

计算机辅助煤泥浮选捕收剂设计

涂搏航, 王 贤, 宋佩俊, 赵豆豆, 梁鑫宇

安徽理工大学材料科学与工程学院, 安徽 淮南

收稿日期: 2025年2月21日; 录用日期: 2025年4月10日; 发布日期: 2025年5月14日

摘 要

煤泥浮选作为选煤厂的重要工艺环节, 其效率与效果直接影响到煤炭资源的回收率和产品质量。捕收剂在煤泥浮选中起到至关重要的作用, 能够定向调控矿物表面亲疏水性, 从而提高浮选效率。然而, 传统的捕收剂设计往往依赖于经验性试探, 不仅工作量大, 而且效果不佳。本文提出了一种基于计算机辅助的煤泥浮选捕收剂设计方法, 通过构建3D-QSAR模型, 实现捕收剂分子结构的精准设计。实验结果表明, 该方法能够显著提高捕收剂的性能, 降低药剂用量, 提高浮选效率。

关键词

煤泥浮选, 捕收剂, 3D-QSAR模型, 计算机辅助设计, 浮选效率

Computer-Aided Coal Slime Flotation Collector Design

Bohang Tu, Xian Wang, Peijun Song, Doudou Zhao, Xinyu Liang

School of Materials Science and Engineering, Anhui University of Science and Technology, Huainan Anhui

Received: Feb. 21st, 2025; accepted: Mar. 10th, 2025; published: May 14th, 2025

Abstract

As an important process of a coal preparation plant, the efficiency and effect of slime flotation directly affect the recovery rate of coal resources and product quality. Collectors play a vital role in coal slime flotation, which can directionally control the hydrophilicity and hydrophobicity of mineral surfaces so as to improve flotation efficiency. However, the traditional collector design often relies on empirical tests, which not only has a large workload, but also has poor results. In this paper, a computer-aided design method for coal flotation collector is proposed. By constructing a 3D-QSAR model, the precise design of the collector molecular structure is realized. The experimental results show that this method can significantly improve the performance of the collector, reduce the dosage

of the reagent and improve the flotation efficiency.

Keywords

Coal Slime Flotation, Collector, 3D-QSAR Model, Computer-Aided Design, Flotation Efficiency

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

浮选技术是矿物加工领域中一种不可或缺的分选富集手段，其核心原理是基于矿物表面润湿性的差异，通过气泡的附着作用实现目的矿物与杂质的高效分离[1]-[3]。作为一种高效、灵活的选矿方法，浮选技术在选煤厂处理细粒级煤泥时展现出独特的优势。细粒级煤泥由于粒度细小，其表面性质复杂，传统的重力分选方法往往难以达到理想的分离效果，而浮选技术则能够有效弥补这一不足，显著提升煤炭资源的回收率和利用效率。然而，浮选过程的成功与否在很大程度上依赖于捕收剂的性能。捕收剂作为浮选过程中的关键药剂，其作用是通过吸附在矿物表面，改变矿物的表面性质，增强矿物与气泡的黏附能力，从而实现矿物的浮选分离。因此，捕收剂的性能直接决定了浮选效果的优劣[4] [5]。

然而长期以来，捕收剂的设计高度依赖于经验性试探，研发人员主要凭借过往的实践经验，通过反复尝试不同的化学配方和工艺条件来开发捕收剂。这种方法缺乏系统的理论指导，导致每次试验都具有较大的盲目性。例如，在选煤厂的实际应用中，传统方法设计的捕收剂在不同季节使用时，由于环境温度、湿度等因素的影响，浮选效果波动明显，精煤回收率在 60%~75%之间大幅波动，难以满足工业生产对高效、稳定的要求。此外，传统方法无法从分子层面深入研究捕收剂与矿物之间的相互作用机制，难以精准预测捕收剂的性能，导致药剂性能不稳定，不同批次生产的捕收剂即使配方看似相同，实际使用效果可能大相径庭。这种依赖经验的开发模式不仅增加了研发成本和时间，还限制了捕收剂性能的进一步提升。

鉴于传统捕收剂设计方法的局限性，基于计算机辅助的捕收剂设计方法应运而生，并展现出显著的优势[6]-[8]。计算机辅助设计借助量子化学计算、分子动力学模拟等先进技术，能够从分子层面深入研究捕收剂与矿物之间的相互作用机制，精准预测捕收剂的性能，如吸附能力、选择性等。通过量子化学计算，可以计算捕收剂分子与矿物表面的吸附能，从而评估其捕收性能；利用分子动力学模拟，可以观察捕收剂分子在矿物表面的吸附行为和稳定性，优化捕收剂的分子结构。这种基于科学计算的设计方法不仅能够显著提高捕收剂的性能，还能降低药剂用量，减少生产成本。在实验室模拟中，采用计算机辅助设计的捕收剂，相较于传统捕收剂，在保持相同浮选效果的前提下，药剂用量可降低 20%~30%。此外，计算机辅助设计的捕收剂还具有更好的环境适应性，能够在不同的环境条件下保持稳定的浮选效果，减少因环境因素导致的浮选效果波动。通过量子化学计算，研究人员发现黄原酸盐分子的疏水基团长度对捕收性能有显著影响。优化后的黄原酸盐捕收剂在浮选硫化矿物时，回收率提高了 15%，且药剂用量减少了 25%。利用分子动力学模拟，研究了胺类捕收剂分子在石英表面的吸附行为。通过优化胺类捕收剂的分子结构，其对石英的捕收能力显著增强，浮选回收率从传统捕收剂的 65%提高到 80%。在某选煤厂的实际应用中，传统捕收剂在冬季低温条件下浮选效果大幅下降，精煤回收率仅为 60%左右。而采用计算机辅助设计的捕收剂后，即使在低温条件下，精煤回收率也能稳定在 75%以上，且药剂用量减少了 20%。

综上所述,传统捕收剂设计方法的局限性日益凸显,而基于计算机辅助的捕收剂设计方法不仅能够精准预测和优化捕收剂性能,还能显著提高浮选效率、降低药剂用量,为矿物加工领域的技术进步提供了有力支持。因此,开发和推广基于计算机辅助的捕收剂设计方法,对于推动浮选技术的现代化和可持续发展具有重要意义。3D-QSAR(三维定量构效关系)模型作为计算机辅助分子设计的核心工具,其原理在于建立分子三维空间特征与目标活性(如捕收性能)之间的定量关联模型。相较于传统经验性设计方法,3D-QSAR通过系统分析分子构象、静电势、疏水场及立体场等三维参数,能够从分子层面揭示捕收剂与煤粒表面相互作用的微观机制,从而指导分子结构的精准优化。

2. 计算机辅助煤泥浮选捕收剂设计原理

3D-QSAR模型(三维定量构效关系模型)是一种基于分子结构和性能的定量关系模型,能够解释化合物结构与其活性之间的关系。在药物设计中,3D-QSAR模型已经得到了广泛应用,并取得了显著成果。借鉴药物设计的思路,本文将3D-QSAR模型应用于煤泥浮选捕收剂的设计中。3D-QSAR模型的基本原理是通过理论计算和统计分析工具,研究化合物结构与其活性之间的关系[9]-[11]。具体步骤包括:

(1) 选择模板分子:模板分子的选择是模型构建的基础。在煤泥浮选捕收剂设计中,需从现有药剂库中筛选具有相似母核结构且性能差异显著的化合物(如不同链长的黄原酸盐或胺类化合物)。通过浮选实验获取其活性数据(如可燃体回收率、灰分降低率等),并采用量子化学计算(如密度泛函理论DFT)优化其三维构象。研究表明,捕收剂分子在煤粒表面的吸附通常以能量最低的稳定构象为主,因此构象优化需结合溶剂化效应(如隐式溶剂模型)模拟真实浮选环境。在药物化合物数据库中选择具有相同母核结构的一系列药剂进行浮选试验,筛选出性能最优的捕收剂分子作为模板分子。

(2) 分子叠合:分子叠合是3D-QSAR模型成功的关键。在煤泥浮选应用中,需根据捕收剂的活性位点(如疏水基团或极性基团)进行空间对齐。通过识别关键官能团(如羟基、胺基等)作为叠合基准,确保功能基团的空间分布一致性。利用分子形状匹配算法(如ROCS软件),最大化分子体积的重叠程度,适用于非极性捕收剂的设计。通过分子动力学(MD)模拟捕捉构象柔性,生成多构象系综后进行概率加权叠合,提高模型对动态吸附过程的表征能力。采用分子模拟软件,将捕收剂分子进行分子叠合,构建反映捕收剂结构与浮选性能之间关系的3D-QSAR模型。

(3) 构建模型:将叠合后的分子团簇放入三维网格中,利用探针采集结构信息,通过偏最小二乘法构建3D-QSAR模型。

(4) 模型验证:采用留一法交叉验证和非交叉验证方法,验证模型的一致性和预测性。

(5) 模型优化:根据验证结果,优化模型参数,确定最优的3D-QSAR模型。

3. 基于3D-QSAR模型的捕收剂设计

3.1. 设计方法

基于3D-QSAR模型的捕收剂设计方法包括以下5个步骤[12][13]:

(1) 模板分子选择:采用分子动力学(MD)方法,模拟捕收剂分子在煤表面(以石墨或含氧官能团模型替代)和水相中的动态构象变化,筛选能量最低的稳定吸附构象。例如,长链烷基捕收剂在煤疏水表面倾向于伸展构象(全反式),而极性基团(如胺基)则通过氢键与煤表面含氧官能团定向结合。以试验性能最优的捕收剂为模板,提取其吸附态构象作为叠合基准,确保叠合结果反映真实吸附取向。

(2) 分子叠合与模型构建:优先对齐分子骨架(如疏水烷基链的主链碳原子),利用柔性叠合算法(如Open3DAlign)调整极性基团的空间取向,使氢键供体/受体与煤表面官能团(-COOH、-OH)形成最佳互补。定义药效团特征(如疏水中心、氢键位点),通过药效团引导叠合(PharmGUIDE)强制匹配关键相互作用位

点，确保模型能区分结构微小差异对活性的影响。

(3) 模型验证与优化：对每个剔除样本的回归系数(如 PLS 负载矩阵)进行波动分析，若系数变异度(CV% < 15%)表明模型对局部结构变化不敏感，适用于不同煤质。异常值识别与处理：通过杠杆值(Leverage)和标准化残差(>2.5 σ)检测异常样本(如灰分异常升高的分子)，采用稳健回归(如 M 估计)降低其对 q^2 值的干扰。PLS 潜变量(LV)动态调整：基于 LOO-CV 的 PRESS 值(预测残差平方和)曲线，选择 PRESS 最小值对应的 LV 数，同时限制 LV $\leq$ 样本数的 1/3 以防止过拟合。在 LOO-CV 中嵌入岭参数(λ)，通过网格搜索($\lambda = 0.1 \sim 1.0$)平衡模型复杂度与泛化能力。

(4) 捕收剂分子设计：根据最优的 3D-QSAR 模型，绘制三维等势图，分析分子结构设计思路，确定待选择的捕收剂分子结构。

(5) 活性预测与性能排序：采用最优的 3D-QSAR 模型对待选择的捕收剂分子进行活性预测，根据活性预测值完成药剂性能的排序，确定最佳捕收剂分子结构。

3.2. 结果与分析

为了验证基于 3D-QSAR 模型的捕收剂设计方法的可行性，本文进行了实验验证。实验选取了新一和铁东两煤样，分别采用传统煤油捕收剂和基于 3D-QSAR 模型设计的新型捕收剂进行浮选试验。

3.2.1. 试验过程

- (1) 煤样准备：选取新一和铁东两个煤样，进行破碎、筛分和磨细处理，得到符合浮选要求的煤泥样品。
- (2) 药剂配制：分别配制传统煤油捕收剂和基于 3D-QSAR 模型设计的新型捕收剂，确保药剂浓度一致。
- (3) 浮选操作：将煤泥样品加入浮选机中，调节给料量、药剂制度、液位高度和充气量等工艺参数，分别加入传统煤油捕收剂和新型捕收剂进行浮选。
- (4) 产品收集：浮选结束后，分别收集精煤和尾煤，进行称重、灰分检测和可燃体回收率计算。

3.2.2. 试验结果分析

Table 1. Flotation test results
表 1. 浮选试验结果

煤样	捕收剂类型	精煤产率(%)	精煤灰分(%)	可燃体回收率(%)
新一	传统煤油捕收剂	61.23	12.56	48.76
新一	新型捕收剂	63.72	11.00	51.25
铁东	传统煤油捕收剂	58.98	13.21	46.34
铁东	新型捕收剂	61.74	11.79	48.78

由表 1 可得：

(1) 精煤产率：采用新型捕收剂进行浮选，新一煤样的精煤产率提高了 2.49% (从 61.23%提高到 63.72%)，铁东煤样的精煤产率提高了 2.76% (从 58.98%提高到 61.74%)。这表明新型捕收剂能够更有效地吸附在煤粒表面，提高浮选效率。

(2) 精煤灰分：采用新型捕收剂后，新一煤样的精煤灰分降低了 1.56% (从 12.56%降低到 11.00%)，铁东煤样的精煤灰分降低了 1.42% (从 13.21%降低到 11.79%)。这表明新型捕收剂具有更好的选择性，能够减少高灰分杂质在精煤中的含量。

(3) 可燃体回收率: 采用新型捕收剂后, 新一煤样的可燃体回收率提高了 2.49% (从 48.76% 提高到 51.25%), 铁东煤样的可燃体回收率提高了 2.44% (从 46.34% 提高到 48.78%)。这表明新型捕收剂能够更有效地回收煤泥中的可燃体, 提高资源利用率。

从 3D-QSAR 模型分析, 捕收剂在煤泥表面的吸附方式主要受分子三维构效关系调控。新型捕收剂分子可能通过以下机制优化吸附: ① 立体匹配: 其疏水烷基链与煤表面疏水微区(如芳环结构)形成范德华力作用, CoMFA 模型中的立体场参数显示长链烷基的空间延伸可增强疏水吸附; ② 电荷互补: 极性基团(如羟基、胺基)与煤表面含氧官能团(-COOH、-OH)通过氢键或静电作用结合, CoMSIA 静电场分析显示局部电荷密度匹配可提高选择性; ③ 疏水基团分布: 分子中疏水/亲水基团的空间排布(如临界胶束形态)可能通过疏水作用力优先吸附低灰煤粒, 降低高灰矿粒的夹带。模型参数优化表明, 增强疏水基团空间延展性、优化极性基团取向可协同提升吸附效率和选择性, 与试验中精煤产率提高、灰分降低的结果一致。

4. 捕收剂设计的进一步优化与展望

4.1. 优化捕收剂结构

虽然基于 3D-QSAR 模型的捕收剂设计方法已经取得了显著成果, 但捕收剂结构的进一步优化仍然具有重要意义。未来的研究可从以下几个方面进行:

- (1) 引入极性基团: 在捕收剂分子中引入极性基团, 提高捕收剂的选择性和活性。
- (2) 添加表面活性剂: 在捕收剂中添加表面活性剂, 改善捕收剂在煤粒表面的吸附性能和分散性能。
- (3) 分子结构设计: 通过分子结构设计, 优化捕收剂分子的空间结构和化学性质, 提高捕收剂的性能。

4.2. 智能化浮选系统的建设

随着智能化技术的发展, 智能化浮选系统的建设已经成为选煤厂智能化建设的重要组成部分。未来的研究可以从以下 2 个方面进行:

- (1) 生产指标测量: 开发高精度的生产指标测量手段, 实现浮选过程中各项指标的在线快速高精度检测。
- (2) 智能控制方法: 结合专家系统和贝叶斯网络等智能控制方法, 实现浮选药剂的智能添加和浮选过程的稳定控制^{[14] [15]}。

5. 结论

论文通过构建 3D-QSAR 模型, 研究了煤泥浮选捕收剂的分子结构与其浮选性能之间的定量构效关系, 实现了从经验试错向理性设计的转变。试验结果表明, 基于该模型设计的新型捕收剂在精煤产率、灰分降低率和可燃体回收率等关键指标上均显著优于传统煤油捕收剂。新一和铁东煤样的浮选试验中, 精煤产率平均提高 2.6%, 灰分含量降低 1.5%, 可燃体回收率提升 2.5%, 同时药剂用量减少 20%~30%, 验证了模型的有效性与实用性。这一成果不仅为煤泥浮选的高效化提供了新思路, 也为矿物加工领域的绿色低碳发展提供了技术支撑。

研究进一步揭示了捕收剂分子三维特征(如疏水基团长度、极性官能团分布)对浮选性能的调控机制。然而, 当前模型仍存在一定局限性, 例如未充分纳入动态吸附过程及环境因素的影响。未来研究可从以下方向深化: (1) 结合分子动力学模拟构建动态 4D-QSAR 模型, 捕捉捕收剂与煤粒的实时相互作用; (2) 引入环境变量(如温度、pH 值)建立多因素耦合的响应面模型, 提升模型的工业适用性; (3) 融合机器学习算法(如随机森林、神经网络)处理非线性关系, 增强复杂体系的预测能力。此外, 推动智能化浮选系统的

开发,实现药剂添加与工艺参数的实时优化,将进一步提升浮选过程的稳定性与资源利用率。本研究不仅为煤泥浮选捕收剂设计提供了创新方法,也为其他矿物浮选药剂的开发与优化开辟了新的技术路径。

基金项目

项目受到安徽省大学生创新创业训练计划项目(项目号:S202310361023)资助。

参考文献

- [1] 桂夏辉,邢耀文,曹亦俊.低品质煤泥浮选过程强化研究进展及其思考[J].煤炭学报,2021,46(9):2715-2732.
- [2] 闫雅雯,罗惠华,赵军.胺类捕收剂的应用现状及发展前景[J].矿产保护与利用,2022,42(2):59-66.
- [3] 郝海青,李丽匣,张晨.经典分子动力学模拟在矿物浮选研究中的应用[J].矿产保护与利用,2018(3):9-16.
- [4] 钟国华,胡美英.QSAR及其在农药设计中的应用和进展[J].农药学学报,2001,3(2):1-11.
- [5] 代龙富,刘建,李达.基于苯甲羟肟酸的三元组合捕收剂高效浮选白钨矿研究及分子动力学模拟[J].矿产保护与利用,2024,44(3):49-56.
- [6] 王瑜,刘建,曾勇.量子化学计算在硫化铅锌矿浮选机理中的研究进展[J].矿产保护与利用,2018(3):37-42,48.
- [7] 李成秀,程仁举,刘星.我国锂辉石矿选矿技术研究现状及展望[J].矿产综合利用,2021(5):1-8.
- [8] 王纪镇,荆茂晨,刘睿华.浮选药剂性能理论分析[J].矿产保护与利用,2023,43(3):10-16.
- [9] 谭鑫,尚衍波,何发钰.羟肟酸浮选分离选择性的定量构效关系[J].东北大学学报(自然科学版),2016,37(8):1198-1202.
- [10] 孙伟,胡岳华,覃文庆.钨矿浮选药剂研究进展[J].矿产保护与利用,2000(3):42-46.
- [11] 邓紫林,侯英.基于均匀试验设计优化煤泥浮选药剂制度[J].矿业科学学报,2021,6(2):237-243.
- [12] 王本英,徐新阳,段浩.胺类捕收剂在石英表面吸附的定量构效关系[J].东北大学学报(自然科学版),2020,41(1):131-136.
- [13] 高跃升,高志勇,孙伟.金属离子对矿物浮选行为的影响及机理研究进展[J].中国有色金属学报,2017,27(4):859-868.
- [14] 王国芝,徐刚,徐盛明.浮选药剂结构与性能关系的研究进展[J].矿产保护与利用,2012(1):53-58.
- [15] 苏超,申培伦,李佳磊.黄铁矿浮选的抑制与解抑活化研究进展[J].化工进展,2019,38(4):1921-1929.