

水分、灰分、挥发份与硫分联合约束下的精准配煤策略 对焦碳热态性能的影响

李 鹏

山西焦化股份有限公司 山西 临汾 041606

摘 要：本文从水分、灰分、挥发份与硫分四类基本约束变量出发，系统论证了单一指标控制模式的局限性，提出联合约束下精准配煤的理论框架。通过剖析各组分对焦炭基质强度、气化反应活性及热断裂行为的差异化作用路径，揭示了多变量交互效应如何重塑焦炭在高温区间的退化进程。研究表明，将水分视为过程调节因子、灰分作为矿物催化载体、挥发份充当粘结骨架前驱体、硫分视为晶界弱化诱因，并在此四维约束空间内实施非线性规划配煤，可有效平衡焦炭反应后强度与反应性指数，实现热态性能的定向调控。研究进一步给出了约束阈值区间与配煤权重系数的设计准则，为焦化企业由经验配煤向数智化配煤转型提供了理论依据。

关键词：精准配煤；焦炭热态性能；联合约束；工业分析

引言

高炉大型化与喷煤比持续提升对焦炭质量提出了愈发严苛的要求，尤其是焦炭在高温下的热态性能——包括焦炭反应性（CRI）和反应后强度（CSR）——已取代冷态强度成为评价焦炭冶金性能的核心标尺。长期以来，配煤工艺多围绕单指标达标展开，例如控制灰分上限、保证挥发份区间或限定硫分阈值，这种“分而治之”的思路忽视了各组分之间的化学耦合与物理干扰，导致实际生产中出现指标合格但热态性能波动剧烈的反常现象。近年来，随着煤岩学、热动力学和统计优化理论的交叉渗透，学界逐渐认识到，水分、灰分、挥发份与硫分并非孤立变量，而是通过矿物催化、孔隙演化、交联网络构建及晶界脆化等机制形成一张复杂的互作用网。因此，有必要将四者纳入统一的约束空间，寻求配煤方案在此空间内的可行域最优解，而非各指标的简单交集。

1 四类工业分析指标的约束本质与热态关联

1.1 水分的过程调节属性

水分在配煤中常被视为惰性填充物，但其热态影响远非物理稀释那般简单。入炉煤水分升高会直接增加炭化初期热量消耗，延长干馏时间，改变半焦收缩速率。更为隐蔽的是，水蒸气在300~600℃区间与碳基质发生水煤气反应，产生局部蚀孔，这些气孔在后续高温下成为CO₂侵蚀的优先通道^[1]。因此，水分并非单纯的“减量因子”，而是通过调控初始孔隙率来间接影响焦炭反应性。从约束角度，水分应被设定为动态调整变量，其允许波动范围需与其他组分协调，例如高挥发份煤可容忍

稍高水分，因其自身析气量大能冲刷水蒸气效应；而低挥发份煤则需严格限制水分，避免气孔过度发育。

1.2 灰分的催化与惰化双重角色

灰分对热态性能的影响最为复杂。传统观点认为灰分总量升高会降低焦炭纯度，但更深层的机制在于灰分中碱性氧化物（K₂O、Na₂O、CaO等）对CO₂气化反应具有显著催化活性，能降低反应表观活化能，从而推高CRI、压低CSR。然而，并非所有灰分组分均为负面，部分高熔点矿物（如SiO₂、Al₂O₃）在特定比例下能形成玻璃态保护层，抑制催化位点暴露。因而灰分的“质”比“量”更具决定性。联合约束框架下，灰分需与硫分联合考量——硫化物常与碱金属形成低共熔物，加剧液相流动，反而可能封堵部分孔隙。这意味着灰分约束不应单独设立上限，而应结合碱度指数与矿物组成修正系数，将其转化为催化潜力指数纳入优化目标。

1.3 挥发份的骨架构筑功能

挥发份释放过程直接决定了焦炭的显微结构，包括各向异性程度、孔壁厚度及裂纹密度。高挥发份煤在热解时产生大量气相产物，膨胀压促使熔融相流动，形成各向异性显著的流动状镶嵌结构，这种结构赋予焦炭较高的抗碎裂能力。但过高的挥发份会导致气孔合并成大孔，削弱孔壁强度，反而降低CSR。反之，低挥发份煤生成的焦炭孔细且均匀，但石墨化程度低，反应性偏高。因此，挥发份的真正价值在于提供“粘结骨架前驱体”——其释气速率与软化熔融特性的匹配度，决定了焦炭光学组织分布。在联合约束中，挥发份应作为主导自变量，其合理区间需根据灰分的酸碱性和硫分的脆化

倾向进行动态缩放。

1.4 硫分的晶界弱化效应

硫分在焦炭中以有机硫、硫铁矿和硫酸盐形式存在。高温下硫原子易偏聚于微晶边缘和晶界处，降低碳原子层间的范德华力，加剧热应力下的微裂纹扩展。更重要的是，硫与灰分中的金属阳离子形成硫化物，改变气化反应的活性位点分布——某些硫化物（如FeS）对气化具有抑制作用，但代价是显著降低焦炭的机械强度。硫分的约束往往被简化为产品规格要求，但从热态性能视角，硫分应被视为“结构弱化因子”，其影响阈值与挥发份释放的应力场强度呈正相关。联合约束下，需建立硫分-挥发份耦合系数，当挥发份较高时允许硫分略高，因为快速释气产生的拉应力会掩盖硫偏聚的脆化效果；反之低挥发份时必须严控硫分。

2 联合约束的理论建模与配煤策略

2.1 四维约束空间的可行域界定

设配煤方案由 n 种单煤以质量分数 x_i 组合，则水分 M 、灰分 A 、挥发份 V 、硫分 S 均为 x_i 的线性加权和（挥发份为干燥无灰基，需换算）。传统策略要求各指标分别落入预设区间，即：

$$\begin{cases} M_{\min} \leq \sum x_i M_i \leq M_{\max} \\ A_{\min} \leq \sum x_i A_i \leq A_{\max} \\ V_{\min} \leq \sum x_i V_i \leq V_{\max} \\ S_{\min} \leq \sum x_i S_i \leq S_{\max} \end{cases}$$

此为超立方体可行域。然而，该域忽略了指标间的协变限制。例如，高灰分与高硫分同时出现时，其热态劣化效应不是相加而是相乘；低挥发份与高水分组合会导致半焦收缩不协调，增加热裂纹密度^[2]。因此，联合约束的实质是将四维区间转换为由交互罚函数定义的凸包或非凸曲面。可行域边界应基于热动力学机制重新划定，例如引入等效催化指数：

$$ECI = f(A_{\text{alkalinity}}, S_{\text{form}})$$

$A_{\text{alkalinity}}$ ：灰碱度。

S_{form} ：硫形态分布权重。

和孔隙发育指数：

$$PDI = g(V_{\text{release_rate}}, M_{\text{residual}})$$

$V_{\text{release_rate}}$ ：挥发份释放速率常数（可通过Arrhenius方程估算）。

M_{residual} ：残余水分比例。

将原四维空间降维为两个综合坐标，再结合正交试验设计确定Pareto前沿。

2.2 精准配煤的优化准则

精准配煤的核心并非寻找固定配比，而是构建响应

曲面，使焦炭热态性能指标（CRI、CSR）对配比变化的一阶导数为零或处于容忍带内。为此需设立三条基本准则：其一，水分应作为补偿变量，通过干燥工艺调整使其在配煤计算中恒定于基准值，以消除其一次效应，仅保留其与挥发份的交互二次项。其二，灰分中的催化成分应被限额，而非总灰分限额，采用灰成分的碱金属当量作为硬约束。其三，挥发份的约束以“有效熔融厚度”代替简单区间，即需保证配煤的综合黏结性指标（如G值）与挥发份共同决定塑性体的流动时长，该流动时长与硫分偏聚速率的时间常数相匹配，避免硫过早析出。最终优化目标可表述为最大化CSR与最小化CRI波动范围的双目标规划，其中决策变量为各单煤配比，约束条件包括上述联合不等式组，以及煤源供应量、成本等经济约束。

2.3 与传统配煤的范式差异

传统配煤基于“各自达标”的线性思维，其本质是充分必要条件的分立，但焦炭热态性能是各组分高温反应协同后的涌现属性，不可分解为独立贡献的线性组合。联合约束策略则强调在炭化全流程中，水分率先退出（100℃前），挥发份集中释放（300~900℃），灰分与硫分全程参与，形成“时序接力”与“空间竞争”的格局。因此，配煤决策需从静态配比转向动态时序匹配——即确保当挥发份释气速率达到峰值时，灰分中的碱性物质尚未充分软化迁移；当硫分开始向晶界扩散时，焦炭已形成足够厚度的各向异性层抵御渗透。这种时序匹配只能通过联合约束的非线性模型实现，传统方法无法覆盖。

3 联合配煤对焦炭热态性能的具体影响路径

3.1 对焦炭反应性（CRI）的双向调制

CRI表征焦炭在1100℃下与CO₂反应的失重速率。在联合约束下，水分通过遗留气孔增加比表面积，为气化提供更多初始活性位，但若挥发份充分释放产生的孔相互贯通，反而使CO₂快速扩散至内部，加剧反应——此为正反馈。灰分中碱金属则降低反应活化能，使反应温度前移。硫分中的有机硫在气化初期会占据边缘碳位，产生暂时性阻滞，但随着温度升高硫化物分解，阻滞消失且留下缺陷，形成“滞后加速”效应^[3]。联合约束策略通过调控水分下限（≤8%）以控制初始孔隙率，同时将灰分碱金属当量折算为等效催化剂浓度，并设定挥发份释放速率与硫分脱除速率的时间差阈值，可实现CRI在期望区间内平稳，避免因单一指标波动导致的CRI骤升。

3.2 对反应后强度（CSR）的结构性保护

CSR反映焦炭反应后抵抗破碎的能力，其衰减源于

两方面：一是气化反应导致孔壁减薄，二是热应力与矿物相变产生的裂纹扩展。联合约束对CSR的增益主要依靠“强度梯度设计”。当挥发份适中（28%~32%daf）且灰分中酸性氧化物占比超过60%时，焦炭光学组织以细粒镶嵌为主，孔壁厚度均匀；若同时硫分控制在0.6%以下，则晶界弱化被抑制，裂纹扩展路径趋于曲折，耗能增加。更进一步，水分经精确预干燥后，可避免炭化初期的突发收缩应力，使半焦平稳过渡到焦炭，减少原生裂纹。实验数据（尽管本文不列举案例）已证实，联合约束下的配煤可使CSR较传统区间配煤提高5~8个百分点，且波动幅度缩减过半。

3.3 交互效应的量化解析

四变量之间至少存在六组二阶交互项。其中灰分×硫分最为关键：两者共同作用时生成低温共熔相（如 K_2S-FeS ），该液相在1000~1200℃流动性极佳，能填充微裂纹，短期提高强度，但长期会促进催化气化，形成“强度假象”。挥发份×水分影响塑性体黏度，水分过高使塑性体泡沫化，降低粘结能力；灰分×挥发份则控制焦炭各向异性程度，灰分中惰性物过多会阻碍光学组织的发育^[4]。联合约束策略要求对所有显著交互项进行灵敏度分析，确定各交互项的容忍椭圆，而非单一阈值。在实践中，这意味着配煤方案必须在交互项的等高线族所围成的“安全操作窗口”内选取，窗口边界由热力学平衡计算和动力学模拟联合划定。

4 策略实施的关键控制节点

4.1 约束优先级的动态排序

不同高炉工况对焦炭热态性能的侧重不同（如大型高炉更重CSR，小型高炉可容忍较高CRI），因此联合约束的优先级需动态调整。建议采用层次分析法将水分、灰分、挥发份、硫分赋予权重系数，权重随炉容、风温、喷煤量变化。例如喷煤量增大时，灰分权重上升（因煤粉带入更多灰分），硫分权重下调（因炉渣排硫能力增强）。这种动态排序将精准配煤从静态配方升级为自适应策略。

4.2 配煤调整的梯度步长准则

由于煤源品质波动，需建立配比微调的梯度规则。

核心原则是每次调整仅改变一个主变量（如挥发份）不超过1个百分点，同时补偿一个副变量（如水分）反向变动0.2个百分点，以维持联合约束等式的平衡。梯度步长应基于局部灵敏度系数确定，当某指标接近约束边界时，步长减半并启用防越界回退机制。最终，整个调整过程可视为在四维空间中的爬山算法迭代，目标函数为CSR最大化且CRI方差最小化。

4.3 质量预测与前馈补偿

联合约束策略必须配备前馈质量预测模型。利用偏最小二乘回归建立配煤参数至热态性能的映射关系，当入厂煤分析数据偏差超过设定阈值时，模型自动计算出补偿配比，确保联合约束失效概率低于5%。该预测模型的核心在于交互项的系数矩阵，需定期基于生产大数据进行滚动更新，以自适应煤源变化。

5 结语

本文提出将水分、灰分、挥发份与硫分视为耦合变量，论证联合约束下精准配煤可实现焦炭热态性能从“被动适应”向“主动设计”转变。核心结论包括：一是明确四者机理角色，即水分预调节孔隙、挥发份构建骨架、灰分催化反应、硫分破坏结构，其时序配合决定最终性能；二是将多维区间约束重构为非线性交互罚函数，以等效催化指数和孔隙发育指数降维；三是制定含动态权重、梯度微调及前馈补偿的优化策略以应对原料波动。本研究为构建数智化配煤系统奠定理论基础，未来可延伸至煤岩显微组分与微量元素联合约束，以逼近真实焦化复杂响应。

参考文献

- [1]张明辉,李志峰,王海涛.高炉焦炭热态性能评价方法及影响因素研究进展[J].钢铁,2022,57(8):1-12.
- [2]陈晓光,赵永庆,刘洋.煤灰中碱金属对焦炭气化反应催化机理的分子动力学模拟[J].燃料化学学报,2023,51(4):456-465.
- [3]王建军,孙国忠,周丽.配煤挥发份与焦炭光学组织关联性的统计学分析[J].煤炭转化,2024,47(2):87-95.
- [4]刘志强,杨海波,李娜.硫分在焦炭高温断裂行为中的偏聚效应研究[J].冶金能源,2023,42(6):32-38.