

固定床熔渣气化高速射流区气固运动行为研究

邹震江^{1,2}, 陈贵锋², 董卫果², 晁俊楠², 王雪², 郭辰辰²

(1. 煤炭科学研究总院, 北京 100013; 2. 煤炭资源高效开采与洁净利用国家重点实验室, 北京 100013)

摘要:为研究固定床熔渣气化炉中气化剂喷嘴安装角度、喷嘴口径、气化剂射流速度与高速射流区深度的关系, 利用模化原理对工业级气化炉高速射流区建立 $\phi 50$ cm 二维冷态模型, 采用精密皮托管测量颗粒床层中的气体速度分布, 并采用无量纲分析方法, 对试验数据进行处理。结果表明: 射流穿透深度与喷嘴口径的二次方大致成正比关系; 射流深度随喷嘴安装角度的增大呈现先增加后减小的趋势, 使得射流深度最大的安装角度为 $17^\circ \sim 20^\circ$; 射流深度随射流流速增加呈增大趋势, 并拟合出气化剂喷嘴安装角度、射流速度、喷嘴口径与射流区深度的无量纲关系式。

关键词:固定床熔渣气化炉; 高速射流区; 冷态模型; 相似理论; 穿透深度

中图分类号: TQ54

文献标志码: A

文章编号: 1006-6772(2017)03-0045-06

Research on the gas-solid two-phase movement behavior in turbulent flow region of fixed bed slagging gasifier

Zou Zhenjiang^{1,2}, Chen Guifeng², Dong Weiguo², Chao Junnan², Wang Xue², Guo Chenchen²

(1. China Coal Research Institute, Beijing 100013, China; 2. State Key Laboratory of Coal Mining and Clean Utilization, Beijing 100013, China)

Abstract: In this paper, the relationship between the slag gasifier nozzle angle, nozzle diameter, jet velocity and turbulent flow region depth in the fixed bed gasifier were investigated. The study was carried out on a two-dimensional cold-state experimental model of industrial-scale gasifier established according to similarity theory. The gas velocity distribution in the granular bed was measured by the precision pitot tube, and the data was processed by dimensionless method. Results show that jet penetration depth and the quadratic of nozzle diameter are strongly related. Nozzle jet depth presents a trend of increase before decrease with the increase of nozzle angle. Jet depth is the largest when installing angle varies from 17° to 20° . The jet depth increases with the increasing of jet gas velocity. The dimensionless relation of gasification agent nozzle angle, jet velocity, nozzle diameter and turbulent zone depth are elucidated.

Key words: fixed bed slagging gasifier; turbulence flow region; cold-state model; similarity theory; penetration depth

0 引 言

煤气化是现代煤化工的产业龙头^[1], 目前国内各种类型的气化炉以固定床气化炉为主, 其中固定床液态排渣气化炉具有煤转化合成气效率高、氧气耗量低、蒸气利用率高、废水量低、适用煤种范围广等优点^[2-4]。现运行的固定床液态排渣气化炉出现了偏烧、沟流、下渣口挂渣堵塞等问题, 更有公司在鼓风口长期黑管状态下运行。出现这些问题的原因多是操作人员对气化炉喷嘴区认识不足, 鼓风口操

作参数设置错误^[5]。经由气化剂喷嘴形成的高速射流在床层中的穿透深度是影响熔渣气化炉运行的重要指标之一。国内外学者对射流穿透规律进行了研究。Lacey^[6]认为熔渣气化炉可以扩大固定床气化炉的煤种适用性。何优优^[7]建立了冷态模拟装置对固定床层进行研究, 总结出固定床层内物料流动区和死区的停留时间关系。鉴于固定床熔渣气化炉与炼铁高炉结构上有部分相似, 因此可借鉴高炉关于鼓风口高速回旋区的研究方法对气化炉高速射流区进行研究。张生富等^[8-9]以重钢5号高炉实际

收稿日期: 2016-11-15; 责任编辑: 白娅娜 DOI: 10.13226/j.issn.1006-6772.2017.03.009

基金项目: 国家高技术研究发展计划(863计划)资助项目(2015AA050505)

作者简介: 邹震江(1991—), 男, 山东聊城人, 硕士研究生, 从事煤气化研究工作。E-mail: zouzhenjiang@sina.cn

引用格式: 邹震江, 陈贵锋, 董卫果, 等. 固定床熔渣气化高速射流区气固运动行为研究[J]. 洁净煤技术, 2017, 23(3): 45-50.

Zou Zhenjiang, Chen Guifeng, Dong Weiguo, et al. Research on the gas-solid two-phase movement behavior in turbulent flow region of fixed bed slagging gasifier[J]. Clean Coal Technology, 2017, 23(3): 45-50.

尺寸和操作参数为基础,依据相似理论建立冷态模型,采用小米、绿豆为炉料,对回旋区大小和形状进行研究,得到风口直径、气速与回旋区大小和形状的关系。Sastry 等^[10]利用冷态试验数据回归分析得到回旋区穿透因子。笔者拟以工业级熔渣气化炉为原型,通过模化方法建立冷态模型,研究气化剂喷嘴口径、气化剂射流速度、气化剂喷嘴安装角度与高速射流区深度的关系,并用无量纲的方法拟合数据,得到预测气化炉高速射流区深度的数学模型。

1 固定床熔渣气化工艺及冷态试验

1.1 固定床熔渣气化工艺

固定床液态排渣气化炉结构如图1所示。固定床液态排渣气化炉是耐压筒体结构,操作压力为2~4 MPa。在鲁奇气化炉基础上,取消了炉篦^[11],由固态排渣改为液态排渣,并增加了气化剂喷嘴。气化剂不再由炉篦均布,而是通过对置喷嘴高速射入炉内,形成高温射流区。固定床液态排渣气化炉采用液态排渣方式,在气化炉的底部,对置式喷嘴将高压气化剂喷入燃烧区^[12],高速气体扰动炉体下部煤料,形成气液固三相的高速射流区,氧气与煤料中的碳剧烈反应释放出大量热,将核心区加热至1 500~2 000 ℃,提高了气化炉的气化强度和热效率。气化剂中水蒸气分解量超过90%,大幅降低了水蒸气的消耗量。炉内温度的提高,使煤反应活性对气化速度的影响大幅降低。煤料经过燃烧、气化反应后产生的灰渣在高温下熔化,液态灰渣的密度约为2 600 kg/m³,参与气化的煤料密度为800~1 500 kg/m³,因此在液渣池内,液态灰渣在下层,而煤料则漂浮在液渣层上,当积累到一定液位,液渣自动排入水冷装置,形成玻璃状固体。

气化剂喷嘴附近的高速射流区正常运行是固定床熔渣气化炉长期稳定运行的关键,目前在运行的固定床熔渣气化炉由于喷嘴设计参数及操作参数等原因出现偏烧、沟流、耐火料烧蚀等问题。高速射流区的深度及形状对气化炉下部燃烧反应及床层温度分布影响很大,同时高速射流区内的气化剂与焦炭剧烈反应产生大量气体,高温气体是气化炉生产煤气所需化学能和热能的主要来源。因此气化炉高速射流区的形成及反应情况将直接影响气化炉床层结构、煤气组分以及操作稳定性。本文通过试验研究不同气化剂喷嘴直径、气化剂喷射速度、喷嘴安装角度对高速射流在固定床层内穿透深度的影响。

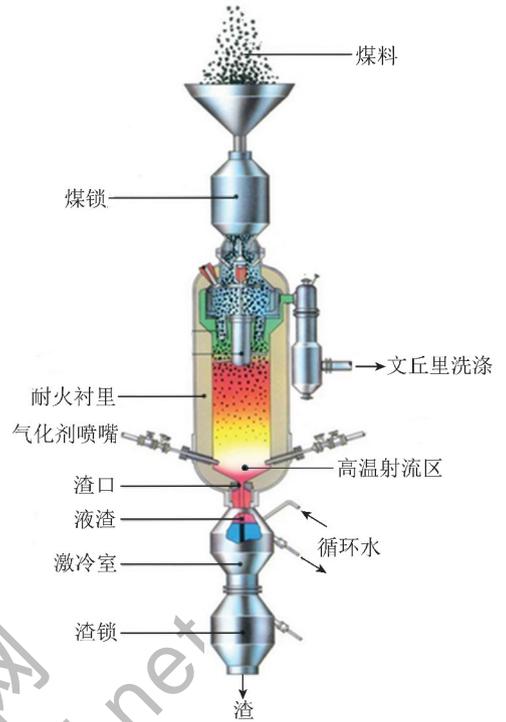


图1 固定床液态排渣气化炉结构

Fig. 1 Sketch of fixed bed slagging gasifier

1.2 冷态模拟装置及参数确定

固定床熔渣气化工艺反应温度高,气化压力大,因此直接对工业级气化炉进行研究难度较大。国内外研究表明,一般情况下在冷态等温模型上得到的流速分布、流体流型、压力分布规律与热态实际设备的情况接近,得到的流动特征与通道几何性质、运行工况之间的规律适用于热态设备。本文采用模化原理,通过对工业级气化炉参数的模化处理,搭建小型冷态模拟装置,用于研究固定床熔渣气化高速射流区的气化剂穿透规律。

以工业级3.6 m、4 MPa操作条件下的固定床熔渣气化炉为原型进行冷态模化试验研究,忽略气化炉内的化学反应、传热,将气化剂视为不可压缩流体,煤料视为无弹性球形颗粒。固体颗粒在床层中遵循动量守恒与质量守恒。

动量守恒方程为

流体相:

$$\operatorname{div}(\varepsilon \bar{u}) = 0 \quad (1)$$

颗粒相:

$$\operatorname{div}[(1 - \varepsilon)\bar{v}] = 0 \quad (2)$$

式中, ε 为孔隙率; \bar{u} 为流体相的速度; \bar{v} 为颗粒相的速度。

质量守恒方程为

流体相:

$$\rho_f \varepsilon \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{u} \cdot \text{grad } \bar{u} \right) + \bar{i} \rho_s g \varepsilon + \text{grad } d_s + \beta (\bar{u} - \bar{v}) = 0 \quad (3)$$

颗粒相:

$$\rho_s (1 - \varepsilon) \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \bar{v} \cdot \text{grad } \bar{v} \right) + \bar{i} \rho_s g (1 - \varepsilon) - \beta (\bar{u} - \bar{v}) = 0 \quad (4)$$

式中, ρ_f 为流体相密度; t 为时间; ρ_s 为颗粒相密度; g 为重力加速度; d_s 为固体颗粒直径; \bar{i} 、 β 为常数。

对方程进行无量纲处理, 得到无量纲的流体运动方程, 即

$$\frac{\rho_f}{\rho_s} \varepsilon \left[\frac{\partial \bar{u}'}{\partial t'} + (\bar{u}' \cdot \nabla) \bar{u}' \right] + \frac{\bar{i} \rho_f g \varepsilon}{\rho_s u_o^2} + \nabla \left(\frac{p}{\rho_s u_o^2} \right) +$$

$$\frac{\beta d_s}{\rho_s u_o} (\bar{u}' - \bar{v}') = 0 \quad (5)$$

无量纲颗粒运动方程:

$$(1 - \varepsilon) \left[\frac{\partial \bar{v}'}{\partial t'} + (\bar{v}' \cdot \nabla) \bar{v}' \right] + \frac{\bar{i} g d_s}{u_o^2} (1 - \varepsilon) - \frac{\beta d_s}{\rho_s u_o^2} (\bar{u}' - \bar{v}') = 0 \quad (6)$$

式中, \bar{u}' 为流体相的无量纲速度; \bar{v}' 为颗粒相的无量纲速度; p 为流体压强; u_o 为气相速度。

本文研究对象仅为气化炉的高速射流区, 由式(5)和式(6)提取出风速较高情况下的模化准数, 分别为 $\frac{g d_s}{v}$ 、 $\frac{\rho_f}{\rho_s}$ 、 $\frac{J}{d_s}$ 、 $\frac{D}{d_s}$ 、 Φ_s 、颗粒分布及反应器结构。其中, v 为气流速度, J 为反应器高度, D 为反应器直径, Φ_s 为床层孔隙率。由模化准数求得冷模装置的尺寸及试验参数, 见表1。

表1 冷模试验参数

Table 1 Experiment parameter of cold-state model

项目	固体颗粒密度 $\rho_s /$ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	气体密度 $\rho_f /$ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	固体颗粒 直径 d_s / m	射流风速 $v /$ ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	反应器高度 J / m	反应器直径 D / m	喷嘴口径 R / mm
实际气化炉	1 400	22.28	0.01	250	13	3.6	24
冷态试验装置	63.6	1.186	0.001 39	93	180	0.5	3.333

冷态试验主体装置的三视图如图2所示。根据实际气化炉的尺寸通过模化算法得到冷态试验装置尺寸。

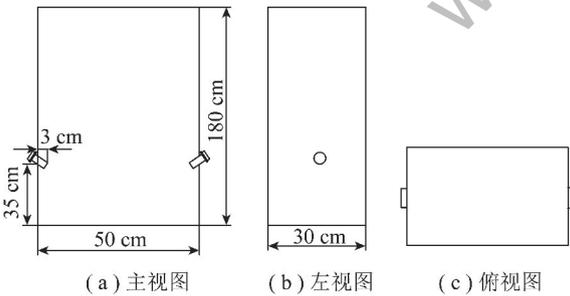


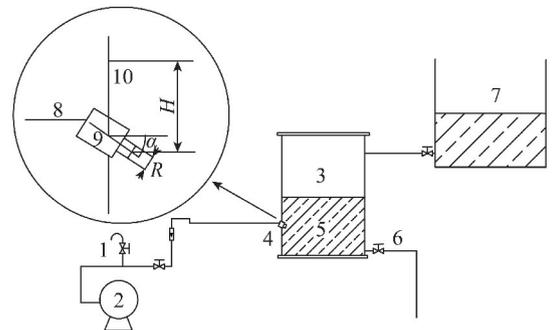
图2 冷态模拟主体装置尺寸

Fig. 2 Size of main device of cold-state simulation

1.3 试验材料及装置

试验采用重质聚丙烯 EPS 泡沫塑料作为冷态试验颗粒, 粒径为 1 ~ 2 mm, 实密度 67.3 kg/m^3 , 常温空气模拟气化剂。试验流程如图3所示。采用空气压缩机进气, 压缩空气通过转子流量计计量流量, 通过控制手阀开度控制空气流量, 然后通入冷模试验装置。冷模装置内注入一定高度的 EPS 泡沫

颗粒, 压缩空气通过喷嘴喷入装置主体。图3为喷嘴区的放大示意。图中 α 为试验用喷嘴调节倾角, H 为喷口到料层顶端的距离。



1—排空阀; 2—压缩机; 3—冷模装置主体; 4, 9—喷嘴; 5—水; 6—排水阀; 7—料桶; 8—压缩空气管路; 10—冷模装置筒壁

图3 冷态试验流程

Fig. 3 Flow chart of the cold-state experiment

试验研究喷嘴安装角度、射流速度、喷嘴口径等对射流深度的影响喷嘴安装角度为 0° 、 10° 、 19° 、 25° 、 34° , 射流速度为 35、65、75、90、100、120 m/s, 喷嘴口径为 1.0、1.5、2.0、2.5、3.0、3.5 mm。

试验将精密皮托管探头伸入料层,通过调节探头朝向,在固定点上寻找风速最大的方向作为气流方向,测量固定位置的气流速度及方向。定义料层内气速 $<3\text{ m/s}$ 位置为射流最远端,以气化剂喷嘴与射流最远端分别对地面做铅垂线,铅垂线之间的距离为射流深度。

2 试验结果与分析

2.1 不同倾角 α 对射流深度的影响

空气射流在颗粒中的发展分为2部分(图4)。由图4可知,I段空气射流沿喷嘴方向前进;II段颗粒相区间压强大于射流压强时,射流发生断裂,分散成多个气泡,并产生向上运动的趋势,由于II段气泡分散,且受到颗粒作用力的原因,II段的射流较I段更加分散。

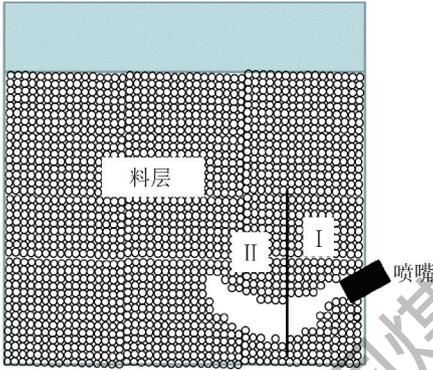


图4 射流发展
Fig. 4 Image of jet flow

试验通过万向管接头调节喷嘴角度,并通过水平角度仪进行校正,不同喷嘴倾角 α 与射流深度 L 的关系如图5所示。由图5可知,喷嘴有一定倾角后,在水平方向上的喷射距离明显增大,在 19° 时喷射距离最远。继续增大喷嘴倾角,气流向下喷射的距离加大,但水平方向的距离减小。

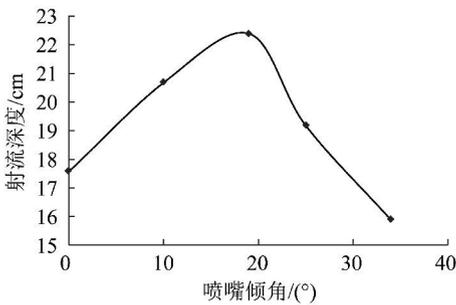


图5 喷嘴倾角与射流深度的关系

Fig. 5 Relationship between nozzle angle and jet distance

2.2 喷嘴气速 v 对射流深度及发散角度的影响

试验通过手阀调节气量,利用转子流量计读取

的喷嘴气量计算射流速度,不同喷嘴气速 v 对射流深度的影响如图6所示。

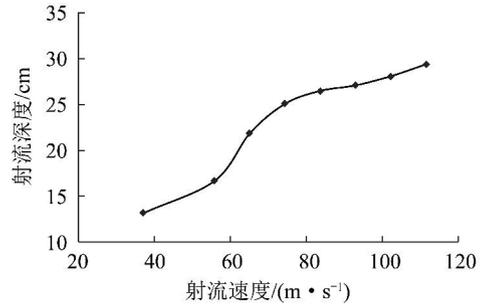


图6 射流速度与射流深度的关系

Fig. 6 Relationship between jet velocity and jet distance

由图6可知,随着气速的增大,喷射距离逐步增加,喷射距离在较高速度时增幅减缓。射速越高,射流区I段越长。不论气速大小,射流均会呈现先沿喷嘴角度下降,然后上升的趋势。

2.3 喷嘴口径 R 对射流深度的影响

喷嘴口径对射流深度的影响如图7所示。由图7可知,在相同气速下,喷嘴口径越大,射流的喷射深度越大,穿透深度主要与射流动量有关系,射流的动量与喷嘴口径的二次方成正比,因此射流深度与喷嘴口径大致呈二次方关系。

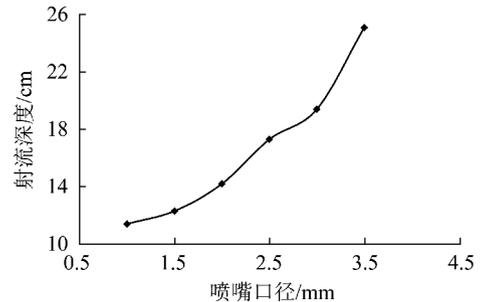


图7 喷嘴口径与射流深度的关系

Fig. 7 Relationship between nozzle diameter and jet distance

2.4 无量纲分析

对试验结果在忽略气体压缩性及温度变化等条件下,根据 π 准则,射流穿透深度 L 与气体密度 ρ_g 、固体密度 ρ_s 、固体粒径 d_s 、喷嘴口径 R 、重力加速度 g 、喷嘴倾角 α 、射流速度 v 有关,因此射流深度的关系式可表示为

$$L = f(\rho_g, \rho_s, d_s, R, g, v, \cos \alpha) \quad (7)$$

将其假设为指数方程:

$$L = k \rho_g^a \rho_s^b d_s^c v^d R^e g^f (\cos \alpha)^m \quad (8)$$

式中, k, a, b, c, d, e, f, m 为待定指数。

其中涉及的基本因次包括质量 $[M]$ 、长度 $[L]$

及时间[T],共有7个变量和3个基本因次,因此可得到4个基本无量纲数群,将各物理量的因次代入式(8)得

$$[L] = k[M \cdot L^{-3}]^a [M \cdot L^{-3}]^b [L]^c [L \cdot T^{-1}]^d [L]^e [L \cdot T^{-2}]^f \quad (9)$$

根据因次和谐原理,式(9)等号前后的基本因次幂次相同。

$$\begin{aligned} [M]: & a + b = 0 \\ [L]: & -3a - 3b + c + d + e + f = 1 \quad (10) \\ [T]: & -d - 2f = 0 \end{aligned}$$

假定 v 、 R 已知,求取4个基本无量纲数群:

$$\pi_1 = \rho_s^{a_1} v^{b_1} R^{c_1} L \quad (11)$$

根据因次和谐原理,可得

$$\begin{aligned} a_1 &= 0 \\ -3a_1 + b_1 + c_1 + 1 &= 0 \quad (12) \\ b_1 &= 0 \end{aligned}$$

由式(12)可得 $a_1=0, b_1=0, c_1=-1$,即 $\pi_1 = \frac{L}{R}$,

同理可得到 $\pi_2 = \frac{\rho_g}{\rho_s}, \pi_3 = \frac{d_s}{R}, \pi_4 = \frac{Rg}{v^2} = \frac{1}{Fr}$ 。

即可得

$$F\left(\frac{L}{R}, \frac{\rho_g}{\rho_s}, \frac{d_s}{R}, \frac{Rg}{v^2}\right) = 0 \quad (13)$$

将式(13)改写为

$$\frac{L}{R} = k \left(\frac{\rho_g}{\rho_s}\right)^p \left(\frac{d_s}{R}\right)^q \left(\frac{Rg}{v^2}\right)^n (\cos \alpha)^m \quad (14)$$

式中, p, q, n, m 为待定系数。

对式(14)两边取对数得

$$\ln \frac{L}{R} = \ln k + p \ln \frac{\rho_g}{\rho_s} + q \ln \frac{d_s}{R} + n \ln \frac{Rg}{v^2} + m \ln \cos \alpha \quad (15)$$

由气化炉高速射流区冷态试验研究得到回旋区深度等值计算上述方程组中的已知量,代入式(15)中求解,得到 k, p, q, n, m 的值,将其代入式(14)即可得到射流区深度计算模型的具体形式。联立求解可得

$$k = 0.0318, p = -0.5477, q = 0.0358, n = -0.3827, m = 0.9593。$$

将上述系数代入式(14),气化炉射流穿透深度计算模型如下

$$\frac{L}{R} = 0.0318 \left(\frac{\rho_g}{\rho_s}\right)^{-0.5477} \left(\frac{d_s}{R}\right)^{0.0358} \left(\frac{Rg}{v^2}\right)^{-0.3827} (\cos \alpha)^{0.9593} \quad (16)$$

射流在固体颗粒床层内的无量纲准则关系式与经验关系式的对比如图8所示。由图8可知,无量纲穿透深度关系式与试验结果吻合较好。

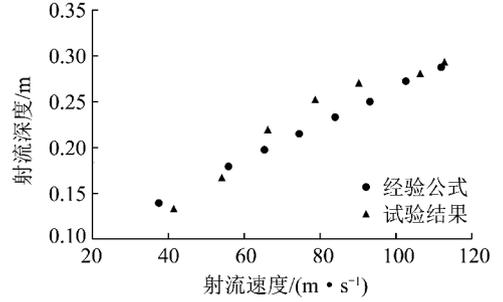


图8 无量纲公式与试验结果对比

Fig. 8 Comparison of dimensionless formula and experimental results

将 $Fr = \frac{v^2}{Rg}$ 代入式(16),简化得

$$\frac{L}{R} = 0.0318 \left(\frac{\rho_g}{\rho_s}\right)^{-0.5477} \left(\frac{d_s}{R}\right)^{0.0358} (Fr)^{0.3827} (\cos \alpha)^{0.9593} \quad (17)$$

采用均方根误差(RMSE)进行分析得

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^z (X_{o,i} - X_{m,i})^2}{z}} \quad (18)$$

式中, $X_{o,i}$ 为试验值; $X_{m,i}$ 为模型计算值; z 为试验值数量。

由式(17)可知,射流深度 L 与喷嘴口径 R 呈正相关关系,对试验数据进行误差分析,求得RMSE为0.2,因此对试验数据回归所得模型可信。理论上可知气体动量与喷嘴口径呈二次方关系,随着喷嘴口径的增大,气体动量成倍增加,射流突破颗粒惯性力的能力增强,从而使穿透深度加大。气速直接影响射流的动能,射流动能提高增强了穿透能力,促进射流向炉体中心发展。但实际反应中,射流速度的增加对燃烧温度产生直接影响,燃烧温度提高也加速燃烧反应,从而促使射流深度增加。

试验过程中还发现喷嘴气速由小变大过程中,某一气速形成的射流深度要小于由大变小至同一气速时的射流深度,床层高度也随之变化,气速由大变小时的床层体积大于气速由小变大时同一气速的体积,由此可推断同一射流气速时,气速由大变小时床层孔隙率大于气速由小变大时的孔隙率。孔隙率的差异导致床层内部阻力不同,使得气速变化方向不同时,同一气速下射流深度发生变化。

3 结 论

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

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

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

参考文献 (References) :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(上接第44页)

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

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

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

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

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

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

2001, 18(4):396-399.

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

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

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

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