

文章编号: 0253-2409(2012)12-1415-07

## 煤灰流动温度预测模型的研究

许洁, 刘霞, 李德侠, 周志杰, 王辅臣, 于广锁

(华东理工大学 煤气化及能源化工教育部重点实验室, 上海 200237)

**摘要:** 以181种煤样的灰流动温度为基础, 通过多元线性拟合以及逐步回归法, 建立了关联各煤灰氧化物成分以及煤灰酸碱比的流动温度预测模型, 相关性系数达0.934, 该模型预测值与实验结果有较好的一致性。利用FactSage软件计算出液相线温度, 建立流动温度与液相线温度之间的关联公式, 相关性系数达0.924, 说明该关联式同样具有较好的预测效果。

**关键词:** 煤灰; 灰流动温度; 灰熔点经验模型; FactSage; 相关性系数

**中图分类号:** TQ534 **文献标识码:** A

### Prediction model for flow temperature of coal ash

XU Jie, LIU Xia, LI De-xia, ZHOU Zhi-jie, WANG Fu-chen, YU Guang-suo  
(Key Laboratory of Coal Gasification and Energy Chemical Engineering of Ministry of Education,  
East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

**Abstract:** Ash flow temperature (FT) is an important index for coal gasification, determining the slagging model of coal-combustion and gasification process. On the basis of flow temperature of 181 coal ash samples, the FT prediction model associated with ash composition and acid/basic ratio was set up. The correlation coefficient is 0.934, indicating the FT prediction values is in good agreement with the experiment values. The liquidus temperature was calculated by FactSage software. The formula between FT and the liquidus temperature was established, and the correlation coefficient is 0.924.

**Key words:** coal ash; ash flow temperature; FT empirical model; factsage; the correlation coefficient

煤灰是煤中无机矿物质及金属有机物经高温灼烧后的残留物。其成分十分复杂, 主要是硅酸盐、硫酸盐以及多种金属氧化物的混合物, 这些成分决定了灰熔融特性<sup>[1,2]</sup>。煤灰熔融性是气化用煤的一个重要指标, 决定煤炭燃烧与气化过程排渣方式的选择。工程上一般采用煤灰熔融温度作为某一煤种是否适用于气流床气化技术的判断依据, 并用来控制气化炉的最高操作温度(高于流动温度50~100℃)<sup>[3,4]</sup>。为了实现控制煤灰熔融温度的目的, 以适应不同排渣方式的气化技术、扩大煤种的适用范围<sup>[5]</sup>, 对煤灰组成与煤灰熔融性关系的研究具有重要的意义<sup>[6]</sup>。

目前, 世界各国学者<sup>[7-13]</sup>在大量实验基础上总结出了基于煤灰组成的灰熔融温度预测公式。但由于煤灰成分的复杂多样性, 且各组分含量变化较大, 煤灰熔融温度与煤灰成分之间是一种不确定的数量关系, 因此, 两者间的普遍适用性关联式成为研究的热点。

本实验以181种世界各国较为常用的煤样为基础, 从实验数据和FactSage计算两个角度对灰熔融

流动温度进行预测。在灰熔点数据描述、分析、推断以及检验上采用现代统计理论与方法, 建立了新的更具普遍性和准确性的灰熔点经验模型。利用FactSage软件计算液相线温度(LT), 得到液相线温度与灰熔融温度之间的关联式。

### 1 实验部分

#### 1.1 煤灰样本的选取

选用世界上具有代表性的181种煤样的灰熔融温度为基础数据, 其中, 26种数据为实验室测量所得, 实验测定煤样主要灰分组成、酸碱比和流动温度(FT)见表1, 其余数据均从文献中收集<sup>[7,14,15]</sup>。

#### 1.2 煤灰样本代表性的统计检验

煤灰成分主要考虑SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、CaO、Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、SO<sub>3</sub>、TiO<sub>2</sub>、MgO、Na<sub>2</sub>O、K<sub>2</sub>O。煤灰组分是影响灰熔融性的主要因素, 有必要客观地探索灰成分与熔融特性之间的关系<sup>[16,17]</sup>, 并作出初步判断, 为建立更为准确的灰熔点预测模型奠定基础。探索性分析主要采用测定煤灰中各种组分与熔融性的相关性系数的方法。相关性系数是测定变量之间相关密切程度

收稿日期: 2012-04-28; 修回日期: 2012-06-13。

基金项目: 国家自然科学基金(21176078); 国家重点基础研究发展规划(973计划, 2010CB227005)。

联系作者: 于广锁, Tel: 021-64252974, Fax: 021-64251312, E-mail: gsyu@ecust.edu.cn。

和相关方向的指标,其计算公式如下:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2}} \quad (1)$$

式(1)中, $R > 0$  为正相关, $R < 0$  为负相关, $R = 0$  为不相关。 $R$  绝对值越大,相关程度越高。 $R = 1$  或

者 $-1$  时,两者呈完全正相关或完全负相关。完全正相关或负相关时,所有图点都在直线回归线上;点分布在直线回归线上下越离散, $R$  的绝对值越小。通常  $R$  的绝对值  $\geq 0.7$  是可以接受的, $R$  的绝对值  $\geq 0.8$  时认为两个变量有很强的线性相关性,而当  $R$  的绝对值  $\geq 0.9$  时是比较完美的。

表 1 实验测定煤样灰成分及灰熔融特征温度

Table 1 Chemical composition and fusibility property of coal ashes

No.	Ash composition w/%										Temperature $t/^\circ\text{C}$	
	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SO <sub>3</sub>	TiO <sub>2</sub>	MgO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	A/B <sup>*</sup>	FT	LT
1	41.36	31.82	10.87	5.11	5.06	1.50	1.76	0.75	0.40	3.95	1 370	1 522
2	34.92	27.10	19.01	4.88	8.50	1.25	2.07	0.68	0.40	2.34	1 320	1 478
3	32.67	24.73	29.00	4.17	3.92	1.00	2.24	0.58	0.31	1.61	1 260	1 336
4	37.98	14.05	20.80	7.15	12.70	0.67	1.62	2.64	0.94	1.59	1 147	1 362
5	52.79	17.02	8.90	6.36	8.97	0.67	1.86	0.69	1.64	3.62	1 285	1 326
6	26.40	14.17	23.56	13.14	16.56	0.65	2.00	1.71	0.48	1.01	1 198	1 282
7	42.44	26.06	12.03	6.53	6.78	1.02	1.18	1.54	1.28	3.08	1 335	1 454
8	40.24	17.56	13.43	7.69	9.87	0.96	5.81	2.14	1.58	1.92	1 165	1 362
9	38.11	16.13	12.25	9.57	12.23	0.89	5.62	1.93	1.50	1.79	1 176	1 389
10	20.94	10.91	21.45	15.26	13.34	0.57	12.78	3.27	0.26	0.61	1 134	1 421
11	32.68	15.24	18.68	7.66	19.02	0.70	1.64	2.71	0.35	1.57	1 217	1 397
12	58.61	18.09	5.98	6.43	4.23	0.71	1.79	0.78	2.41	4.45	1 258	1 389
13	42.04	30.57	8.30	6.54	6.15	1.65	1.61	0.87	0.66	4.13	1 356	1 550
14	44.20	27.35	9.68	3.42	5.86	1.18	6.29	0.38	1.02	3.50	1 340	1 430
15	24.24	8.99	5.77	50.96	0.97	0.34	2.21	1.17	1.02	0.55	1 515	1 493
16	24.23	11.06	22.20	12.72	14.31	0.74	10.56	2.73	0.27	0.74	1 248	1 193
17	40.24	16.23	16.14	14.89	0.56	0.91	5.31	2.87	1.59	1.41	1 200	1 415
18	39.78	16.15	16.53	15.34	0.67	0.87	4.75	3.11	1.54	1.38	1 192	1 412
19	40.08	17.94	14.25	9.67	6.54	0.93	5.96	2.18	1.52	1.76	1 429	-
20	50.80	28.44	3.30	9.67	4.02	1.29	0.72	0.22	0.87	5.45	1 548	-
21	39.76	22.05	23.47	7.64	3.11	1.00	1.46	0.16	0.66	1.88	1 247	1 435
22	36.67	20.27	29.10	7.07	2.86	0.80	1.66	0.15	0.61	1.50	1 233	1 352
23	35.32	19.49	31.57	6.82	2.74	0.60	1.75	0.14	0.58	1.36	1 236	1 300
24	23.15	13.46	27.21	15.62	13.57	0.52	2.96	1.98	0.30	0.77	1 280	-
25	50.79	30.75	5.39	3.85	4.54	1.35	0.99	0.47	1.21	6.96	1 519	1 635
26	37.78	15.76	14.77	12.55	14.24	1.28	1.60	0.59	0.63	1.82	1 284	1 399

A/B=acid/base=( SiO<sub>2</sub>+ Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>+ TiO<sub>2</sub>)/( CaO+ Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>+ MgO+ Na<sub>2</sub>O+ K<sub>2</sub>O) ;

“-”: liquidus temperature can not be calculated by FactSage software

计算以上 181 种煤样灰成分与流动温度间的相 关性系数,见表 2。

表 2 各组分与流动温度间的单相关性系数

Table 2 Correlation coefficient between ash components and flow temperature

Correlation coefficient	Ash composition										
	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SO <sub>3</sub>	TiO <sub>2</sub>	MgO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	S/A	A/B
$R$	0.311	0.636	-0.490	-0.169	-0.441	0.393	-0.313	-0.384	0.075	-0.290	0.675

从煤灰组分与流动温度间的相关方向角度分析,呈现正相关的包括 SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、TiO<sub>2</sub>与 K<sub>2</sub>O,呈

现负相关性的包括 CaO、Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、MgO、Na<sub>2</sub>O 与 SO<sub>3</sub>。单一灰成分与流动温度间的相关性普遍不够显

著,相关关系较显著( $|R| > 0.6$ )的仅有:  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; 相关关系很低即相关系数绝对值在0.2以下的包括  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  和  $\text{K}_2\text{O}$ ; 相关关系最低的是  $\text{K}_2\text{O}$  与流动温度,相关系数绝对值小于0.1,说明自变量与因变量之间很不相关。

将煤灰九种组分与流动温度间的相关程度由高到低排序,结果见表3。由表3可知,煤灰九种组分与流动温度间的相关关系按照密切程度可大致分为三个档,最高档包括三种组分,分别为  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{SO}_3$ ; 居中档有四种组分,分别为  $\text{TiO}_2$ 、 $\text{Na}_2\text{O}$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{SiO}_2$ ; 最低档包括  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  和  $\text{K}_2\text{O}$ 。

计算181种煤灰中各组分含量在全部煤灰中所占比重的样本均值,进一步探索组分含量大小与流

动温度的关系。平行对比表3和表4发现,除  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{TiO}_2$ 、 $\text{Na}_2\text{O}$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$  四种组分外,其他五种组分所占比重越小,对应相关性也越弱。对于  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{TiO}_2$ 、 $\text{Na}_2\text{O}$  和  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  四种组分,  $\text{SiO}_2$  含量虽最高,但与流动温度的相关性却居第七位;  $\text{TiO}_2$  含量虽接近于最低,但与流动温度的相关性却高居第四位;  $\text{Na}_2\text{O}$  的含量最低,但与流动温度的相关性却居第五位。对于  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , 因其中并非完全以  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  形式存在,还含有部分  $\text{FeO}$ , 所以该相关系数可能中和了  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  和  $\text{FeO}$  对流动温度的影响。

通过以上分析有助于更好地建立灰熔融温度预测模型,以免过分强调某些含量较高的组分或者忽略某些含量较低的组分对熔融温度的影响。

表3 煤灰组分与流动温度间的相关程度

Table 3 Relevant degree between coal ash components and flow temperature

No.	1	2	3	4	5	6	7	8	9
FT	$\text{Al}_2\text{O}_3$	$\text{CaO}$	$\text{SO}_3$	$\text{TiO}_2$	$\text{Na}_2\text{O}$	$\text{MgO}$	$\text{SiO}_2$	$\text{Fe}_2\text{O}_3$	$\text{K}_2\text{O}$

表4 各组分含量在全部煤灰中所占比重的样本均值排序

Table 4 Order of average value for each kind of coal ash composition

No.	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Component	$\text{SiO}_2$	$\text{Al}_2\text{O}_3$	$\text{CaO}$	$\text{Fe}_2\text{O}_3$	$\text{SO}_3$	$\text{MgO}$	$\text{K}_2\text{O}$	$\text{TiO}_2$	$\text{Na}_2\text{O}$
Average value w/%	41.986	21.296	13.460	9.816	6.474	2.789	1.130	1.093	0.910

## 2 煤灰流动温度预测公式的建立

根据181种煤灰熔融数据,按照不同组分构成因素进行回归研究,从而确定较为准确的回归方程,以实现效果较好的灰熔点预测公式的建立。

### 2.1 由九种组分建立的回归方程

以181种煤样的灰熔点数据为基础,九种煤灰成分为自变量,煤灰流动温度FT为因变量进行多元线性拟合,结果如下:

$$\begin{aligned} \text{FT} = & -4.258\text{SiO}_2 + 2.771\text{Al}_2\text{O}_3 - 5.942\text{CaO} \\ & - 3.361\text{Fe}_2\text{O}_3 - 6.176\text{SO}_3 - 1.826\text{TiO}_2 - 6.77\text{MgO} \\ & - 22.96\text{Na}_2\text{O} + 2.5\text{K}_2\text{O} + 1.627 \end{aligned} \quad (2)$$

式(2)的相关性系数  $R = 0.684$ , 可知流动温度与九种氧化物之间的一次线性相关性不明显。

因氧化物组分对熔融温度多数情况下呈现V字影响趋势,所以对各个氧化物组分平方后再与FT进行多元线性拟合得:

$$\begin{aligned} \text{FT} = & 0.0872\text{SiO}_2^2 + 0.2984\text{Al}_2\text{O}_3^2 \\ & + 0.1269\text{CaO}^2 + 0.1772\text{Fe}_2\text{O}_3^2 + 0.2313\text{SO}_3^2 \\ & + 0.5395\text{TiO}_2^2 + 0.7417\text{MgO}^2 - 4.964\text{Na}_2\text{O}^2 \\ & + 0.3227\text{K}_2\text{O}^2 + 918 \end{aligned} \quad (3)$$

式(3)的相关性系数  $R = 0.802$ , 对比式(2)的一

次线性关系,相关性系数有较大提高。

### 2.2 引入综合参数酸碱比建立的回归方程

以上分析为各个氧化物组分与FT之间的关联公式,由表2可知,综合参数酸碱比( $A/B = (\text{SiO}_2 + \text{Al}_2\text{O}_3) / (\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{CaO} + \text{MgO})$ )与流动温度FT之间相关性系数较大(0.675),为了综合考虑酸碱氧化物对熔融温度的影响,引入酸碱比建立回归方程:

$$\begin{aligned} \text{FT} = & 0.0547\text{SiO}_2^2 + 0.2344\text{Al}_2\text{O}_3^2 \\ & + 0.1133\text{CaO}^2 + 0.1742\text{Fe}_2\text{O}_3^2 + 4.332\text{SO}_3^2 \\ & + 6.096\text{TiO}_2^2 + 0.6217\text{MgO}^2 - 3.715\text{Na}_2\text{O}^2 \\ & + 0.4779\text{K}_2\text{O}^2 + 18.830A/B + 939.5 \end{aligned} \quad (4)$$

其中,  $R = 0.817$ , 相关性进一步增强,因此,将式(4)确定为回归方程。

### 2.3 流动温度回归方程的优化

由于181种煤样并非按照统一的条件和标准测量而得,灰熔点数据不一定具有良好的代表性,建立熔融温度回归方程时,为了一定程度上排除随机因素和偶然因素的干扰,降低数据随机误差的影响,进一步提高熔融数据和回归模型的代表性,使其达到令人满意的预测效果,本实验采用逐步回归法。即在回归方程建立之后,将原始数据代入公式方程中

检验,从而找到一个实际值与回归方程推算值相差最大的点,该点称为“最大误差离散点”,删除该点,以剩余的灰熔点数据为基础重新建立回归方程,如此反复,直至达到具有广泛代表性的灰熔点预测模型。

GB/T219-2008 煤灰熔融特性测试方法中规定煤灰熔融温度的再现值不超过 80 °C,通常文献将国标规定的再现值不超过 80 °C 作为经验公式模型预测值与实际测量值的偏差允许范围。

第一步,计算得到灰熔点实际测量值与回归方程测量值相距最大(418 °C)的点,即最大误差离散点。此处为第 172 个样品,删除该点后重新建立新的回归公式。以此类推,采用逐步回归法,至回归方程预测值与实际灰熔点数值的偏差不超过 80 °C,优化过程结束,此时得到的方程即为最终的熔融温度预测模型。式(4)经过了 28 步优化循环,即删除了 28 个最大误差离散点后,剩余所有煤样的流动温度预测值与其流动温度实验值之间的偏差均低于 80 °C,得到的模型公式(5):

$$FT = 0.091SiO_2^2 + 0.2701Al_2O_3^2 + 0.1489CaO^2 + 0.2088Fe_2O_3^2 + 6.827SO_3 + 4.564TiO_2 + 0.5237MgO^2 - 2.852Na_2O^2 + 0.9676K_2O^2 + 9.891A/B + 837.5 \quad (5)$$

其中, $R=0.934$ ,相关性系数较高,说明模型方程(5)具有较好的预测效果。图 1 为剩余 153 个煤样的灰分及酸碱比覆盖范围。

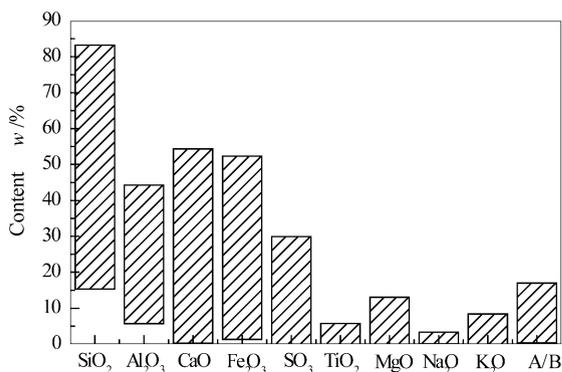


图 1 煤样的灰分及酸碱比覆盖范围

Figure 1 Composition ranges of coal ash samples

### 3 煤灰流动温度预测公式的对比

选取三个较为常用的熔融温度经验公式与模型(5)作对比,依据 153 个具有代表性的煤灰流动温度数据,通过计算并对比经验公式预测值与实际测量值之间的偏差。常用的经验公式描述如下:

#### 3.1 经验公式 I

Winegartner 等<sup>[9]</sup>以美国中东部伊利诺伊州第 6 号煤层和美国中西部堡联盟煤层煤样为研究对象,确定了关联 52 个自变量参数的熔融温度预测公式,Segglani 等<sup>[11]</sup>在其基础上进行了系数修正和简化,得到如下公式:

$$FT = 2240 \times e^{0.15sv^2} + 6.13 \times Al_2O_3 - 13.8 \times CaO + 0.259 \times [FeO]^2 + 0.278 \times [Al_2O_3]^2 + 0.736 \times [MgO]^2 + 0.259 \times FeO \times CaO - 0.73 \times FeO \times MgO + 2.03 \times [SiO_2/Al_2O_3]^2 + 92[B/A]^2 + 231 \times SV^2 - 1340 \quad (6)$$

式中,  $SV = SiO_2 / (SiO_2 + Fe_2O_3 + CaO + MgO)$

$A = SiO_2 + Al_2O_3 + TiO_2 + P_2O_5$

$B = Fe_2O_3 + CaO + MgO + K_2O + Na_2O$

根据经验公式 I 的煤灰成分适用范围,删除 153 个煤样中煤灰成分不在该范围内的 11 个煤样,依据剩余煤灰成分计算该经验公式流动温度预测值与实际测量值的偏差  $\sigma$ ,结果见表 5。

#### 3.2 经验公式 II

Kahramanac 等<sup>[18]</sup>以澳大利亚煤样为研究对象,引入 85% movement 参数建立了如下公式模型:

$$FT = 0.903 \times (1340 \times \lg Al_2O_3 - 251 \times \lg Fe_2O_3 - 106 \times \lg CaO - 172) + 158 \quad (7)$$

该经验公式流动温度预测值与实际测量值的偏差结果见表 5。

#### 3.3 经验公式 III

戴爱军<sup>[19]</sup>研究了煤灰主要成分与煤灰酸碱比对灰熔融特性的影响,建立了预测流动温度的经验模型:

$$y = 1463.055 - 376.865x + 181.35x^2 - 33.485x^3 + 2.7355x^4 - 0.0825x^5 \quad (8)$$

式中,  $x = (SiO_2 + Al_2O_3 + TiO_2) / (Fe_2O_3 + CaO + MgO)$ ,  $y$  表示流动温度 FT。

据经验公式 III 的煤灰成分适用范围,计算该经验公式流动温度预测值与实际测量值的偏差  $\sigma$ ,结果见表 5。

从表 5 可知,经验公式 III 和公式(5)相对经验公式 I 和经验公式 II 预测煤灰流动温度的准确性较好,满足预测偏差小于 50 °C 的煤样比例分别为 68.28% 和 83.01%,且公式(5)预测偏差大于 70 °C 的煤样比例很小。

因此,在公式的灰分适用范围内,新建立的经验公式(5)具有良好的流动温度预测效果。

表 5 灰流动温度预测效果  
Table 5 Effect of prediction ash flow temperatures

	Empirical formula I	Empirical formula II	Empirical formula III	Formula (5)
Number of coal saamples	142	153	145	153
$\sigma < 50\text{ }^{\circ}\text{C}$	23	32	99	127
$50\text{ }^{\circ}\text{C} < \sigma < 70\text{ }^{\circ}\text{C}$	14	7	19	19
$70\text{ }^{\circ}\text{C} < \sigma < 80\text{ }^{\circ}\text{C}$	8	6	10	7
$\sigma > 80\text{ }^{\circ}\text{C}$	97	108	17	0

#### 4 煤灰流动温度预测公式的准确性检验

表 6 为实验测定煤样灰成分。选用实验室测得的七种煤灰流动温度数据来检验公式(5)预测灰流动温度的准确性,将流动温度测量值和预测值的误

差比较,计算偏差见表 7。由表 7 可知,偏差均小于  $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。可见,在公式的适用范围内,流动温度模型(5)具有良好的预测效果。

表 6 实验测定煤样灰成分  
Table 6 Chemical composition of coal ashes

Name	Chemical composition w / %								
	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SO <sub>3</sub>	TiO <sub>2</sub>	MgO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O
Slag of Ning coal	24.24	8.99	5.77	50.96	0.97	0.34	2.21	1.17	1.02
Lump coal of yangyi area	24.23	11.06	22.20	12.72	14.31	0.74	10.56	2.73	0.27
Fine coal of yangyi area	40.08	17.94	14.25	9.67	6.54	0.93	5.96	2.18	1.52
Number 1 slag	40.24	16.23	16.14	14.89	0.56	0.91	5.31	2.87	1.59
Number 2 slag	39.78	16.15	16.53	15.34	0.67	0.87	4.75	3.11	1.54
Mei hua jing	39.42	15.76	11.98	6.06	14.84	0.88	7.62	1.66	1.17
Suo pu yi 3	48.78	17.61	16.92	4.26	6.33	0.97	2.00	0.56	1.47

表 7 公式(5)灰流动温度预测值与测量值的偏差  
Table 7 Deviation temperatures of actual and calculated FT in correlation (5)

Name	FT measured value t / $^{\circ}\text{C}$	FT calculated value t / $^{\circ}\text{C}$	Deviation
Slag of Ning coal	1 515	1 473	42
Lump coal of yangyi area	1 245	1 177	68
Fine coal of yangyi area	1 190	1 193	3
Number 1 slag	1 210	1 156	54
Number 2 slag	1 190	1 150	40
Mei hua jing	1 220	1 223	3
Suo pu yi 3	1 250	1 261	11

#### 5 煤灰流动温度与液相线温度关系模型的建立

随着 FactSage 计算软件的普遍应用,煤灰流动温度除了运用实验数据预测,还可以采用液相线温度预测。

FactSage 软件是 FACT-Win/F\* A\* C\* T 和 ChemSage/SOLGSMIX 两个热化学软件包的结合,是基于最小 Gibbs 函数原理建立起来的一种热力学平衡计算程序。Equilib 模型是 FactSage 的核心模型,该模型采用 Gbbis 能最小化算法和 ChemSage 中热化学函数,在煤灰熔融特性的研究计算中提供了

很强的适应性<sup>[20]</sup>。液相线温度 LT 是采用 FactSage 计算的 代表煤灰三角锥呈完全熔融流动状态时对应的温度,可通过 Equilib 模型获得<sup>[21]</sup>。

灰流动温度与液相线温度间具有很好的相关性,通常采用 FactSage 计算煤灰液相线温度,进而预测灰熔融温度<sup>[21]</sup>,可建立流动温度与液相线温度间的关联式:

$$T_{\text{FT}} = a_{\text{FT}} + b_{\text{FT}} T_{\text{liquidus}} \quad (9)$$

表 1 中包含了经 FactSage 软件计算得到的 153 个煤样灰液相线温度,图 2 代表 153 个以煤灰流动温度 FT 与各自对应的液相线温度 LT 为坐标的数据点,采用一元线性拟合模拟液相线温度与该流动

温度之间的关系式如下:

$$FT = 0.74936LT + 216.249 \quad (10)$$

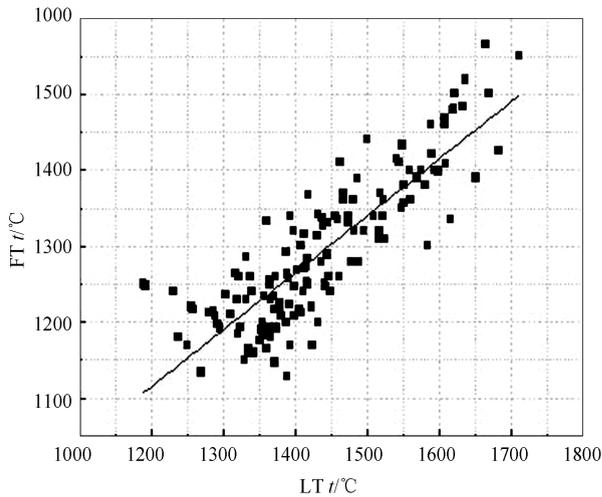


图2 灰流动温度与液相线温度之间的关系

Figure 2 Relationship of FT and LT

其中,相关性系数  $R = 0.924$ 。由此可见,煤灰流动温度与液相线温度之间有较强的线性相关性,式(10)对于预测煤灰熔融温度具有一定的普适性和准确性。

### 参考文献

- [1] 芦涛,张雷,张晔,丰芸,李寒旭. 煤灰中矿物质组成对煤灰熔融温度的影响[J]. 燃料化学学报, 2010, **38**(1): 23-28.  
(LU Tao, ZHANG Lei, ZHANG Ye, FENG Yun, LI Han-xu. Effect of mineral composition on coal ash fusion temperature[J]. Journal of Fuel Chemistry and Technology, 2010, **38**(1): 23-28.)
- [2] 龙永华,高晋生. 煤中矿物质与气化工艺的选择[J]. 洁净煤技术, 1998, **4**(3): 34-37.  
(LONG Yong-hua, GAO Jin-sheng. The effect of mineral matter of coal on LTS gasifying process[J]. Clean Coal Technology, 1998, **4**(3): 34-37.)
- [3] JAK E. Prediction of coal ash fusion temperatures with the F \* A \* C \* T thermodynamic computer package[J]. Fuel, 2002, **81**(13): 1655-1668.
- [4] SONG W J, TANG L H, ZHU X D, WU Y Q, ZHU Z B, KOYAMA S. Prediction of Chinese coal ash fusion temperatures in Ar and H<sub>2</sub> atmospheres[J]. Energy Fuels, 2009, **23**(4): 1990-1997.
- [5] 禹立坚,黄镇宇,程军,潘华引,周俊虎,岑可法. 配煤燃烧过程中煤灰熔融性研究[J]. 燃料化学学报, 2009, **37**(2): 139-144.  
(YU Li-jian, HUANG Zhen-yu, CHENG Jun, PAN Hua-yin, ZHOU Jun-hu, CEN Ke-fa. Study on the coal ash fusibility during blending coal combustion[J]. Journal of Fuel Chemistry and Technology, 2009, **37**(2): 139-144.)
- [6] 戴爱军,杜彦学,谢欣馨. 煤灰成分与灰熔融性关系研究进展[J]. 煤化工, 2009, (4): 16-19.  
(DAI Ai-jun, DU Yan-xue, XIE Xin-xin. Research progress on the relationship between coal ash components and ash fusion character[J]. Coal Chemical Industry, 2009, (4): 16-19.)
- [7] 张德祥,龙永华,高晋生. 煤灰中矿物的化学组成与灰熔融性的关系[J]. 华东理工大学学报, 2003, **29**(6): 590-594.  
(ZHANG De-xiang, LONG Yong-hua, GAO Jin-sheng. Relationship between the coal ash fusibility and its chemical composition[J]. Journal of East China University of Science and Technology, 2003, **29**(6): 590-594.)
- [8] 郝丽芬,李东雄,靳智平. 灰成分与灰熔融性关系的研究[J]. 电力学报, 2006, **21**(3): 294-296.  
(HAO Li-fen, LI Dong-xiong, JIN Zhi-ping. The research of relationship about ash composition and ash melt[J]. Journal of Electric Power, 2006, **21**(3): 294-296.)
- [9] WINEGARTER E C, ROLDERS B T. An empirical study of the relation of chemical properties to ash fusion temperature[J]. Trans ASME J Eng Power, 1975, **97**(3): 395-401.
- [10] SEGGIANI M. Empirical correlations of the ash fusion temperatures and temperature of critical viscosity for coal and biomass ashes[J]. Fuel, 1999, **78**(9): 1121-1125.
- [11] SEGGIANI M, PANNOCCHIA G. Prediction of coal ash thermal properties using partial least-squares regression[J]. Ind Eng Chem Res, 2003, **42**(20): 4919-4926.
- [12] LOLJA S A. Correlation between ash fusion temperatures and chemical composition in Albanian coal ashes[J]. Fuel, 2003, **81**(17): 2257-2261.
- [13] LOLJA S A, HAXHI H, DHIMITRI R. Ash composition of the main Albanian coals[J]. Fuel, 2000, **79**(2): 207-209.

## 6 结论

借助现代统计理论对181种煤灰流动温度分析表明,煤灰各个氧化物以及酸碱比与灰流动温度之间存在各不相同的关联性,其中,酸碱比与灰流动温度的相关性系数最大。

以181种煤灰熔融温度数据为基础,通过多元线性拟合以及逐步回归法,建立了关联各煤灰氧化物成分以及酸碱比的流动温度预测模型。其中,酸碱比的流动温度预测模型预测效果较好,相关性系数达0.934。误差分析表明,相比于常用灰熔融温度经验公式,该模型准确性和普适性更好。该模型为:

$$FT = 0.091SiO_2^2 + 0.2701Al_2O_3^2 + 0.1489CaO^2 + 0.2088Fe_2O_3^2 + 6.827SO_3 + 4.564TiO_2 + 0.5237MgO^2 - 2.852Na_2O^2 + 0.9676K_2O^2 + 9.891A/B + 837.5$$

以153种煤样为基础,利用FactSage软件计算液相线温度,建立了流动温度与液相线温度之间的关联公式:  $FT = 0.74936LT + 216.249$ 。相关性系数达0.924,预测值与实验值有较好的一致性。

- [14] 王敏龙, 邓蜀平, 郝栩. 配煤降低潞安煤灰熔融温度及其机理研究[J]. 煤炭转化, 2007, **30**(3): 25-30  
(WANG Min-long, DENG Shu-ping, HAO Xu. An experimental study of the effect of Lu'an coal blending on coal ash fusibility.) [J].  
Coal Conversion, 2007, **30**(3): 25-30)
- [15] 刘新兵, 陈菟. 煤灰熔融性的研究[J]. 煤化工, 1995, **33**(2): 48-53.  
(LIU Xin-bing, CHEN Chong. Study on coal ash fusibility[J]. Coal Chemical Industry, 1995, **33**(2): 48-53.)
- [16] VASSIEV S V, KITANO K, TAKEDA S, TSURUE T. Influence of mineral and chemical composition of coal ashes on their fusibility[J].  
Fuel Process Technol, 1995, **45**(1): 27-51.
- [17] 贾明生, 张乾熙. 影响煤灰熔融性温度的控制因素[J]. 煤化工, 2007, **35**(3): 1-5.  
(JIA Ming-sheng, ZHANG Qian-xi. Key factors affecting fusion temperature of coal ash[J]. Coal Chemical Industry, 2007, **35**(3): 1-5.)
- [18] KAHRAMANAC H, BOS F, REIFENSTEIN A, COIN C D A. Application of a new ash fusion test to Theodore coals[J]. Fuel, 1998, **77**  
(10): 1005-1011.
- [19] 戴爱军. 煤灰成分对灰熔性影响研究[J]. 洁净煤技术, 2007, **13**(5): 23-26.  
(DAI Ai-jun. Reserch on influence of ash components in coal ash on ash fusibility[J]. Clean Coal Technology, 2007, **13**(5): 23-26.)
- [20] BALE C W, BELISLE E, CHARTRAND P, DECTEROV S A, ERIKSSON G, HACK K, JUNG I-H, KANG Y-B, MELANCON J,  
PELTON A D, ROBELIN C, PETERSEN S. FactSage thermochemical software and databases: Recent developments [J]. CALPHAD:  
Comput Coupling Phase Diagrams Thermochem, 2009, **33**(2): 295-311.
- [21] JAK E. Prediction of coal ash fusion temperatures with the F \* A \* C \* T thermodynamic computer package[J]. Fuel, 2002, **81**(13): 1655-  
1668.

## 欢迎订阅第41卷(2013年)《燃料化学学报》

《燃料化学学报》是中国化学会和中国科学院山西煤炭化学研究所主办,科学出版社出版的学术性刊物。创刊于1956年,公开发行。本刊是我国能源领域中重要的学术性期刊。设有研究快报、研究论文、研究简报、综述和知识介绍等栏目。主要报道国内在燃料化学、化工及其交叉学科的基础研究等领域内的科技新成就和最新进展,刊登具有较高学术水平和应用价值的论文,既传播知识,交流学术思想,又促进了经济发展并为培养人才作贡献。

《燃料化学学报》已连续多年入选国内外检索系统,国外如:“CA”“Ei”“AJ”“International Chemical Engineering”“Fuel and Energy Abstract”“Coal Abstracts”美国“American Petroleum Institute Central Abstracting and Information Services”“美国剑桥科技文摘(CSA)”等。国内如:《中国学术期刊文摘》《中国化学化工文摘》《中国科学引文数据库》《中国化学文献数据库》《中国科技期刊题名数据库》《中国科技论文统计与分析数据库》《中国矿业文摘》《中国科技论文统计与分析》等;连续几年入选“CA”千种表。已成为《中国期刊网》《中国学术期刊(光盘版)》全文收录期刊、《中国学术期刊综合评价数据库》源期刊、《万方数据系统期刊数据库》源期刊,2001年度获新闻出版总署授予的“中国期刊方阵双效期刊”。并多次获国家、中国科学院、华北地区优秀期刊奖。

《燃料化学学报》为月刊,A4开本,128页,全部为铜版纸印刷,每册定价25元,全年300元(含邮资)。欢迎广大读者在当地邮局订阅(邮政代号:22—50)。若需过刊或漏订,可随时与编辑部联系。

联系地址:太原市桃园南路27号《燃料化学学报》编辑部

邮政编码:030001

电话:0351-2025214 4066044

传真:0351-2025214

电子信箱:rlhx@sxicc.ac.cn