования, также приводит к уменьшению выхода кокса [47].

Другим направлением воздействия на величину выхода кокса может быть использование реакций вторичного пиролиза относительно высокомолекулярных летучих продуктов коксования как в процессе их образования внутри угольной загрузки, так и путем внесения в печную камеру вместе с шихтой.

Другой возможный путь воздействия на процессы образования кокса – создание давления в угольной загрузке, которое должно способствовать развитию реакции конденсации и тормозить реакции деструкции. Одновременно, благодаря задержке летучих продуктов внутри угольной загрузки должны протекать реакции вторичного пиролиза их на полукоксе-коксе с образованием добавочных количеств коксового остатка [48]. Хотя в коксовых батареях современных конструкций трудно создать значительные давления в печных камерах, авторы предполагают [45], что сильное уплотнение засыпи угля или коксование сбrikетированного угля может способствовать возникновению газового давления внутри угольного массива, которое должно действовать аналогично повышению давления в печной камере.

Большой выход смолы, как и сырого бензола, соответствует определенной температуре в печной камере, причем оптимальная величина температуры для выхода смолы лежит ниже, чем температура наиболее высокого выхода бензола. Между температурами печной камеры и подсводового пространства, выходом и качеством смолы и бензола существует отчетливо выраженная зависимость. При повышении температуры обогрева коксовых печей выход смолы снижается, в то время как выход бензола стремится к максимуму. Количество и свойства содержащихся в сыром газе смолы и бензольных углеводородов, помимо рода угля, в сильнейшей степени зависят от обусловленных температурой взаимно влияющих друг на друга процессов в печной камере. Это видно на Рисунке 14 [11] по данным Трефни [49], показывающих в графическом изображении процесс образования ароматических продуктов согласно методу Эглофа и Туомея.

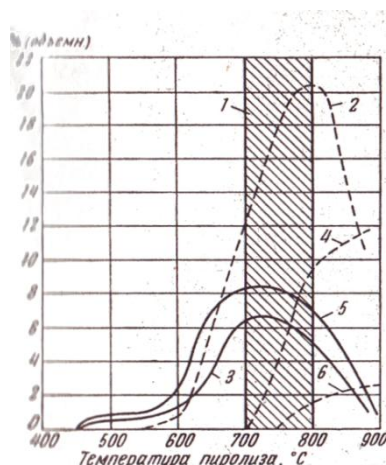


Рисунок 14 – Графическое изображение образования ароматических веществ:

1 – наиболее благоприятная зона для образования углеводородов; 2 – бензол;
3 – ксилол; 4 – нафталин; 5 – толуол; 6 – антрацен

Таки образом, выход и состав каменноугольной смолы определяются степенью пиролиза продуктов коксования в камерах коксовых печей, зависящей в основном от длительности воздействия на них высокой температуры и ее предельной величины [42]. Особенно отрицательно сказывается на выходе смолы и качестве смолы и сырого бензола перестой коксового пирога, вызывающий несоответствие между периодом коксования и температурой коксового пирога [13].

Согласно проведенным исследованиям [50], другими наиболее существенными факторами, положительно влияющими на количество образующейся смолы, оказались выход летучих веществ из шихты и величина разовой загрузки в печную камеру. Это вполне естественно, так как с увеличением загрузки уменьшается величина подсводового пространства и, следовательно, снижается температура и время пребывания парогазовых продуктов в зоне вторичного пиролиза. Влияние этих же параметров на выход коксового газа противоположно влиянию на выход смолы.

Связь между выходом сырого бензола и температурой коксования сложна. Бензольные углеводороды являются вторичным продуктом – продуктом разложения первичной смолы. При повышении температуры коксования параллельно проходят два процесса: разложение компонентов сырого бензола и их образование за счет разложения смолы. В результате при повышении температуры коксо-

вания до известных пределов возможно увеличение выхода сырого бензола: при температуре в отопительных простенках 1100–1150 °С он составляет 0,8–0,9 % от шихты, при 1300–1380 °С достигает 1,0–1,1 % [13]. Однако состав сырого бензола при этом неизбежно меняется: уменьшается содержание толуола, ксилолов, растворителей и непредельных соединений и растет содержание чистого бензола [13, 51].

Также существенными факторами, положительно влияющими на количество образующегося сырого бензола, являются степень измельчения шихты, давление в газосборнике, а отрицательно влияющими – разовая загрузка и период коксования.

Выход алкилбензолов (толуола, ксилолов и мезитилена) значительно увеличивается при повышении разовой загрузки, что объясняется снижением температуры в подсводовом пространстве. Противоположный эффект наблюдается при росте степени измельчения шихты. Чем мельче размер частиц шихты, тем, вероятно, в большей степени поток химических продуктов направлен на горячую сторону, где происходит значительный пиролиз термически менее стабильных компонентов смолы и сырого бензола. Повышение давления в газосборнике увеличивает время пребывания сырого бензола в подсводовом пространстве, что усиливает пиролиз, приводящий к большему содержанию в нем бензола [9].

Несмотря на то, что на выход и состав сырого бензола так же, как и каменноугольной смолы, влияет очень много факторов, возможности изменения их состава и выхода в желаемом направлении очень ограничены. Это происходит вследствие того, что всегда стремятся поддерживать режим коксовых печей, обеспечивающий высокое качество металлургического кокса. Изменять условия этого режима с целью изменения в желаемом направлении выхода и состав каменноугольной смолы и сырого бензола нельзя [42, 51].

Состав шихты также подбирается для обеспечения высокого качества металлургического кокса и увеличения его выхода в определенных пределах, а также обеспечения правильного проведения технологического режима процесса коксования. Поэтому здесь большое значение имеет именно планирование выхода кокса и химических продуктов для соблюдения технологического режима работы коксохимического завода и, в том числе, экономических параметров производства.

Однако при строгом соблюдении технологического режима можно добиться увеличения выхода химических продуктов. Например, соблюдение полноты загрузки углей в коксовую камеру уменьшает высоту подсводового пространства, уменьшает вертикальную усадку, что способствует увеличению выхода химических продуктов. Соблюдение крупности помола, укрупнение помола шихты (увеличение содержания класса 0–3 мм) увеличивает насыпную плотность шихты, вследствие чего уменьшается усадка коксового пирога и объем подсводового пространства, что также увеличивает выход химических продуктов.

Также большую роль играет строго соблюдение гидравлического режима коксовых батарей. При разрежении в коксовой камере или давлении меньшем, чем в отопительном простенке, происходит просос газов из отопительной системы и воздуха через неплотности в кладке коксовых печей, а также загрузочных люках и дверях. Это приводит к сгоранию части химических продуктов внутри камеры, повышению температуры в камере и разбавлению коксового газа продуктами его сгорания. При подсосе воздуха также происходит горение кокса в печах, что ухудшает его качество, снижает выход, а также приводит к ухудшению качества коксового газа за счет разбавления его продуктами горения. При давлении в коксовой камере большем, чем в отопительном простенке, прямой коксовый газ попадает в отопительную систему, что приводит к потере газа. Так как количество газа, попавшего в отопительную систему при прососах невозможно регулировать, то нарушается температурный режим, происходит локальный перегрев кладки печей, а, следовательно, появляются участки повышенного пиролиза парогазовых продуктов, что снижает выход химических продуктов.

На выход и качество химических продуктов, поступающих из коксовых печей, влияет влажность коксуемой шихты, поскольку пары воды способствуют охлаждению стен камеры и подсводового пространства и тем самым уменьшают пиролиз смолы. При этом меняется состав смолы, снижается выход бензола [36]. Кроме этого в увеличение влажности шихты увеличивает содержание паров воды в прямом коксовом газе, что увеличивает количество надсмольной воды.

Дифференцированное регулирование давления в газосборнике при применении его в системе с двумя газосборниками без нарушения гидравлического режима коксовых печей позволяет увеличить на 5–6 % выход газа при одновременном повышении выхода бензола. Кроме того, снижение давления уменьшает период коксования и не отражается на качестве кокса [42].

Исходя из того, что в процессе коксования и природа углей, и технологические условия процесса коксования оказывают влияние на выход химических продуктов, причем влияние технологических условий разное не только для каждого завода, но и для каждой коксовой батареи и даже печи, а также существуют потери химических продуктов, для изучения зависимости выхода химических продуктов от природы углей необходимо создание условий, близких к условиям промышленного коксования, но в то же время постоянных для всех определений, а также исключающих потери химических продуктов. Данные условия, на наш взгляд, можно создать в условиях лабораторного эксперимента с применением общепризнанного метода определения выхода химических продуктов.

1.1.4 Современное состояние вопроса прогнозирования выхода химических продуктов коксования

Прогнозирование как вид научного исследования имеет важное значение для управления современной отраслью промышленности. Это относится и к коксохимическому производству, когда необходимо знать не только коксующие свойства перерабатываемых углей, но и выход химических продуктов коксования, что позволит научно обоснованно планировать выработку продуктов коксования [32].

В настоящее время планирование объемов производства основных видов продукции на коксохимических предприятиях производится на основании принципа прогноза выхода основных продуктов коксования по результатам полученных ранее данных [52]. Но также существуют различные уравнения для прогноза выхода основных продуктов коксования по показателям качества углей [53].

Для определения выхода химических продуктов коксования на примере кокса, каменноугольной смолы и сырого бензола предложен ряд формул, в которых показатели технического анализа углей или шихты являются основными параметром прогнозирования. Наиболее распространенные из них – это выход летучих веществ на различные состояния топлива (сухое состояние и сухое беззольное состояние) и зольность на сухую массу. В данные уравнения иногда также дополнительно вводят параметры, учитывающие выход летучих веществ из кокса или конкретизируют температурный режим его получения, и/или другие параметры [52].

Показатель выхода летучих веществ – одна из важнейших характеристик, определяющих наряду с различными индексами спекаемости как саму пригодность углей для коксования [54–56], так и значения выхода основного продукта этого процесса – валового кокса и всей гаммы побочных химических продуктов [57, 58]. Значения выхода летучих веществ используются как параметр в единой классификации по ГОСТ 25543-2013 «Угли бурые, каменные и антрациты. Классификация по генетическим и технологическим параметрам» [26].

В 1960-х годах прогноз выхода химических продуктов коксования осуществлялся по специальным таблицам, составленным лабораторным путем для каждого бассейна, месторождения и пласта [59].

Одним из ранних методов прогнозирования выхода химических продуктов коксования является метод, предложенный Лейбовичем Р.Е., Обуховским Я.М. и Сатановским С.Я. [60], основывающийся на зависимости выхода химических продуктов коксования от выхода летучих веществ исходных углей (Таблица 8).

Исходя из приведенных в таблице 8 данных, выведены уравнения зависимости выхода химических продуктов коксования от выхода летучих веществ:

$$B_K^d = -0,8794V^c + 99,986; (1)$$

$$B_{CM}^d = -0,00084(V^c)^2 + 0,257V^c - 2,718; (2)$$

$$B_G^d = 0,00099(V^c)^2 + 0,001294V^c + 0,3565. (3)$$

В данных формулах B_K^d – расчетный показатель выхода кокса на сухую массу, масс. %; B_{CM}^d – расчетный показатель выхода смолы на сухую массу шихты, масс. %;

B_6^d – расчетный показатель выхода бензольных углеводородов на сухую массу шихты, V^c – выход летучих веществ на сухую массу шихты, масс. %.

Таблица 8 – Производственные выходы продуктов высокотемпературного коксования каменных углей в зависимости от выхода летучих веществ исходных углей

Продукты коксования	Выход летучих веществ (V^c), масс. %											
	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Кокс (безводный), кг/т	833	824	815	806	798	789	780	771	762	754	745	736
Вода, включая пирогенетическую, кг/т	21,6	22,7	24,0	25,5	27,3	29,3	31,5	34,1	36,7	39,7	42,9	46,3
Смола (безводная), кг/т	18,6	20,9	23,1	25,3	27,5	29,7	31,8	34,0	36,1	38,2	40,3	42,4
Аммиак, кг/т	2,84	2,86	2,89	2,92	2,94	2,97	3,01	3,01	3,09	3,12	3,17	3,22
Сульфат аммония, кг/т	11,0	11,1	11,2	11,3	11,4	11,5	11,6	11,8	11,9	12,1	12,3	12,5
Бензольные углеводороды (в сумме), кг/т	7,4	7,8	8,2	8,7	9,1	9,6	10,1	10,6	11,2	11,7	12,3	12,9
Газ, приведенный к 16,8 МДж (4000 ккал)	359	367	374	383	391	399	408	417	426	433	442	451
Калорийное число газа*, МДж/кг (ккал/кг) угля	6,02 (1436)	6,15 (1466)	6,27 (1496)	6,43 (1531)	6,57 (1565)	6,70 (1595)	6,84 (1630)	7,00 (1668)	7,15 (1703)	7,27 (1733)	7,41 (1767)	7,57 (1806)
Удельная теплота сгорания газа на 1 % летучих веществ, кДж (ккал)	315 (75)	307 (73)	298 (71)	294 (70)	286 (68)	281 (67)	273 (65)	269 (64)	264 (63)	260 (62)	256 (61)	252 (60)

* Условный показатель, характеризующий теплоту сгорания газа, полученного из 1 кг угля.

Приведенные в литературных источниках уравнения определения выхода кокса по показателю выхода летучих веществ на различные состояния топлива можно разделить на две группы. Первая группа включает в себя формулы, не включающие расчет величины «припека». Одной из первых формул определения ожидаемого выхода кокса в промышленных условиях следует считать выражение, предложенное С.Г. Ароновым, М.В. Гофманом и И.А. Копелиовичем [61]:

$$B_K^d = 100 - V_y^d - V_k^d; (4)$$

где B_k^d – выход сухого кокса, масс. %; V_y^d и V_k^d – выходы летучих веществ соответственно из сухого угля и кокса, масс. %. Выражение $V_y^d - V_k^d$ в этой формуле трактуется как выход сырого коксового газа, равный относительной потере массы коксующей загрузки.

В.И. Сухоруков и Ю.В. Степанов [62] принимают, что отношение выхода сырого коксового газа к выходу летучих веществ по ГОСТР55660-2013 постоянно для различных шихт и предлагают на этой основе выражение для определения теоретического выхода кокса:

$$B_k = 100 - k_{\Pi} V_{\text{ш}}^d; \quad (5)$$

где k_{Π} – относительный выход парогазовой фазы при коксовании в производственных условиях, $V_{\text{ш}}^d$ – выход летучих веществ на сухую массу шихты, масс. %.

Исходя из данного выражения (5), для условий НТМК получено выражение для расчета теоретического выхода кокса [64]:

$$B_k = 100 - 0,857 V_{\text{ш}}^d; \quad (6)$$

Несколько позже это выражение (4) было видоизменено [61]:

$$B_k^d = \frac{100(100 - V_y^d)}{100 - V_k^d}. \quad (7)$$

Практическое использование приведенных формул обнаружило несоответствие производственного выхода кокса и лабораторного (тигельного), причем во всех случаях производственный выход кокса превышал лабораторный на некоторую величину, названную «припеком», которая доходит до 5 масс. % при коксовании в динасовых печах и до 7 масс. % - в шамотных [61].

В 1950-х годах для определения ожидаемого выхода кокса в промышленных условиях рекомендован и ряд других формул [62]:

$$B_k = 0,69T + 25,9; \quad (8)$$

$$B_k = T + [Z(100 - T)/100]; \quad (9)$$

где B_k – ожидаемый выход кокса, масс. %; $T = 100 - V_y^d$ – тигельный выход кокса, масс. %; $Z = 100(B_k - T)/(100 - T)$ – степень разложения.

Японские исследователи [12] рекомендуют для определения выхода кокса формулу:

$$B_K = 28,19 + 0,75T - 0,0067t_K; (10)$$

где t_K –конечная температура коксования, °С.

Исследователями [43, 61, 64–65] также предложен еще ряд формул для прогнозирования показателя выхода кокса:

$$B_K^p = 98,182 - 0,761V_{\text{ш}}^{daf} \text{ (США); (11)}$$

$$B_K^p = 96,1 - 0,75V_{\text{ш}}^{daf} \text{ (Австралия); (12)}$$

$$B_K^p = 96,74 - 0,755V_{\text{ш}}^{daf} \text{ (ФРГ); (14)}$$

$$B_K^p = 94,3 - 0,635V_{\text{ш}}^d \text{ (ВНИИчермет); (15)}$$

$$B_K^p = 95,82 - 0,560V_{\text{ш}}^d \text{ (ВНИИчермет); (16)}$$

$$B_K^p = 94,92 - 0,84V_{\text{ш}}^d + 7,7H_K^{daf} \text{ (Н. П. Аксенин); (17)}$$

$$B_K^p = 139 - 0,75V_{\text{ш}}^{daf} - 0,0067 \text{ (Япония); (18)}$$

$$B_K^p = 42 \frac{100 - V_{\text{ш}}^{daf}}{100 - V_K^{daf}} + 47,1 \text{ (Б.И. Кустов, Я.Е. Гинсбург); (19)}$$

$$B_K^p = 94,52 - 0,7V_{\text{ш}}^{daf} - \text{для периода коксования 30 ч и более (УХИН); (20)}$$

$$B_K^p = 94,86 - 0,7V_{\text{ш}}^{daf} \text{ для периода коксования 15 ч (УХИН); (21)}$$

Уравнение вида (11–21) разработаны для условий практически каждого коксохимического завода, а иногда для каждой батареи [32, 63].

В данных формулах B_K^p – расчетный показатель выхода кокса, масс. %; $V_{\text{ш}}^d$ – выход летучих веществ на сухую массу шихты, масс. %; V_K^d – выход летучих веществ на сухую массу кокса, масс. %; $V_{\text{ш}}^{daf}$ – выход летучих веществ на сухую беззольную массу, масс. %; H_K^{daf} – выход водорода из кокса на горючую массу (масс. %), в большинстве случаев принимается равным 0,4.

Умбах [66] для определения выхода кокса рекомендует следующую формулу:

$$B_K^p = 0,88(100 - V_{\text{ш}}^d) + 12; (22)$$

Для предприятий Украины при неопределенной сырьевой базе коксования (ограниченных данных о марочном и бассейновом составе шихты) авторы [32] рекомендуют выход валового кокса из шихты определять по формуле:

$$B_K^d = 94,84 - 0,635V_{\text{ш}}^d. (23)$$

Для батарей с печными камерами высотой 7,0 м [32]:

$$B_{\kappa}^d = 48,6 + 0,418 \frac{100 - V_{\text{ш}}^d}{100 - V_{\kappa}^d} \cdot 100. (24)$$

Для батарей с печными камерами высотой до 6,0 м включительно [32]:

$$B_{\kappa}^d = 47,1 + 0,421 \frac{100 - V_{\text{ш}}^d}{100 - V_{\kappa}^d} \cdot 100. (25)$$

В работах авторами [66–68] приведена квадратичная зависимость выхода кокса от выхода летучих веществ из шихты, полученная методом наименьших квадратов:

$$B_{\kappa}^d = \frac{100 - V_{\text{ш}}^d}{100 - V_{\kappa}^d} \cdot 100 - 0,008(V_{\text{ш}}^d)^2 + 0,52V_{\text{ш}}^d - 2,23. (26)$$

Авторы [68] данное уравнение также приводят как рекомендуемое для прогноза выхода кокса в лабораторном методе измерения данного показателя.

Для условий Мариупольского коксохимического завода авторы [64] приводят следующее уравнение:

$$B_{\kappa}^d = \frac{100 - V_{\text{ш}}^d}{100 - V_{\kappa}^d} \cdot 100 - 0,004(V_{\text{ш}}^d)^2 + 0,27V_{\text{ш}}^d - 1,14. (27)$$

Авторы [68] также рекомендуют данное уравнение (27) для расчета выхода сухого валового кокса для промышленного коксования.

В данных формулах B_{κ}^d – расчетный показатель выхода валового кокса на сухую массу.

Поэтому можно заключить, что для однородных (витринитовых) углей Донбасса наиболее распространенными являются регрессионные уравнения первой или второй степени. Чаще других используют полиномиальные уравнения второй степени, общий вид которых можно представить формулой [53]:

$$B_i^d = a(V_{\text{ш}}^d)^2 + bV_{\text{ш}}^d + C; (28)$$

где B_i^d – выход кокса, смолы, бензола и других продуктов коксования от сухой массы шихты, масс. %; $V_{\text{ш}}^d$ – выход летучих веществ от сухой массы шихты, масс. %.

Кроме того, разработан ряд уравнений, в которых в качестве дополнительных параметров присутствуют конечная температура коксования, температура в контрольных отопительных каналах и др. [32].

По уточненной формуле УХИНа с учетом температуры обогрева и конечной температуры в центре коксового пирога [61, 69]:

$$B_{\kappa}^d = 94,48 - 0,02(t_{\kappa} - 0,8t_{об}) - 0,698V_{ш}^d; (29)$$

где t_{κ} – конечная температура коксования по оси коксового пирога, °С;
 $t_{об}$ – средняя температура на машинной и коксовой сторонах по контрольным отопительным каналам, °С.

По формуле японских исследователей [70]:

$$B_{\kappa}^d = 103,19 - 0,75V_{ш}^d - 0,0067t_{\kappa}. (30)$$

В УХИНе [57] для оценки выхода различных продуктов коксования получены регрессионные уравнения, учитывающие показатель выхода летучих веществ на сухую беззольную массу V^{daf} (масс. %) и толщину пластического слоя y (мм):

$$B_{\kappa} = 96,093 - 0,6823V^{daf} + 0,0263V^{daf}y. (31)$$

Вторая группа включает в себя формулы, включающие расчет величины «припека». Основная формула для расчета выхода кокса, включающая расчет величины припека [64]:

$$B_{\kappa}^p = \frac{100 - V_{ш}^d}{100 - V_{\kappa}^d} \cdot 100 + P_{\kappa}; (32)$$

где P_{κ} – величина припека кокса, вычисляемая по разности между выходом кокса в производственных условиях и выходом твердого остатка из шихты в лабораторных условиях при испытании методом тигельной пробы, масс. %.

Вопросу выхода кокса (и соответственно «приросту кокса») уделяется большое внимание. Так, из одних данных [71] следует, что прирост кокса в производственных условиях при коксовании углей с выходом летучих веществ до 20 % равен нулю, а при выходе летучих веществ 40 % он достигает 5 %; из других [72] – прирост кокса может изменяться от 0,5 до 2,5 %. По данным [73] прирост кокса из углей марки К составляет 2,7 %, из углей марок Г – 5,9 %, по данным [74] прирост кокса прямо пропорционален выходу летучих веществ из углей и составляет 0,8 % на каждый процент выхода летучих веществ сверх 10 %.

В промышленных условиях выход валового кокса из рабочей шихты определяют по следующей формуле [71]:

$$B_{\kappa}^d = \frac{100 - (V^p + W_t^r)}{100 - V_{\kappa}^d} \cdot 100 + P_{\kappa}; (33)$$

где V^p – выход летучих веществ рабочей шихты, масс. %; W_t^r – массовая доля общей влаги в рабочей шихте, масс. %.

Поскольку определение прироста кокса в производственных условиях практически невозможно, были сделаны попытки определить данный показатель расчетным путем.

Авторы [75] предложили следующее выражение:

$$\Pi_k = 47,1 - 0,58 B_p; \quad (34)$$

где B_p – тигельный выход кокса, %.

Как показало практическое применение формулы (34) для углей с выходом летучих веществ более 18 % прирост кокса получается завышенным, а для углей с выходом летучих веществ менее 18 % он принимает отрицательные значения, то есть с уменьшением выхода летучих веществ менее 18 % выход кокса становится ниже тигельного. Аналогичные результаты получены при определении прироста кокса по формуле, предложенной в [23]:

$$\Pi_k = 0,25 (V^{daf} - 12); \quad (35)$$

где V^{daf} – выход летучих веществ из углей на горючую массу, %.

Авторы [75, 76] предложили следующее выражение:

$$\Pi_k = K_{\pi} \cdot V_y^d; \quad (36)$$

где V_y^d – выход летучих веществ из угля на сухую массу, масс. %, K_{π} – коэффициент пиролиза (доля летучих веществ шихты, превратившихся в твердый остаток), определяемый по формуле:

$$K_{\pi} = 0,042 V_y^d - 0,97. \quad (37)$$

Расчет прироста кокса по формуле (36) для углей с выходом летучих веществ <23,1 % дает отрицательное значение, то есть выход кокса, определяемый по этой формуле, ниже тигельного.

Позднее исследователями был предложен еще ряд формул для определения «припека кокса»:

$$\Pi_k = 47,1 - 0,58 \frac{100 - V_{ш}^d}{100 - V_k^d} \cdot 100; \quad (\text{Б.И.Кустов, Я.Е. Гинсбург}[61]) \quad (38)$$

$$\Pi_k = 3 + 0,25 V_{ш}^{daf}; \quad (\text{С.М. Григорьев}[66]) \quad (39)$$

$$P_k = -2,24 + 0,16V_{ш}^d; \text{ (китайские исследователи[61]) } (40)$$

$$P_k = 0,042V_{ш}^d - 0,97; \text{ (А.Я. Обуховский[77]) } (41)$$

$$P_k = \frac{86 \cdot 95 V_{ш}^d}{100 - V_{ш}^d} - 20,86; \text{ (Ю.А. Филоненко[77]) } (42)$$

Данную формулу(42) рекомендуется применять в интервале изменения показателей $V_{ш}^d = 23,48 \div 29,60$ и $A_k^d = 0,84 \div 1,45$ % масс. [77].

Исходя из вышеописанного, следует отметить, что определение ожидаемого выхода кокса по формуле (32) неточно, поскольку входящий в нее параметр P_k не поддается точному определению расчетным путем.

Для прогнозирования выхода кокса может использоваться и такой показатель технического анализа, как зольность на сухую массу [78]:

$$B_k = 100/K_{оз}; (43)$$

где $A_{ш}^d$ и A_k^d – зольность соответственно угольной шихты и кокса, масс. %; $K_{оз}$ – это отношение содержания золы в коксе к содержанию ее в исходной шихте называют коэффициентом озольнения кокса в процессе коксования [78]:

$$K_{оз} = \frac{A_k^d}{A_{ш}^d}. (44)$$

Этот коэффициент в среднем составляет 1,33 и изменяется в пределах 1,29–1,38.

Исходя из этого, уравнение (37) принимает вид:

$$B_k = 100 \cdot \frac{A_{ш}^d}{A_k^d}. (45)$$

Как для определения выхода валового кокса, так и для определения выходов каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа выход летучих веществ на различные состояния топлива является основным параметром прогнозирования.

Выход смолы $B_{см}$ (в масс. % от рабочей шихты) может быть определен по следующей эмпирической формуле [72]:

$$B_{см} = [-18,36 + 1,53V^{daf} - 0,026(V^{daf})^2] \cdot \frac{100 - (A^d + W_t^r)}{100}; (46)$$

Выход сырого бензола $B_б$ (в масс. % от рабочей шихты) может быть определен по следующей эмпирической формуле [24]:

$$B_б = [-1,61 + 0,144V^{daf} - 0,0016(V^{daf})^2] \cdot \frac{100 - (A^d + W_t^r)}{100}; (47)$$

Выход обратного сухого газа B_{Γ}^d (в масс. % от рабочей шихты) с достаточной для практики точностью дает следующая эмпирическая формула[72]:

$$B_{\Gamma}^d = a\sqrt{V_{\text{ш}}^d} \left(\frac{100 - W_t^r}{100} \right); \quad (48)$$

где A^d - содержание золы в рабочей шихте, масс. %; W_t^r –массовая доля общей влаги в рабочей шихте, масс. %; a – коэффициент пропорциональности, равный 3,0–3,3.

С.Г. Ароновым и Р.Л. Милушовичем в середине прошлого века также предложено уравнение, позволяющее оценить выходы каменноугольной смолы и сырого бензола [32]:

$$B_{\text{см}} = -18,36 + 1,53V^{daf} - 0,0236(V^{daf})^2; \quad (49)$$

$$B_{\text{б}} = -1,61 + 0,144V^{daf} - 0,0016(V^{daf})^2. \quad (50)$$

Выход коксового газа находят по общепринятой формуле Я.О. Габинского[31]:

$$B_{\Gamma} = \kappa_{\Gamma}\sqrt{V_{\text{ш}}^d}. \quad (51)$$

Эмпирический коэффициент κ_{Γ} , зависящий от марочного состава шихты и режима коксования, в работе [80] принят равным 2,54–2,99, а в работе [72] 3,0–3,3.

Данные уравнения (49–51) находят применение и сейчас, хотя произошли существенные изменения, касающиеся условий коксования и свойств шихты, в результате чего наблюдается расхождение между экспериментальными и прогнозными величинами [32].

В УХИНе [57] для оценки выхода каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа предложены следующие регрессионные уравнения:

$$B_{\text{см}} = -2,656 + 0,2919V^{daf} + 0,00237(V^{daf})^2. \quad (52)$$

$$B_{\text{б}} = -0,152 + 0,04372V^{daf} + 0,00654y. \quad (53)$$

$$B_{\Gamma} = 4,097 + 0,26851V^{daf} + 0,00112V^{daf}y. \quad (54)$$

В работах авторами [66, 67] приведены квадратичные зависимости выхода каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа от выхода летучих веществ из шихты, полученные методом наименьших квадратов:

$$B_{\text{см}}^d = 6,69 - 0,45V_{\text{ш}}^d + 0,0117(V_{\text{ш}}^d)^2; \quad (55)$$

$$B_{\text{б}}^d = 3,11 - 0,19V_{\text{ш}}^d + 0,00439(V_{\text{ш}}^d)^2; \quad (56)$$

$$B_{\Gamma}^d = 3,95 \sqrt{V_{\text{ш}}^d} - 6,87. \quad (57)$$

В настоящее время планирование объемов производства каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа на коксохимических предприятиях Украины при неопределенной сырьевой базе коксования (ограниченных данных о марочном и бассейновом составе шихты) рекомендуется осуществляется по следующим формулам [80]:

– для батарей с печными камерами высотой 7,0 м:

$$B_{\text{см}} = 7,69 - 0,52V_{\text{ш}}^d - 0,0135(V_{\text{ш}}^d)^2. \quad (58)$$

Данное уравнение авторы [14] указывают как действительное для условий Мариупольского коксохимического завода.

$$B_{\text{с}} = -1,74 + 0,138V_{\text{ш}}^d + 0,0016(V_{\text{ш}}^d)^2; \quad (59)$$

$$B_{\Gamma} = 3,93\sqrt{V_{\text{ш}}^d} - 6,90; \quad (60)$$

– для батарей с печными камерами высотой до 6,0 м включительно:

$$B_{\text{см}} = 8,23 - 0,55V_{\text{ш}}^d - 0,0144(V_{\text{ш}}^d)^2; \quad (61)$$

$$B_{\text{с}} = 2,91 - 0,199V_{\text{ш}}^d + 0,0044(V_{\text{ш}}^d)^2; \quad (62)$$

$$B_{\Gamma} = 2,80\sqrt{V_{\text{ш}}^d}. \quad (63)$$

Для условий Мариупольского коксохимического завода авторы [63] приводят следующие уравнения:

$$B_{\text{с}} = 3,58 - 0,22V_{\text{ш}}^d + 0,00505(V_{\text{ш}}^d)^2; \quad (64)$$

$$B_{\Gamma} = 4,54\sqrt{V_{\text{ш}}^d} - 7,9. \quad (65)$$

Для условий НТМК [14] получены следующие уравнения:

$$B_{\text{см}} = 0,135V_{\text{ш}}^d - 0,04S_{\text{ш}}^d; \quad (66)$$

$$B_{\text{с}} = 0,0443V_{\text{ш}}^d - 0,0132S_{\text{ш}}^d, \quad (67)$$

$$B_{\Gamma} = 0,559V_{\text{ш}}^d - 0,166S_{\text{ш}}^d, \quad (68)$$

где $S_{\text{ш}}^d$ – содержание общей серы в шихте на сухую массу, масс. %.

Одной из первых зависимостей, отражающей связь выхода кокса с марочным составом шихт и их спекаемостью, является формула, предложенная А.М. Шейхетом, В.М. Чучминовым и В.Ф. Ильиным (ДМетИ) [81]:

$$B_k^p = 76,2 + ((Ж:Г) - 0,07) \cdot 4,43; (69)$$

где Ж и Г- содержание углей данных марок в шихте, масс. %.

Для расчета B_k^p из шихт с близкими или равными величинами Ж:Г возникает необходимость замены показателя марочного состава более чувствительным критерием, который, отражая те же особенности свойств угольных смесей, что и отношение Ж:Г, должен вместе с тем изменяться в более широком диапазоне числовой шкалы и иметь более точное количественное выражение.

В качестве дифференцирующего критерия марочной характеристики шихты Ж:Г может быть использован комплекс показателей динамики вспучивания по ГОСТ 14056-77 [82] в виде произведения $I_b \cdot P_b \cdot \frac{1}{P_n}$, где I_b – максимальное вспучивание, мм, с увеличением которого выход кокса должен расти. С выходом кокса достаточно тесно связаны величины дилатометрических характеристик спекаемости шихты, причем для условий Криворожского коксохимического завода наиболее тесно с выходом кокса коррелирует величина периода вспучивания по ГОСТ 14056-77 P_b , с. Последняя находится в закономерной связи также с величиной припека P_k . Поэтому предложена следующая формула [81]:

$$B_k = \frac{100 - V_{ш}^d}{100 - V_k^d} \cdot 100 + 2,65 + (P_b - 230) \cdot 0,062, (70)$$

впоследствии преобразованная для выхода кокса 6%-ной влажности (т) из одной печной камеры [81]:

$$B_k = 13,174 + 0,02313 P_b. (71)$$

Авторами [68] предложено корреляционное уравнение расчета выхода валового кокса применительно к условиям коксохимического производства Новолипецкого металлургического комбината:

$$B_k = \frac{100 - V_{ш}^d}{100 - V_k^d} \cdot 100 + \frac{I_b}{2,77 + 0,239 I_b} \text{ при } V_k^d = 0,8 \% = const, (72)$$

где I_b – индекс вспучивания по ГОСТ 14056-77 [34], мм.

Для условий ОАО «Запорожжкокс» [77] разработана зависимость между показателями качества шихты, ее подготовкой, режимом коксования и выходом кокса:

$$B_k = 2,39 \left(\left(93,73 - \frac{132,8}{A_{ш}^d} \right) (49 + 942,5 V_{ш}^{daf}) (1841,62 \Pi^{-1,52}) \frac{\Pi_B}{1,36 \Pi_B - 0,26} \cdot \frac{x}{0,0014x - 0,0066} \left(72,9 + \frac{81,6}{y} \right) \cdot \frac{\tau}{0,0013\tau - 0,00064} \right)^{1/7} - 109,3 \pm 0,77. \quad (73)$$

Здесь Π – степень измельчения шихты (содержание класса < 3 мм), масс. %; Π_B – спекаемость шихты; x, y – пластометрические показатели шихты, мм; τ – оборот печей, ч.

С широким распространением на предприятиях петрографического анализа углей для установления марочного и мацерального состава, теоретически и экспериментально доказана возможность [83] применения его результатов для прогнозирования выхода химических продуктов коксования. Для углей Карагандинского бассейна в работе [83] выведены следующие математические зависимости:

– выход кокса:

$$B_k = 68,6 + 8,08R_{o,r} + 0,0627\Sigma OK - 0,0181L; \quad (74)$$

– выход смолы:

$$B_{см} = 4,60 - 0,62R_{o,r} - 0,0428\Sigma OK + 0,0896L; \quad (75)$$

– выход сырого бензола:

$$B_6 = 1,653 - 0,543R_{o,r} - 0,0055\Sigma OK + 0,0225L; \quad (76)$$

– выход коксового газа:

$$B_r = 355,5 - 10,02R_{o,r} - 0,831\Sigma OK + 0,935L; \quad (77)$$

где $R_{o,r}$ – среднее значение произвольного показателя отражения витринита, %; ΣOK – сумма фюзенизированных компонентов на чистый уголь, масс. %; L – объемная доля мацералов группы липтинита, %.

Авторами работы [84] приведена следующая математическая зависимость для определения выхода кокса:

$$B_k^p = 15,283R_{o,r} - 0,0188\Sigma OK + 60,363. \quad (78)$$

Данное уравнение оспаривается авторами [19] в связи с недостаточным количеством данных для построения зависимости.

Для углей произвольного петрографического состава его можно определить либо по данным элементного анализа угля, либо с использованием данных о мацеральном составе и показателе отражения витринита $R_{o,r}$ [23, 85].

В работе [23] приведены математические зависимости выхода химических продуктов коксования от химического потенциала для среднепластовых проб углей кольчугинской и балахонской серий Кузбасса:

- выход смолы:

$$B_{cm} = 1,565 \cdot 10^{-11} Z_{хим}^{31,253} \exp(-4,398 Z_{хим}); \quad (79)$$

- выход сырого бензола:

$$B_6 = 4,683 \cdot 10^{-5} Z_{хим}^{6,14} \exp(-0,3558 Z_{хим}); \quad (80)$$

- выход коксового газа:

$$B_6 = 2,374 \cdot 10^{-5} Z_{хим}^{-3,985} \exp(-1,751 Z_{хим}); \quad (81)$$

где $Z_{хим}$ – показатель химического потенциала углей. На качественном уровне он основывается на структурно-химическом многообразии органической массы углей различных марок и разных месторождений, которое потенциально может быть преобразовано путем соответствующей технологической переработки угольного сырья в широкий круг органических соединений и продуктов высокой потребительской ценности [24].

В первом случае [85]:

$$Z_{хим} = (H^{daf})^{0,92} (N^{daf})^{0,14} (S^{daf})^{0,1}; \quad (82)$$

где H^{daf} , N^{daf} , S^{daf} – содержание соответственно водорода, азота и общей серы на сухую беззольную массу топлива, масс. %.

Во втором случае [85]:

$$Z_{хим} = Z_{хим}(Vt) \cdot x_{Vt} + Z_{хим}(I) \cdot x_I + Z_{хим}(L) \cdot x_L; \quad (83)$$

где $Z_{хим}(Vt)$, $Z_{хим}(I)$, $Z_{хим}(L)$ – показатели химического потенциала соответственно мацералов групп витринита, инертинита и липтинита; x_{Vt} , x_I , x_L – содержание (доли) в угле соответственно витринита, инертинита и липтинита.

Химический потенциал для отдельных групп мацералов авторами [23] представлен в виде зависимостей:

$$Z_{\text{хим}}(Vt) = 6,159R_{0,r}^{0,2902} \exp[-0,3279R_{0,r} - 0,00887R_{0,r}^2]; \quad (84)$$

$$Z_{\text{хим}}(I) = 5,438R_{0,r}^{0,3414} \exp[-0,4277R_{0,r} + 0,02468R_{0,r}^2]; \quad (85)$$

$$Z_{\text{хим}}(L) = 19,174R_{0,r}^{0,4285} \exp[-1,5857R_{0,r} + 0,3078R_{0,r}^2]; \quad (86)$$

В работе [24] приведены уравнения прогноза выхода кокса и основных химических продуктов коксования из межбассейновых шихт на основе данных общей выборки углей Украины, Российской Федерации и США:

$$B_{\text{к}}^{\text{daf}} = 0,6184Vt_I + 0,6588Vt_{II} + 0,7286Vt_{III} + 0,7954Vt_{IV} + 0,8298Vt_V + 0,8690Vt_{VI} + 0,4978L + 0,7984(I + Sv); \quad (87)$$

$$B_{\text{см}}^{\text{daf}} = 0,0838Vt_I + 0,0742Vt_{II} + 0,0586Vt_{III} + 0,0316Vt_{IV} + 0,0254Vt_V + 0,0085Vt_{VI} + 0,1105L + 0,0198(I + Sv); \quad (88)$$

$$B_{\text{б}}^{\text{daf}} = 0,0215Vt_I + 0,0183Vt_{II} + 0,0136Vt_{III} + 0,0093Vt_{IV} + 0,0063Vt_V + 0,0019Vt_{VI} + 0,0382L + 0,0068(I + Sv). \quad (89)$$

В данных уравнениях:

1) Vt_I – витринит стадий метаморфизма Д и ДГ ($R_{0,r} \leq 0,64$ %), определяется по формуле [24]:

$$Vt_I = (Vt^{<0,64} \cdot Vt)/100; \quad (90)$$

где $Vt^{<0,64}$ – содержание витринита стадий метаморфизма Д и ДГ, масс. %;

Vt – общее содержание мацералов группы витринита, масс. %;

2) Vt_{II} – витринит стадии метаморфизма Г ($R_{0,r} = 0,65–0,89$ %), определяется по формуле [24]:

$$Vt_{II} = (Vt^{0,65–0,89} \cdot Vt)/100; \quad (91)$$

где $Vt^{0,65–0,89}$ – содержание витринита стадии метаморфизма Г, масс. %;

3) Vt_{III} – витринит стадии метаморфизма Ж ($R_{0,r} = 0,90–1,19$ %), определяется по формуле [24]:

$$Vt_{III} = (Vt^{0,90–1,19} \cdot Vt)/100; \quad (92)$$

где $Vt^{0,90–1,19}$ – содержание витринита стадии метаморфизма Ж, масс. %;

4) Vt_{IV} – витриниты липтинит стадии метаморфизма К ($R_{0,r} = 1,20–1,39$ %), определяется по формуле [24]:

$$Vt_{IV} = (Vt^{1,20–1,39} \cdot Vt + L^{1,20–1,39})/100; \quad (93)$$

где $Vt^{0,90-1,19}$ – содержание витринита стадии метаморфизма Ж, масс. %; $L^{0,90-1,19}$ – содержание липтинита стадии метаморфизма Ж, масс. %;

5) Vt_V – витринит стадии метаморфизма ОС ($R_{0,r} = 1,40-1,69$ %), определяется по формуле [24]:

$$Vt_V = (Vt^{1,40-1,69} \cdot Vt)/100; (94)$$

где $Vt^{1,40-1,69}$ – содержание витринита стадии метаморфизма ОС, масс. %;

6) Vt_{VI} – витринит стадии метаморфизма Т ($R_{0,r} = 1,70-2,20$ %), определяется по формуле [24]:

$$Vt_V = (Vt^{1,70-2,20} \cdot Vt)/100; (95)$$

где $Vt^{1,70-2,20}$ – содержание витринита стадии метаморфизма Т, масс. %;

7) L – липтинит стадий метаморфизма Д, ДГ, Г, Ж, определяется по формуле [24]:

$$L = (L^{<0,64} + L^{0,65-0,89} + L^{0,90-1,19}) \cdot L/100; (96)$$

где $L^{<0,64}$, $L^{0,65-0,89}$, $L^{0,90-1,19}$ – содержание соответственно липтинита стадий метаморфизма Д и ДГ, Г, Ж, масс. %; L – общее содержание мацералов группы липтинита, масс. %;

8) I – содержание мацералов группы инертинита, масс. %;

9) Sv – содержание мацералов группы семивитринита, масс. %;

В работах [24, 86, 87] авторами указана возможность прогнозирования выхода химических продуктов коксования по данным элементного и петрографического анализов углей. По результатам исследований разработаны уравнения прогноза выходов основных продуктов коксования от значений параметра cA , характеризующего содержание ароматического углерода в органической массе угля по отношению к его общему содержанию:

– для украинских углей [24, 86]:

$$B_K^{daf} = 216,83 \cdot cA - 93,489; (97)$$

$$B_{CM}^{daf} = -64,066 \cdot cA + 54,427; (98)$$

$$B_6^{daf} = -12,773 \cdot cA + 11,124; (99)$$

– для российских углей [24, 86]:

$$B_K^{daf} = 192,39 \cdot cA - 75,262; (100)$$

$$B_{\text{см}}^{\text{daf}} = -63,730 \cdot cA + 53,903; (101)$$

$$B_6^{\text{daf}} = -14,690 \cdot cA + 12,559; (102)$$

– для американских углей [24, 86]:

$$B_{\text{к}}^{\text{daf}} = 206,26 \cdot cA - 86,072; (103)$$

$$B_{\text{см}}^{\text{daf}} = -65,460 \cdot cA + 55,915; (104)$$

$$B_6^{\text{daf}} = -20,167 \cdot cA + 16,923; (105)$$

– общие эмпирические уравнения [24, 86]:

$$B_{\text{к}}^{\text{daf}} = 204,67 \cdot cA - 84,501; (106)$$

$$B_{\text{см}}^{\text{daf}} = -65,017 \cdot cA + 55,176; (107)$$

$$B_6^{\text{daf}} = -14,652 \cdot cA + 12,581. (108)$$

Исходя из приведенных методов расчета выхода химических продуктов коксования, можно отметить, что большинство таких уравнений связано с выходом самого крупнотоннажного продукта – валового кокса.

Преимуществом в данном случае уравнений, учитывающих величину «припека», является тот факт, что они описывают выход кокса как результат двух процессов: первичных – потери массы и превращения исходного вещества в кокс и вторичных превращений образующихся в первичных процессах продуктов. Однако эти уравнения не дают возможности прогнозировать величину «припека». Для его определения также существуют несколько эмпирических зависимостей. Большинство из них являются уравнениями первого порядка, поэтому не могут учитывать взаимодействие веществ в многокомпонентной смеси – такой, как угольная шихта [66]. Зависимость, предложенная Г.П. Гейдом и А.Я. Обуховским [77] имеет второй порядок, что позволяет учесть взаимодействие компонентов шихты при коксовании. Ее исследование методами дифференциального исследования показывает, что при значениях выхода летучих веществ, соответствующих практическим условиям работы коксохимического производства, увеличение этого показателя приводит к росту «припека». Это соответствует современным теориям коксообразования, базирующимся, в частности, на законе действующих масс: увеличение количества парогазовых продуктов термической деструкции интенсифицирует про-

цессы вторичного пиролиза. Но данное утверждение нуждается в экспериментальной проверке [66].

В ряде приведенных уравнений прогноза выхода кокса кроме показателя выхода летучих веществ используют и другие величины. По мнению ученых [66] такое увеличение числа входных переменных не всегда оправданно, так как это приводит к снижению точности прогноза. Так, в соответствии с Правилами технической эксплуатации [88] конечная температура процесса коксования должна находиться в пределах 1000–1100 °С, поэтому для прогноза выхода кокса в промышленных условиях влияние конечной температуры коксования должно учитываться в числовых параметрах соответствующего уравнения. Аналогичным образом должна учитываться и массовая доля водорода, так как этот показатель характеризует степень завершенности процессов коксообразования [67].

Суммарное содержание в шихте спекающих компонентов – углей марок Ж, К и ОС, по мнению авторов [66], тоже не может служить входной переменной в уравнениях для прогноза выхода промышленного кокса, так как известны допустимые интервалы изменения данных показателей, необходимые для производства кондиционного кокса в агрегатах различных типов. Интервал изменения толщины пластического слоя промышленных шихт для коксования не превышает 5 мм, а погрешность ее определения с помощью наиболее распространенного ручного пластометрического аппарата составляет 1 мм [89]. Следовательно, известное в теории вероятностей «Правило трех сигм» не позволяет использовать этот показатель для достоверного прогноза выхода продуктов переработки угольных шихт.

Для прогноза выхода коксового газа широко используют известное уравнение Я.О. Габинского [79]. Анализ производственных данных показал существенные отклонения выхода коксового газа при прогнозе его выхода по данному уравнению. Поэтому различные авторы вводят в данное уравнение свободный член, позволяющий минимизировать отклонение прогнозной величины выхода коксового газа от производственной для данного предприятия.

Для выхода смолы и сырого бензола, как правило, используют ставшие классическими, зависимости, полученные С.Г. Ароновым и Р.Л. Милушовичем [32]. Однако

эти зависимости не в полной мере отражают существенно изменившиеся свойства сырья и условия коксования. Попытка введения поправочных коэффициентов также не увенчалась успехом [66].

1.2 Заключение по литературному обзору и постановка цели и задач исследования

Анализ литературных источников показал, что на сегодняшний день имеется большое количество методов оценки выхода химических продуктов коксования угля. С одной стороны, это обусловлено большим количеством параметров, оказывающих влияние на выход химических продуктов, с другой взаимосвязью параметров между собой, а также сложностью строения вещества угля и его недостаточной изученностью.

На основании теоретических изысканий выявлено, что процесс коксования углей может быть охарактеризован как непрерывный ряд пирогенетических процессов разложения угольного вещества, природа которого, его состав оказывают непосредственное влияние на качество и количество образующихся химических продуктов. Основными показателями качества углей, оказывающими влияние на выход химических продуктов, являются выход летучих веществ, мацеральный состав, произвольный показатель отражения витринита, содержание основных элементов органической массы углей, показатели спекаемости и показатели, характеризующие структуру углей. Также рассмотрена зависимость выхода химических продуктов коксования от свойств исходных углей. Большинство из них являются уравнениями первого порядка, поэтому не могут учитывать взаимодействие веществ в многокомпонентной смеси – такой, как угольная шихта. Однако эти зависимости не в полной мере отражают существенно изменившиеся свойства сырья и условия коксования, а также характеризуются недостаточной точностью.

Исходя из изложенного, в работе планируется исследовать угли Кузнецкого бассейна и их смеси, применяемые для производства металлургического кокса, по основным параметрам качества и определить выход из них основных химических продуктов коксования, провести математический анализ полученных результатов

и построением математической модели прогноза выхода основных химических продуктов коксования.

ГЛАВА 2 ХАРАКТЕРИСТИКА ОБЪЕКТА ИССЛЕДОВАНИЯ, МЕТОДОЛОГИЯ И МЕТОДЫ ДИССЕРТАЦИОННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1 Выбор и обоснование объекта исследования

В 1960-х годах на долю углей Кузнецкого бассейна приходилось более 25 % всех поставок углей для коксования, Донецкого бассейна – более 50 %, Карагандинского – более 13 % и Печорского – более 5 % [90]. С распадом СССР в 1991 г. и переходом на рыночную экономику произошла переориентация российских коксохимических заводов на увеличение использования углей российских бассейнов в шихте для коксования.

По состоянию на 1995 г. сырьевая база коксования включала угли шести бассейнов: Кузнецкого (67–69 %), Печорского (17–18 %), Донецкого (российской и украинской части) (~ 2 %), Кизеловского (~ 0,5 %), Южно-Якутского (1–2 %) и Карагандинского (9–10 %). Из 13 коксохимических предприятий четыре работают на углях одного бассейна – Кузнецкого. Смесь углей двух бассейнов составляет сырьевую базу шести коксохимических предприятий, каждая из которых обязательно включает кузнецкие угли. Три предприятия работают на углях трех-четырех бассейнов, среди которых в качестве постоянных компонентов участвуют кузнецкие угли [91].

По состоянию на 2007 г. предприятия России «обеспечили выпуск 16,4 млн. т кокса из 21,8 млн. т угольной шихты. Сырьевая база коксования состояла из 97,7 % углей отечественных бассейнов – Кузнецкого (82,1 %), Печорского (10,8 %), Южно-Якутского (4,3 %), Улуг-Хемского (0,5 %) и 2,3 % зарубежного - Карагандинского бассейна» [92].

По мнению авторов [93], в ближайшей перспективе суммарная мощность предприятий по добыче коксующихся углей может существенно увеличиться. Наиболее существенный рост ожидается в Кузнецком бассейне – как за счет развития действующих предприятий, так и за счет ввода новых. По состоянию на

2015 г. только в Кузбассе добыча коксующихся углей составила 62,9 млн. т, что на 3,1 млн. т больше, чем в 2014 г. [94].

В Печорском бассейне сохранится существующий фонд, который должен обеспечивать добычу на уровне 13,5–14 млн. т (в 2015 г.), при этом планируется постепенное уменьшение доли жирных углей. В Южно-Якутском бассейне прогнозируется ввод новых предприятий на угли марки К и развитие добычи на разрезе «Нерюнгринский» (ОС). В целом добыча увеличится до 9,5–10 млн. т в 2015 г. [93].

Также планируется ввод мощностей по добыче углей для коксования в Улуг-Хемском бассейне на новых – Межэгейском и Элегестском месторождениях (Республика Тыва), которые по своему качеству конкурентоспособны с кузнецкими углями марок ГЖ, Ж, КЖ и К, что показало всестороннее их изучение и опытно-промышленные коксования. Однако это затрудняется недостаточной транспортной доступностью данного региона угледобычи [95, 96].

Однако на сегодняшний день, исходя из приведенных данных, более 80 % углей для коксования представлены углями Кузнецкого бассейна. Поэтому их изучение является актуальным особенно в свете перехода к производству и сбыту продуктов глубокой переработки угля с высокой добавленной стоимостью, к которым относятся, в том числе, и химические продукты коксования. Это актуально и при разработке и реализации общероссийской программы стратегического управления угольными сырьевыми ресурсами [97].

«Кузнецкий бассейн из всех действующих бассейнов России имеет наибольшие запасы коксующихся углей. Угли Кузнецкого бассейна характеризуются низким, по сравнению с донецкими, содержанием серы (до 0,8 % масс.) и повышенным содержанием фосфора (до 0,15 % масс.) В бассейне добывают все марки коксующихся углей. Благоприятные горно-геологические условия залегания коксующихся углей, небольшая глубина их отработки – эти и другие указанные выше факторы делают их использование экономически целесообразным» [2].

Запасы углей Кузнецкого бассейна до глубины 1800 м определены в размере 905 млрд. т, в том числе спекающихся 364 млрд. т особую роль играет наличие в

запасах всей гаммы коксующихся углей: собственно коксовых углей и углей повышенной спекаемости – жирных и газовых, а также отощенно спекающихся.

По геологическому возрасту угленосные отложения относятся к юрскому, триасовому, пермскому, каменноугольному и девонскому периодам. Угольные пласты каменного угля залегают в балахонской и кольчугинской сериях (карбонское и пермское отложения). Они представлены в основном гумусовыми углями [90].

Для исследований взяты угли и смеси углей сырьевой базы ПАО «Кокс», так как ввиду его географического положения, сырьевая база предприятия ориентирована в основном на угли Кузнецкого бассейна [93]. Угли для коксования на ПАО «Кокс» поставляются практически со всей территории Кемеровской области и представлены большим количеством марок коксующихся углей Кузнецкого бассейна, а также их смесей. Поэтому закономерности образования химических продуктов в зависимости от показателей качества углей, представленных в шихте данного предприятия, могут давать общее представление о зависимостях данных показателей для большинства углей Кузнецкого бассейна. Закономерности образования химических продуктов коксования в зависимости от показателей качества исходных углей, составленные для одного завода, можно перенести на другие предприятия, использующие сходные угли, проводя дополнительные исследования.

Исследования проводились на угольных концентратах, используемых в технологическом процессе производства кокса на ПАО «Кокс». Отбор проб производился на предприятии от поступивших партий топлива в соответствии с ГОСТ 10742-71 [98].

2.2 Методы определения показателей качества углей

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. Поэтому целесообразно использовать методы определения показателей качества углей, применяемые в лабораториях коксохи-

мических предприятий либо в лабораториях угольных предприятий, добывающих и перерабатывающих угли, пригодные для коксования. Методы исследований угольного сырья представлены в Таблице 9.

Таблица 9 – Методы исследований угольного сырья

Наименование показателя(-ей)	Обозначение показателя (-ей)	Наименование метода исследований
Определения стандартных методов технического анализа	-	ГОСТ Р 53357-2013 (ISO 17246:2010) [99]
Пересчет показателей анализа на различные состояния топлива	-	ГОСТ 27313-2015[100]
Зольность на сухое состояние	A^d	ГОСТ Р 55661-2013 (ISO 1171:2010) [101]
Выход летучих веществ на сухое состояние и сухое беззольное состояние	V^d, V^{daf}	ГОСТ Р 55660-2013 (ISO 562:2010, ISO 5071-1:2013) [102]
Общая сера в угле	S_t^d	ГОСТ 2059-95 (ИСО 351-96) [103]
Содержание фосфора в угле	P^d	ГОСТ 1932-93 (ИСО 622-81) [104]
Пластометрические показатели по методу Сапожникова	x, y	ГОСТ 1186-87 [105]
Индекс вспучивания по методу ИГИ-ДМетИ	Ив	ГОСТ 14056-77 [106]
Индекс свободного вспучивания	SI	ГОСТ 20330-91 (ИСО 501-81)[107]
Произвольный показатель отражения витринита в иммерсии	$R_{0,r}$	ГОСТ 9414.1-94 (ИСО 7404-1-84) [108], ГОСТ Р 55662.2-2013 (ИСО 7404-2:2009) [109], ГОСТ Р 55662.3-2013 (ИСО 7404-3:2009) [110], ГОСТ 12113-94 (ИСО 7404-5-85) [111], ГОСТ 25543-2013 [26], ГОСТ 30313-95[112]
Содержание витринита	V_t	
Сумма фюзенизированных (отошающих) компонентов	ΣOK	
Общий углерод	C^{daf}	ГОСТ 2408.1-95 (ИСО 625-75) [113]
Общий водород	H^{daf}	

По результатам определения содержания основных элементов в органической массе углей рассчитаны основные структурные характеристики, отражающие

особенности молекулярной структуры угля и определяющие выход и состав продуктов переработки.

Степень ароматичности структуры органической массы угля, выражаемая долей углерода в составе органических фрагментов, рассчитывалась по формуле Ван-Кревелена для каменных углей [114]:

$$f_a = \frac{(100 - V^{daf})}{1240 \cdot C^{daf}}. \quad (109)$$

Также рассчитывался параметр Н/С, непосредственно связанный с соотношением между долей алифатических и ароматических фрагментов в углях [114].

По формуле Ван-Кревелена рассчитан показатель $C_{ар}$, отражающий содержание ароматического углерода по отношению к общему содержанию углерода [115]:

$$C_{ар} = \frac{3,4 \cdot C^{daf}}{(100 - C^{daf})}. \quad (110)$$

Показатель степени молекулярной ассоциированности вещества угля сА определяется по формуле [116]:

$$сА = 1 - \frac{H^{daf} + 0,125(O^{daf} + N^{daf} + S_t^d)}{0,333 \cdot C^{daf}}. \quad (111)$$

Определение выхода химических продуктов коксования служит для контроля технологического режима при коксовании различных по характеру шихт, для исследования углей, вводимых в шихту, для оценки изменения того или иного фактора в технологическом режиме, и должно давать возможность определять ресурсы химических продуктов, получающихся при пиролизе, для оценки эффективности применения тех или иных углей для промышленного коксования [117].

В 1960–1970-х годах УХИНОм и ВУХИНОм разработаны две модификации лабораторного метода определения выхода химических продуктов коксования методом малых навесок. Различие между методами заключается в основном в конструктивном оформлении аппарата, в способах нагрева пробы и системах регулирования процесса коксования [118].

Суть метода определения выхода химических продуктов коксования по ГОСТ 18635-73 [119] заключается в нагревании 20 г испытуемого угля или уголь-

ной смеси до $(890 \pm 10)^\circ\text{C}$ в пятисекционной или односекционной печи коксования и пиролизе образующихся продуктов с последующим определением их выхода.

Авторами [118, 120] отмечается, что результаты анализа выхода химических продуктов данным методом близки к производственным значениям, устранены потери химических продуктов, что обеспечивает сходимость и воспроизводимость результатов исследований, а также постоянство условий проведения лабораторного процесса коксования. Небольшая величина разовой загрузки обеспечивает компактность установки, а электронное управление режимом нагрева печей облегчает регулирование протекания эксперимента. Исходя из того, что данный метод является стандартизированным, а также обладает вышеперечисленными преимуществами, он получил большое распространение в практике коксохимических заводов.

Схема установки определения выхода химических продуктов коксования представлена на рис.15 [119].

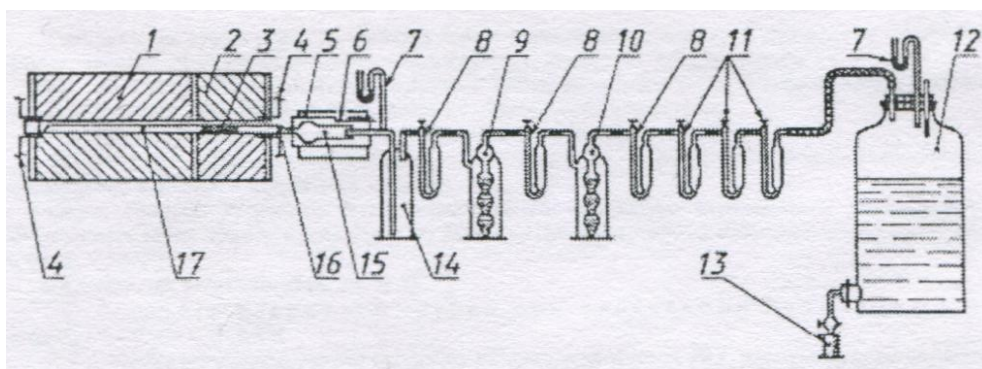


Рисунок 15 – Схема установки для определения выхода химических продуктов коксования: 1 – трубчатая электрическая пятисекционная или односекционная печь коксования, обеспечивающая нагрев до $(890 \pm 10)^\circ\text{C}$; 2 – трубчатая электрическая печь пиролиза, обеспечивающая нагрев до $(790 \pm 10)^\circ\text{C}$; 3 – насадка длиной 120–130 мм, состоящая из четырех рядов фарфоровых бусинок; 4 – одноточечные и пятиточечные хромель-алюмелевые термопреобразователи; 5 – трубчатая печь для ватного фильтра, обеспечивающая нагрев до $(105 \pm 15)^\circ\text{C}$; 6 – термометр; 7 – водяной манометр; 8 – U-образные трубки, заполненные хлористым кальцием; 9 – поглотительная склянка для углекислого газа и сероводорода; 10 – поглотительная склянка для непредельных углеводородов; 11 – U-образные трубки, заполненные активированным углем; 12 – газометр; 13 – мерный цилиндр; 14 – поглотительная склянка для аммиака; 15 – фильтр для улавливания смолы, заполненный 3 г гигроскопической ваты; 16 – кварцевая вставка; 17 – кварцевая реакционная трубка

2.3 Описание методов математического анализа

Для определения параметров модели необходимо провести корреляционный анализ. С его помощью можно выяснить существует ли связь между двумя случайными переменными ξ и η соответствующими принимающими значения «х» и «у» и оценить тесноту этой связи.

«С помощью метода корреляционного анализа решаются две главные задачи:

- определение формы и параметров уравнения связи;
- измерения тесноты связи.

Первая задача решается нахождением уравнения связи и определению его параметров. Вторая - с помощью расчета различных показателей тесноты связи (коэффициента корреляции, корреляционного отношения, индекса корреляции и др.).

Популярность метода обусловлена двумя моментами: коэффициенты корреляции относительно просты в подсчете, их применение не требует специальной математической подготовки. В сочетании с простотой интерпретации, простота применения коэффициента привела к его широкому распространению в сфере анализа статистических данных» [121].

Ограничения корреляционного анализа[121]:

- «применение возможно при наличии достаточного количества наблюдений для изучения. В случае если число наблюдений значительно превышает количество факторов, в действие вступает закон больших чисел, который обеспечивает взаимопогашение случайных колебаний;
- необходимо, чтобы совокупность значений всех факторных и результативного признаков подчинялась многомерному нормальному распределению. В случае если объём совокупности недостаточен для проведения формального тестирования на нормальность распределения, то закон распределения определяется визуально на основе корреляционного поля. Если в расположении точек на этом поле наблюдается линейная тенденция, то можно предположить, что совокупность исходных данных подчиняется нормальному закону распределения;
- исходная совокупность значений должна быть качественно однородной;
- сам по себе факт корреляционной зависимости не даёт основания утверждать, что одна из переменных предшествует или является причиной изменений, или то, что переменные связаны между собой, а не наблюдается действие третьего фактора».

По направлению связь между коррелирующими признаками может быть прямой и обратной. «Значение коэффициента корреляции может изменяться в диапазоне: $-1 \leq r \leq 1$. Абсолютное значение коэффициента корреляции показывает силу взаимосвязи. Чем меньше его абсолютное значение, тем слабее связь. Если он

равен нулю, то связь вообще отсутствует. Чем больше значение модуля коэффициента корреляции, тем сильнее связь и тем меньше разброс в значениях y_i при каждом фиксированном значении x_i . Знак коэффициента корреляции определяет направленность взаимосвязи: минус – отрицательная, плюс – положительная (Рисунок 16)» [121].

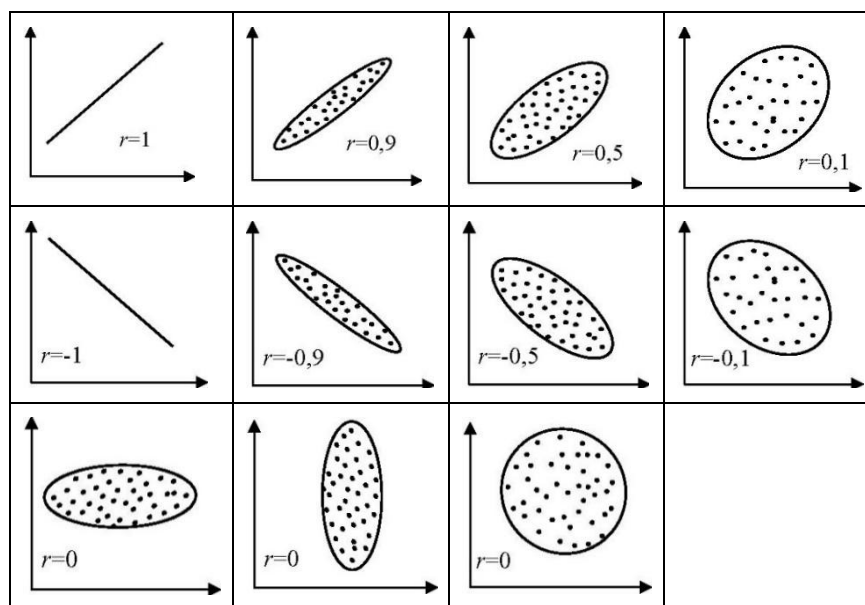


Рисунок 16 – Корреляционные поля при различных значениях коэффициента корреляции

«В зависимости от количества исследуемых признаков различают парную (простую) и множественную корреляцию. При парной корреляции изучают связь между двумя признаками (результативным и факторным), при множественной корреляции – связь между тремя и большим числом признаков (результативной и двумя и большим числом факторов)» [121].

«Одной из главных проблем построения корреляционной модели является определение формы связи и на этой основе установления типа аналитической функции, отражающий механизм связи результативного признака с факторными. Под формой корреляционной связи понимают тип аналитического уравнения, выражающего зависимость между исследуемыми признаками. Важность выбора того или иного уравнения для исследования связей между признаками заключается

в том, что правильно установленная форма связи позволяет подобрать и построить наиболее адекватную модель и на основе ее решения получить статистически достоверные и надежные характеристики» [121].

Метод вычисления коэффициента корреляции зависит от типа шкалы (Таблица 10), которой относятся переменные [122]:

Таблица 10 – Типы шкал переменных

Типы шкал		Мера связи
Переменная X	Переменная Y	
Интервальная (или отношений)	Интервальная (или отношений)	Коэффициент Пирсона
Ранговая, интервальная (или отношений)	Ранговая, интервальная (или отношений)	Коэффициент Спирмена
Ранговая	Ранговая	Коэффициент Кендалла
Дихотомическая	Дихотомическая	Коэффициент ϕ (фи), четырёхполевая корреляция
Дихотомическая	Ранговая	Рангово-бисериальный коэффициент

«Коэффициент корреляции Пирсона (линейная корреляция) применим в том случае, если измерение значений исследуемых признаков производится в шкале отношений или интервалов и форма зависимости является линейной. Коэффициент корреляции характеризует только линейную взаимосвязь (степень ее тесноты). Линейная взаимосвязь двух случайных величин состоит в том, что при увеличении одной случайной величины другая случайная величина имеет тенденцию возрастать (убывать) по линейному закону» [123].

Коэффициенты корреляции Пирсона используются при следующих условиях [123]:

- «метрическая шкала;
- нормальное распределение переменных;
- прямолинейная связь;
- отсутствие дисперсионных выбросов».

Для коэффициента корреляции (r) действует следующая формула: он равен «отношению корреляционного момента (ковариации) (K_{xy}) к произведению стандартных отклонений (σ_x, σ_y)» [123]:

$$r = \frac{K_{xy}}{\sigma_x \sigma_y}. \quad (112)$$

«Условия применения ранговых коэффициентов корреляции:

- метрическая или ранговая шкала;
- связь между переменными монотонна (не меняет знак)» [123].

«Обязательным условием использования коэффициента Спирмена является равенство размаха двух переменных.

Перед использованием коэффициента Спирмена для рядов данных с различным размахом, необходимо обязательно их ранжировать. Ранжирование приводит к тому, что значения этих рядов приобретают одинаковый минимум, равный 1 (минимальный ранг) и максимум, равный количеству значений (максимальный, последний ранг, равный n , т.е. максимальному количеству случаев в выборке).

Для расчета коэффициента ранговой корреляции Спирмена (ρ) используется формула:

$$\rho = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n d_i^2}{n(n^2 - 1)}, \quad (113)$$

где d – разница между рангами показателей одних и тех же испытуемых в упорядоченных рядах, n – число испытуемых или цифровых данных (рангов) в коррелируемых рядах» [123].

«Коэффициент рангов Спирмена подтверждает присутствие монотонно-возрастающей или убывающей зависимости (не обязательно линейной).

Проверка нулевой гипотезы об отсутствии статистически значимой связи можно проверить»:

1. Путем сравнения критического и эмпирического значений коэффициента ранговой корреляции. Если $|\rho| > \rho_{крит}(\alpha, n)$, нулевая гипотеза отвергается и можно сделать вывод о существенности связи.

2. На основании t -критерия [123]:

$$t_{эмп} = \rho \times \frac{\sqrt{n-2}}{1-\rho^2}, \quad (114)$$

Если $t_{эмп} > t_{крит}(\alpha, n)$, то нулевая гипотеза об отсутствии корреляционной зависимости между выборками отвергается» [123].

«Основная задача многомерного корреляционного анализа состоит в оценке корреляционной матрицы q_p по выборке. Эта задача решается определением матрицы выборочных коэффициентов корреляции:

$$q_p = \begin{bmatrix} 1 & r_{12} & \dots & r_{1p} \\ r_{21} & 1 & \dots & r_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{p1} & r_{p2} & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad (115)$$

где r_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, p$) - выборочный парный коэффициент корреляции, рассчитываемый по общей формуле» [123]:

$$r_{ij} = r_{x_i x_j} = \frac{\overline{x_i x_j} - \bar{x}_i \bar{x}_j}{s_i \cdot s_j}. \quad (116)$$

«В многомерном корреляционном анализе рассматривают две типовые задачи:

а) определение тесноты связи одной из переменных с совокупностью остальных ($p - 1$) переменных, включенных в анализ;

б) определение тесноты связи между переменными при фиксировании или исключении влияния остальных q переменных, где $q \leq (p - 2)$ » [124]

«Эти задачи решаются с помощью множественных и частных коэффициентов корреляции.

Теснота линейной взаимосвязи одной переменной x_i с совокупностью других ($p - 1$) переменных x_j , рассматриваемой в целом, измеряется с помощью множественного (или совокупного) коэффициента корреляции $\rho_{i,12..p}$, который является обобщением парного коэффициента корреляции ρ_{ij} . Выборочный множественный, или совокупный, коэффициент корреляции $R_{i,12..p}$, может быть вычислен по формуле:

$$R_{i,12...p} = \sqrt{1 - \frac{|q_p|}{q_{ii}}}, \quad (117)$$

где $|q_p|$ – определитель матрицы q_p ; q_{ij} – алгебраическое дополнение элемента q_{ij} той же матрицы.

Множественный коэффициент корреляции заключен в пределах $0 < R < 1$. Он не меньше, чем абсолютная величина любого парного или частного коэффициента корреляции с таким же первичным индексом» [124].

«С помощью множественного коэффициента корреляции (по мере приближения R к 1) делается вывод о тесноте взаимосвязи, но не о ее направлении. Величина R^2 , называемая выборочным множественным (или совокупным) коэффициентом детерминации, показывает, какую долю вариации исследуемой переменной объясняет вариация остальных переменных.

Если переменные коррелируют друг с другом, то на величине парного коэффициента корреляции частично сказывается влияние других переменных. В связи с этим часто возникает необходимость исследовать частную корреляцию между переменными при исключении (элиминировании) влияния одной или нескольких других переменных. Выборочным частным коэффициентом корреляции между переменными X_i и X_j при фиксированных значениях остальных $(p - 2)$ переменных называется выражение:

$$r_{ij,12...p} = \frac{-q_{ij}}{\sqrt{q_{ii}q_{jj}}}, \quad (118)$$

где q_{ij} – алгебраические дополнения элементов q_{ij} матрицы q_p » [124].

«Частный коэффициент корреляции $r_{ij,1,2...p}$, как и парный коэффициент корреляции r , может принимать значения от -1 до 1. Кроме того, $r_{ij,1,2...p}$, вычисленный на основе выборки объема n , имеет такое же распределение, что и r , вычисленный по $(n - p + 2)$ наблюдениям. Поэтому значимость частного коэффициента корреляции $r_{ij,1,2...p}$ оценивают так же, как и коэффициента корреляции r , но при этом полагают $n' = n - p + 2$ » [124].

«Основная цель регрессионного анализа состоит в определении связи между некоторой характеристикой Y наблюдаемого явления или объекта и величинами $x_1, x_2, \dots, x_n$, которые обуславливают, объясняют изменения Y . Переменная Y называется зависимой переменной (откликом), влияющие переменные $x_1, x_2, \dots, x_n$ называются факторами (регрессорами). Установление формы зависимости, подбор модели (уравнения) регрессии и оценка ее параметров являются задачами регрессионного анализа.

Регрессионный анализ позволяет:

- определить степень детерминированности вариации критериальной (зависимой) переменной предикторами (независимыми переменными);
- предсказать значения зависимой переменной с помощью независимой;
- определить вклад отдельных независимых переменных в вариацию зависимой.

Регрессионный анализ нельзя использовать для определения наличия связи между переменными, поскольку наличие такой связи и есть предпосылка для применения анализа.

В регрессионном анализе изучаются модели вида:

$$Y = \varphi(X) + \varepsilon, \quad (119)$$

где Y - результирующий признак (отклик, случайная зависимая переменная); X - фактор (неслучайная независимая переменная); ε - случайная переменная, характеризующая отклонение фактора X от линии регрессии (остаточная переменная)» [125].

«Уравнение регрессии записывается в виде:

$$y_x = \varphi(x, b_0, b_1, \dots, b_p), \quad (120)$$

где x - значения величины X ; $y_x = M_x(Y)$; $b_0, b_1, \dots, b_p$ - параметры функции регрессии φ » [120].

Таким образом, «задача регрессионного анализа состоит в определении функции и ее параметров и последующего статистического исследования уравнения.

В зависимости от типа выбранного уравнения различают линейную и нелинейную регрессию (в последнем случае возможно дальнейшее уточнение: квадратичная, экспоненциальная, логарифмическая и т.д.).

В зависимости от числа взаимосвязанных признаков различают парную и множественную регрессию. Если исследуется связь между двумя признаками (результативным и факторным), то регрессия называется парной, если между тремя и более признаками, то регрессия называется множественной (многофакторной)»[125].

«Задачей множественной линейной регрессии является построение линейной модели связи между набором непрерывных предикторов и непрерывной зависимой переменной. Часто используется следующее регрессионное уравнение:

$$Y = \sum_{i=1}^n a_i x_i + b_0 + e \quad . \quad (121)$$

Здесь a_i – регрессионные коэффициенты, b_0 – свободный член(если он используется), e – член, содержащий ошибку – по поводу него делаются различные предположения, которые, однако, чаще сводятся к нормальности распределения с нулевым вектором мат. ожидания и корреляционной матрицей» [126].

«Структурный анализ проводится с целью исследования статистических характеристик системы путем выделения в ней подсистем и элементов различного уровня и определения отношений и связей между ними.

Объектами исследования структурного анализа являются различные варианты формируемых в процессе декомпозиции системы структур, позволяющие все-сторонне оценить свойства системы.

В пределах одной системы можно формировать множество различных частных структур. Это объясняется свойством иерархичности системы, а также многообразием отношений, связей и свойств ее элементов. Подвергая делению или группируя элементы, выделяя те или иные отношения и связи, учитывая различные варианты свойств элементов, можно анализировать различные структуры одной и той же системы, выявляя их достоинства и недостатки и определяя основные направления совершенствования» [127].

«Общая процедура структурного анализа включает следующие основные этапы:

- 1) декомпозицию системы управления на интересующие исследователя подсистемы и элементы, формирование структур и их описание;
- 2) определение качественных и количественных характеристик (показателей) выделенных структур (оценивание структур);
- 3) формирование критериев и оценка эффективности выделенных структур;
- 4) принятие решения о необходимости совершенствования структурных характеристик системы управления» [127].

«Канонический анализ (подраздел структурного анализа) предназначен для анализа зависимостей между двумя списками признаков (независимых переменных), характеризующих объекты.

Канонический анализ является обобщением множественной корреляции как меры связи между одной переменной и множеством других переменных. Как известно, множественная корреляция есть максимальная корреляция между одной переменной и линейной функцией других переменных. Эта концепция была обобщена на случай связи между множествами переменных – признаков, характеризующих объекты. При этом достаточно ограничиться рассмотрением небольшого числа наиболее коррелированных линейных комбинаций из каждого множества. Пусть, например, первое множество переменных состоит из признаков $y_1, \dots, y_p$, второе множество состоит из $x_1, \dots, x_q$, тогда взаимосвязь между данными множествами можно оценить как корреляцию между линейными комбинациями $a_1y_1 + a_2y_2 + \dots + a_py_p, b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_qx_q$, которая называется канонической корреляцией. Задача канонического анализа в нахождении весовых коэффициентов таким образом, чтобы каноническая корреляция была максимальной» [128].

«Кластерный анализ – это метод классификационного анализа; его основное назначение – разбиение множества исследуемых объектов и признаков на однородные в некотором смысле группы, или кластеры. Это многомерный статистический метод, поэтому предполагается, что исходные данные могут быть значительного объема, т.е. существенно большим может быть как количество объектов ис-

следования (наблюдений), так и признаков, характеризующих эти объекты. Большое достоинство кластерного анализа в том, что он дает возможность производить разбиение объектов не по одному признаку, а по ряду признаков. Кроме того, кластерный анализ в отличие от большинства математико-статистических методов не накладывает никаких ограничений на вид рассматриваемых объектов и позволяет исследовать множество исходных данных практически произвольной природы. Так как кластеры – это группы однородности, то задача кластерного анализа заключается в том, чтобы на основании признаков объектов разбить их множество на m (m – целое) кластеров так, чтобы каждый объект принадлежал только одной группе разбиения. При этом объекты, принадлежащие одному кластеру, должны быть однородными (сходными), а объекты, принадлежащие разным кластерам, – разнородными. Если объекты кластеризации представить как точки в n -мерном пространстве признаков (n – количество признаков, характеризующих объекты), то сходство между объектами определяется через понятие расстояния между точками, так как интуитивно понятно, что чем меньше расстояние между объектами, тем они более схожи» [129].

«Деревья классификации – это метод кластерного анализа, позволяющий предсказывать принадлежность объектов к тому или иному классу в зависимости от соответствующих значений признаков, характеризующих объекты. Признаки называются независимыми переменными, а переменная, указывающая на принадлежность объектов к классам, называется зависимой. В отличие от классического дискриминантного анализа, деревья классификации способны выполнять одномерное ветвление по переменным различных типов категориальным, порядковым, интервальным. Не накладываются какие-либо ограничения на закон распределения количественных переменных. По аналогии с дискриминантным анализом метод дает возможность анализировать вклады отдельных переменных в процедуру классификации. Деревья классификации могут быть, а иногда и бывают, очень сложными. Однако использование специальных графических процедур позволяет упростить интерпретацию результатов даже для очень сложных деревьев. Возможность графического представления результатов и простота интерпретации

во многом объясняют большую популярность деревьев классификации в прикладных областях, однако, наиболее важные отличительные свойства деревьев классификации – их иерархичность и широкая применимость. Структура метода такова, что пользователь имеет возможность по управляемым параметрам строить деревья произвольной сложности, добиваясь минимальных ошибок классификации» [128].

2.4 Описание математического моделирования методом нейронных сетей

Искусственная нейронная сеть (ИНС) – это математический инструмент, построенный по принципу сетей нервных клеток в живом организме. Она состоит из нейронов, соединенных между собой связями (синапсами). У каждого синапса есть параметр – вес (сила связи), при изменении значения которого меняется значение выходного параметра, соответственно меняется и ошибка, и сеть обучается.

Важным достоинством искусственных нейронных сетей является умение находить сложные зависимости между входными и выходными данными, традиционные математические методы в таких случаях не подходят. Нейронные сети также устойчивы к шумам во входных данных, и способны к сопоставлению, обобщению и фильтрации исходных данных [129].

Однако искусственные нейронные сети не лишены недостатков. Зачастую возникают проблемы, связанные с трудностями нахождения достаточного количества обучающих примеров, время обучения искусственных нейронных сетей достаточно велико, да и поведение обученной нейронной сети не всегда предсказуемо.

Математической модели искусственного нейрона представлена на Рисунке 17 [130].

«Вход модели нейрона X – это вектор, состоящий из большого числа (N) компонент. Каждая из компонент входного вектора X_i – это один из импульсов, получаемых нейроном.

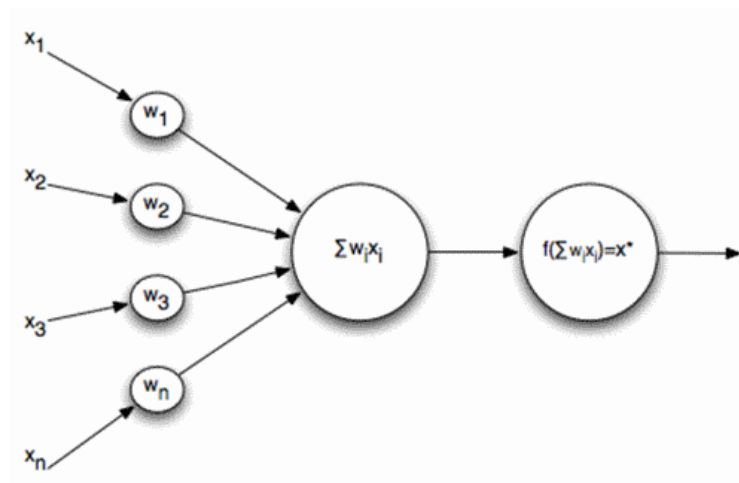


Рисунок 17 – Модель искусственного нейрона

Выход модели нейрона – это одно число X^* . Это означает, что внутри модели, входной вектор должен быть преобразован и агрегирован в скаляр. В дальнейшем этот импульс будет передан другим нейронам.

Известно, что при получении импульса синапс нейрона изменяет его. Математически этот процесс изменения можно описать следующим образом: для каждой из компонент входа X_i задают вес. Импульс, прошедший через синапс, принимает вид $W_i X_i$. Заметим, что веса могут быть назначены при инициализации модели, а могут быть переменными и измеряться в ходе расчетов. Веса – это внутренние параметры сети, о которых шла речь выше. Говоря об обучении сети, имеют в виду нахождение весов синапса.

Сложение полученных импульсов. Агрегирование полученных импульсов – это вычисление их суммы $\sum W_i X_i$.» [130].

Будет активирован нейрон или нет, определяется вычислением так называемой передаточной, или активационной, функции нейрона $f(\sum W_i X_i)$. Если значение функции превышает некоторый заранее определенный порог, то нейрон активирован и передает импульс следующим нейронам в сети.

Модели нейронных сетей могут быть классифицированы по трем различным параметрам:

- по видам связей между уровнями нейронов в сети;
- по виду передаточной функции;

- по используемому алгоритму обучения сети

В контексте искусственных нейронных сетей слово «сеть» употребляют для обозначения связей между искусственными нейронами. На Рисунке 26 приведен пример нейронной сети с одним скрытым уровнем [130].

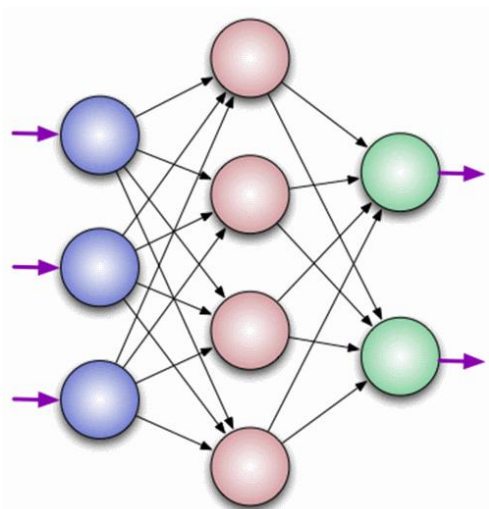


Рисунок 18 – Пример нейронной сети с одним скрытым уровнем

«Чаще всего нейроны располагаются в сети по уровням. На иллюстрации приведен пример трехуровневой нейронной сети. На первом уровне – входные нейроны (отмеченные синим), получающие данные извне и передающие импульсы нейронам на следующем уровне через синапсы. Нейроны на скрытом (втором, красном) уровне обрабатывают полученные импульсы и передают их нейронам на выходном (третьем, зеленом) уровне» [129].

«На нейроны самого нижнего слоя подаются значения входных параметров, на основании которых нужно принимать определенные решения. Эти значения воспринимаются сетью как сигналы, передающиеся в следующий слой, ослабляясь или усиливаясь в зависимости от числовых значений (весов), приписываемых межнейронным связям. В результате на выходе нейрона верхнего слоя вырабатывается некоторое значение, которое рассматривается как ответ – отклик всей сети на входные параметры. Для того чтобы сеть работала ее надо «натренировать» (обучить) на данных для которых известны значения входных параметров и правильные отклики на них. Обучение состоит в подборе весов межнейронных связей,

обеспечивающих наибольшую близость ответов к известным правильным ответам. Нейронные сети могут быть использованы для классификации наблюдений» [130].

Несмотря на недостатки ИНС, большое количество их топологий (много-слойный персептрон [131], вероятностная нейронная сеть [132], когнитрон и не-окогнитрон [133], нейронный газ [134], свёрточная нейронная сеть [135], сеть Хопфилда [136], сети Элмана [137], Джёрдона [138], сеть Ворда и др.) позволяет подобрать подходящую для решения почти любой задачи (например, классификации [139], кластеризации [140], прогнозирования и управления и т.д.).

В задачах прогнозирования и управления успешно используются такие сети как сеть Ворда, сети Элмана и Джердона и др. В некоторых случаях, когда входные значения можно представить в виде двумерного или многомерного куба данных, допустимо применение свёрточной нейронной сети, несмотря на то, что она создана для распознавания образов [141].

ГЛАВА 3 МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ИСХОДНЫХ УГЛЕЙ

3.1 Определение элементов для последующего анализа

В ходе проведения исследований основными химическими продуктами коксования были выбраны (далее группа выходных параметров): кокс, каменноугольная смола, сырой бензол, коксовый газ. Перечень основных параметров для оценки свойств исходных углей и их смесей выбраны (далее, группа входных параметров): A^d , V^d , V^{daf} , Ив, у, $R_{o,g}$, V_b , I, $\sum OK$, S_b^d , SI, C^{daf} , H^{daf} , H/C, Cap, cA, fa. В данной работе проведены исследования для 33 образцов, в ходе которых были определены значения всех входных и выходных параметров. Полученные результаты приведены в Приложении А. Данные значения взяты для определения зависимости между входными и выходными параметрами.

Так как разница между количеством элементов выборки и числом входных параметров невелика, то требуется сократить количество входных параметров. Для определения наличия зависимости между входными и выходными параметрами проведем канонический, корреляционный и регрессионный анализы.

3.2 Кластерный анализ

Выясним, формируют ли элементы выборки «естественные» кластеры, которые могут быть проанализированы с помощью иерархической классификации. Наиболее важным результатом, получаемым в результате древовидной кластеризации, является иерархическое дерево. На Рисунке 19 представлено иерархическое дерево для исследуемых угольных концентратов.

Расстояние между классами определялось методом полной связи (наиболее удаленных соседей) – объединяются те кластеры расстояние между самыми удаленными представителями которых наименьшее.

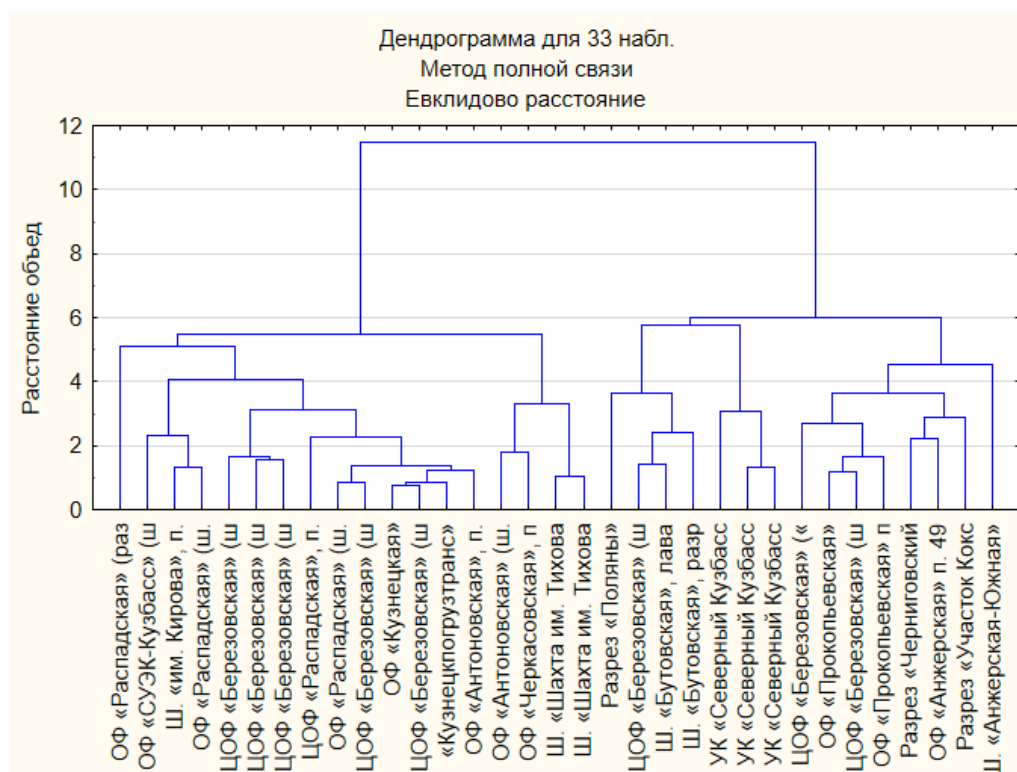


Рисунок 19 – Иерархическое дерево для исследуемых угольных концентратов

«Исходя из визуального представления результатов, можно сделать предположение, что элементы выборки образуют четыре естественных кластера. Проверим данное предположение, разбив исходные данные методом К-средних на 4 кластера, и посмотрим значимость различия между полученными группами (Рисунок 20). Метод К-средних заключается в следующем: вычисления начинаются с k случайно выбранных наблюдений (в нашем случае $k=4$), которые становятся центрами групп, после чего объектный состав кластеров меняется с целью минимизации изменчивости внутри кластеров и максимизации изменчивости между кластерами. После изменения состава кластера вычисляется новый центр тяжести. Алгоритм продолжается до тех пор, пока состав кластеров не перестанет меняться» [142].

В нашем случае такое разбиение данных на кластеры объясняется тем, что выборка захватывает практически все основные марки коксующихся углей.

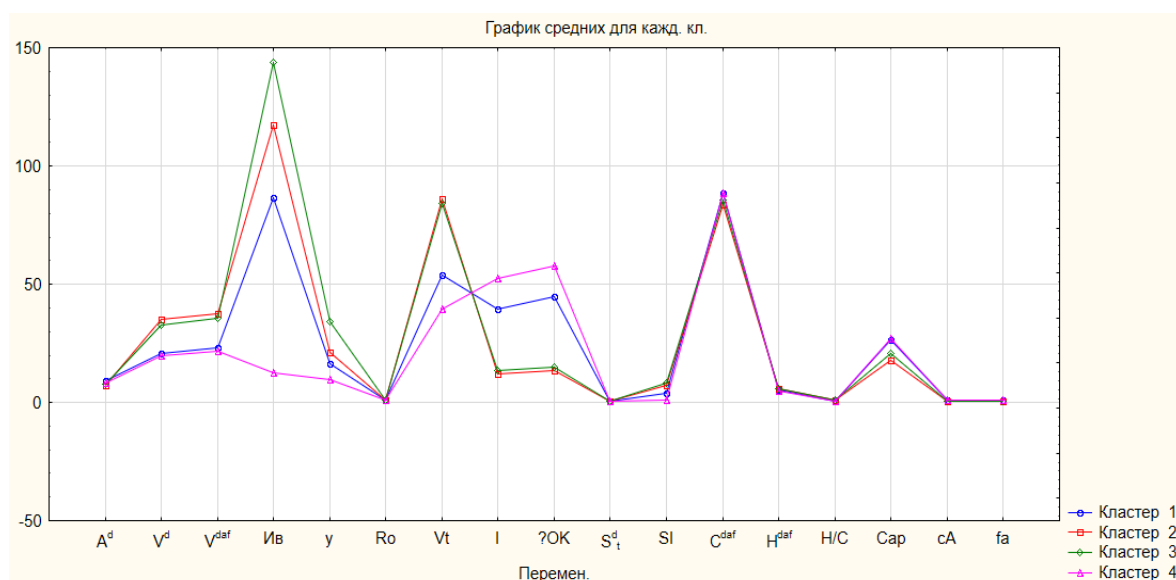


Рисунок 20 – Визуальное представление разбивки
исходных данных на кластеры

3.3 Канонический анализ

Предварительно, с целью установления зависимости между группой входных и группой выходных параметров и однородности выборки, был проведен канонический анализ. Диаграмма разброса входных переменных представлена на Рисунке 21. Результаты анализа представлены в Таблице 11.

Переменные были разделены на 2 группы (левая – группа входных параметров (17 переменных) и правая – группа выходных параметров (4 переменных). Для проведения канонического анализа использовали программу StatSoft Statistica 10. Каноническое значение R (зависимость взвешенных сумм переменных в первом и втором множествах) для наиболее значимого корня велико – 0,996. Из строки «Извлеченная дисперсия» видно, что 4 канонических корня (число канонических корней равно числу переменных в меньшем множестве) извлекают (объясняют) 100 % дисперсии (изменчивости) из правого множества и 76,254 % из левого. Значения в строке «Общая избыточность» можно объяснить следующим образом: пользуясь значениями всех канонических корней и получив значения переменных в правом множестве, можно объяснить, в среднем, 71,869% дисперсии переменных в левом множестве. Аналогично, можно объяснить 95,319% изменчивости в

правой группе по значениям переменных в левом множестве. Получившиеся результаты говорят о достаточно сильной зависимости между переменными двух множеств.

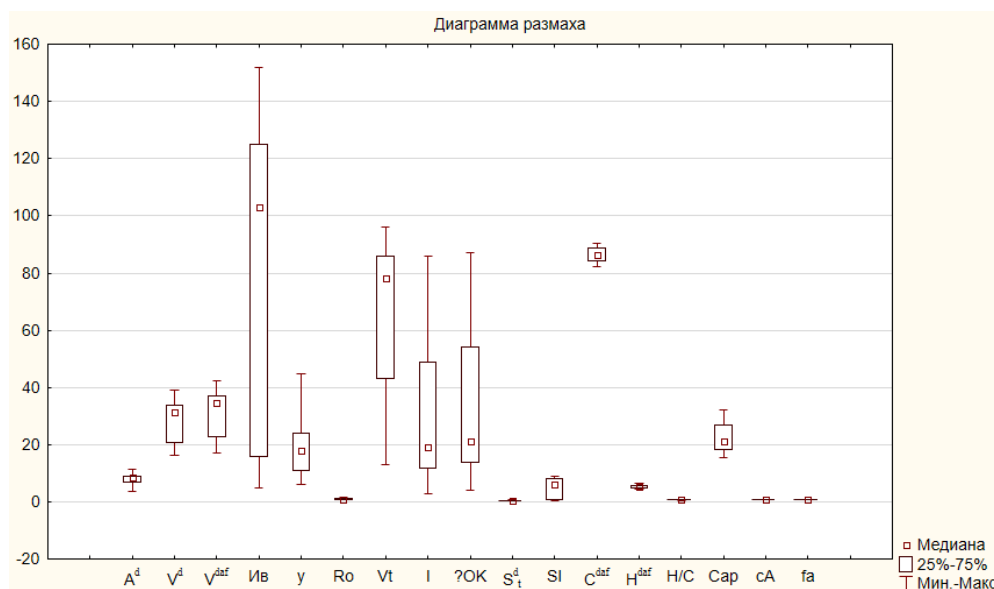


Рисунок 21 – Диаграмма разброса входных переменных

Таблица 11 – Итоги канонического анализа

Canonical R: 0,99577 Chi(68)=147,29 p=0,0001		
N=33	Левая группа	Правая группа
Число переменных	17	4
Извлеченная дисперсия	76,25%	100,00%
Общая избыточность	71,87%	95,32%
Переменные:	$A^d, V^d, V^{daf}, Ив, y, Ro, V_t, I, \sum OK, S_t^d, SI, C^{daf}, H^{daf}, H/C, Cap, cA, fa$	кокс, каменноугольная смола, сырой бензол, коксовый газ

Графическим представлением результатом канонического анализа стала диаграмма рассеяния (Рисунок 22), на которой представлено соотношение между значениями канонических переменных из левого и правого множеств. На графике видна однородность выборки без значительных одиночных выбросов и каких-либо характерных очертаний (например, «U» или «S»).

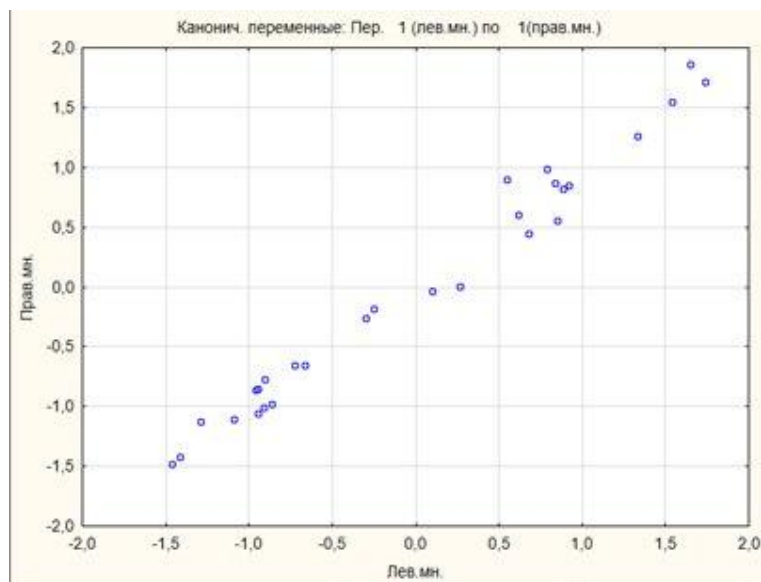


Рисунок 22 – Диаграмма рассеяния канонических переменных

3.4 Корреляционный анализ

В первую очередь, для выявления параметров, не несущих новой информации, был проведен корреляционный анализ. Корреляция представляет собой меру зависимости переменных. Коэффициенты корреляции изменяются в пределах от -1.00 до $+1.00$. Они определяют степень, с которой значения двух переменных «пропорциональны» друг другу [143]. Коэффициент корреляции равный 0 говорит о том, что корреляция отсутствует.

Результатом корреляционного анализа стала корреляционная матрица входных переменных (Приложение Б), из которой видно, что некоторые параметры сильно коррелируют друг с другом (Таблица12). А значит, один из параметров в дальнейшем анализе можно не учитывать. Такими параметрами являются I (коррелирует с V_t , $\sum OK$), SI (коррелирует с Ив), Н/С (коррелирует с H^{daf}), Саp (коррелирует с V^{daf} и C^{daf}).

В связи с тем, что коэффициент корреляции для пары V^d и V^{daf} близок к 1, то в дальнейшем можно использовать V^d или V^{daf} при выявлении наиболее значимых параметров.

Каждая пара связанных параметров была оценена на предмет определения характера связи, в частности линейности. Полученные результаты приведены в Приложении В.

Таблица 12 – Параметры, имеющие высокий коэффициент корреляции

Параметр 1	Параметр 2	Коэффициент корреляции
V^d	V^{daf}	0,998
V^d	V_t	0,910
V^d	ΣOK	-0,903
V^d	cA	-0,908
V^d	f_a	-0,983
V^{daf}	V_t	0,906
V^{daf}	cA	-0,910
V^{daf}	f_a	-0,983
ИВ	SI	0,953
V_t	I	-0,993
V_t	ΣOK	-0,999
I	ΣOK	0,996
C^{daf}	Cap	0,989
C^{daf}	cA	0,933
H^{daf}	H/C	0,986
H^{daf}	cA	-0,924
H/C	cA	-0,974
Cap	cA	0,926

3.5 Регрессионный анализ

Для определения наиболее влияющих на выход продуктов коксования переменных, был проведен регрессионный анализ [144], назначение которого – анализ связи между несколькими независимыми переменными и одной зависимой. Однако проведение данного анализа может оказаться невозможным из-за сильно коррелированных параметров (мультиколлинеарности), что произошло при проведении анализа для сырого бензола и коксового газа. Данную проблему можно избежать исключением из регрессионного анализа некоторых сильно коррелируемых параметров.

На основании того, что в процессе коксования практически вся зольная часть остается в коксе, а значение показателя V^{daf} исключает содержание золы, а также исходя из того, что показатели V^d , V^{daf} связаны математической зависимостью [102], из пары показателей (V^d , V^{daf}) целесообразно для расчетов выхода кокса применять значение показателя V^d . Так как каменноугольная смола, сырой бензол и коксовый газ являются компонентами прямого коксового газа и, соответственно, не содержат нелетучей зольной части, то из пары показателей (V^d , V^{daf}) целесообразно для расчетов выходов сырого бензола и коксового газа применять значение показателя V^{daf} . Данные предположения также подтвердились и при построении нейронной сети, при замене значения V^d на V^{daf} при расчете выхода кокса, как и при замене V^{daf} на V^d при расчете значений каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа увеличивается ошибка прогнозирования.

При попытке проведения регрессионного анализа для выходного параметра «Сырой бензол» проявился эффект мультиколлинеарности. Для исключения выявленного эффекта, необходимо исключить сильно коррелирующие параметры. Между сильно коррелирующими переменными V_t и $\sum OK$, C^{daf} и cA (также связаны математической зависимостью [116]) на основании анализа литературных данных исключаем $\sum OK$ и C^{daf} .

При попытке проведения регрессионного анализа для выходного параметра «Коксовый газ» также наблюдается мультиколлинеарность, поэтому на основании анализа литературных данных из пары переменных cA и f_a исключаем cA .

При построении нейронных сетей в дальнейшем исключенные выше параметры вводились в значимые параметры (для проверки правильности выбора параметра). При добавлении выше исключенных параметров или замене выбранных из пары на них, возрастала ошибка прогнозирования.

Соответственно, на основании проведенного корреляционного анализа и дальнейшего построения нейронных сетей, принято решение исключить следующие переменные:

- для кокса: V^{daf} ;
- для каменноугольной смолы: V^d ;

- для сырого бензола: V^d , ΣOK , C^{daf} ;
- для коксового газа: V^d , 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 [144]. Затем модуль бета-коэффициента был разделен на сумму найденных по модулю бета-коэффициентов. Результаты расчетов приведены в Таблице 13. При дальнейшем анализе и построении модели особое внимание обращалось на параметры с большим получившимся значением.

Таблица 13 – 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
ΣOK	0,92944	0,26038	–	0,647822
S_t^d	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

Примем допустимую точность для отсеивания не значимых параметров, равной 3 %.

Для определения доли вклада того или иного входного параметра определим долю вклада каждого из параметров. Для этого значение модуля бета-коэффициента поделим на суммарное значение всех показателей. Проведем данную процедуру для каждого из выходных параметров. Результаты вычисления приведены в Таблицах 14–17 для параметров «Кокс», «Каменноугольная смола», «Сырой бензол» и «Коксовый газ» соответственно.

Таблица 14 – Определение значимости показателей
для выходного параметра «Кокс»

Параметры	Значение бета-коэффициента	Модуль бета-коэффициента	Доля вклада	Доля вклада, %	Суммарная доля вклада
V^d	-1,4450	1,4450	0,2644	26,44%	0,2644
V_t	-0,9852	0,9852	0,1802	18,02%	0,4446
ΣOK	-0,9294	0,9294	0,1700	17,00%	0,6146
fa	-0,5279	0,5279	0,0966	9,66%	0,7112
cA	0,4599	0,4599	0,0841	8,41%	0,7953
H^{daf}	0,3251	0,3251	0,0595	5,95%	0,8548
y	0,2799	0,2799	0,0512	5,12%	0,9060
Ив	-0,2006	0,2006	0,0367	3,67%	0,9427
C^{daf}	-0,1522	0,1522	0,0278	2,78%	0,9705
S_t^d	0,0878	0,0878	0,0161	1,61%	0,9866
A^d	-0,0602	0,0602	0,0110	1,10%	0,9976
$R_{o,r}$	0,0130	0,0130	0,0024	0,24%	1,0000

Суммарное значение всех модулей бета-коэффициентов равно 5,4662.

По результатам регрессионного анализа наибольшее влияние на выходной параметр «Кокс» оказывают показатели: V^d , V_t , ΣOK , fa , cA , H^{daf} , y , Ив, C^{daf} . Так как выше принято допущение об ограничении в 3 %, такие показатели как S_t^d , A^d , $R_{o,r}$ – исключаем. На основании того, что cA коррелирует с C^{daf} , а fa коррелирует с V^d , а также оба эти показатели являются расчетными показателями – их исключаем.

Таким образом для дальнейшего анализа остаются следующие показатели: V^d , V_t , ΣOK , H^{daf} , y , Ив, C^{daf} .

В связи с тем, что оставшиеся показатели при анализе литературных данных описываются как значимые, и результаты регрессионного анализа, проведенного выше, это также подтверждают, исключить их на данной стадии не представляется возможным. Дальнейшее уменьшение количества параметров будем проводить опытным путем, заключающимся в построении нейронных сетей и отслеживании значения ошибки, получаемой на выходе.

По результатам построения нейронных сетей методом полного перебора при наличии следующих показателей V_t , Ив, H^{daf} в процессе построения модели размер ошибки увеличивался. Исходя из этого, данные показатели будут исключены.

В связи с тем, что для выходного параметра «Каменноугольная смола» из-за эффекта мультиколлинеарности не удастся провести регрессионный анализ, разбиваем данный набор показателей на три набора, исходя из корреляции между параметрами, в каждом из наборов будем исключать по одному из параметров:

- 1) при исключении H^{daf} , провести регрессионный анализ не удастся, слишком много взаимосвязанных между собой параметров;
- 2) при исключении cA , провести регрессионный анализ не удастся, слишком много взаимосвязанных между собой параметров;
- 3) при исключении f_a , провести регрессионный анализ удалось.

Таблица 15 – Определение значимости показателей для выходного параметра «Каменноугольная смола» без входного параметра f_a

Параметры	Значение бета-коэффициента	Модуль бета-коэффициента	Доля вклада	Доля вклада, %	Суммарная доля вклада
V^{daf}	0,7374	0,7374	0,1991	19,91	0,1991
cA	0,6620	0,6620	0,1788	17,88	0,3779
Ив	0,6470	0,6470	0,1747	17,47	0,5526
C^{daf}	-0,5747	0,5747	0,1552	15,52	0,7078
$\sum OK$	0,3682	0,3682	0,0994	9,94	0,8072
y	-0,3135	0,3135	0,0847	8,47	0,8919
V_t	0,1518	0,1518	0,0410	4,1	0,9329
H^{daf}	0,1401	0,1401	0,0378	3,78	0,9707
A^d	-0,0702	0,0702	0,0190	1,9	0,9897
S_t^d	-0,0243	0,0243	0,0066	0,66	0,9963
$R_{o,r}$	0,0138	0,0138	0,0037	0,37	1,0000

Суммарное значение всех модулей бета-коэффициентов равно 3,7029.

Для Каменноугольной смолы: по результатам регрессионного анализа наибольшее влияние оказывают показатели: V^{daf} , cA , Ив, C^{daf} , $\sum OK$, y , V_t , H^{daf} . Так как выше принято допущение о 3-х процентном ограничении, такие показатели как A^d , S_t^d , $R_{o,r}$ – исключаем.

Таблица 16 – Определение значимости показателей для выходного параметра
«Сырой бензол»

Параметры	Значение бета-коэффициента	Модуль бета-коэффициента	Доля вклада	Доля вклада, %	Суммарная доля вклада
cA	-0,9036	0,9036	0,2448	24,48	0,2448
V ^{daf}	0,7614	0,7614	0,2063	20,63	0,4511
Ив	-0,5751	0,5751	0,1558	15,58	0,6069
R _{o,r}	0,3847	0,3847	0,1042	10,42	0,7111
fa	-0,3082	0,3082	0,0835	8,35	0,7946
H ^{daf}	-0,2738	0,2738	0,0742	7,42	0,8688
y	0,2619	0,2619	0,0709	7,09	0,9397
Vt	-0,0929	0,0929	0,0252	2,52	0,9649
A ^d	-0,0719	0,0719	0,0195	1,95	0,9844
S ^d _t	0,0579	0,0579	0,0157	1,57	1,0000

Суммарное значение всех модулей бета-коэффициентов равно 3,6915.

Для сырого бензола: по результатам регрессионного анализа наибольшее влияние оказывают показатели: cA, V^{daf}, Ив, R_{o,r}, fa, H^{daf}, y, Vt. Так как выше принято допущение об ограничении в 3 %, такие показатели как A^d, S^d_t – исключаем.

Таблица 17 – Определение значимости показателей для выходного параметра «Коксовый газ»

Параметры	Значение бета-коэффициента	Модуль бета-коэффициента	Доля вклада	Доля вклада, %	Суммарная доля вклада
V ^{daf}	2,1704	2,1704	0,3705	37,05	0,3705
fa	0,9403	0,9403	0,1605	16,05	0,5310
Vt	-0,6539	0,6539	0,1116	11,16	0,6426
ΣOK	-0,6478	0,6478	0,1106	11,06	0,7532
y	-0,3401	0,3401	0,0581	5,81	0,8113
Ив	0,2997	0,2997	0,0512	5,12	0,8625
C ^{daf}	0,2774	0,2774	0,0474	4,74	0,9099
S ^d _t	-0,1780	0,1780	0,0304	3,04	0,9403
H ^{daf}	-0,1686	0,1686	0,0288	2,88	0,9691
R _{o,r}	-0,0983	0,0983	0,0168	1,68	0,9859
A ^d	-0,0831	0,0831	0,0141	1,41	1,0000

Суммарное значение всех модулей бета-коэффициентов равно 5,8576.

Для коксового газа: по результатам регрессионного анализа наибольшее влияние оказывают показатели: V^{daf}, fa, Vt, ΣOK, y, Ив, C^{daf}, S^d_t, H^{daf}. Так как выше

принято допущение о 3-х процентном ограничении, такие показатели как $R_{o,r}$, A^d – исключаем.

Таким образом, в ходе проведения математического анализа определены основные значимые параметры исходных углей и их смесей для прогнозирования выхода химических продуктов коксования, а именно таких как: кокс, каменноугольная смола, сырой бензол, коксовый газ и разработать программный продукт для прогнозирования выхода химических продуктов коксования.

3.6 Построение уравнений регрессии

С параметрами, определенными по итогам канонического и регрессионного анализов, и выходом продуктом коксования по результатам вновь проведенного регрессионного анализа (Таблицы 18–21 для параметров «Кокс», «Каменноугольная смола», «Сырой бензол» и «Коксовый газ» соответственно) были составлены уравнения регрессии (формулы 122–125 соответственно).

Таблица 18 – Множественная регрессия для выходного параметра «Кокс»

Переменные	Неизвестные коэффициенты регрессии	Стандартные ошибки оценки коэффициентов	Значение статистики Стьюдента	Уровень значимости принятия гипотезы
Св. член	20,7750	121,7738	0,17060	0,865465
V^d	-0,5420	0,3870	-1,40069	0,169639
Ив	-0,0125	0,0096	-1,30218	0,200902
y	0,1500	0,0500	3,00130	0,004793
Vt	-0,3830	0,2054	-1,86460	0,070185
ΣOK	-0,3786	0,2009	-1,88439	0,067388
C^{daf}	-0,2356	1,7272	-0,13639	0,892250
H^{daf}	4,6746	7,7618	0,60225	0,550679
cA	134,2419	254,3224	0,52784	0,600761
fa	-3,1598	32,2639	-0,09794	0,922511

$$K = 20,78 - 0,54 \cdot V^d - 0,013 \cdot \text{Ив} + 0,15 \cdot y - 0,38 \cdot Vt - 0,38 \cdot \Sigma OK - 0,24 \cdot C^{daf} + 4,67 \cdot H^{daf} + 134,24 \cdot cA - 3,16 \cdot fa. \quad (122)$$

Таблица 19 – Множественная регрессия для выходного параметра
«Каменноугольная смола»

Переменные	Неизвестные коэффициенты регрессии	Стандартные ошибки оценки коэффициентов	Значение статистики Стьюдента	Уровень значимости принятия гипотезы
Св. член	29,6791	56,3927	0,526293	0,601743
V^{daf}	0,1233	0,0489	2,519748	0,016067
Ив	0,0096	0,0057	1,690404	0,099139
y	-0,0204	0,0291	-0,702499	0,486649
Vt	-0,0033	0,1246	-0,026244	0,979200
ΣOK	0,00004	0,1215	0,000293	0,999768
C^{daf}	0,0419	1,0564	0,039640	0,968588
H^{daf}	-1,5259	4,6775	-0,326227	0,746043
cA	-33,1125	153,5186	-0,215690	0,830383

$$T_K = 29,68 + 0,12 \cdot V^{daf} + 0,01 \cdot \text{Ив} - 0,02 \cdot y - 0,0033 \cdot Vt + \\ + 0,00004 \cdot \Sigma OK + 0,04 \cdot C^{daf} - 1,53 \cdot H^{daf} - 33,11 \cdot cA. (123)$$

Таблица 20 – Множественная регрессия для выходного параметра
«Сырой бензол»

Переменные	Неизвестные коэффициенты регрессии	Стандартные ошибки оценки коэффициентов	Значение статистики Стьюдента	Уровень значимости принятия гипотезы
Св. член	16,6514	25,60234	0,65039	0,521375
V^{daf}	-0,0141	0,12662	-0,11120	0,912346
Ив	-0,0031	0,00110	-2,82414	0,009174
y	0,0086	0,00556	1,54230	0,135565
$R_{o,r}$	0,5055	0,29400	1,71938	0,097904
Vt	-0,0001	0,00232	-0,05498	0,956588
H^{daf}	-0,3155	0,43829	-0,71977	0,478341
cA	-12,9284	14,31785	-0,90296	0,375166
fa	-5,1920	10,76793	-0,48217	0,633877

$$C_6H_6 = 16,65 - 0,01 \cdot V^{daf} - 0,003 \cdot \text{Ив} + 0,0086 \cdot y + 0,51 \cdot R_o - 0,0001 \cdot Vt - \\ - 0,32 \cdot H^{daf} - 12,93 \cdot cA - 5,19 \cdot fa. (124)$$

Таблица 21 – Множественная регрессия для выходного параметра «Газ»

Переменные	Неизвестные коэффициенты регрессии	Стандартные ошибки оценки коэффициентов	Значение статистики Стьюдента	Уровень значимости принятия гипотезы
Св. член	72,6733	208,5141	0,34853	0,729418
V^{daf}	0,0565	1,2062	0,04688	0,962864
Ив	0,0092	0,0071	1,30291	0,200655
y	-0,0697	0,0369	-1,88757	0,066946
Vt	-0,1147	0,1535	-0,74719	0,459673
ΣOK	-0,1186	0,1496	-0,79259	0,433071
S_t^d	-2,8913	1,0940	-2,64288	0,011981
C^{daf}	-0,3026	1,0154	-0,29798	0,767387
H^{daf}	-0,7713	0,3952	-1,95181	0,058561
fa	-21,5258	107,4349	-0,20036	0,842295

$$G_K = 72,77 + 0,057 \cdot V^{daf} + 0,01 \cdot \text{Ив} - 0,07 \cdot y - 0,12 \cdot Vt - \\ - 0,12 \cdot \Sigma OK - 2,89 \cdot S_t^d - 0,30 \cdot C^{daf} - 0,77 \cdot H^{daf} - 21,53 \cdot fa. \quad (125)$$

Средняя относительная ошибка по найденным уравнениям составила: для параметра «Кокс» –0,63 %, «Каменноугольная смола» –18,65 %, «Сырой бензол» – 12,59 %, «Коксовый газ» –6,22 %, что недостаточно для использования на промышленном предприятии.

Статистический анализ показал, что имеющаяся зависимость носит нелинейный характер. Проведение нелинейной аппроксимация представленной модели имеющимися стандартными средствами не представляется возможной. Поэтому для решения данной задачи было решено применить математическую модель нейронной сети.

Высокотемпературное коксование углей и их смесей рассматривается как система черного ящика. Был выбран данный способ исследования процесса для составления математической модели выхода продуктов коксования, так как строение углей и механизмы протекания высокотемпературного коксования недостаточно изучены.

ГЛАВА 4 ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ВЫХОДА ПРОДУКТОВ КОКСОВАНИЯ

4.1 Топология сети

В виду сложности связи между выходом продуктов коксования и параметрами угольной шихты, для решения задачи прогнозирования особый интерес представляет сеть Ворда и сети на ее основе. Она схожа с многослойным персептроном, но нейроны в ней сгруппированы и используются различные передаточные функции, что позволяет находить более сложные зависимости.

Нейронные сети отлично подходят для решения задачи прогнозирования, однако в данный момент нет универсального инструмента на их основе. Опираясь на результаты статистического анализа, который показал нелинейность связи входных и выходных данных, было принято решение разработать собственную реализацию сети Ворда.

Топология сети Ворда, которая заключается в разбиении нейронов на группы с различными передаточными функциями (Рисунок 23), что позволяет находить более сложные нелинейные зависимости. 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. Желтым цветом обозначены нейроны входного слоя, голубым – нейроны скрытого слоя (эмпирическим путем установлено, что в данной задаче при данных элементах выборки лучше использовать от 1 до 4 скрытых слоев с количеством нейронов в них от 3 до 10, при меньших значениях сеть обычно недообучается, а при больших – чаще всего переобучается), разным оттенком голубого обозначены нейроны с разной передаточной (активационной) функцией, зеленым – нейроны выходного слоя.

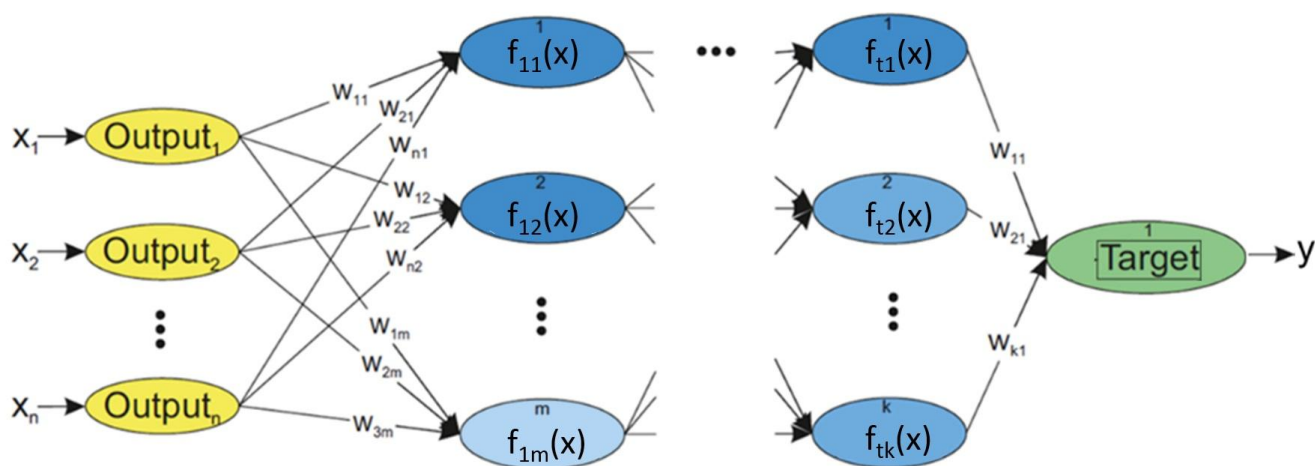


Рисунок 23 – Схема нейронной сети

Так как значения параметров имеют разный диапазон значений, обучение сети сильно затрудняется, чтобы этого избежать, все значения приводятся в интервал $[0;1]$ с использованием формулы 126. Для приведения в обычный диапазон выхода нейронной сети используется формула 127.

На нейроны входного слоя подаются значения определенных параметров шихты, после чего, для приведения диапазона их значений в один интервал $[0;1]$, значения преобразуются по формуле:

$$Output = \frac{X - \min X}{\max X - \min X}, \quad (126)$$

где $Output$ – выход нейрона входного слоя; X – значение параметра, поданное на нейрон входного слоя; $\min X$ – минимальное значение данного параметра в выборке; $\max X$ – максимальное значение данного параметра в выборке.

Преобразованные значения умножаются на соответствующие им веса, которые изначально задаются равными случайному числу в интервале $[-0,5; 0,5)$. Произведения поступают на нейрон скрытого слоя, где они суммируются (т.е. $Output_1 * w_{11} + Output_2 * w_{21} + \dots + Output_n * w_{n1}$, где x – выход нейрона входного слоя, а w – вес синапса). Получившееся значение проходит через передаточную функцию, которая выбирается случайным образом из внесенных в программный код функций. В качестве активационных функций в разработанном приложении могут использоваться:

- **Тождественная** [145] (Рисунок 24) – данная функция определена на интервале $(-\infty; +\infty)$.

$$f(x) = ax \quad (127)$$

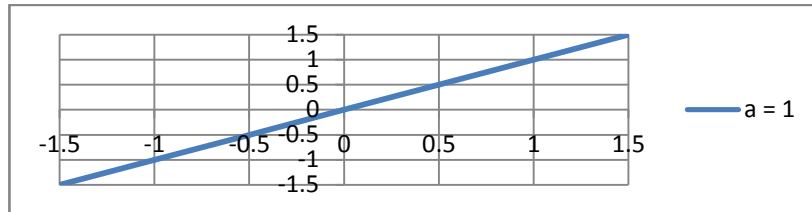


Рисунок 24 – Тождественная функция

- **Логистическая** [146] (Рисунок 25) – данная функция определена на интервале $(0; +1)$.

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-ax}} \quad (128)$$

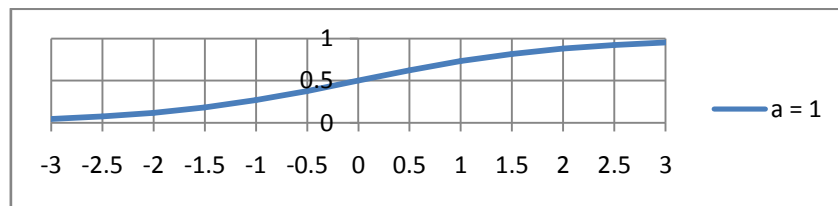


Рисунок 25 – Логистическая функция

- **Гиперболический тангенс** [146] (Рисунок 26) – данная функция определена на интервале $(-1; +1)$.

$$f(x) = \frac{e^{\frac{x}{a}} - e^{-\frac{x}{a}}}{e^{\frac{x}{a}} + e^{-\frac{x}{a}}} \quad (129)$$

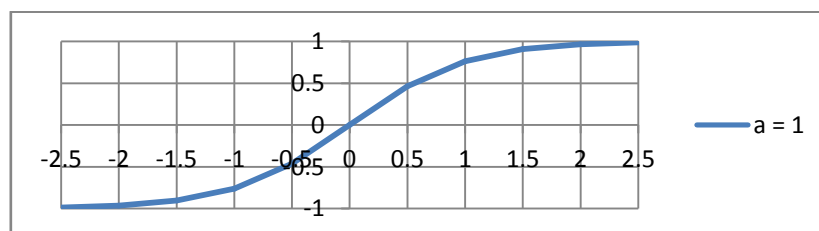


Рисунок 26 – Гиперболический тангенс

- **Экспонента** [147] (Рисунок 27) – данная функция определена на интервале $(0; +\infty)$.

$$f(x) = e^{-ax} \quad (130)$$

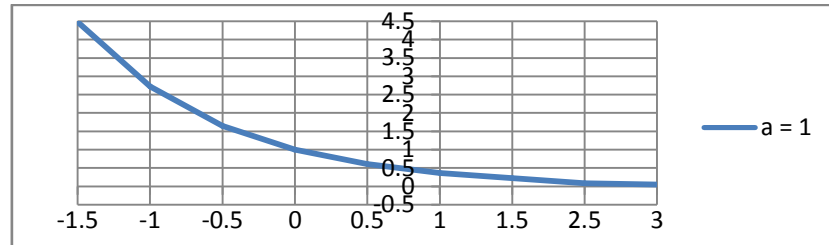


Рисунок 27. – Экспонента

- **Синусоида** [147] (Рисунок 28) – данная функция определена на интервале $[0; 1]$.

$$f(x) = \sin(ax) \quad (131)$$

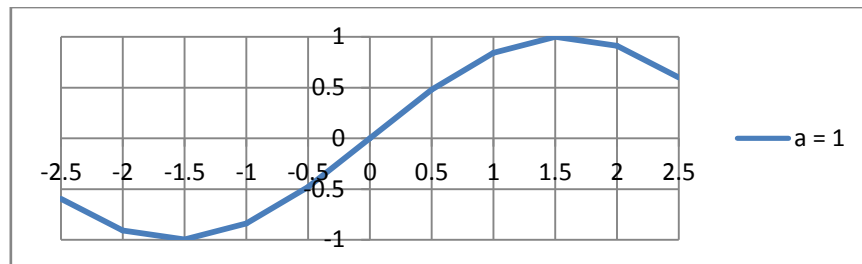


Рисунок 28 – Синусоида

Далее также высчитываются произведения выхода нейрона на соответствующий вес синапса, получившиеся значения поступают на нейрон следующего слоя, где они суммируются, значение суммы проходит через передаточную функцию и т.д., до выходного слоя. Значение нейрона выходного слоя для приведения его в обычный диапазон преобразуется (формула 132):

$$Target = V * (maxT - minT) + minT; \quad (132)$$

где Target – преобразованное значение нейрона выходного слоя; V – значение нейрона выходного слоя; $minT$ – минимальное значение выхода данного продукта

коксования в выборке; $\max T$ – максимальное значение выхода данного продукта коксования в выборке. Полученное значение и является ответом нейронной сети.

4.2 Алгоритм обучения сети

Классическим методом обучения сети считается метод обратного распространения ошибки [133], суть которого состоит в градиентном спуске по поверхности ошибок. Однако данный алгоритм имеет некоторые минусы: попадание в локальные минимумы, паралич сети из-за сильного увеличения значения весов в процессе обучения. К тому же на передаточную функцию накладывается ограничение, что она дифференцируема на всем интервале, чего нельзя сказать о гиперболе [141].

Учитывая выше перечисленные недостатки, было принято решение при обучении сети применять 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. Перед первой итерацией средняя относительная ошибка задается наибольшим возможным значением типа Double равным $1.7976931348623157E + 308$, что позволяет на первой итерации принять первый вариант сети. 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 виду того, что сеть могла не обучаться долгое время, в программу была добавлена возможность указать количество итераций (обычно порядка 1000, 10000, в зависимости от общего количества итераций), при которых сеть могла не обучаться, по истечению которых происходит добавление нейрона со случайными значениями весов и случайной передаточной функцией в случайный скрытый слой. Смена передаточной функции происходит на каждой итерации, если выбран данный способ обучения. Она не зависит от количества итераций, которые сеть

поряд может не обучаться. Добавление нейрона – это своего рода крайний случай, когда обычный способ обучения долгое время не работает.

Блок-схема обучения сети представлена в Приложении Г.

4.3 Описание полученных нейронных сетей

Топология полученной нейронной сети для выходного параметра «Кокс» представлена на Рисунке 29.

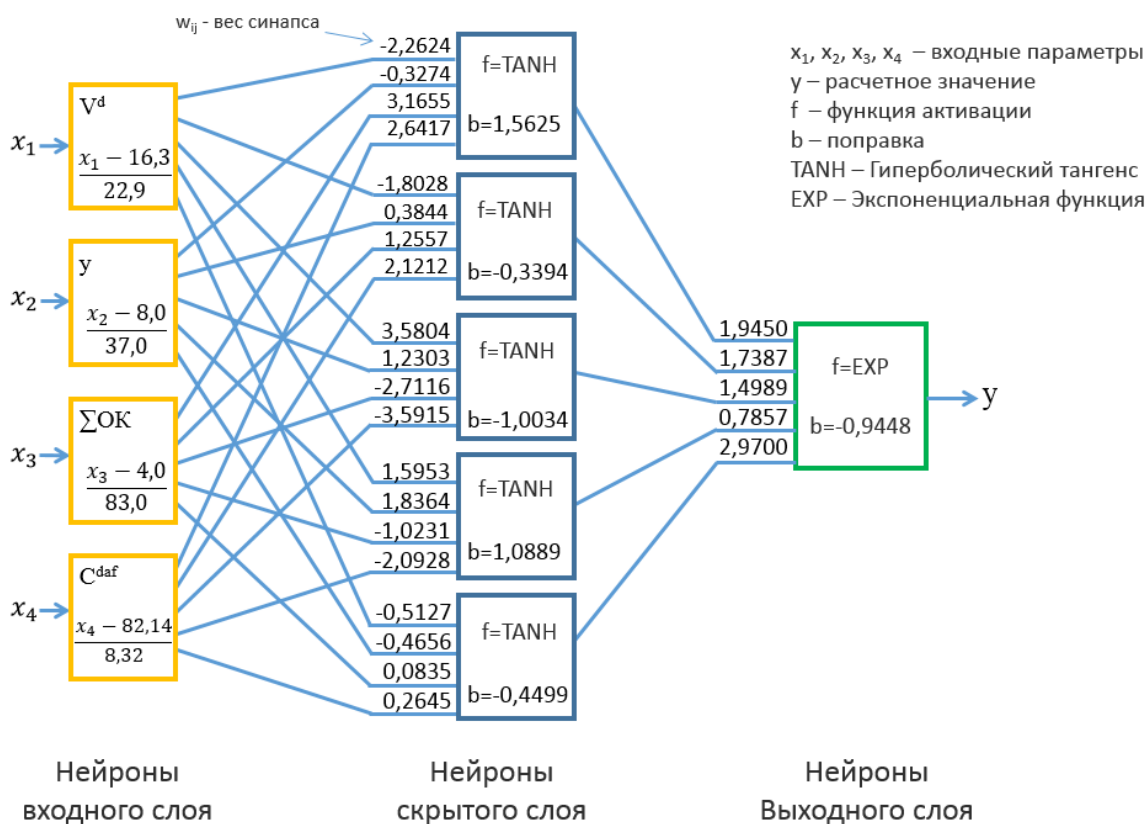


Рисунок 29 – Топология нейронной сети для выходного параметра «Кокс»

Рассмотрим математическую модель для выходного параметра «Кокс». Введем обозначение h_{ij} – значение на выходе из нейрона; i – номер слоя; j – номер нейрона в слое; k_{ij} – сумма значений веса синапса, умноженных на выходное значение из нейрона. Нумерацию слоев начнем с 0. Обозначим: $x_1 - V^d$; $x_2 - y$; $x_3 - \Sigma OK$; $x_4 - C^{daf}$.

Для нейронов входного слоя:

$$\begin{cases} h_{01} = \frac{x_1 - 16,3}{22,9}; \\ h_{02} = \frac{x_2 - 8,0}{37,0}; \\ h_{03} = \frac{x_3 - 4,0}{83,0}; \\ h_{04} = \frac{x_4 - 82,14}{8,32}. \end{cases} \quad (133)$$

Для нейронов скрытого слоя (один скрытый слой):

$$\begin{cases} k_{11} = 1,5626 + h_{01} \cdot (-2,2624) + h_{02} \cdot (-0,3274) + h_{03} \cdot (3,1655) + h_{04} \cdot (2,6417); \\ k_{12} = -0,3394 + h_{01} \cdot (-1,8028) + h_{02} \cdot (0,3844) + h_{03} \cdot (1,2557) + h_{04} \cdot (2,1212); \\ k_{13} = -1,0034 + h_{01} \cdot (3,5804) + h_{02} \cdot (1,2303) + h_{03} \cdot (-2,7116) + h_{04} \cdot (-3,5915); \\ k_{14} = 1,0889 + h_{01} \cdot (1,5953) + h_{02} \cdot (1,8364) + h_{03} \cdot (-1,0231) + h_{04} \cdot (-2,0928); \\ k_{15} = -0,4499 + h_{01} \cdot (-0,5127) + h_{02} \cdot (-0,4656) + h_{03} \cdot (0,0835) + h_{04} \cdot (0,2645). \end{cases} \quad (134)$$

$$\begin{cases} h_{11} = \frac{e^{2k_{11}} - 1}{e^{2k_{11}} + 1} = \text{TANH}(k_{11}); \\ h_{12} = \frac{e^{2k_{12}} - 1}{e^{2k_{12}} + 1} = \text{TANH}(k_{12}); \\ h_{13} = \frac{e^{2k_{13}} - 1}{e^{2k_{13}} + 1} = \text{TANH}(k_{13}); \\ h_{14} = \frac{e^{2k_{14}} - 1}{e^{2k_{14}} + 1} = \text{TANH}(k_{14}); \\ h_{15} = \frac{e^{2k_{15}} - 1}{e^{2k_{15}} + 1} = \text{TANH}(k_{15}). \end{cases} \quad (135)$$

Для нейрона выходного слоя:

$$k_{21} = -0,9448 + h_{11} \cdot 1,9450 + h_{12} \cdot 1,7387 + h_{13} \cdot 1,4989 + h_{14} \cdot 0,7857 + h_{15} \cdot 2,9700; \quad (136)$$

$$h_{21} = e^{k_{21}} = \text{EXP}(k_{21}). \quad (137)$$

Преобразование значения в исходный диапазон:

$$y = 19,05 \cdot h_{21} + 66,53. \quad (138)$$

Топология полученной нейронной сети для выходного параметра «Каменноугольная смола» представлена на Рисунке 30.

Обозначим: $x_1 - V^{daf}$; $x_2 - \text{Ив}$; $x_3 - Vt$; $x_4 - \sum OK$; $x_5 - C^{daf}$; $x_6 - \text{сА}$.

Для нейронов входного слоя:

$$\begin{cases} h_{01} = \frac{x_1 - 17,0}{25,0}; \\ h_{02} = \frac{x_2 - 5,0}{147,0}; \\ h_{03} = \frac{x_3 - 3,0}{83,0}; \\ h_{04} = \frac{x_4 - 4}{83,0}; \\ h_{05} = \frac{x_5 - 81,88}{8,58}; \\ h_{06} = \frac{x_6 - 0,6994}{0,1297}. \end{cases} \quad (139)$$

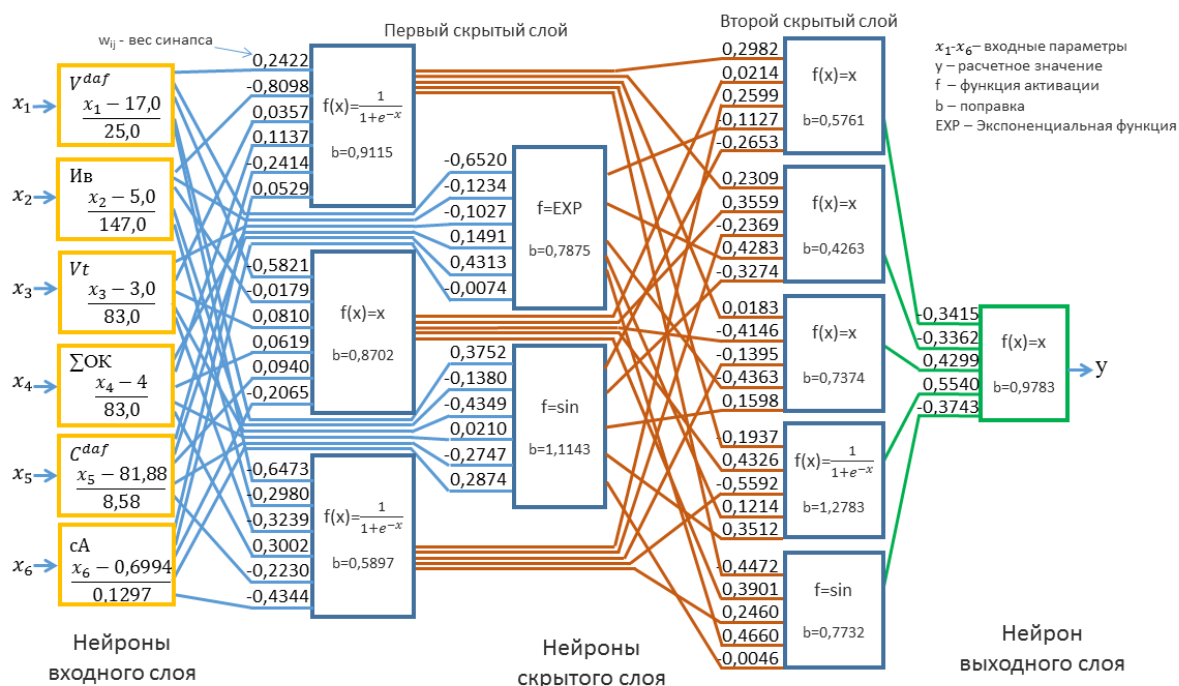


Рисунок 30 – Топология нейронной сети для выходного параметра
«Каменноугольная смола»

Для нейронов первого скрытого слоя:

$$\begin{cases} k_{11} = 0,9115 + h_{01} \cdot (-0,2422) + h_{02} \cdot (-0,8098) + h_{03} \cdot 0,0357 + h_{04} \cdot 0,1137 + h_{05} \cdot (-0,2414) + h_{06} \cdot 0,0529; \\ k_{12} = 0,8702 + h_{01} \cdot (-0,5821) + h_{02} \cdot (-0,0179) + h_{03} \cdot 0,0810 + h_{04} \cdot 0,0619 + h_{05} \cdot 0,0940 + h_{06} \cdot (-0,2065); \\ k_{13} = 0,5897 + h_{01} \cdot (-0,6473) + h_{02} \cdot (-0,298) + h_{03} \cdot (-0,3239) + h_{04} \cdot 0,3002 + h_{05} \cdot (-0,223) + h_{06} \cdot (-0,4344); \\ k_{14} = 0,7875 + h_{01} \cdot (-0,652) + h_{02} \cdot (-0,1234) + h_{03} \cdot (-0,1027) + h_{04} \cdot 0,1491 + h_{05} \cdot 0,4313 + h_{06} \cdot (-0,0074); \\ k_{15} = 1,1143 + h_{01} \cdot 0,3752 + h_{02} \cdot (-0,1380) + h_{03} \cdot (-0,4349) + h_{04} \cdot 0,0210 + h_{05} \cdot (-0,2747) + h_{06} \cdot 0,2874. \end{cases} \quad (140)$$

$$\begin{cases} h_{11} = \frac{1}{e^{-k_{11}} + 1}; \\ h_{12} = k_{12}; \\ h_{13} = \frac{1}{e^{-k_{13}} + 1}; \\ h_{14} = e^{k_{14}}; \\ h_{15} = \sin(k_{15}). \end{cases} \quad (141)$$

Для нейронов второго скрытого слоя:

$$\begin{cases} k_{21} = 0,5761 + h_{21} \cdot 0,2982 + h_{22} \cdot 0,0214 + h_{23} \cdot 0,2599 + h_{24} \cdot (-0,1127) + h_{25} \cdot (-0,2653); \\ k_{22} = 0,4263 + h_{21} \cdot 0,2309 + h_{22} \cdot 0,3559 + h_{23} \cdot (-0,2369) + h_{24} \cdot 0,4283 + h_{25} \cdot (-0,3274); \\ k_{23} = 0,7374 + h_{21} \cdot 0,0183 + h_{22} \cdot (-0,4146) + h_{23} \cdot (-0,1395) + h_{24} \cdot (-0,4363) + h_{25} \cdot 0,1598; \\ k_{24} = 1,2783 + h_{21} \cdot (-0,1937) + h_{22} \cdot 0,4326 + h_{23} \cdot (-0,5592) + h_{24} \cdot 0,1214 + h_{25} \cdot 0,3512; \\ k_{25} = 0,7732 + h_{21} \cdot (-0,4472) + h_{22} \cdot 0,3901 + h_{23} \cdot 0,2460 + h_{24} \cdot 0,4660 + h_{25} \cdot (-0,0046). \end{cases} \quad (142)$$

$$\begin{cases} h_{21} = k_{21}; \\ h_{22} = k_{22}; \\ h_{23} = k_{23}; \\ h_{24} = \frac{1}{e^{-k_{24}} + 1}; \\ h_{25} = \sin(k_{25}). \end{cases} \quad (143)$$

Для нейрона выходного слоя:

$$k_{31} = 0,9783 + h_{31} \cdot (-0,3415) + h_{32} \cdot (-0,3362) + h_{33} \cdot 0,4299 + h_{34} \cdot 0,5540 + h_{35} \cdot (-0,3743); \quad (144)$$

$$h_{31} = k_{31}. \quad (145)$$

Преобразование значения в исходный диапазон:

$$y = 4,95 \cdot h_{31} + 0,99. \quad (146)$$

Топология полученной нейронной сети для выходного параметра «Сырой бензол» представлена на Рисунке 31.

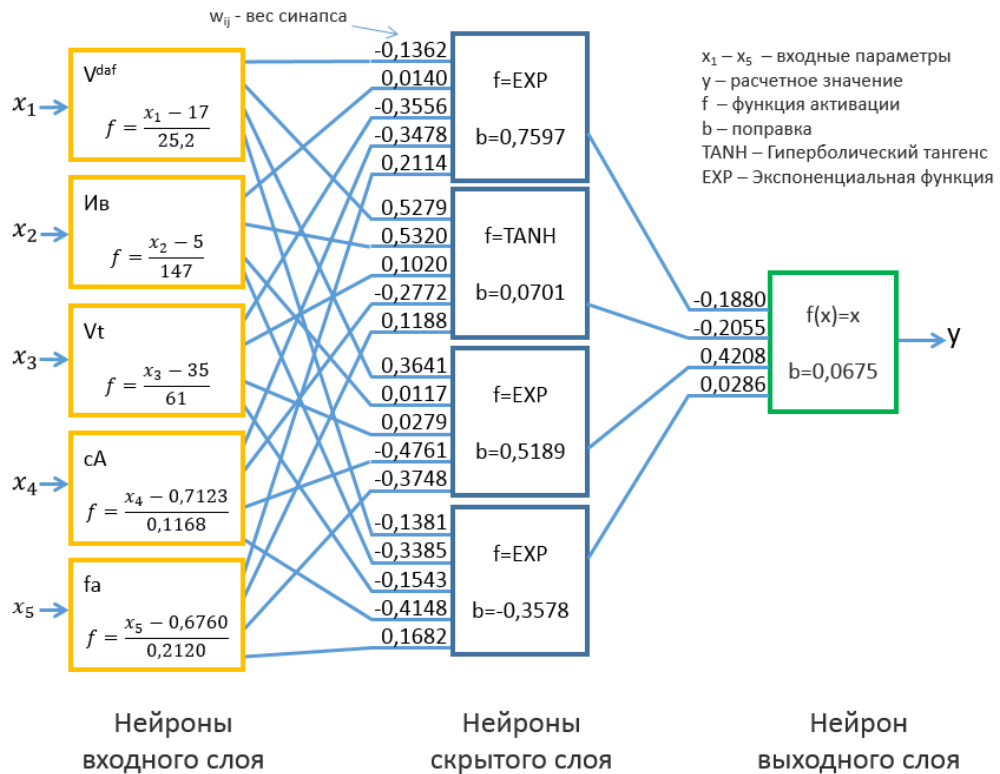


Рисунок 31 – Топология нейронной сети для выходного параметра «Сырой бензол»

Обозначим: $x_1 - V^{daf}$; $x_2 - Ив$; $x_3 - Vt$; $x_4 - cA$; $x_5 - fa$.

Для нейронов входного слоя:

$$\begin{cases} h_{01} = \frac{x_1 - 17}{25,2}; \\ h_{02} = \frac{x_2 - 5}{147}; \\ h_{03} = \frac{x_3 - 35}{61}; \\ h_{04} = \frac{x_4 - 0,7123}{0,1168}; \\ h_{05} = \frac{x_5 - 0,6760}{0,2120}. \end{cases} \quad (147)$$

Для нейронов скрытого слоя (один скрытый слой):

$$\begin{cases} k_{11} = 0,7597 + h_{01} \cdot 0,1362 + h_{02} \cdot 0,0140 + h_{03} \cdot (-0,3556) + h_{04} \cdot (-0,3478) + h_{05} \cdot 0,2114; \\ k_{12} = 0,0701 + h_{01} \cdot 0,5279 + h_{02} \cdot 0,5320 + h_{03} \cdot 0,1020 + h_{04} \cdot (-0,2772) + h_{05} \cdot 0,1188; \\ k_{13} = 0,5189 + h_{01} \cdot 0,3641 + h_{02} \cdot 0,0117 + h_{03} \cdot 0,0279 + h_{04} \cdot (-0,4761) + h_{05} \cdot (-0,3748); \\ k_{14} = 0,3578 + h_{01} \cdot 0,1381 + h_{02} \cdot (-0,3385) + h_{03} \cdot (-0,1543) + h_{04} \cdot (-0,4148) + h_{05} \cdot 0,1682. \end{cases} \quad (148)$$

$$\begin{cases} h_{11} = e^{k_{11}}; \\ h_{12} = \frac{e^{2k_{12}-1}}{e^{2k_{12}+1}} = \text{TANH}(k_{12}); \\ h_{13} = e^{k_{13}}; \\ h_{14} = e^{k_{14}}. \end{cases} \quad (149)$$

Для нейрона выходного слоя:

$$k_{21} = 0,0675 + h_{11} \cdot (-0,1880) + h_{12} \cdot (-0,2055) + h_{13} \cdot 0,4208 + h_{14} \cdot 0,0286; \quad (150)$$

$$h_{21} = k_{21}. \quad (151)$$

Преобразование значения в исходный диапазон:

$$y = 1,6 \cdot h_{21} + 0,4. \quad (152)$$

Топология полученной нейронной сети для выходного параметра «Коксовый газ» представлена на Рисунке 32.

Обозначим: $x_1 - V^{daf}$; $x_2 - \text{Ив}$; $x_3 - Vt$; $x_4 - fa$.

Для нейронов входного слоя:

$$\begin{cases} h_{01} = \frac{x_1-17}{25,2}; \\ h_{02} = \frac{x_2-5}{147}; \\ h_{03} = \frac{x_3-35}{61}; \\ h_{04} = \frac{x_4-0,6760}{0,2120}. \end{cases} \quad (153)$$

Для нейронов скрытого слоя (один скрытый слой):

$$\begin{cases} k_{11} = -0,1706 + h_{01} \cdot 0,4888 + h_{02} \cdot (-0,2070) + h_{03} \cdot (-0,0264) + h_{04} \cdot (-0,0934); \\ k_{12} = -0,0902 + h_{01} \cdot (-0,7052) + h_{02} \cdot 0,0828 + h_{03} \cdot 0,1618 + h_{04} \cdot (-0,0561); \\ k_{13} = 0,5055 + h_{01} \cdot (-0,4662) + h_{02} \cdot 0,2507 + h_{03} \cdot (-0,2970) + h_{04} \cdot 0,4606. \end{cases} \quad (154)$$

$$\begin{cases} h_{11} = \frac{e^{k_{11}}-1}{e^{2k_{11}+1}} = \text{TANH}(k_{11}); \\ h_{12} = \sin(k_{12}); \\ h_{13} = \frac{e^{k_{13}}-1}{e^{2k_{13}+1}} = \text{TANH}(k_{13}). \end{cases} \quad (155)$$

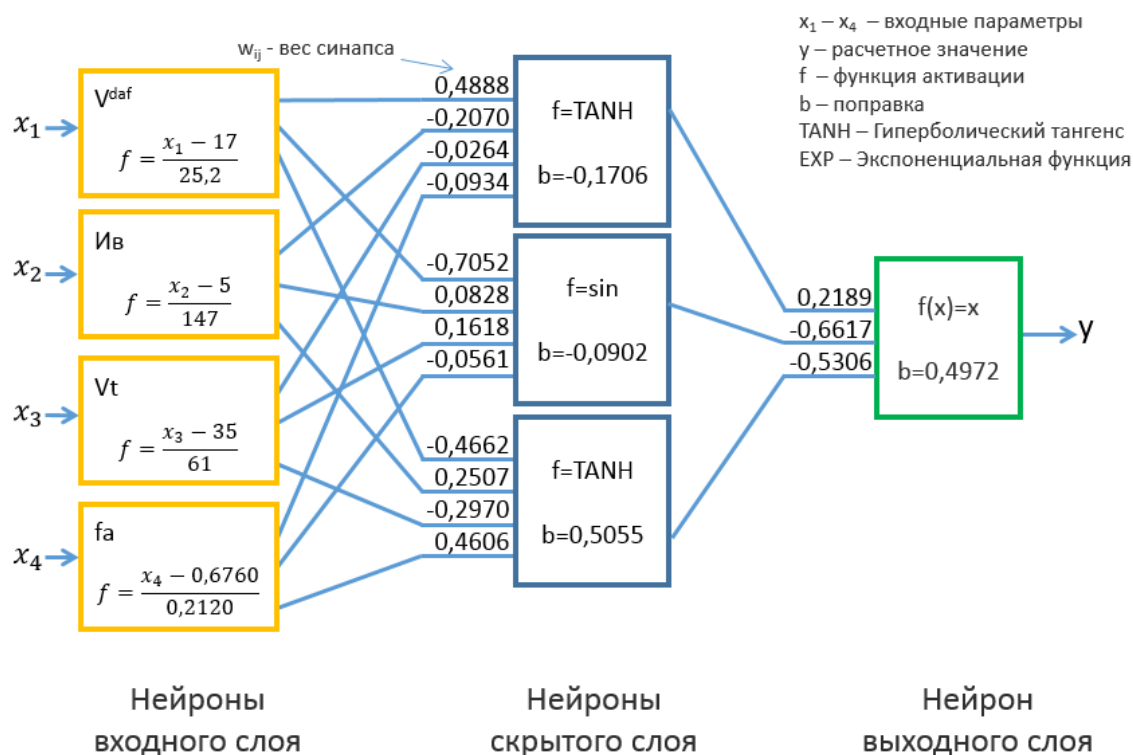


Рисунок 32 – Топология нейронной сети для выходного параметра «Коксовый газ»

Для нейрона выходного слоя:

$$k_{21} = 0,4972 + h_{11} \cdot 0,2189 + h_{12} \cdot (-0,6617) + h_{13} \cdot (-0,5306); \quad (156)$$

$$h_{21} = k_{21}. \quad (157)$$

Преобразование значения в исходный диапазон:

$$y = 8,53 \cdot h_{21} + 8,53. \quad (158)$$

Для разработки программы и реализации алгоритмов искусственных нейронных сетей используется язык программирования C# (написана визуальная часть приложения, а также логика построения нейронной сети) и среда разработки Visual Studio 2013.

На основе результатов исследований создано приложение «Интеллектуальная информационная система прогнозирования выхода продуктов коксования», разделенное на две функциональные части. Первая часть предназначена для создания и обучения нейронных сетей, вторая часть – для прогнозирования с использованием созданных ранее нейронных сетей.

Для работы с нейронными сетями, на главной форме (Рисунок 33) в меню расположены пункты меню «Файл» и «Справка». В пункте меню «Файл» расположены служебные функции: открытие программы создания сети, загрузка созданных сетей, выход из программы. В пункте меню «Справка» находится раздел «О программе», который позволяет узнать версию программы и ее авторов. Для работы программы необходимо открыть 4 сохраненных нейронных сети: «Кокс», «Каменноугольная смола», «Сырой бензол», «Коксовый газ».

Рисунок 33 – Главная форма пользовательского приложения

В верхней части окна выводится средняя относительная ошибка сетей. Под средней относительной ошибкой располагаются поля для ввода значений входных параметров, поле « f_a » рассчитывается автоматически после заполнения полей « C^{daf} » и « V^{daf} ». Ниже находятся две кнопки: «Очистить» и «Рассчитать». Под кнопками выводится значения прогнозируемых выходов кокса, каменноугольной смолы, сырого бензола, коксового газа. Кнопка «Очистить» для очищения ранее введенных значений в разделе формы «Входные параметры». Кнопка «Рассчитать», по введенным значениям в разделе «Входные параметры», запускает расчет с использованием нейронных сетей и выводит в нижнюю часть формы полученные значения.

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 (Рисунок 34).

После заполнения полей «Кол-во нейронов в слое» и «Кол-во слоев», данной приложение позволяет создать сеть по нажатию кнопки «Создать сеть». После заполнения полей «Кол-во эпох» и «Добавлять нейрон после» (если сеть не обучается указанное число эпох, в случайный слой добавляется нейрон) можно начать обучение сети, нажав на кнопку «Обучить сеть».

В процессе обучения нейронной сети на графике расположенном слева отображено изменение средней относительной ошибки. По оси абсцисс – номера эпох, по оси ординат – значения средней относительной ошибки. На графике расположенном справа показывается теоретический ответ (желтые маркеры) и ответ, полученный с помощью нейронной сети (синие маркеры). При прохождении обучения сети, левый и правый графики обновляются.

В верхней части приложения показывается средняя относительная ошибка на обучающей выборке, а также, после обучения сети, по нажатию на кнопку «Проверить», выводится значение средней относительной ошибки на тестовой выборке.

Можно сохранить сеть в файл, нажав на кнопку «Сохранить сеть», а также открыть уже созданную сеть, нажав на кнопку «Открыть сеть».

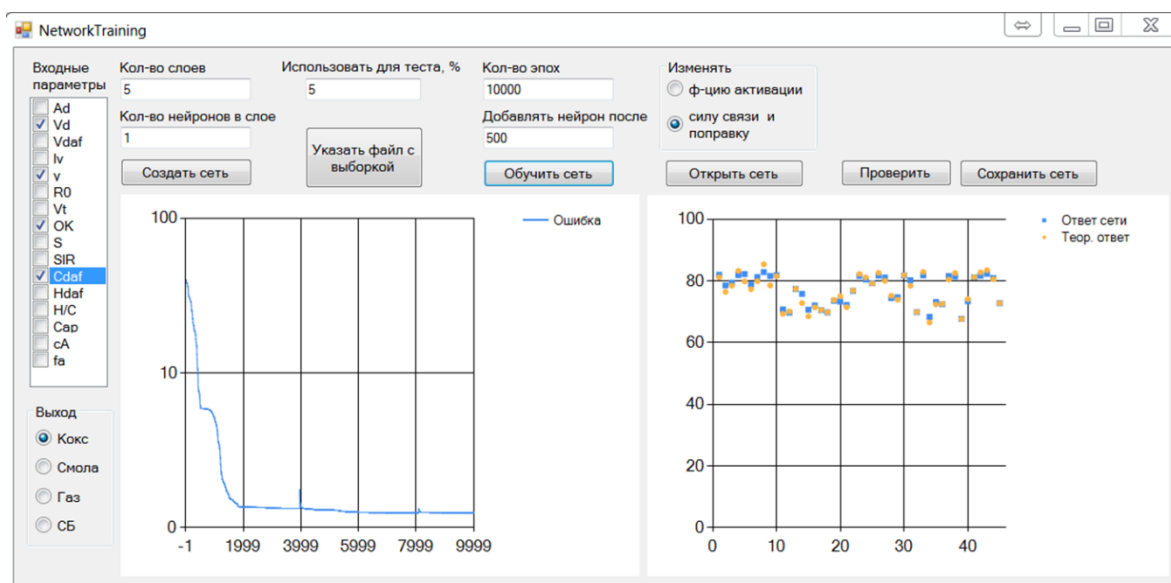


Рисунок 34 – Окно приложения для обучения сети

Характеристика построенных нейронных сетей приведена в Таблице 22.

Таблица 22 – Характеристика построенных нейронных сетей

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

4.4 Проверка математической модели

Для исследуемых углей, представленных в Приложении А, проведено прогнозирование выхода основных химических продуктов коксования с использованием уравнений регрессии, представленных в п. 3.6 (формулы 122-125 соответственно для выхода кокса, каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа). Полученные данные сравнены с экспериментальным определением показателей выхода продуктов коксования с вычислением относительной ошибки прогнозирования (Таблица 23). Для анализируемых углей также проведено прогнозирование с использованием уравнений, указанных в литературных источниках (формулы 31 (УХИН) [57], 21 (УХИН) [63]– для прогнозирования выхода кокса, 52 (УХИН) [57], 55 [66, 67]– каменноугольной смолы, 53 (УХИН) [57], 56 [66, 67] – сырого бензола, 54 (УХИН) [57], 57 [66, 67]– коксового газа). Результаты расчетов представлены в Таблице 24.

Для проверки адекватности нейросетевой математической модели для исследуемых углей, представленных в Приложении А, также проведено прогнозирование выхода основных химических продуктов коксования. Полученные данные сравнены с экспериментальным определением показателей выхода продуктов коксования с вычислением относительной ошибки прогнозирования (Таблица 25).

Таблица 23 – Проверка уравнений регрессии для значений

выхода основных химических продуктов коксования из исследуемых углей

№ п/п	Экспериментальные по ГОСТ 18635-73 [119]				Прогноз по уравнениям регрессии				Относительная ошибка			
	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %
1	85,36	1,19	0,59	9,87	85,37	1,14	0,35	11,52	0,01	4,20	40,68	16,72
2	77,41	4,28	1,04	12,55	77,61	3,85	0,99	15,04	0,26	10,05	4,81	19,84
3	68,49	5,81	1,35	17,78	69,84	4,46	1,18	16,27	1,97	23,24	12,59	8,49
4	71,4	5,22	1,13	16,06	71,95	4,23	1,10	15,72	0,77	18,97	2,65	2,12
5	70,58	5,91	1,12	16,14	69,75	4,54	1,16	16,19	1,18	23,18	3,57	0,31
6	69,88	5,85	1,08	17,18	69,22	4,33	0,94	15,38	0,94	25,98	12,96	10,48
7	73,78	3,63	1,04	14,84	73,71	4,13	0,96	15,33	0,09	13,77	7,69	3,30
8	75,01	3,56	0,90	14,28	74,17	4,12	0,92	14,86	1,12	15,73	2,22	4,06
9	71,47	5,89	1,02	15,60	72,02	4,32	1,07	15,64	0,77	26,66	4,90	0,26
10	76,9	3,78	0,92	13,19	76,61	3,74	0,85	14,24	0,38	1,06	7,61	7,96
11	82,23	1,00	0,41	12,53	82,37	1,76	0,35	11,11	0,17	76,00	14,63	11,33
12	81,12	3,17	0,48	11,50	80,96	2,52	0,47	12,24	0,20	20,50	2,08	6,43
13	79,15	1,75	0,78	13,31	78,53	2,47	0,57	13,22	0,78	41,14	26,92	0,68
14	82,61	1,42	0,40	12,49	82,22	1,79	0,47	12,41	0,47	26,06	17,50	0,64
15	80,02	2,76	0,57	11,88	80,34	2,10	0,53	12,71	0,40	23,91	7,02	6,99
16	75,17	4,00	1,25	15,17	74,71	4,34	1,25	16,81	0,61	8,50	0,00	10,81
17	73,89	3,81	1,07	16,67	73,85	4,24	1,15	15,89	0,05	11,29	7,48	4,68
18	81,81	1,97	0,52	12,39	81,49	1,73	0,46	12,32	0,39	12,18	11,54	0,56
19	85,58	1,19	0,52	10,14	85,76	1,14	0,34	10,81	0,21	4,20	34,62	6,61
20	69,91	4,49	1,07	17,82	68,46	4,49	1,20	16,44	2,07	0,00	12,15	7,74
21	82,87	1,80	0,44	11,61	83,17	1,62	0,41	11,97	0,36	10,00	6,82	3,10
22	66,53	5,94	1,24	18,40	67,17	4,89	1,45	17,72	0,96	17,68	16,94	3,70
23	72,38	4,88	1,15	15,24	73,46	4,09	1,05	15,48	1,49	16,19	8,70	1,57
24	72,54	3,61	1,01	15,60	72,24	4,01	1,03	15,79	0,41	11,08	1,98	1,22
25	80,4	2,55	0,46	13,18	80,29	2,25	0,44	12,02	0,14	11,76	4,35	8,80
26	82,52	1,57	0,51	11,90	81,11	1,89	0,52	12,58	1,71	20,38	1,96	5,71
27	67,63	4,69	1,31	17,73	66,95	4,85	1,48	17,42	1,01	3,41	12,98	1,75
28	74,08	3,64	0,98	15,45	73,84	4,05	1,02	15,25	0,32	11,26	4,08	1,29
29	81,18	2,12	0,49	11,79	81,05	2,12	0,49	11,79	0,16	0,00	0,00	0,00
30	82,77	1,16	0,53	12,39	82,19	1,63	0,41	11,76	0,70	40,52	22,64	5,08
31	83,46	0,99	0,51	11,91	83,35	1,43	0,44	11,84	0,13	44,44	13,73	0,59
32	80,53	1,49	0,49	11,96	80,81	2,01	0,50	12,37	0,35	34,90	2,04	3,43
33	72,77	3,07	1,21	15,47	73,19	4,18	1,11	15,83	0,58	36,16	8,26	2,33
Средняя относительная ошибка расчетной выборки									0,63	18,65	12,59	6,22

Таблица 24 – Проверка уравнений, указанных в литературных источниках, для значений выхода основных химических продуктов коксования из исследуемых углей

№ п/п	Экспериментальные по ГОСТ 18635-73 [119]				Прогноз по уравнениям, указанным в литературных источниках				Относительная ошибка			
	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %	(31) K ^d , %	(52) T _K ^d , %	(53) C ₆ H ₆ ^d , %	(54) G _K ^d , %	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %
1	85,36	1,19	0,59	9,87	88,70	3,67	0,74	9,38	3,92	208,35	25,74	5,00
2	77,41	4,28	1,04	12,55	106,39	10,65	1,64	15,07	37,43	148,77	57,47	20,07
3	68,49	5,81	1,35	17,78	89,08	12,05	1,65	15,22	30,06	107,36	22,30	14,37
4	71,4	5,22	1,13	16,06	94,21	11,34	1,62	15,00	31,94	117,28	43,21	6,62
5	70,58	5,91	1,12	16,14	90,06	12,14	1,67	15,33	27,60	105,46	48,79	5,04
6	69,88	5,85	1,08	17,18	89,61	10,69	1,52	14,38	28,24	82,79	41,14	16,27
7	73,78	3,63	1,04	14,84	93,34	10,74	1,55	14,57	26,51	195,85	49,51	1,80
8	75,01	3,56	0,90	14,28	97,06	10,37	1,55	14,49	29,40	191,36	71,78	1,50
9	71,47	5,89	1,02	15,60	98,09	11,39	1,65	15,19	37,25	93,36	61,64	2,61
10	76,9	3,78	0,92	13,19	104,00	9,65	1,53	14,31	35,24	155,22	66,13	8,51
11	82,23	1,00	0,41	12,53	89,87	4,05	0,81	9,72	9,30	305,28	96,39	22,39
12	81,12	3,17	0,48	11,50	90,89	6,08	1,05	11,28	12,05	91,85	119,66	1,87
13	79,15	1,75	0,78	13,31	85,40	6,33	1,03	11,23	7,90	261,63	31,83	15,63
14	82,61	1,42	0,40	12,49	85,62	4,99	0,87	10,26	3,64	251,56	117,73	17,88
15	80,02	2,76	0,57	11,88	86,62	5,76	0,97	10,87	8,25	108,53	70,81	8,54
16	75,17	4,00	1,25	15,17	100,28	12,43	1,76	15,94	33,40	210,71	40,64	5,07
17	73,89	3,81	1,07	16,67	114,99	11,72	1,79	16,12	55,62	207,54	67,34	3,30
18	81,81	1,97	0,52	12,39	85,76	4,87	0,86	10,17	4,83	147,37	64,96	17,89
19	85,58	1,19	0,52	10,14	88,96	2,99	0,66	8,85	3,96	151,36	26,28	12,70
20	69,91	4,49	1,07	17,82	88,03	12,14	1,65	15,24	25,92	170,44	54,52	14,48
21	82,87	1,80	0,44	11,61	85,24	4,40	0,79	9,79	2,85	144,55	80,06	15,64
22	66,53	5,94	1,24	18,40	86,17	13,88	1,80	16,23	29,52	133,72	45,50	11,78
23	72,38	4,88	1,15	15,24	95,20	10,92	1,59	14,77	31,53	123,85	37,86	3,08
24	72,54	3,61	1,01	15,6	86,81	10,69	1,50	14,27	19,67	196,21	48,98	8,56
25	80,4	2,55	0,46	13,18	90,45	5,71	1,01	11,00	12,50	124,11	119,23	16,55
26	82,52	1,57	0,51	11,90	86,41	5,35	0,92	10,56	4,71	240,86	81,05	11,27
27	67,63	4,69	1,31	17,73	88,44	13,74	1,80	16,24	30,77	192,87	37,72	8,41
28	74,08	3,64	0,98	15,45	94,27	10,74	1,56	14,61	27,26	195,04	59,33	5,42
29	81,18	2,12	0,49	11,79	90,57	5,51	0,99	10,85	11,56	160,02	101,35	7,94
30	82,77	1,16	0,53	12,39	87,58	4,25	0,80	9,78	5,81	266,05	51,12	21,10
31	83,46	0,99	0,51	11,91	87,58	4,25	0,80	9,78	4,94	328,91	57,04	17,93
32	80,53	1,49	0,49	11,96	88,30	5,27	0,93	10,58	9,65	253,78	90,65	11,54
33	72,77	3,07	1,21	15,47	94,20	11,39	1,62	15,03	29,45	270,97	34,10	2,87
Средняя относительная ошибка расчетной выборки									20,38	180,09	61,27	10,41

Продолжение Таблицы 24

№ п/п	Прогноз по уравнени- ям, указанным в лите- ратурных источниках				Относительная ошибка			
	(21) K^d , %	(55) T_K^d , %	(56) $C_6H_6^d$, %	(57) G_K^d , %	K^d , %	T_K^d , %	$C_6H_6^d$, %	G_K^d , %
1	81,70	2,42	1,14	9,46	4,29	103,04	94,01	4,11
2	70,08	4,42	1,57	15,65	9,47	3,34	51,15	24,69
3	67,98	5,35	1,86	16,57	0,74	7,97	37,88	6,83
4	69,03	4,85	1,70	16,09	3,32	7,15	50,74	0,21
5	67,84	5,54	1,92	16,73	3,88	6,32	71,61	3,66
6	70,01	4,81	1,69	16,06	0,19	17,73	56,73	6,52
7	69,94	4,65	1,64	15,89	5,20	27,99	57,77	7,07
8	70,50	4,07	1,46	15,23	6,01	14,25	62,65	6,64
9	68,96	4,88	1,71	16,13	3,51	17,13	68,04	3,39
10	71,62	3,82	1,39	14,91	6,87	1,13	51,20	13,03
11	81,00	2,38	1,12	9,84	1,50	138,38	172,10	21,45
12	77,43	2,51	1,06	11,99	4,55	20,75	120,85	4,27
13	77,01	2,55	1,06	12,16	2,70	45,57	36,52	8,67
14	79,32	2,37	1,07	10,71	3,98	66,68	167,26	14,28
15	77,99	2,43	1,05	11,49	2,54	12,00	84,95	3,30
16	67,42	5,50	1,91	16,70	10,31	37,45	52,78	10,07
17	68,47	5,73	1,98	16,90	7,34	50,45	85,50	1,35
18	79,53	2,40	1,06	11,19	2,79	21,61	103,19	9,70
19	82,96	2,46	1,18	9,08	3,06	107,02	126,80	10,48
20	67,84	5,89	2,04	17,03	2,96	31,24	90,34	4,45
21	80,37	2,36	1,07	10,57	3,02	31,33	144,16	8,93
22	65,32	7,03	2,41	17,86	1,82	18,33	94,18	2,93
23	69,66	4,58	1,62	15,82	3,76	6,12	40,93	3,81
24	70,01	4,71	1,66	15,96	3,49	30,53	64,49	2,30
25	78,06	2,44	1,05	11,57	2,91	4,30	129,20	12,19
26	78,69	2,38	1,06	11,01	4,64	51,71	107,82	7,44
27	65,53	6,84	2,35	17,73	3,11	45,92	79,15	0,02
28	69,94	4,39	1,56	15,61	5,59	20,66	59,43	1,06
29	78,41	2,41	1,05	11,36	3,41	13,83	115,24	3,65
30	80,65	2,36	1,09	10,30	2,56	103,82	105,12	16,85
31	80,65	2,37	1,10	10,12	3,37	139,33	115,19	15,03
32	78,83	2,40	1,06	11,23	2,11	61,05	115,51	6,09
33	68,96	4,88	1,71	16,13	5,24	58,98	41,66	4,26
Средняя относительная ошибка расчетной выборки					3,95	40,10	86,49	7,54

Таблица 25 – Проверка нейросетевой математической модели для значений выхода основных химических продуктов коксования из исследуемых углей

№ п/п	Экспериментальные по ГОСТ 18635-73 [119]				Прогноз по нейросетевой математической модели				Относительная ошибка			
	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %
1	85,36	1,19	0,59	9,87	85,37	1,14	0,45	11,52	0,01	4,20	23,73	16,72
2	77,41	4,28	1,04	12,55	77,61	3,85	0,97	15,04	0,26	10,05	6,73	19,84
3	68,49	5,81	1,35	17,78	69,84	4,46	1,18	16,27	1,97	23,24	12,59	8,49
4	71,4	5,22	1,13	16,06	71,95	4,23	1,10	15,72	0,77	18,97	2,65	2,12
5	70,58	5,91	1,12	16,14	69,75	4,54	1,16	16,19	1,18	23,18	3,57	0,31
6	69,88	5,85	1,08	17,18	69,22	4,33	0,93	15,38	0,94	25,98	13,89	10,48
7	73,78	3,63	1,04	14,84	73,71	4,13	0,94	15,33	0,09	13,77	9,62	3,30
8	75,01	3,56	0,90	14,28	74,17	4,12	0,91	14,86	1,12	15,73	1,11	4,06
9	71,47	5,89	1,02	15,60	72,02	4,32	1,06	15,64	0,77	26,66	3,92	0,26
10	76,9	3,78	0,92	13,19	76,61	3,74	0,83	14,24	0,38	1,06	9,78	7,96
11	82,23	1,00	0,41	12,53	82,37	1,76	0,50	11,11	0,17	76,00	21,95	11,33
12	81,12	3,17	0,48	11,50	80,96	2,52	0,52	12,24	0,20	20,50	8,33	6,43
13	79,15	1,75	0,78	13,31	78,53	2,47	0,62	13,22	0,78	41,14	20,51	0,68
14	82,61	1,42	0,40	12,49	82,22	1,79	0,53	12,41	0,47	26,06	32,50	0,64
15	80,02	2,76	0,57	11,88	80,34	2,10	0,57	12,71	0,40	23,91	0,00	6,99
16	75,17	4,00	1,25	15,17	74,71	4,34	1,26	16,81	0,61	8,50	0,80	10,81
17	73,89	3,81	1,07	16,67	73,85	4,24	1,16	15,89	0,05	11,29	8,41	4,68
18	81,81	1,97	0,52	12,39	81,49	1,73	0,53	12,32	0,39	12,18	1,92	0,56
19	85,58	1,19	0,52	10,14	85,76	1,14	0,53	10,81	0,21	4,20	1,92	6,61
20	69,91	4,49	1,07	17,82	68,46	4,49	1,20	16,44	2,07	0,00	12,15	7,74
21	82,87	1,80	0,44	11,61	83,17	1,62	0,51	11,97	0,36	10,00	15,91	3,10
22	66,53	5,94	1,24	18,40	67,17	4,89	1,51	17,72	0,96	17,68	21,77	3,70
23	72,38	4,88	1,15	15,24	73,46	4,09	1,04	15,48	1,49	16,19	9,57	1,57
24	72,54	3,61	1,01	15,6	72,24	4,01	1,00	15,79	0,41	11,08	0,99	1,22
25	80,4	2,55	0,46	13,18	80,29	2,25	0,48	12,02	0,14	11,76	4,35	8,80
26	82,52	1,57	0,51	11,90	81,11	1,89	0,58	12,58	1,71	20,38	13,73	5,71
27	67,63	4,69	1,31	17,73	66,95	4,85	1,53	17,42	1,01	3,41	16,79	1,75
28	74,08	3,64	0,98	15,45	73,84	4,05	1,00	15,25	0,32	11,26	2,04	1,29
29	81,18	2,12	0,49	11,79	81,05	2,12	0,56	11,79	0,16	0,00	14,29	0,00
30	82,77	1,16	0,53	12,39	82,19	1,63	0,54	11,76	0,70	40,52	1,89	5,08
31	83,46	0,99	0,51	11,91	83,35	1,43	0,54	11,84	0,13	44,44	5,88	0,59
32	80,53	1,49	0,49	11,96	80,81	2,01	0,58	12,37	0,35	34,90	18,37	3,43
33	72,77	3,07	1,21	15,47	73,19	4,18	1,10	15,83	0,58	36,16	9,09	2,33
Средняя относительная ошибка тестовой выборки									0,64	19,53	10,02	5,11

На основании проведенных расчетов можно заключить, что наименьшая средняя относительная ошибка наблюдается для нейросетевой математической модели.

Для проверки адекватности нейросетевых математических моделей экспериментальным данным применен критерий Фишера. Для определения его расчетного значения рассчитаны [148]:

– дисперсия адекватности $\hat{s}^2$ [148]:

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^n (\tau_i - \hat{\tau}_i)^2; \quad (159)$$

где τ_i – значение экспериментальной характеристики; $\hat{\tau}_i$ – значение расчетной характеристики; n – объем выборки; p – число оцениваемых параметров модели.

Для расчетов взяты значения экспериментальных и расчетных значений выходов кокса, каменноугольной смолы, сырого бензола и коксового газа, приведенные в Таблице 25. Значения дисперсии адекватности составили соответственно: $\hat{s}_{K^d}^2 = 0,43$; $\hat{s}_{T_{K^d}}^2 = 0,63$; $\hat{s}_{C_6H_6^d}^2 = 0,01$; $\hat{s}_{G_{K^d}}^2 = 0,98$.

– дисперсия воспроизводимости s^2 [148]:

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\tau_i - \tau_{cp})^2; \quad (160)$$

где τ_{cp} – среднее значение экспериментальной характеристики.

Значения дисперсии воспроизводимости составили соответственно: $s_{K^d}^2 = 31,37$; $s_{T_{K^d}}^2 = 2,74$; $s_{C_6H_6^d}^2 = 0,10$; $s_{G_{K^d}}^2 = 5,65$.

Рассчитаем критерий Фишера F_p при условии $s^2 > \hat{s}^2$ [148]:

$$F_p = \frac{s^2}{\hat{s}^2}. \quad (161)$$

Значение критерия Фишера составило: $Fp_{K^d} = 72,95$; $Fp_{T_{K^d}} = 4,35$; $Fp_{C_6H_6^d} = 10,00$; $Fp_{G_{K^d}} = 5,77$.

Табличные значения критерия Фишера для заданного уровня значимости $\alpha=0,05$ составили [149]: $F_{T_{K^d}} = 2,92$; $F_{T_{T_{K^d}}} = 2,53$; $F_{T_{C_6H_6^d}} = 2,53$; $F_{T_{G_{K^d}}} = 2,92$.

Поскольку соответствующее расчетное значение F_p больше F_t , то нейросетевые математические модели адекватны.

На основе данных ПАО «Кокс» о суточной шихте из исследуемых углей составлены экспериментальные угольные смеси, для которых определен выход химических продуктов коксования, который сравнен с рассчитанным по правилу аддитивности [17] из прогнозных значений. Состав экспериментальных угольных смесей представлен в Таблице 26. Результаты определения выхода химических продуктов коксования для экспериментальных угольных смесей, их прогнозные значения, рассчитанные по правилу аддитивности [17] из прогнозных значений для исследуемых углей представлены в Таблице 27.

Таблица 26 – Состав экспериментальных угольных смесей из исследуемых углей

№ п/п	Наименование пробы	Марка	Доля угля в смеси, %
Смесь 1 (шихта 3 бат., 1 смена от 15.06.16)			
1	ОФ «СУЭК-Кузбасс» (ш. «Шахта им. Кирова»), п. 35/06	Г	20
2	ЦОФ «Березовская» (ш. «Ерунаковская»), п. 33/282А	ГЖ	15
3	УК «Северный Кузбасс» (ОФ «Северная»), п. 38/237	К	40
4	ЦОФ «Березовская» (ш. «Анжерская-Южная» - 60 % + ш. «Бутовская» - 40 %), п. 43/289В	ОС+КО	25
Смесь 2 (шихта 3 бат., 1 смена от 07.04.16)			
23	ОФ «Распадская» (ш. «Абашевская»), п. 3/04	ГЖ	15
24	ЦОФ «Березовская» (ш. «Усковская»), п. 17/165А	ГЖ	20
25	УК «Северный Кузбасс» (ОФ «Северная»), п. 12/159	К	40
26	ЦОФ «Березовская» («ш. Бутовская»), п. 15/161	КО	25

Таблица 27 – Проверка нейросетевой математической модели при составлении смесей из исследуемых углей

Значение	K ^d , %	T _K ^d , %	NH ₃ ^d , %	W _K ^d , %	H ₂ S ^d , %	CO ₂ ^d , %	C _m H _n ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %
Смесь 1 (шихта 3 батарея, 1 смена от 15.06.16)									
Экспериментальное (по ГОСТ 18635-73) [119]	77,6	2,49	0,46	3,49	0,25	0,55	0,68	0,80	13,68
Прогнозируемое по модели	77,43	2,83	–	–	–	–	–	0,82	13,43
Относительная ошибка	0,22	13,65	–	–	–	–	–	2,50	1,83
Смесь 2 (шихта 3 батарея, 1 смена от 07.04.16)									
Экспериментальное (по ГОСТ 18635-73) [119]	78,6	2,15	0,51	3,03	0,19	0,69	0,66	0,79	13,38
Прогнозируемое по модели	77,86	2,79	–	–	–	–	–	0,69	13,43
Относительная ошибка	0,94	29,77	–	–	–	–	–	12,66	0,37

Для проверки возможности использования нейросетевой математической модели в практике коксохимических заводов составлены экспериментальные угольные смеси, состав которых моделирует среднемесячные расходы углей на процесс высокотемпературного коксования (на основе данных ПАО «Кокс»)[150].

Для этого проведен анализ углей, входящих в смеси для определения показателей их качества и оценки выхода химических продуктов коксования, результаты которого приведены в [150]. Для исследуемых проб проведено дополнительное исследование с целью уточнения показателей технического анализа и выхода химических продуктов коксования. Полученные результаты представлены в Таблице 28.

Таблица 28 – Результаты анализа качества углей

№ п/п	Наименование пробы	Марка
1	ОФ «Абашевская», п 78/225	ГЖ
2	ОФ «Абашевская», п. 96/260	ГЖ
3	Ш. «Усковская», п.82/562	ГЖ
4	ОФ «Распадская» п.79/944	ГЖ
5	ЦОФ «Березовская» (ш. Карагайлинская)	Ж
6	ОФ «Антоновская»	ГЖ+Ж
7	ОФ «Коксовая» п.74/197	К
8	УК «Северный Кузбасс» п.83/182	К
9	Разрез «Апсатский» п.25/468А	К
10	ОФ «Прокопьевская» п.80/09	К
11	ОФ «Прокопьевская», п.17/10	КО
12	Разрез «Участок «Коксовый»» п.72/180	К
13	Разрез «Участок «Коксовый»» п. 70/170	КС
14	Ш. «Анжерская-Южная» (обогащенная проба)	КО
15	Ш. «Бутовская» п.8/522	КО

Продолжение таблицы 28

№ п/п	A ^d , %	V ^d , %	V ^{daf} , %	Ив, мм	x, мм	y, мм	Ro,r, %	Vt, %	I, %	ΣOK, %
1	7,4	35,4	38,2	127	37	24	0,787	92	6	7
2	7,9	31,6	34,3	119	36	18	0,790	83	13	16
3	4,8	35,1	36,9	111	35	17	0,856	82	16	18
4	8,2	34,5	37,6	121	43	20	0,853	89	11	11
5	8,7	32,7	35,8	134	11	24	0,828	78	21	22
6	6,7	32,9	35,3	132	-	24	0,790	89	9	11
7	9,5	18,0	19,9	44	40	14	1,434	58	46	40
8	8,9	22,8	25,0	37	44	13	1,064	58	35	40
9	9,6	25,7	28,4	92	26	17	1,144	64	31	34
10	8,0	25,8	28,0	17	39	13	1,174	41	53	57
11	9,7	21,2	23,5	6	37	10	1,013	42	48	57
12	7,5	20,9	22,6	67	26	15	1,375	48	43	50
13	6,2	19,3	20,6	15	38	11	1,351	40	51	57
14	8,7	17,1	18,8	7	32	11	1,311	13	86	87
15	10,0	22,9	25,4	20	44	12	1,269	50	47	48

Продолжение таблицы 28

№ п/п	S ^d , %	P ^d , %	SI	C ^{daf} , %	H ^{daf} , %	H/C	Сар	сА	fa	K ^d , %	T _K ^d , %
1	0,41	0,038	7½	83,86	5,63	0,81	17,67	0,75	0,71	69,31	4,73
2	0,48	0,040	6½	82,16	5,46	0,80	15,66	0,74	0,77	70,08	4,44
3	0,44	0,030	6½	81,88	6,78	0,99	15,36	0,70	0,75	70,05	5,95
4	0,60	0,056	7½	85,49	5,62	0,79	20,03	0,76	0,71	72,23	3,80
5	0,58	0,038	9	86,15	5,51	0,77	21,15	0,77	0,72	72,80	4,72
6	0,50	0,050	8	83,72	5,50	0,79	17,48	0,75	0,75	72,11	5,26
7	0,38	0,036	4	89,56	4,77	0,64	29,17	0,82	0,87	83,25	1,97
8	0,32	0,040	3	86,83	5,22	0,72	22,42	0,79	0,84	78,44	2,97
9	0,37	0,014	6½	86,99	4,49	0,62	22,73	0,81	0,80	77,32	3,27
10	0,33	0,057	½	85,72	4,96	0,69	20,41	0,79	0,81	76,42	3,17
11	0,34	0,059	½	88,75	4,61	0,62	26,82	0,82	0,83	78,52	1,94
12	0,27	0,053	6	89,71	4,91	0,66	29,64	0,81	0,83	81,15	1,83
13	0,34	0,018	1	88,95	4,58	0,62	27,37	0,82	0,86	81,51	2,26
14	0,37	0,005	1	90,02	4,74	0,63	30,67	0,82	0,87	85,36	1,19
15	0,42	0,008	1	88,93	4,73	0,64	27,31	0,81	0,81	79,90	2,93

Продолжение таблицы 28

№ п/п	NH ₃ ^d , %	W _K ^d , %	H ₂ S ^d , %	CO ₂ ^d , %	C _m H _n ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %	A ^d коксо- вого ос- татка, %	V ^{daf} кок- сового остатка, %	Коз
1	0,72	5,82	0,27	0,98	0,69	1,26	16,22	10,9	2,1	1,5
2	0,69	4,90	0,23	0,98	1,00	1,05	16,63	11,0	2,6	1,4
3	0,69	4,54	0,23	0,99	0,71	0,99	15,85	6,9	2,3	1,4
4	0,45	5,14	0,35	0,82	0,64	1,01	15,56	11,5	2,2	1,4
5	0,55	3,32	0,36	0,66	0,79	1,11	15,69	13,6	2,4	1,6
6	0,81	3,55	0,25	0,92	0,63	1,04	15,43	-	-	-
7	0,53	2,01	0,24	0,62	0,15	0,51	10,72	9,7	2,3	1,0
8	0,66	2,79	0,15	0,92	0,34	0,60	13,13	11,1	1,8	1,2
9	0,40	3,58	0,23	0,83	0,21	0,65	13,50	13,1	2,2	1,4
10	0,67	3,95	0,14	1,14	0,44	0,59	13,48	10,4	1,3	1,3
11	0,55	4,44	0,17	1,01	0,19	0,60	12,58	11,2	2,4	1,2
12	0,53	2,47	0,12	0,88	0,16	0,45	12,41	9,4	2,4	1,3
13	0,61	1,39	0,19	0,84	0,11	0,42	12,67	7,7	2,0	1,2
14	0,47	1,75	0,22	0,41	0,14	0,59	9,87	10,8	2,5	1,2
15	0,56	2,83	0,24	0,49	0,04	0,55	12,46	12,6	2,2	1,3

Для проверки адекватности нейросетевой математической модели для представленных выше углей также проведено прогнозирование выхода основных хи-

мических продуктов коксования. Полученные данные сравнены с экспериментальным определением показателей выхода продуктов коксования с вычислением относительной ошибки прогнозирования (Таблица 29).

Таблица 29 – Проверка нейросетевой математической модели для значений выхода основных химических продуктов коксования из углей, входящих в смеси

№ п/п	Экспериментальные по ГОСТ 18635-73 [119]				Прогноз по нейросетевой математической модели				Относительная ошибка			
	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H ₆ ^d , %	G _K ^d , %
1	69,31	4,73	1,26	16,22	68,8	4,48	1,16	16,18	0,74	5,29	9,57	0,67
2	70,08	4,44	1,05	16,63	70,01	4,24	0,87	14,7	0,10	4,50	17,14	11,61
3	70,05	5,95	0,99	15,85	68,23	4,27	1,13	15,71	2,60	28,24	14,14	0,88
4	72,23	3,80	1,01	15,56	72,86	4,24	1,13	16,15	0,87	11,58	11,88	3,79
5	72,80	4,72	1,11	15,69	72,99	4,00	0,97	15,33	0,26	15,25	12,61	2,29
6	72,11	5,26	1,04	15,43	70,95	4,22	0,95	15,04	1,61	19,77	8,65	2,53
7	83,25	1,97	0,51	10,72	82,36	1,62	0,53	11,33	1,07	17,77	3,92	5,69
8	78,44	2,97	0,60	13,13	79,38	2,45	0,62	12,82	1,20	17,51	3,33	2,36
9	77,32	3,27	0,65	13,50	77,31	3,10	0,59	13,31	0,01	5,20	9,23	1,41
10	76,42	3,17	0,59	13,48	76,63	2,80	0,64	13,92	0,27	11,67	8,47	3,26
11	78,52	1,94	0,60	12,58	80,73	1,93	0,56	12,80	2,81	0,52	6,67	1,75
12	81,15	1,83	0,45	12,41	80,44	1,91	0,49	11,92	0,87	4,37	8,89	3,95
13	81,51	2,26	0,42	12,67	81,85	1,64	0,52	11,83	0,42	27,43	23,81	6,63
14	85,36	1,19	0,59	9,87	85,37	1,14	0,45	11,52	0,01	4,20	23,73	16,72
15	79,90	2,93	0,55	12,46	79,77	2,18	0,58	13,26	0,16	25,60	5,45	6,42
Средняя относительная ошибка тестовой выборки									0,87	13,26	11,17	4,66

Экспериментальные угольные смеси, составленные на основе данных ПАО «Кокс» о среднемесячном расходе углей на коксование, представлены в Таблице 30. Результаты определения выхода химических продуктов коксования для исследуемых смесей представлены в Таблице 31.

Таблица 30 – Составы экспериментальных угольных смесей

№ п/п	Поставщик	Марка	Содержание в опытной смеси, %				
			Январь 2015	Февраль 2015	Март 2015	Апрель 2015	Май 2015
1	ОФ «Абашевская», п. 78/225	ГЖ	19,19	-	1,80	3,15	1,36
2	ОФ «Абашевская», п. 96/260	ГЖ	-	19,36	10,01	6,04	5,93
3	Ш. «Усковская», п. 82/562	ГЖ	8,76	12,18	19,31	19,49	19,57
4	ОФ «Распадская», п. 79/944	ГЖ	8,68	7,52	5,98	4,54	8,13
5	ЦОФ «Березовская» (ш. Карагайлинская)	Ж	3,59	2,76	7,12	6,92	7,00
6	ОФ «Антоновская»	ГЖ+Ж	1,86	-	-	1,94	0,95
7	ОФ «Коксовая», п. 74/197	К	1,83	3,34	8,64	7,51	2,99
8	УК «Северный Кузбасс», п. 83/182	К	6,62	11,78	6,23	10,26	5,37
9	Разрез «Апсатский», п. 25/468А	К	7,43	3,19	0,56	1,96	1,96
10	ОФ «Прокопьевская», п. 80/09	К	8,35	11,04	9,51	8,20	6,98
11	ОФ «Прокопьевская», п. 17/10	КО	4,69	4,07	1,83	4,79	2,82
12	Разрез «Участок «Коксовый»», п. 72/180	К	9,77	7,71	10,49	12,48	13,07
13	Разрез «Участок «Коксовый»», п. 70/170	КС	1,85	2,04	2,08	1,99	0,94
14	Ш. «Анжеро-Южная»	КО	6,94	3,09	2,28	2,27	5,73
15	Ш. «Бутовская», п. 8/522	КО	10,44	11,92	14,16	8,46	17,20

Таблица 31 – Выход химических продуктов коксования их экспериментальных угольных смесей

Наименование смеси	K^d , %	T_K^d , %	NH_3^d , %	W_K^d , %	H_2S^d , %	CO_2^d , %	$C_mH_n^d$, %	$C_6H_6^d$, %	G_K^d , %
Январь 2015	76,81	3,45	0,55	4,13	0,20	0,93	0,66	0,85	12,42
Февраль 2015	75,46	3,17	0,54	3,61	0,24	0,87	0,79	0,97	14,35
Март 2015	75,67	3,38	0,56	3,42	0,23	0,86	0,74	1,17	13,97
Апрель 2015	75,91	3,52	0,59	3,53	0,22	0,74	0,72	1,03	13,74
Май 2015	76,42	3,34	0,57	3,70	0,24	0,75	0,69	1,02	13,27

Прогнозируемые значения выхода химических продуктов коксования для экспериментальных угольных смесей, рассчитанные по правилу аддитивности [17] из прогнозных значений для исследуемых углей, а также их относительная ошибка от экспериментальных и производственных значений представлены в Таблице 32. После знака дроби в столбце « G_K^d » указана сумма выхода коксового газа, пирогенетической воды, сероводорода, углекислого газа и непредельных углеводородов.

Таблица 32 – Проверка нейросетевой математической модели для экспериментальных и производственных значений выхода химических продуктов коксования для угольных смесей

Значение	K ^d , %	T _K ^d , %	C ₆ H 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	–

Относительная ошибка значений, рассчитанных по модели, от производственных выходов основных химических продуктов коксования на примере кокса, каменноугольной смолы и сырого бензола примерно одинакова в течение всего периода наблюдений, что может объясняться различиями протекания процесса

коксования в лабораторных и производственных условиях (разницатемпературных режимов, скорость протекания процесса пиролиза, дополнительный пиролиз летучих продуктов в подсводовом пространстве коксовых печей). Кроме этого, сырой бензол, полученный в промышленных условиях включает непредельные соединения, что дает увеличение его выхода по сравнению с лабораторными значениями.

Также проведена проверка адекватности полученной нейросетевой математической модели с использованием критерия Фишера для 47 значений результатов исследований углей и их смесей, представленных в Приложении А и Таблице 28.

Значения дисперсии адекватности составили соответственно (формула 159): $\hat{s}^2_{K^d} = 0,58$; $\hat{s}^2_{T_{K^d}} = 0,56$; $\hat{s}^2_{C_6H_6^d} = 0,01$; $\hat{s}^2_{G_{K^d}} = 0,82$.

Значения дисперсии воспроизводимости составили соответственно (формула 160): $s^2_{K^d} = 28,34$; $s^2_{T_{K^d}} = 2,42$; $s^2_{C_6H_6^d} = 0,09$; $s^2_{G_{K^d}} = 4,88$.

Значение критерия Фишера составило (формула 161): $Fp_{K^d} = 48,86$; $Fp_{T_{K^d}} = 4,32$; $Fp_{C_6H_6^d} = 9,00$; $Fp_{G_{K^d}} = 5,95$.

Табличные значения критерия Фишера для заданного уровня значимости $\alpha=0,05$ составили [149]: $F_{T_{K^d}} = 2,84$; $F_{T_{T_{K^d}}} = 2,45$; $F_{T_{C_6H_6^d}} = 2,45$; $F_{T_{G_{K^d}}} = 2,84$.

Поскольку соответствующее расчетное значение F_p больше F_t , то нейросетевые математическое модели адекватны.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено исследование влияния параметров качества исходных углей на выход химических продуктов и установлены наиболее влияющие параметры, проведено математическое моделирование. На основе полученных данных создана нейросетевая математическая модель прогноза выхода химических продуктов коксования по параметрам качества исходных углей. Данная модель способна прогнозировать выход основных химических продуктов коксования в условиях нестабильности качества угольного материала, что позволяет ее применение в условиях угледобывающих и углеперерабатывающих предприятий, а также при обучении студентов соответствующих специальностей. Используя модель, можно рассчитать величину ресурсов продуктов коксования в угле, отклонений выхода химических продуктов коксования от заданных показателей, тем самым уже на этапе выбора поставщика или марки углей спланировать более эффективное использование ценных марок углей.

В качестве дальнейшей перспективы развития системы и модернизации математических моделей может являться создание комплекса программ и по учету данных об углях и прогнозу пригодности углей для коксования.

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 %, для каменноугольной смолы – 19,53 %, для сырого бензола – 10,02 %, для коксового газа – 5,11 %.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Глущенко И.М. Теоретические основы технологии горючих ископаемых. М.: «Металлургия», 1990. 296 с.
2. Технология коксохимического производства / А.А. Кауфман, Г.Д. Харлампович. Екатеринбург: ВУХИН-НКА, 2005. 288 стр.
3. Катылымов А.В., Кобыков А.И. Переработка твердого топлива. Калуга: Издательство Н. Бочкаревой, 2003. 248 с.
4. Комплексная переработка углей и повышение эффективности их использования. Каталог-справочник / Под общей редакцией В.М. Щадова / Г.С. Головин, А.С. Малолетнев. М.: НТК «Трек», 2007. 290 с.
5. Стремихеев А.А., Деревицкая В.А. Основы химии высокомолекулярных соединений. М.: Химия, 1976. 437 с.
6. Скляр М.Г., Нестеренко И.В. О взаимодействии первичных продуктов деструкции углей при их нагреве без доступа воздуха // Кокс и химия. 1998. № 10. С. 7-9.
7. Скляр М.Г. Физико-химические основы спекания углей. М.: Metallurgy, 1984. 201 с.
8. Дешалит Г.И. Курс технологии коксохимического производства. Коксование углей. – Харьков М.: Metallurgizdat, 1947. 322 с.
9. Чистяков А.Н., Чистякова Т.Б., Камаль М.Р. Химический состав сырого бензола и его взаимосвязь с условиями коксования // Кокс и химия. 1983. № 12. С. 20-27.
10. Русчев Д.Д. Химия твердого топлива. Л.: «Химия», 1976. 275 с.
11. Руководство по коксованию. Т. II. Под ред. О. Гросскинского. М.: Metallurgy, 1966. 607 с.
12. Бутакова В.И. Создание и развитие полиеновой модели строения углей // Кокс и химия. 2015. № 4. С. 12-22.
13. Коляндра Л.Я. Улавливание и переработка химических продуктов коксования. Харьков: Metallurgizdat, 1962. 468 с.
14. Лейбович Р.Е., Яковлева Е.И., Филатов А.Б. Технология коксохимического производства. М.: «Металлургия», 1982. 359 с.

15. Иванов В.П., Станкевич А.С., Школлер М.Б., Сивчиков В.Е. Восстановленность и петрографический состав углей Кузнецкого бассейна // Химия твердого топлива. 2002. № 4. С. 3-19.
16. Турик И.А., Алексеева Н.Ф. О выходе коксового газа из углей и шихт // Кокс и химия. 1985. № 12. С. 18-20.
17. Обуховский Я.М. Составление угольных шихт для коксования. М.: Металлургиздат, 1957. 328 с.
18. Козина О.Я., Некрасова Т.П. Влияние марочного состава угольной шихты и температурного режима коксования на выход и качество химических продуктов // Кокс и химия. 2008. № 2. С. 42-43.
19. Гагарин С.Г. Оценка химического потенциала углей // Кокс и химия. 2000. № 1. С. 30-33.
20. Литвиненко М.С. Очистка коксового газа от сероводорода. Харьков: Металлургиздат, 1959. 343 с.
21. Васютин Л.Ф., Галушкин С.А. Распределение серы шихты в продуктах коксования // Кокс и химия. 1979. № 8. С. 28-30.
22. Медведев К.П., Петропольская В.М. Влияние условий коксования на образование сернистых соединений коксового газа // Химия твердого топлива. 1972. № 3. С. 27-31.
23. Гагарин С.Г. Химический потенциал мацералов и углей // Кокс и химия. 2000. № 3. С. 17-22.
24. Головкин М.Б., Дроздник И.Д., Мирошниченко Д.В., Кафтан Ю.С. Использование данных элементного и петрографического анализов углей для прогнозирования выхода химических продуктов коксования // Кокс и химия. 2012. № 6. С. 9-17.
25. Еремин И.В., Броневец Т.М. Проект Международной классификации углей низкого, среднего и высокого рангов // Химия твердого топлива. 1997. № 2. С. 3-12.
26. ГОСТ 25543-2013. Угли бурые, каменные и антрациты. Классификация по генетическим и технологическим параметрам. М.: ФГУП «СТАНДАРТИНФОРМ», 2014. 22 с.

27. Еремин И.В., Броневец Т.М. О возможности применения Международной классификации углей в пластах к оценке угольных месторождений России // Химия твердого топлива. 1997. №1. С. 3-10.
28. Эпштейн С.А., Супруненко О.И., Барабанова О.В. Вещественный состав и реакционная способность витринитов каменных углей разной степени восстановленности // Химия твердого топлива. 2005. №1. С. 22-35.
29. Жданов В.С., Русьянова Н.Д., Мухаметзянова Е.Э., Белявская Л.В. Структурные характеристики углей различных бассейнов // Кокс и химия. 1992. № 9. С. 5-8.
30. Гагарин С.Г. Регрессионный анализ состава и свойств мацераловразновосстановленных углей Кузбасса // Кокс и химия. 1998. № 2. С. 2-6.
31. Карачаров Н.Н., Петропольская В.М., Мариич Л.И. Влияние состава шихты на качественные показатели каменноугольной смолы // Кокс и химия. 1978. № 2. С. 30-33.
32. Головкин М.Б., Мирошниченко Д.В., Кафтан Ю.С. Современное состояние вопроса прогнозирования выхода кокса и основных химических продуктов коксования // Кокс и химия. 2011. № 9. С. 45-52.
33. Гагарин С.Г. Формы кислорода в органической массе углей // Кокс и химия. 2001. № 10. С. 16-23.
34. Мирошниченко Д.В., Дроздник И.Д., Кафтан Ю.С. и др. Особенности окисления угля шахтоуправления «Покровское» в лабораторных и естественных условиях. Сообщение 2. Лабораторные коксования опытных шихт // Кокс и химия. 2015. № 5. С. 6-11.
35. Тамко В.А., Саранчук В.И. Выход и состав коксового газа из шихт с увеличенным количеством слабоспекающихся и неспекающихся углей // Кокс и химия. 2000. № 4. С. 20-23.
36. Иванов Е.Б., Мучник Д.А. Технология производства кокса. Киев: «Вища школа», 1976. 232 с.
37. Харлампович Г.Д., Кауфман А.А. Технология коксохимического производства. М.: Металлургия, 1995. 384 с.
38. Справочник коксохимика. Том 2. Производство кокса / Под ред. Рудыка В.И., Зингермана Ю.Е. Харьков: ИНЖЭК, 2014. 728 с.

39. Химическая технология твердых горючих ископаемых/ Под ред. Г.Н. Макарова и Г.Д. Харламповича. М.: Химия, 1986. 496 с.
40. Химические вещества из угля / Под ред. И. В. Калечица. М.: Химия, 1980. 616 с.
41. Правила технической эксплуатации коксохимических предприятий ПТЭ-68. Харьков: Прапор, 1970. 255 с.
42. Мазорин С.Н., Скрипник Е.А. Каменноугольная смола (получение и переработка). М.: Металлургия, 1985. 118 с.
43. Бездверный Г.Н., Фроловнин Ю.В., Павлович Л.Б., Бутакова В.И. Влияние объема печных камер на качество химических продуктов // Кокс и химия. 1987. № 9. С. 24-27.
44. Зубилин И.Г., Рудыка В.И., Зубилина А.И., Тараканов А.А. Влияние газификации стеновых отложений углерода на образование внебалансовых ресурсов коксового газа // Кокс и химия. 2001. № 4. С. 30-32.
45. Аронов С.Г., Склад М.Г. Выход кокса в условиях интенсификации процесса коксования и задачи регулирования этого показателя // Кокс и химия. 1972. № 7. С. 14-19.
46. Шапиро М.Д., Гадяцкий В.Г. О взаимодействии углей с растворителями // Химия твердого топлива. 1969. № 4. С. 142-145.
47. Бронштейн А.П., Макаров Г.Н., Сливинская И.И. Термическая деструкция кузнечных газовых углей // Кокс и химия. 1970. № 5. С. 13-19.
48. Грязнов Н.С., Петров В.К. Коксование углей под газовым давлением // Кокс и химия. 1960. № 1. С. 30-35.
49. Альтшулер В.С., Тайц Е.М., Шафир Г.С. и др. Исследование влияния свойств углей и условий коксования на содержание углеводородной части коксового газа // Химия твердого топлива. 1968. № 6. С. 34-39.
50. Акулов П.В., Григорьев Н.П., Колодкин Б.Ф. и др. Влияние технологических факторов на выход и состав химических продуктов коксования // Кокс и химия. 1972. № 10. С. 36-39.
51. Коляндра Л.Я. Переработка сырого бензола. Харьков: Metallurgizdat, 1960. 319 с.

52. Горелов П.Н., Котеленец М.С. Прогнозирование выхода основных продуктов коксования углей и шихт по выходу летучих веществ и окисленности // Кокс и химия. 1987. № 1. С. 26-30.
53. Улановский М.Л. Оценка информативности элементного состава углей в аспекте прогноза выхода продуктов коксования// Кокс и химия. 2012. № 3. С. 2-5.
54. Склад М.Г. Физико-химические основы спекания углей. М.: Металлургия, 1984. 201 с.
55. Справочник по химии и технологии твердых горючих ископаемых / А. Н. Чистяков, Д. А. Розенталь, Н. Д. Русьянова. СПб.: Синтез, 1996. 362 с.
56. Гагарин С.Г. Оценка выхода летучих веществ по мацеральному составу углей и степени их метаморфизма // Кокс и химия. 2000. № 11-12. С. 5-10.
57. Дроздник И.Д., Кафтан Ю.С., Меньшикова С.Д. Химический потенциал различных типов углей в классификации по генетическим и технологическим параметрам // Кокс и химия. 1990. № 8. С. 2-3.
58. Телешев Ю.В., Кауфман С.И., Шептовицкий М.С. Составление и исследование материального баланса процесса коксования // Кокс и химия. 1997. № 1. С. 19-25.
59. Котеленец М.С., Золотухин А.И. Уточнение лабораторного метода определения выходов химических продуктов коксования // Кокс и химия. 1960. № 4. С. 41.
60. Лейбович Р.Е., Обуховский Я.М., Сатановский С.Я. Технология коксохимического производства. М.: Металлургия, 1966. 463 с.
61. Аксенин Н.П., Крюков А.Н., Семисалов А.П. Об определении выхода кокса (Обзор) // Кокс и химия. 1984. № 7. С. 23-25.
62. Сухоруков В.И., Степанов Ю.В. О выходе кокса в промышленных условиях // Кокс и химия. 2001. № 3. С. 36-44.
63. Гребенюк А.Ф., Збыковский Е.И., Збыковский А.И. О методиках прогнозирования выхода продуктов коксования // Кокс и химия. 2004. № 11. С. – 20-24.
64. Улановский М.Л. Влияние выхода летучих веществ и зольности шихты на выход кокса// Кокс и химия. 1990. № 10. С. 51-52.
65. Дворин Г.С. К вопросу о показателях выхода кокса// Кокс и химия. 1971. № 5. С. 25-30.

66. Телешев Ю.В., Кауфман С.И., Шептовицкий М.С. и др. Составление и исследование материального баланса коксования // Кокс и химия. 1997. № 1. С. 19-25.
67. Телешев Ю.В., Кауфман С.И., Шептовицкий М.С. Опыт определения выхода кокса в промышленных условиях // Кокс и химия. 1997. № 3. С. 16-18.
68. Буланов Е.А., Блохин В.С., Болкунов В.Ф., Зиновьева Л.А. Определение выхода сухого валового кокса // Кокс и химия. 1999. № 9. С. 15-18.
69. Золотарев И.В., Вегеря И.Н., Дудяк В.Н. К вопросу об определении выхода валового кокса из угольных шихт // Углекимический журнал. 2003. № 3/4. С. 35-39.
70. Обзор докладов 16-й специальной конференции по коксу // Нейрекокайси. 1953. Vol. 32. № 316. P. 461-470.
71. Григорьев С.М. О процессах образования и свойствах горючих ископаемых. М.: Изд-во АН СССР, 1954. 345 с.
72. Barking H., Eymann C. // Gluckauf. 1953. № 39-40. P. 993-1003.
73. Haarman A. // Brennstoff-Chemie. 1956. № 19-20. P. 301-310.
74. Кустов Б.И., Гинсбург Я.Е. Производство высококачественного кокса для металлургии // Сталь. 1952. № 7. С. 91-93.
75. Ханин И.М., Обуховский Я.М., Юшин В.В. Методы расчета материального и теплового баланса коксовых печей. М.: Металлургия, 1972. 199 с.
76. Лобов А.А., Торяник Э.И., Кузниченко В.М. и др. Прогноз выхода валового кокса от шихты в условиях промышленного коксования // Кокс и химия. 2003. № 8. С. 13-18.
77. Филатов Ю.В., Ковалев Е.Т., Шульга И.В., Кауфман С.И. Теория и практика производства и применения доменного кокса улучшенного качества. Киев: Наукова думка, 2011. 128 с.
78. Вирозуб И.В., Лейбович Р.Е. Расчеты коксовых печей и процессов коксования. Киев: Вища школа, 1972. 160 с.
79. Методические рекомендации по планированию объемов производства основных видов продукции на коксохимических предприятиях Украины. Утв. на заседании Совета директоров УНПА «Укркокс» 24.05.2002 г. Днепропетровск, Харьков, 2002. 102 с.

80. Шейхет А.М., Чучминов В.М., Ильин В.М. О влиянии марочного состава и спекаемости шихты на выход кокса // Кокс и химия. 1976. № 9. С. 21-24.
81. ГОСТ 14056-77. Угли каменные. Ускоренный метод определения дилатометрических показателей в приборе ИГИ-ДМетИ. М.: Изд-во стандартов, 1977. 10 с.
82. Глущенко И.М. Петрографическая характеристика и ее значение для оценки свойств углей. М.: Недра, 1971. 133 с.
83. Рубчевский В.Н., Чернышов Ю.А., Овчинникова С.А. Разработка количественных зависимостей прогноза выхода кокса и основных химических продуктов коксования // Кокс и химия. 2009. № 4. С. 11-16.
84. Степанов Ю.В., Карпин Г.М. О выходе кокса и химических продуктов коксования // Кокс и химия. 2009. № 10. С. 13-17.
85. Мирошниченко Д.В., Головкин М.Б. Прогноз выхода химических продуктов коксования по данным элементного и петрографического анализов угля // Кокс и химия. 2014. № 3. С. 32-43.
86. Данилов А.Б., Вердибоженко Г.С., Дроздник И.Д. Практическое использование данных петрографического анализа углей и шихт для прогнозирования выхода химических продуктов коксования // Кокс и химия. 2012. № 11. С. 19-23.
87. Правила технической эксплуатации коксохимических предприятий. М.: Металлургия, 1985. 248 с.
88. Кафтан Ю.С. О научных основах составления угольных шихт для коксования// Кокс и химия. 1990. № 6. С. 8-10.
89. Скляр М.Г., Тютюнников Ю.Б. Химия твердых горючих ископаемых. Киев: Вища школа, 1985. 298 с.
90. Справочник коксохимика. В 6-и томах. Том 1. Угли для коксования. Обогащение углей. Подготовка углей к коксованию / Под ред. Борисова Л. Н., Шаповала Ю. Г. Харьков: Издательский дом «ИНЖЭК», 2010. 536 с.
91. Ольшанецкий Л.Г. Угольная сырьевая база коксования России: состояние и проблемы // Кокс и химия. 1995. № 12. С. 2-3.
92. Киселев Б.П., Лисковец С.А. О сырьевой базе коксования России // Кокс и химия. 2007. № 11. С. 2-9.

93. Киселев Б.П., Лисковец С.А. Угольная база коксования России: взгляд на краткосрочную перспективу // Кокс и химия. 2007. № 1. С. 15-20.
94. Шикер Т. В 2015 году в Кузбассе добыли 215,8 млн. т угля [Электронный ресурс] // sibdepo.ru [сайт]. [2000]. URL:<http://sibdepo.ru/news/v-2015-godu-v-kuzbasse-dobyli-215-8-mln-tonn-uglya.html>. (дата обращения 18.01.2017).
95. Золотухин Ю.А., Красковская Т.Ф. О свойствах углей Улуг-Хемского бассейна. 1. разновидности типов витринита и его ассоциаций с микрокомпонентами и минеральными составляющими // Кокс и химия. 2016. № 1. С. 2-9.
96. Золотухин Ю.А. , Беркутов Н.А., Кошкарров Д.А. О свойствах углей Улуг-Хемского бассейна. 2. Закономерности формирования качества кокса из шихт с участием углей Межегейского месторождения // Кокс и химия. 2016. № 2. С. 2-9.
97. Прошунин Ю.Е., Школлер М.Б. О перспективных направлениях глубокой переработки каменных и бурых углей в Кемеровской области // Кокс и химия. 2016. № 2. С. 10-15.
98. ГОСТ 10742-71. Угли бурые, каменные, антрацит, горючие сланцы и угольные брикеты. Методы отбора и подготовки проб для лабораторных испытаний. М.: ИПК Издательство стандартов, 2002. 18 с.
99. ГОСТ Р 53357-2013. Топливо твердое минеральное. Технический анализ. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2014. 9 с.
100. ГОСТ 27313-2015. Топливо твердое минеральное. Обозначение показателей качества и формулы пересчета результатов анализа на различные состояния топлива. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2016. 23 с.
101. ГОСТ Р 55661-2013. Топливо твердое минеральное. Определение зольности. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2014. 11 с.
102. ГОСТ Р 55660-2013. Топливо твердое минеральное. Определение выхода летучих веществ. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2014. 14 с.
103. ГОСТ 2059-95. Топливо твердое минеральное. Метод определения общей серы сжиганием при высокой температуре. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2008. 14 с.
104. ГОСТ 1932-93. Топливо твердое. Методы определения фосфора. М.: ИПК Издательство стандартов, 2000. 17 с.

105. ГОСТ 1186-87. Угли каменные. Метод определения пластометрических показателей. М.: Издательство стандартов, 1987. 21 с.
106. ГОСТ 14056-77. Угли каменные. Ускоренный метод определения дилатометрических показателей в приборе ИГИ-ДМетИ. М.: Издательство стандартов, 1977. 7 с.
107. ГОСТ 20330-91. Уголь. Метод определения показателя вспучивания в тигле. М.: Издательство стандартов, 1992. 10 с.
108. ГОСТ 9414.1-94. Уголь каменный и антрацит. Методы петрографического анализа. Часть 1. Словарь терминов. М.: Издательство стандартов, 1995. 23 с.
109. ГОСТ Р 55662.2-2013. Методы петрографического анализа углей. Часть 2. Методы подготовки проб углей. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2014. 19 с.
110. ГОСТ Р 55662.3-2013. Методы петрографического анализа углей. Часть 3. Метод определения мацерального состава. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2014. 16 с.
111. ГОСТ 12113-94. Угли бурые, каменные, антрациты, твердые рассеянные органические вещества и углеродистые материалы. Метод определения показателей отражения. М.: Издательство стандартов, 1995. 23 с.
112. ГОСТ 30313-95. Угли каменные и антрациты (угли среднего и высокого рангов). Кодификация. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2014. 16 с.
113. ГОСТ 2408.1-95. Топливо твердое. Методы определения углерода и водорода. М.: ИПК Издательство стандартов, 2000. 23 с.
114. Гагарин С.Г., Лесникова Е.Б., Шуляковская Л.В. и др. Оценка степени ароматичности структуры бурых углей // Химия твердого топлива. 1993. № 1. С. 3-10.
115. Нерсисян Г.А., Стахов В.М., Иванов В.П. Характеристика угля Магавузского месторождения Армении // Кокс и химия. 2015. № 10. С. 7-11.
116. ГОСТ 27313-2015. Топливо твердое минеральное. Обозначение показателей качества и формулы пересчета результатов анализа на различные состояния топлива. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2016. 23 с.
117. Гофтман М. В. Прикладная химия твердого топлива. М.: Metallurgizdat, 1963. 597 с.
118. Ковалевская М.М., Кульман Р.К., Бабенко М.С. О методе определения выходов химических продуктов коксования // Кокс и химия. 1961. № 1. С. 43-46.

119. ГОСТ 18635-73. Угли каменные. Метод определения выхода химических продуктов коксования. М.: ИПК Издательство стандартов, 2000. 11 с.
120. Котеленец М.С., Новиков В.Н., Горелов П.Н., Носкова Л.В. К стандартизации лабораторного метода определения выхода химических продуктов коксования // Кокс и химия. 1977. № 3. С. 32-34.
121. Ранговая корреляция.[Электронный ресурс]. URL: <http://www.studfiles.ru/preview/1582411/page:4/> (дата обращения: 01.05.2017).
122. Корреляционный анализ. [Электронный ресурс]. //WebResearch: [сайт]. [2017]. URL: http://www.datuapstrade.lv/rus/spss/section_15/(дата обращения: 02.05.2017).
123. Понятие о многомерном корреляционном анализе.[Электронный ресурс] // Студопедия: [сайт]. [2015]. URL: http://studopedia.ru/9_148244_ponyatie-o-mnogomernom-korrelyatsionnom-analize.html(дата обращения: 02.05.2017).
124. Ллойд Э., Ледерман У. Справочник по прикладной статистике.Том 2. М.: Финансы и статистика, 1990. 526 с.
125. Гришенцев А.Ю. Теория и практика технического и технологического эксперимента: Учебное пособие. СПб.: СПбГУ ИТМО, 2010. 102 с.
126. Множественная линейная регрессия.[Электронный ресурс] // Портал знаний. Глобальный интеллектуальный ресурс:[сайт]. [2017]. URL:<http://statistica.ru/theory/mnozhestvennaya-lineynaya-regressiya/>(дата обращения: 02.05.2017).
127. Структурный анализ и его особенности.[Электронный ресурс] //life-prog.ru: [сайт].[2013]. URL: http://life-prog.ru/1_3453_strukturniy-analiz-i-ego-osobennosti.html(дата обращения: 02.05.2017).
128. Обзор методов статистического анализа данных.[Электронный ресурс]// Лаборатория статистических исследований Кубанского государственного университета: [сайт]. [2010]. URL: <http://statlab.kubsu.ru/node/4>(дата обращения: 02.05.2017).

129. Преимущества нейронных сетей.[Электронный ресурс] // AIportal: [сайт]. [2009]. URL: <http://www.aiportal.ru/articles/neural-networks/advantages.html>(дата обращения: 02.06.2017).
130. Искусственная нейронная сеть.[Электронный ресурс] // Witology.ru: [сайт]. [2011]. URL: http://wiki.witology.com/index.php/%D0%98%D1%81%D0%BA%D1%83%D1%81%D1%81%D1%82%D0%B2%D0%B5%D0%BD%D0%BD%D0%B0%D1%8F_%D0%BD%D0%B5%D0%B9%D1%80%D0%BE%D0%BD%D0%BD%D0%B0%D1%8F_%D1%81%D0%B5%D1%82%D1%8C(дата обращения: 02.06.2017).
131. Розенблатт Ф. Принципы нейродинамики: Перцептроны и теория механизмов мозга. М.: Мир, 1965. 480 с.
132. Толпин Д.А. Вероятностные сети для описания знаний// Информационные процессы. 2007. Т.7. №1. С.93-103.
133. Уоссермен Ф. Нейрокомпьютерная техника: Теория и практика. М.: Мир, 1992.240 с.
134. Martinetz T.M., Berkovich S.G., Schulten K.J. Neural-gas network for vector quantization and its application to time-series prediction // IEEE Transactions on Neural Networks. 1993. Vol. 4. № 4. pp. 558-569.
135. Fukushima Kunihiro. Neocognitron: A Self-organizing Neural Network Model for a Mechanism of Pattern Recognition Unaffected by Shift in Position// Biol. Cybernetics. 1980. №36. pp.193-202. [Электронный ресурс] // URL: <http://cs.princeton.edu/courses/archive/spr08/cos598B/Readings/Fukushima1980.pdf>(дата обращения: 03.06.2017).
136. Hopfield J.J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities// Proceedings of National Academy of Sciences.1982. Vol. 79. №. 8. pp. 2554-2558.
137. Elman J.L. Finding structure in time // Cognitive Science. 1990. №. 14.pp. 179-211. [Электронный ресурс] // URL: <https://crl.ucsd.edu/~elman/Papers/fsit.pdf>(дата обращения: 04.06.2017).
138. Jordan M.I. Serial order: A parallel distributed processing approach. // Institute for Cognitive Science Report 8604. University of California, San Diego, 1986.

139.

Применение нейронных сетей для задач классификации [Электронный ресурс] // BaseGroupLabs: [сайт]. [2017]. URL: <https://basegroup.ru/community/articles/classification> (дата обращения: 10.06.2017).

140. Алгоритмы кластеризации данных с использованием нейронных сетей. [Электронный ресурс] // Электронная библиотека БГУ: [сайт]. [2008]. URL: <http://elib.bsu.by/bitstream/123456789/7648/1/50.pdf> (дата обращения: 11.06.2017).

141. Дороганов В. С. Нейросетевые методы и программное обеспечение для решения задачи прогноза показателей качества металлургического кокса. [Электронный ресурс] // Сайт кафедры ПИТ ИИТМА КузГТУ им. Т. Ф. Горбачева: [сайт]. [2006]. URL: <http://vtit.kuzstu.ru/files/growns//229/doroganov.pdf> (дата обращения: 13.06.2017).

142. Метод k-средних. [Электронный ресурс] // Data Scientist: [сайт]. [2017]. URL: <http://datascientist.one/k-means-algorithm/> (дата обращения: 11.08.2017).

143. Основные статистики и таблицы. [Электронный ресурс] // StatSoft: [сайт]. [1999]. URL: <http://statsoft.ru/home/textbook/modules/stbasic.html#Correlations> (дата обращения: 11.08.2017).

144. Множественная регрессия. [Электронный ресурс] // StatSoft: [сайт]. [1999]. URL: <http://statsoft.ru/home/textbook/modules/stmulreg.html> (дата обращения: 11.08.2017).

145. Арнис. Нейронные сети для начинающих. Часть 1. [Электронный ресурс] // Хархабр: [сайт]. [2006]. URL: <https://habrahabr.ru/post/312450/> (дата обращения: 16.08.2017).

146. Функции активации в нейронных сетях. [Электронный ресурс] // AIportal: [сайт]. [2009]. URL: <http://www.aiportal.ru/articles/neural-networks/activation-function.html> (дата обращения: 18.08.2017).

147. Дифференциальные уравнения и передаточные функции линейных непрерывных систем автоматического регулирования. [Электронный ресурс] // Вунивере.ru: [сайт]. [2017]. URL: <https://vunivere.ru/work10051/page3> (дата обращения: 18.08.2017).

148. Лебедев Н.Н., Манаков М.Н., Швец В.Ф. Теория химических процессов основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1984. 376 с.
149. Тынкевич М.А., Пимонов А.Г., Вайнгауз А.М. Статистический анализ данных на компьютере: учебное пособие. Кемерово: Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева, 2013. 124 с.
150. Васильева Е.В., Черкасова Т.Г., Колмаков Н.Г. Прогнозирование выхода кокса на основе определения выхода химических продуктов коксования углей // Кокс и химия. 2015. № 11. С. 14-19.

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.

ПРИЛОЖЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ АНАЛИЗА КАЧЕСТВА УГЛЕЙ

Таблица А.1 –Результаты анализа качества углей

№ п/п	Наименование пробы	Марка
1	Ш. «Анжерская-Южная» (обогащенная проба)	КО
2	Ш. «Шахта им. Тихова» (секция №1)	Ж
3	ОФ «Антоновская», п.21/326	ГЖ
4	«Кузнецкпогрузтранс» («ш. Абашевская»), п. 19/07	ГЖ
5	ЦОФ «Распадская», п. 35/857	ГЖ
6	ЦОФ «Березовская» (ш. «Усковская»), п. 67/370А	ГЖ
7	ЦОФ «Березовская» (ш. «Ерунаковская»), п. 70/371Б	ГЖ
8	ОФ «Черкасовская», п. 28/07	Ж
9	ЦОФ «Березовская» (ш. «Костромовская»)	Ж
10	Ш. «Шахта им. Тихова», пласт 23	Ж
11	Разрез «Участок Коксовый», п. 40/96	К
12	УК «Северный Кузбасс» (ОФ «Северная»), п.22/253	К
13	ОФ «Прокопьевская» п.17/07	КО
14	ОФ «Анжерская» п. 49/126	КО
15	ЦОФ «Березовская» (ш. «Анжерская-Южная» - 70%, КО+ ш. «Бутовская» - 30%, КО), п. 47/359Б	КО
16	ОФ «Антоновская» (ш. «Полосухинская»)	ГЖ
17	ОФ «Распадская» (разрез «Межегейский»)	Ж
18	Ш. «Бутовская», разрезная печь А-3-2, от м.т. 1039+37м, мощн. 0,7 м	КО
19	Разрез «Поляны»	КС
20	ОФ «Распадская» (ш. «Усковская») п.41/25	ГЖ
21	Ш. «Бутовская», лава А-3, секция 130, Верхняя Пачка, мощн. - 0,87 м	КО
22	Ш. «им. Кирова», п. 85/03	Г
23	ОФ «Распадская» (ш. «Абашевская»), п. 3/04	ГЖ
24	ЦОФ «Березовская» (ш. «Усковская»), п. 17/165А	ГЖ
25	УК «Северный Кузбасс» (ОФ «Северная»), п. 12/159	К
26	ЦОФ «Березовская» («ш. Бутовская»), п. 15/161	КО
27	ОФ «СУЭК-Кузбасс» (ш. «Шахта им. Кирова»), п. 35/06	Г
28	ЦОФ «Березовская» (ш. «Ерунаковская»), п. 33/282А	ГЖ
29	УК «Северный Кузбасс» (ОФ «Северная»), п. 38/237	К
30	ЦОФ «Березовская» (ш. «Анжерская-Южная» - 60 % + ш. «Бутовская»- 40 %), п. 43/289В	ОС+КО
31	Разрез «Черниговский», п.17/06	КС
32	ОФ «Прокопьевская»	К
33	ОФ «Кузнецкая»	ГЖ+Ж

Продолжение таблицы А.1

№ п/п	A ^d , %	V ^d , %	V ^{daf} , %	ИВ, мм	x, мм	y, мм	Ro,r, %	Vt, %	I, %	ΣOK, %
1	8,7	17,1	18,8	7	32	11	1,311	13	86	87
2	8,2	32,5	35,4	149	10	37	0,931	76	21	23
3	8,3	35,2	38,4	122	50	19	0,821	86	11	13
4	8,5	33,8	36,9	125	50	24	0,780	86	12	14
5	7,4	35,7	38,6	131	40	20	0,827	83	14	16
6	5,2	33,7	35,5	103	37	19	0,786	85	12	14
7	6,8	33,2	35,6	121	54	23	0,835	80	17	19
8	9,7	31,3	34,8	136	32	27	0,845	86	12	13
9	8,6	33,9	37	134	36	28	0,847	85	12	14
10	8,4	30,4	33,2	148	13	35	0,911	78	19	21
11	9,7	17,9	19,8	60	21	14	1,346	56	35	43
12	8,5	22,8	24,9	92	32	18	1,193	52	42	47
13	9,5	23,2	25,5	10	25	10	1,013	42	49	56
14	10,9	19,8	22,2	6	43	8	1,038	39	49	57
15	10,2	21,6	24,1	27	42	11	1,01	43	48	56
16	9,1	35,6	39,2	120	27	30	0,819	91	8	9
17	3,8	36,2	37,7	152	-7	45	0,858	96	3	4
18	4,5	20,9	21,9	6	44	8	1,005	38	51	58
19	4	16,3	17	16	39	10	1,517	57	34	40
20	5,3	36,6	38,6	114	38	18	0,756	88	10	11
21	5,7	19,5	20,7	5	40	6	1,056	35	60	61
22	7	39,2	42,2	114	54	17	0,713	91	9	9
23	8,3	33	36	124	35	25	0,847	88	10	12
24	6	33,4	35,5	81	50	16	0,8	83	14	16
25	9,3	21,8	24	94	43	17	1,184	47	46	51
26	11,4	20,5	23,1	13	43	10	1,042	43	49	54
27	7,5	38,8	41,9	126	46	19	0,726	93	6	7
28	9	32,4	35,6	126	30	24	0,856	81	16	18
29	9,3	21,3	23,5	100	43	17	1,151	60	34	38
30	7	18,9	20,3	12	39	10	1,104	39	52	58
31	8,8	18,5	20,3	10	33	10	1,255	38	50	58
32	8,4	21	22,9	24	39	13	1,066	49	50	50
33	8,4	33,9	37	120	43	24	0,841	82	18	17

Продолжение таблицы А.1

№ п/п	S ^d , %	P ^d , %	SI	C ^{daf} , %	H ^{daf} , %	H/C	Cap	cA	fa	K ^d , %	T _K ^d , %
1	0,37	0,005	1	90,02	4,74	0,63	30,67	0,82	0,87	85,36	1,19
2	0,56	0,009	9	87,01	5,87	0,81	22,77	0,77	0,72	77,41	4,28
3	0,44	0,048	6½	83,61	5,87	0,84	17,34	0,74	0,71	68,49	5,81
4	0,39	0,033	8	84,14	6,06	0,86	18,04	0,74	0,73	71,4	5,22
5	0,61	0,056	9	83,42	5,72	0,82	17,11	0,75	0,71	70,58	5,91
6	0,44	0,04	6½	82,65	5,19	0,75	16,20	0,76	0,76	69,88	5,85
7	0,44	0,04	6	84,86	5,28	0,75	19,06	0,77	0,73	73,78	3,63
8	0,86	0,046	8	84,53	5,39	0,77	18,58	0,76	0,75	75,01	3,56
9	0,47	0,035	8	84,2	5,68	0,81	18,12	0,75	0,72	71,47	5,89
10	0,52	0,008	8½	86,28	5,61	0,78	21,38	0,77	0,75	76,9	3,78
11	0,23	0,08	3½	88,82	4,71	0,64	27,01	0,81	0,87	82,23	1
12	0,54	0,007	4½	87,63	4,95	0,68	24,09	0,80	0,83	81,12	3,17
13	0,3	0,052	½	85,99	5,12	0,71	20,87	0,78	0,84	79,15	1,75
14	0,37	0,024	½	88,92	4,46	0,60	27,29	0,82	0,85	82,61	1,42
15	0,31	0,008	1	88,05	5,14	0,70	25,05	0,80	0,83	80,02	2,76
16	0,78	0,045	8	86,19	5,59	0,78	21,22	0,77	0,68	75,17	4
17	0,4	0,001	8½	86,38	5,63	0,78	21,56	0,77	0,70	73,89	3,81
18	0,61	0,001	1	89,1	4,46	0,60	27,79	0,82	0,85	81,81	1,97
19	0,48	0,036	3½	90,46	4,52	0,60	32,24	0,83	0,89	85,58	1,19
20	0,43	0,042	6½	83,39	5,87	0,84	17,07	0,74	0,71	69,91	4,49
21	0,43	0,003	1	88,87	4,39	0,59	27,15	0,82	0,86	82,87	1,8
22	0,39	0,016	6½	82,75	5,97	0,87	16,31	0,73	0,68	66,53	5,94
23	0,44	0,034	8½	84,85	5,92	0,84	19,04	0,75	0,73	72,38	4,88
24	0,44	0,031	6	84,4	5,71	0,81	18,39	0,75	0,74	72,54	3,61
25	0,62	0,017	3½	88,98	4,89	0,66	27,45	0,81	0,83	80,4	2,55
26	0,54	0,06	1	88,55	5,19	0,70	26,29	0,80	0,84	82,52	1,57
27	0,37	0,02	6	82,14	6,44	0,94	15,64	0,71	0,68	67,63	4,69
28	0,4	0,032	7	84,6	6,07	0,86	18,68	0,74	0,74	74,08	3,64
29	0,56	0,07	4½	88,9	6,05	0,82	27,23	0,77	0,83	81,18	2,12
30	0,39	0,018	1	88,53	4,77	0,65	26,24	0,81	0,87	82,77	1,16
31	0,31	0,004	1	89,79	5,03	0,67	29,90	0,81	0,86	83,46	0,99
32	0,35	0,034	1½	87,96	5,1	0,70	24,84	0,80	0,85	80,53	1,49
33	0,47	0,037	7½	84,5	6,13	0,87	18,54	0,74	0,72	72,77	3,07

Продолжение таблицы А.1

№ п/п	NH_3^d , %	W_K^d , %	H_2S^d , %	CO_2^d , %	C_mH_n^d , %	C_6H_6^d , %	G_K^d , %
1	0,47	1,75	0,22	0,41	0,14	0,59	9,87
2	0,56	2,52	0,29	0,54	0,81	1,04	12,55
3	0,71	3,7	0,28	1,06	0,82	1,35	17,78
4	0,68	3,6	0,14	0,96	0,81	1,13	16,06
5	0,6	3,44	0,23	1,19	0,79	1,12	16,14
6	0,68	3,32	0,07	1,22	0,72	1,08	17,18
7	0,56	4,39	0,11	0,92	0,73	1,04	14,84
8	0,54	3,57	0,14	1,22	0,78	0,9	14,28
9	0,61	3,38	0,13	0,94	0,96	1,02	15,6
10	0,44	3,06	0,09	0,77	0,85	0,92	13,19
11	0,53	1,82	0,12	1,22	0,14	0,41	12,53
12	0,52	2,15	0,14	0,55	0,37	0,48	11,5
13	0,61	2,45	0,24	1,29	0,42	0,78	13,31
14	0,4	1,74	0,06	0,73	0,15	0,4	12,49
15	0,55	2,96	0,07	0,73	0,46	0,57	11,88
16	0,46	2,23	0,2	0,67	0,85	1,25	15,17
17	0,18	2,52	0,03	0,88	0,95	1,07	16,67
18	0,4	2,18	0,08	0,43	0,22	0,52	12,39
19	0,46	1,44	0,09	0,43	0,15	0,52	10,14
20	0,61	3,76	0,14	1,26	0,94	1,07	17,82
21	0,4	2,08	0,09	0,5	0,21	0,44	11,61
22	0,65	4,7	0,08	1,53	0,93	1,24	18,4
23	0,58	3,85	0,19	0,71	1,02	1,15	15,24
24	0,58	4,65	0,31	0,82	0,88	1,01	15,6
25	0,43	2	0,23	0,4	0,35	0,46	13,18
26	0,36	2,25	0,18	0,44	0,27	0,51	11,9
27	0,63	5,53	0,26	1,23	0,99	1,31	17,73
28	0,52	3,45	0,2	0,58	1,1	0,98	15,45
29	0,43	3,06	0,24	0,34	0,35	0,49	11,79
30	0,41	1,91	0,1	0,48	0,25	0,53	12,39
31	0,4	1,81	0,08	0,69	0,15	0,51	11,91
32	0,49	3,42	0,14	0,97	0,51	0,49	11,96
33	0,57	4,84	0,19	0,87	1,01	1,21	15,47

Продолжение таблицы А.1

№ п/п	A ^d коксового остатка, %	V ^{daf} коксового остатка, %	K ₀₃
1	10,8	2,5	1,2
2	13,6	2,8	1,7
3	12,6	2,5	1,5
4	11,5	2,8	1,4
5	9,8	1,9	1,3
6	7,3	2,9	1,4
7	9,3	1,2	1,4
8	13,2	1,5	1,4
9	11,6	1,6	1,4
10	11,8	2,6	1,4
11	11,5	1,7	1,2
12	10,9	2,6	1,3
13	11,9	2	1,3
14	14,2	1,7	1,3
15	12,3	2,7	1,2
16	9	2,7	1,4
17	7,2	2,6	1,5
18	5,9	1,6	1,3
19	4,8	2,5	1,2
20	8,5	2,4	1,5
21	7	2,6	1,2
22	10,7	3,5	1,5
23	12,3	3	1,5
24	7,9	2,9	1,3
25	11,3	1,5	1,2
26	14	2,7	1,2
27	11,5	2,8	1,5
28	12,6	3,7	1,4
29	11,5	3,3	1,2
30	8,4	3	1,2
31	10,7	3,2	1,2
32	10,9	1,3	1,3
33	12,2	2,6	1,5

Таблица А.2 – Погрешности методов определения качества углей

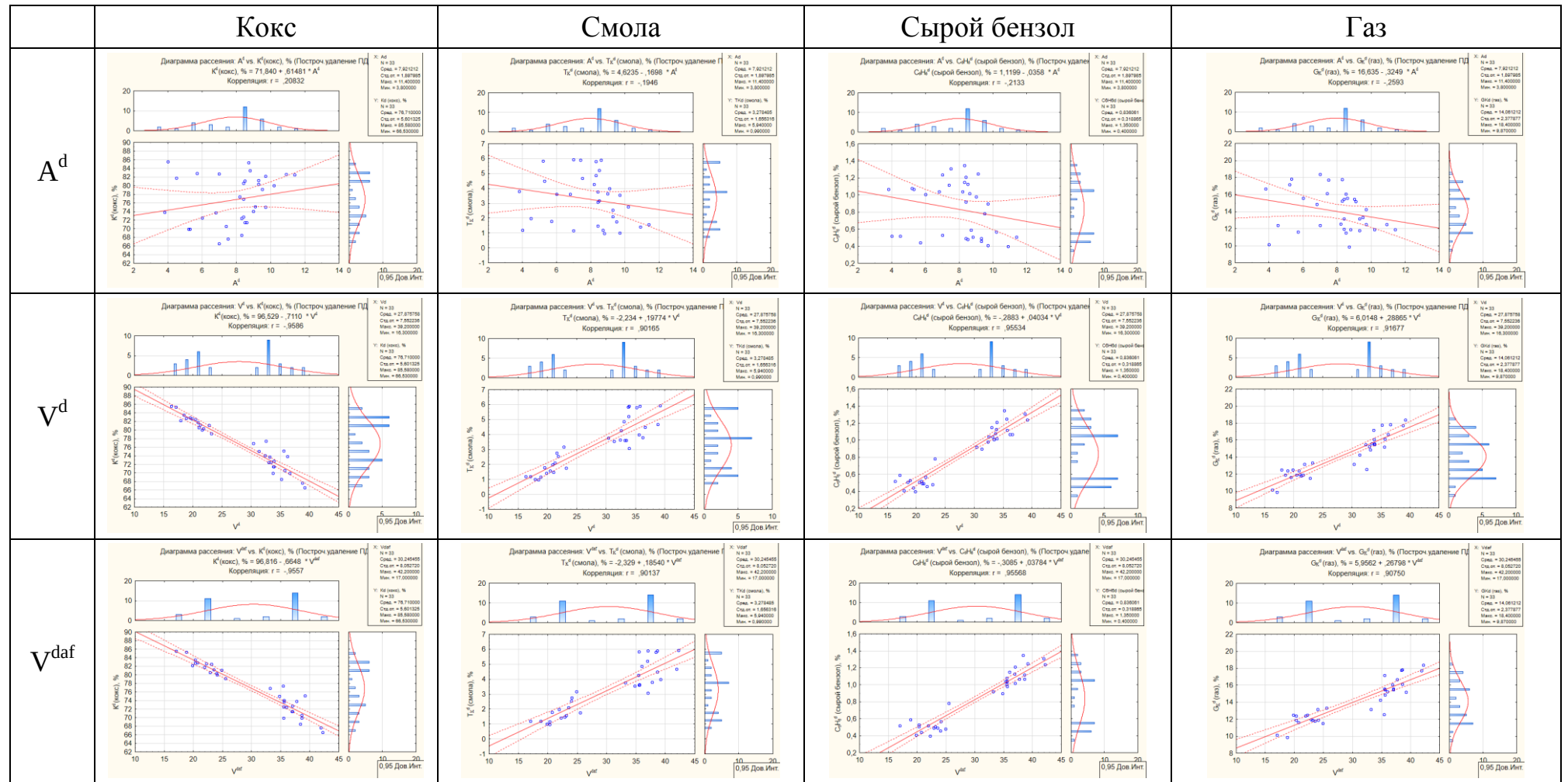
Наименование показателя	Погрешность определения
A^d , %	до 10 % – 0,2 %, более 10 % – 2 % среднего результата
V^d , %	3 % среднего результата
V^{daf} , %	3 % среднего результата
Ив, мм	до 50–4 мм, от 50 до 80–8 мм, свыше 80–12 мм
x, мм	3 мм
y, мм	до 20 включ. – 1 мм, от 20 до 30 включ – 2 мм, свыше 30 – 3 мм
$R_{o,r}$, %	0,03
V_t , %	1
I, %	1
ΣOK , %	1
S_t^d , %	0,05
P^d , %	менее 0,02 – 0,002%, равно или более 0,02 – 10 % среднего значения
SI	1
C^{daf} , %	0,25
H^{daf} , %	0,12
H/C	0,25
Cap	–
cA	–
fa	–
K^d , %	0,5
T_K^d , %	от 0,3 до 1,0 – 0,2 %, от 1,0 до 3 – 0,3 %, от 3 до 10 – 0,4 %
NH_3^d , %	от 0,13 до 0,4 – 0,03 %, от 0,4 до 1,0 – 0,05 %
W_K^d , %	от 1 до 3 – 0,2 %, от 3 до 10 – 0,3 %
H_2S^d , %	–
CO_2^d , %	–
$C_mH_n^d$, %	–
$C_6H_6^d$ (сырой), %	0,1
G_K^d , %	–
A^d коксового остатка, %	до 10 % – 0,2 %, более 10 % – 2 % среднего результата
V^{daf} коксового остатка, %	3 % среднего результата
Коз	–

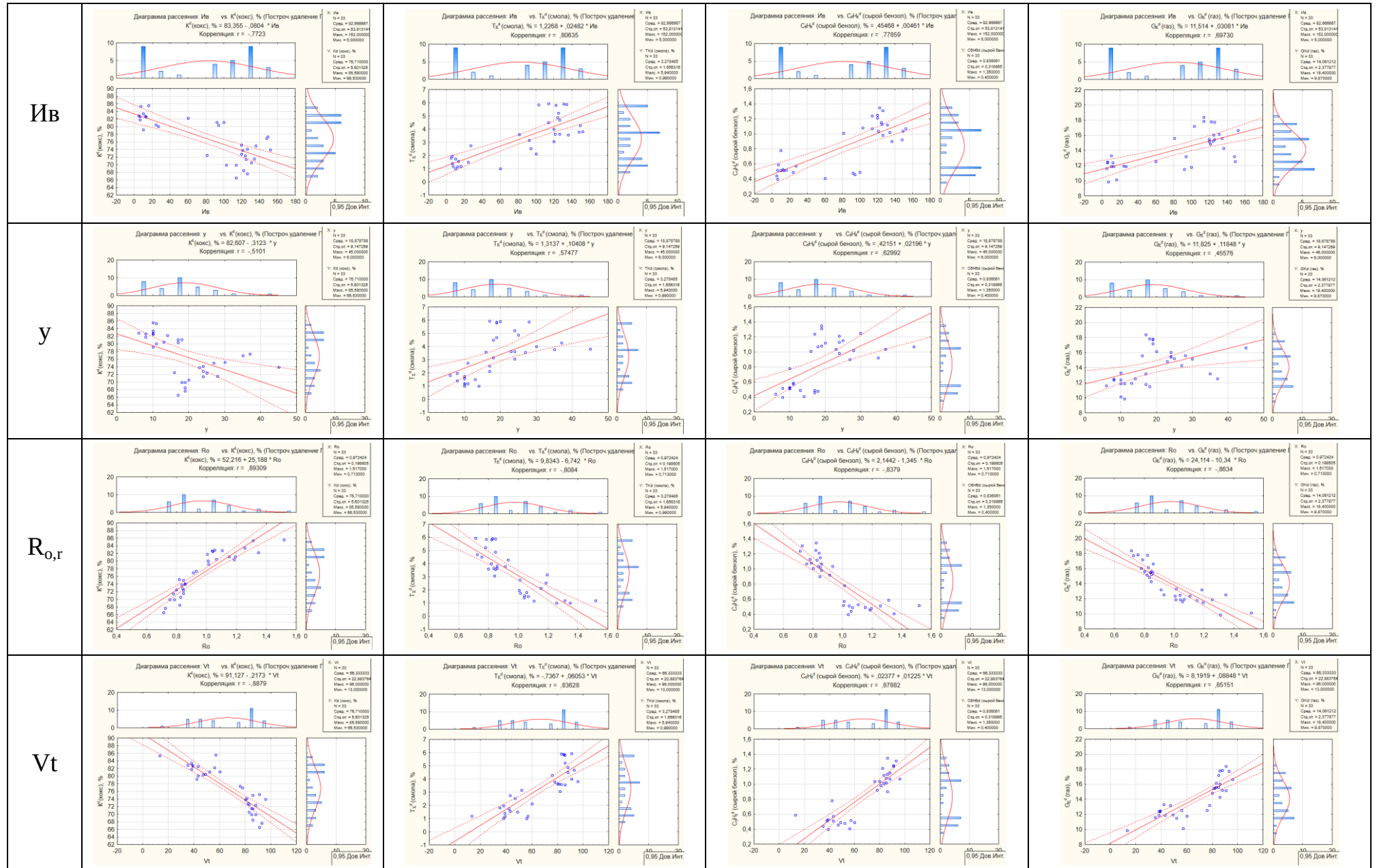
ПРИЛОЖЕНИЕ Б КОРРЕЛЯЦИОННАЯ МАТРИЦА

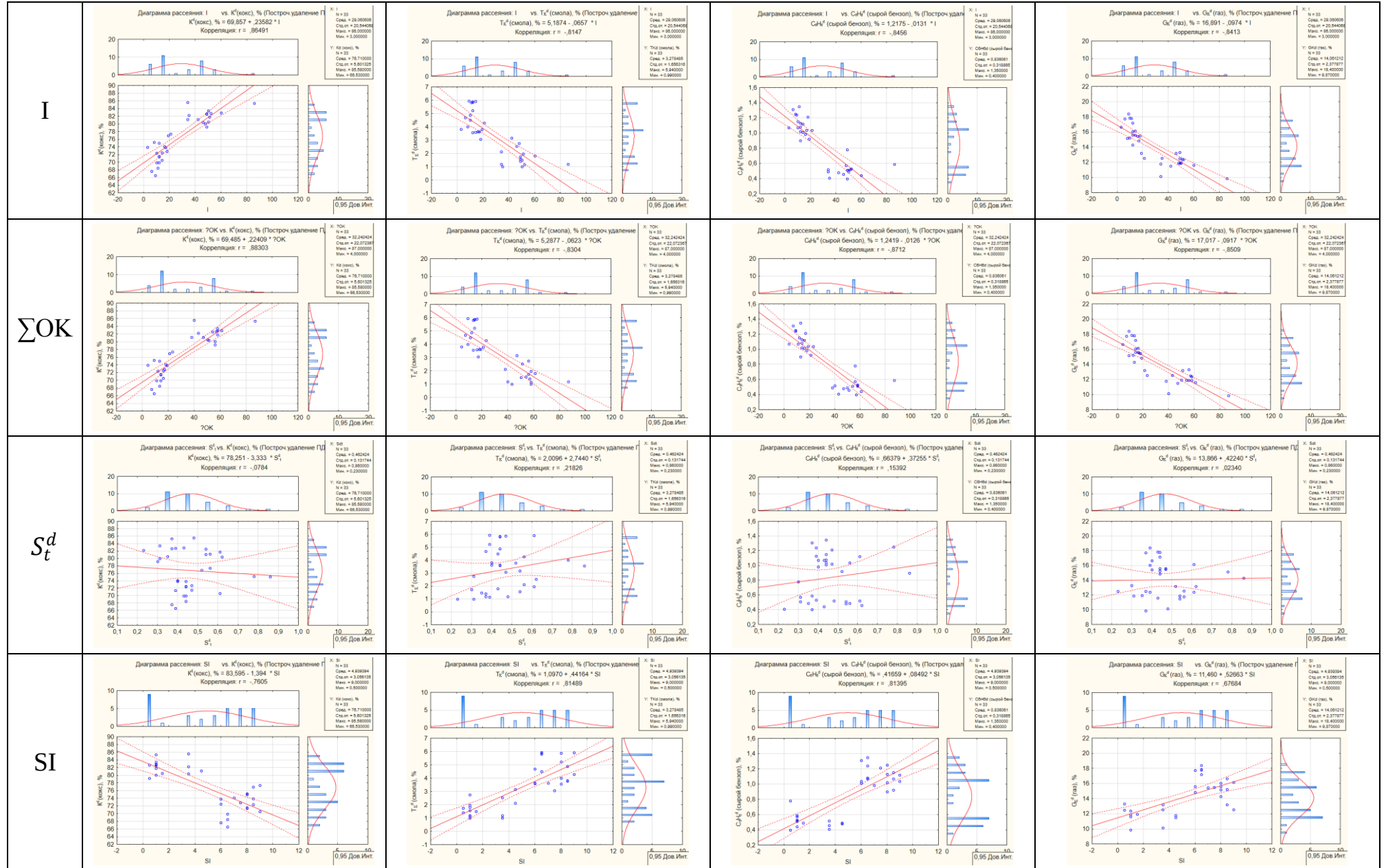
	A ^d	V ^d	V ^{daf}	Iv	y	R _{0,r}	Vt	I	ΣOK	S _t ^d	SI	C ^{daf}	H ^{daf}	H/C	Cap	cA	fa
A ^d	1,00000	-0,27732	-0,21325	-0,15522	-0,16628	0,15361	-0,30496	0,316578	0,31408	-0,02764	-0,20251	0,23881	-0,09437	-0,13822	0,19183	0,18714	0,19894
V ^d	-0,27732	1,00000	0,99761	0,84733	0,69879	-0,88771	0,91030	-0,87999	-0,90274	0,35948	0,80379	-0,87950	0,80917	0,86599	-0,89019	-0,90796	-0,98303
V ^{daf}	-0,21325	0,99761	1,00000	0,85298	0,70079	-0,89054	0,90618	-0,87452	-0,89791	0,37202	0,80729	-0,87631	0,81631	0,87076	-0,89025	-0,90954	-0,98681
Iv	-0,15522	0,84733	0,85298	1,00000	0,85710	-0,66614	0,87404	-0,84248	-0,86343	0,43455	0,95299	-0,66154	0,76121	0,77286	-0,67802	-0,76025	-0,86979
y	-0,16628	0,69879	0,70079	0,85710	1,00000	-0,50513	0,71475	-0,67926	-0,70258	0,37556	0,82893	-0,39658	0,59099	0,56838	-0,44082	-0,52074	-0,76049
R _{0,r}	0,15361	-0,88771	-0,89054	-0,66614	-0,50513	1,00000	-0,75926	0,74633	0,75485	-0,37141	-0,59193	0,86293	-0,74289	-0,80669	0,88498	0,86286	0,84965
Vt	-0,30496	0,91030	0,90618	0,87404	0,71475	-0,75926	1,00000	-0,99308	-0,99909	0,35453	0,85336	-0,79608	0,77173	0,81581	-0,79977	-0,84258	-0,89496
I	0,31657	-0,87999	-0,87452	-0,84248	-0,67926	0,74633	-0,99308	1,00000	0,99576	-0,33216	-0,82224	0,78214	-0,74584	-0,79156	0,78525	0,82151	0,85911
ΣOK	0,31408	-0,90274	-0,89791	-0,86343	-0,70258	0,75485	-0,99909	0,99576	1,00000	-0,35668	-0,84302	0,79301	-0,76317	-0,80816	0,79602	0,83649	0,88547
S _t ^d	-0,02764	0,35948	0,37202	0,43455	0,37556	-0,37141	0,35453	-0,33216	-0,35668	1,00000	0,40789	-0,20160	0,26449	0,25672	-0,23141	-0,24352	-0,40695
SI	-0,20251	0,80379	0,80729	0,95299	0,82893	-0,59193	0,85336	-0,82224	-0,84302	0,40789	1,00000	-0,59559	0,68739	0,69792	-0,60452	-0,68590	-0,83429
C ^{daf}	0,23881	-0,87950	-0,87631	-0,66154	-0,39658	0,86293	-0,79608	0,78214	0,79301	-0,20160	-0,59559	1,00000	-0,72536	-0,82749	0,98899	0,93331	0,78731
H ^{daf}	-0,09437	0,80917	0,81631	0,76121	0,59099	-0,74289	0,77173	-0,74584	-0,76317	0,26449	0,68739	-0,72536	1,00000	0,98639	-0,72844	-0,92365	-0,80464
H/C	-0,13822	0,86599	0,87076	0,77286	0,56838	-0,80669	0,81581	-0,79156	-0,80816	0,25672	0,69792	-0,82749	0,98639	1,00000	-0,82488	-0,97385	-0,84012
Cap	0,19183	-0,89019	-0,89025	-0,67802	-0,44082	0,88498	-0,79977	0,78525	0,79602	-0,23141	-0,60452	0,98899	-0,72844	-0,82488	1,00000	0,92582	0,80687
cA	0,18714	-0,90796	-0,90954	-0,76025	-0,52074	0,86286	-0,84258	0,82151	0,83649	-0,24352	-0,68590	0,93331	-0,92365	-0,97385	0,92582	1,00000	0,85369
fa	0,19894	-0,98303	-0,98681	-0,86979	-0,76049	0,84965	-0,89496	0,85911	0,88547	-0,40695	-0,83429	0,78731	-0,80464	-0,84012	0,80687	0,85369	1,00000

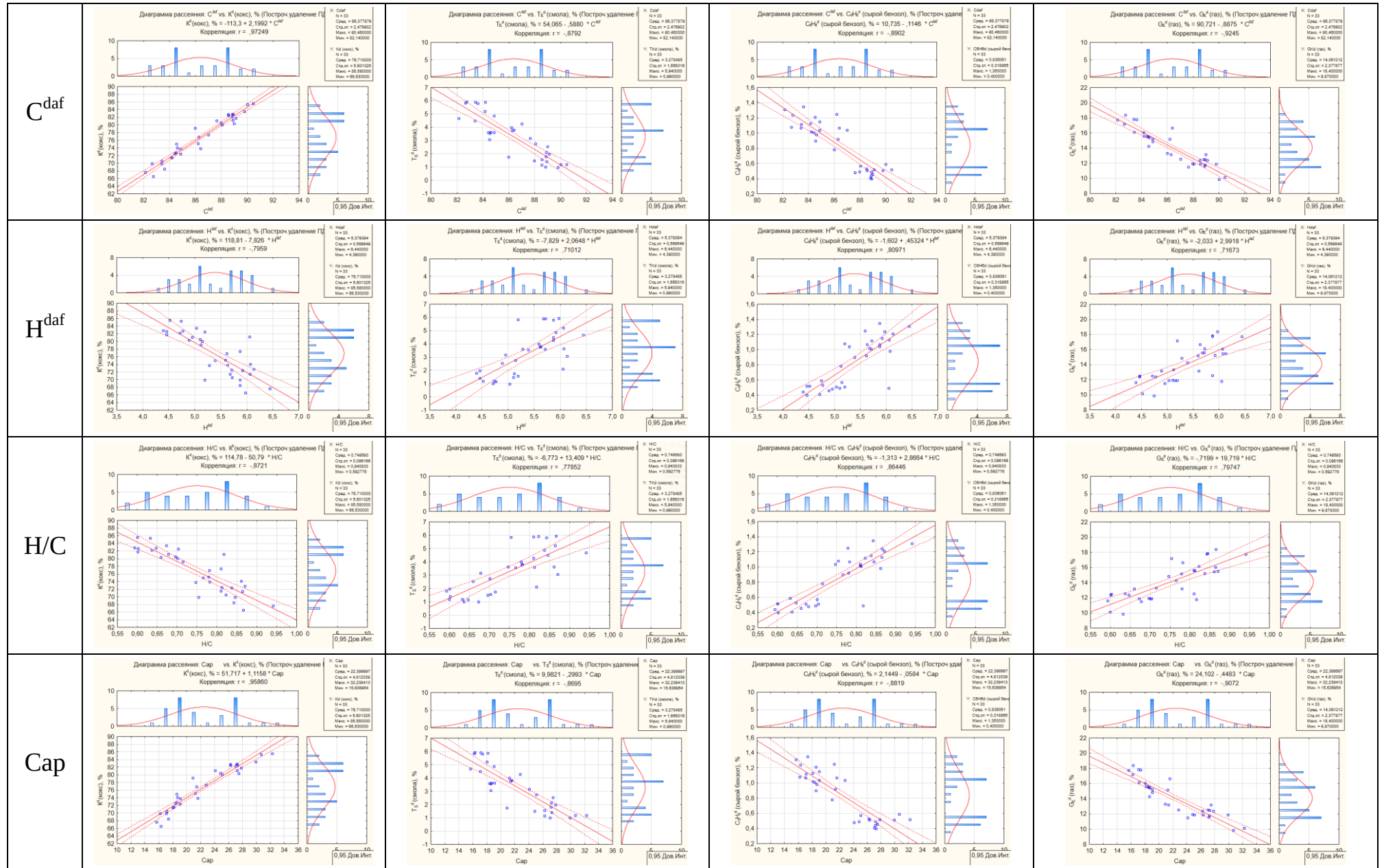
Цветом выделены параметры, исключенные в п. 3.4: желтым – пара SI-Iv; оранжевым – I-VtI-ΣOK; синим – C_{ap}-C^{daf}; зеленым – H/C-H^{daf}.

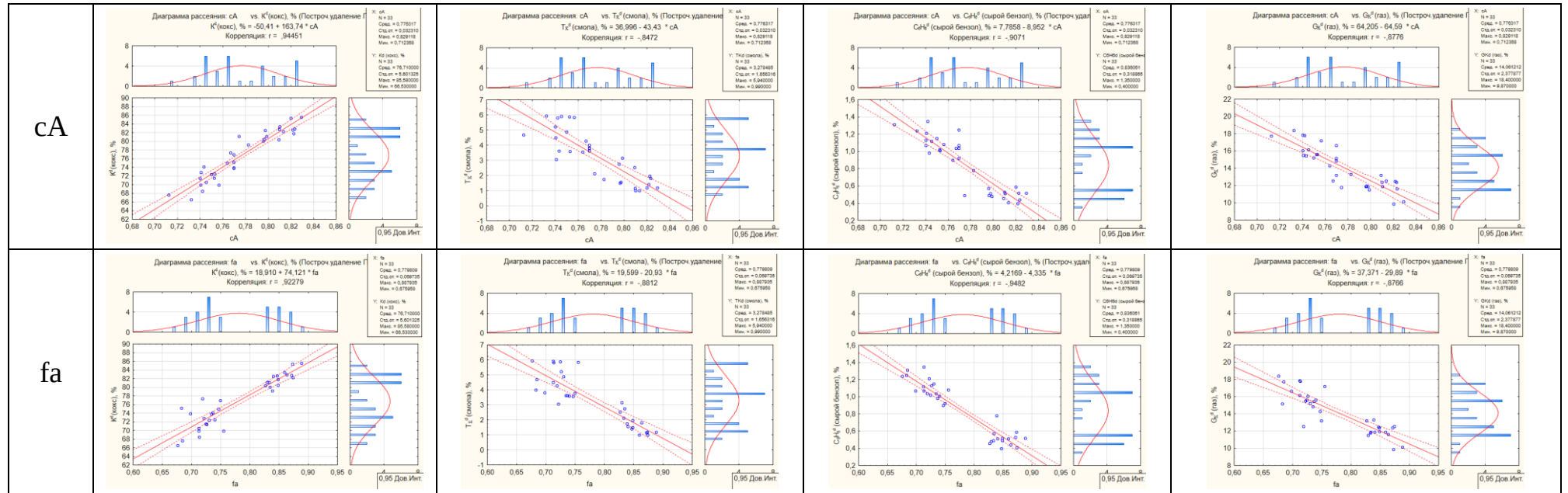
ПРИЛОЖЕНИЕ В ГРАФИКИ КОРРЕЛЯЦИИ



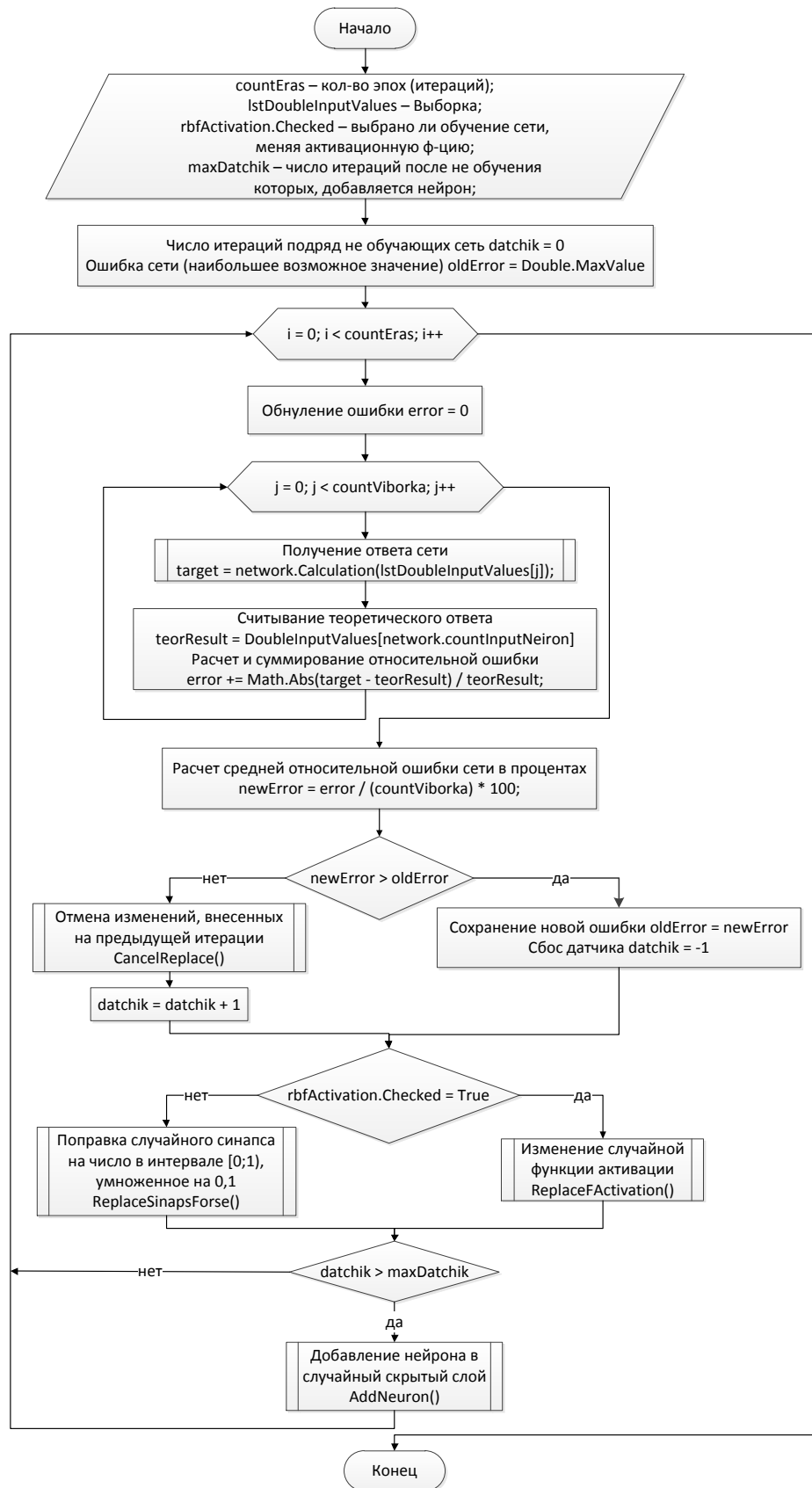








ПРИЛОЖЕНИЕ Г БЛОК-СХЕМА ОБУЧЕНИЯ СЕТИ



ПРИЛОЖЕНИЕ ДПРОТОКОЛ ПОДВЕДЕНИЯ ИТОГОВ ОПЫТНОЙ ЭКСПЛУАТАЦИИ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ



Публичное акционерное общество
«Кокс»
650021, Россия, Кемерово,
ул. 1-я Стахановская, д.6
Тел.: +7 (3842) 77-62-00
Факс: +7 (3842) 57-16-23
E-mail: office@kem.metholding.ru
www.kemkoks.ru

«Утверждаю»

Главный инженер ПАО «Кокс»

Колмаков Н.Г.

Подпись

2017 год

Дата



№ 15.00-1758 от «16» 11 2017 г.

Протокол подведения итогов опытной эксплуатации программы для ЭВМ

«Интеллектуальная информационная система прогнозирования выхода продуктов коксования» № 1

Настоящий протокол составлен по результатам проведения опытной эксплуатации программы для ЭВМ «Интеллектуальная информационная система прогнозирования выхода продуктов коксования» (далее - Программа) авторов Васильевой Е.В., Колмакова Н.Г., Черкасовой Т.Г., Субботина С.П., Пилецкой А.Б., Дороганова В.С., Кошелева Е.А., Неведрова А.В. Правообладатель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева».

Место испытаний: Центральная заводская лаборатория ПАО «Кокс», г. Кемерово, ул. 1-я Стахановская, д. 6.

Период проведения опытной эксплуатации: с 26 сентября 2017 г по 8 ноября 2017 г.

Опытная эксплуатация проводилась начальником ЦЗЛ ПАО «Кокс» Солодовым В.С.

Опытная эксплуатация проведена с целью оценки возможности и необходимости применения разработанной Программы в работе ЦЗЛ ПАО «Кокс», а также выявления недостатков в работе Программы.

Перечень требований, на соответствие которым проверялась Программа:

- 1) сравнение расчетных показателей выхода кокса, каменноугольной смолы, сырого бензола, коксового газа (далее – ХПК) с производственными показателями при составлении шихт из углей, используемых для прогнозирования;

- 2) оценки возможности применения Программы в условиях ЦЗЛ ПАО «Кокс»;
- 3) оценка необходимости применения Программы в условиях ЦЗЛ ПАО «Кокс»;
- 4) выявление недостатков в работе Программы.

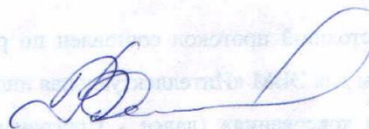
Результаты опытной эксплуатации:

- 1) расчетные показатели выхода ХПК для шихт из углей, используемых для прогнозирования, согласуются с производственными значениями в рамках указанной в Программе ошибки прогнозирования;
- 2) данная Программа может быть применена как инструмент, позволяющий оценить количественные показатели выхода ХПК на этапе подбора углей для коксования;
- 3) использование Программы дает возможность сократить затраты рабочего времени при предварительной оценке углей в процедуре подбора углей для коксования, что подтверждает необходимость ее применения в работе ЦЗЛ ПАО «Кокс»;
- 4) недостатков в работе Программы не выявлено.

Заключение:

Рекомендуем продолжить применение Программы в работе ЦЗЛ ПАО «Кокс» в режиме опытной эксплуатации.

Начальник ЦЗЛ



В.С. Солодов