

碳达峰-碳中和战略中的关键力学问题专刊

煤炭地下气化关键力学问题的数值研究进展¹⁾刘曰武^{*,†,2)} 方惠军^{**,††,2)} 李龙龙^{*,†,3)} 葛腾泽^{**,††} 郑太毅^{*} 刘丹璐^{**,††} 丁玖阁^{*}^{*} (中国科学院力学研究所, 北京 100190)[†] (中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049)^{**} (中联煤层气国家工程研究中心有限责任公司, 北京 100090)^{††} (中石油煤层气有限责任公司, 北京 100028)

摘要 煤炭资源的清洁高效利用已成为“双碳”背景下科学研究的重要方向和新课题。在众多相关技术中, 煤炭地下气化技术近年来得到快速发展并展现出巨大潜力。然而, 由于室内实验和现场试验的实施成本非常高, 气化机理认识和控制运行工艺优化方面的研究均受到很大限制。近年来, 运行成本低、操作简单、实施周期短的数值模拟方法成为重要的研究工具, 得到越来越多的关注。由于煤炭地下气化过程极其复杂, 数值模拟方法在数学建模和数值求解方面均面临巨大挑战。对此, 本文开展了以下工作: 对煤炭地下气化过程进行了详细分析, 阐明各个运行空间的物质和关键问题, 厘清煤炭地下气化的本质; 归纳出流体动力学问题、热力学问题、材料应力问题以及化学反应动力学问题等 4 类关键力学问题; 详细介绍每个关键力学问题数值研究的最新成果和发展历程; 介绍煤炭地下气化数值研究的工程应用, 并指出其发展趋势。本文工作对推动煤炭地下气化数值方法的发展以及指导我国煤炭地下气化先导试验设计和现场实施有积极的理论意义。

关键词 煤炭地下气化, 关键力学问题, 数值研究, 数学模型

中图分类号: O35 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-22-331

RECENT PROGRESS ON NUMERICAL RESEARCH OF KEY MECHANICAL PROBLEMS DURING UNDERGROUND COAL GASIFICATION¹⁾Liu Yuewu^{*,†,2)} Fang Huijun^{**,††,2)} Li Longlong^{*,†,3)} Ge Tengze^{**,††} Zheng Taiyi^{*} Liu Danlu^{**,††} Ding Jiuge^{*}^{*} (Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)[†] (School of Engineering Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)^{**} (National Engineering Research Center of Coalbed Methane Co., Ltd., Beijing 100090, China)^{††} (PetroChina Coalbed Methane Co., Ltd., Beijing 100028, China)

Abstract Clean and efficient coal utilization becomes an important direction and new research topic under the dual-carbon background. Recently, underground coal gasification (UCG) develops very fast and shows great potential in this area. However, the laboratory and field experiments, which are usually used to investigate the gasification mechanisms

2022-07-22 收稿, 2022-10-21 录用, 2022-10-22 网络版发表。

1) 中国石油天然气股份有限公司科技项目 (2019E-25) 资助。

2) 共同第一作者。

3) 通讯作者: 李龙龙, 副研究员, 主要研究方向为渗流力学及煤炭地下气化。E-mail: lilonglong@imech.ac.cn

引用格式: 刘曰武, 方惠军, 李龙龙, 葛腾泽, 郑太毅, 刘丹璐, 丁玖阁. 煤炭地下气化关键力学问题的数值研究进展. 力学学报, 2023, 55(3): 669-685

Liu Yuewu, Fang Huijun, Li Longlong, Ge Tengze, Zheng Taiyi, Liu Danlu, Ding Jiuge. Recent progress on numerical research of key mechanical problems during underground coal gasification. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2023, 55(3): 669-685

and optimize the operating parameters, are quite expensive. Thus, there is a strong demand for the numerical approach that is low-cost, easy operation, and short-cycle. Currently, the numerical approach faces challenges in terms of mathematical modelling and numerical method for solving the nonlinear system because of the complexity of the gasification process. To deal with that, we have done the work as follows: clarified the materials and key problems in each space based on a detailed analysis and revealed the essence of the UCG; summarized four kinds of key mechanical issues including fluid dynamics, thermodynamics, material mechanics, and chemical reaction kinetics; reviewed the development history of numerical research for key mechanical problems in detail and introduced the latest results; illustrated the status of engineering application of numerical research and pointed out the development trends. The work in this paper has positive theoretical significance for the development of the numerical technique for UCG and guiding the design and implementation of UCG trials in China.

Key words underground coal gasification, key mechanical problems, numerical research, mathematical model

1 引言

1.1 煤炭地下气化研究背景及意义

当今世界, 能源安全是国民经济发展的基础, 对保障国家安全有着举足轻重的影响. 中国能源消费结构以煤炭为主, 如何在保证能源供给、维持高速发展态势的前提下, 加快实现能源转型是目前能源行业发展的重中之重. 在此背景下, 煤炭资源的高效清洁利用成为科学研究的重要方向和新课题^[1]. 目前煤炭地下气化 (underground coal gasification, UCG 或 in-situ coal gasification, ISCG) 已成为相关领域的重要发展方向之一. 该技术是一种将气化剂注入地下原位煤层, 通过有控制的燃烧和气化, 使得原煤及其燃烧产物与气化剂发生氧化还原反应, 生成 CH_4 , H_2 , CO 等有效气体组分的化学采煤技术. 煤炭地下气化的最大优势在于, 可以开发矿采技术无法开采的深层乃至超深层煤, 而这些煤炭资源的储量是中浅层煤炭无法比拟的. 此外, 原煤在地层中直接转换为以 CH_4 , H_2 和 CO 为主的清洁能源, 不仅大量节省了将煤炭开采到地面所需成本, 还将灰渣遗留在地下, 达到环境保护的效果.

中国科学院力学研究所历来以工程科学实现为指南, 积极重视国家的国防安全和能源安全. 郑哲敏先生生前积极关注常规和非常规能源的发展, 包括煤层气、页岩油、页岩气以及天然气水合物开发等, 2018 年指导本文作者集中组织 7 家单位 20 余名作者撰文“页岩气开采中的若干力学前沿问题”^[2], 发表于 2019 年的《力学进展》. 对煤炭资源的高效清洁利用技术更是十分关心, 希望早日实现煤炭地下气化的商业化开发.

1.2 煤炭地下气化的简要发展历程及国内外发展状况

煤炭地下气化的概念由德国科学家威廉·西蒙 (Wiliam Simens) 于 1868 年提出, 至今已有 150 年历史, 在此过程中实现了从概念到技术的转化, 并得到长足发展. 重要的里程碑事件概述如下.

1868 年, 生于德国的英国科学家威廉·西蒙在英国皇家化学学会内部会议上首次提出煤炭原位气化的可能性. 1888 年, 俄国科学家德米特里·门捷列夫 (Dmitri Mendeleev) 首次提出煤炭地下气化工工艺以及通过管网进行合成气输送的可能性. 1906—1910 年, 美国科学家安森·贝茨 (Anson Betts) 向美国、英国和加拿大专利局提交并获得 3 项专利^[3-5], 尤其是在向英国提出的专利中给出了煤炭地下气化的 4 种方案, 阐述了煤炭原位气化的基本要素: 至少建立 2 口井, 井之间强化连通; 气化剂通过单/多点注入到煤层; 煤炭原位气化, 无需进行开采; 合成气通过管网抽采到地面. 其中, 第 4 种方案为盲孔地下气化方法. 1912 年, 英国科学家威廉姆·拉姆塞 (William Ramsay) 在烟尘消除展览会 (Smoke Abatement Exhibition) 开幕午餐会上发表了有关煤炭地下气化的评论. 随后, 说服实业家 Hugh Bell 支持在达勒姆 Tuesdale 附近的 Hett Hill 进行煤炭地下气化试验. 1913 年, 拉姆塞按照安森·贝茨发明中的第一套方案完成了气化试验的设计方案, 然而由于 1914 年第一次世界大战的爆发, 拉姆塞的气化试验未能实施^[6]. 1933 年, 顿涅兹克煤化工研究所提出气流气化方法并获得专利; 1933—1934 年, 莫斯科附近的克鲁托夫斯科进行现场先导试验, 并获得初步成功; 截止 20 世纪 50 年代中期, 前苏联建成莫斯科近郊地下气化工站、利西昌斯克地下气化工站、南阿宾斯克地

下气化站、夏斯克地下气化站、卡门斯克地下气化站、安格林地下气化站和戈尔洛夫斯科地下气化站等 8 座地下气化站^[7], 其中安格林地下气化站日产量最高时达到 386 万方/天; 1964 年, 前苏联部长会议决定停止进一步开发工作; 直到 1990 年苏联解体, 仍有 2 座地下气化站继续维持运行, 包括乌兹别克斯坦的安格林地下气化站和西西伯利亚的基谢廖夫斯克地下气化站。1980 年代, 美国利物莫尔实验室提出注入点后退技术 (controlled retraction injection point, CRIP)。1987—1988 年, CRIP 技术在“洛基山 1 号”先导试验中获得巨大成功^[8], 推动了煤炭地下气化高效运行及工艺技术的迅速发展。1999—2003 年, Linc Energy 公司在昆士兰 Chinchilla 的第一个半商业化项目取得成功。2006 年后, Carbon Energy 公司和 Cougar Energy 公司分别在 Wooldwood Creek 和 Kingaroy 开展了煤炭地下气化试验^[9]。2004 年, 加拿大 Swan Hill 矿区 1400 m 深 U 型水平井成功实施, 开创了深层煤炭气化的先河。

中国煤炭地下气化研究始于 1958 年, 主要针对煤矿巷道中的气化^[10]。2014 年, 廊坊新奥集团利用石油部门的钻井技术和连续油管技术, 在内蒙古乌兰察布市进行了深度为 283 m 的煤炭地下气化现场试验, 推动了国内钻井式煤炭地下气化技术的发展^[11]。2019 年, 中石油设立集团公司科技重大专项 2019 E-25, 并于 2022 年 4 月成立煤炭地下气化研究中心, 开始有组织的进行前期研究和现场先导试验研究。

1.3 煤炭地下气化的主要研究手段及其评价

目前煤炭地下气化的研究手段主要是实验研究 (现场先导试验和室内实验) 和数值模拟研究, 相关评价如下。

1.3.1 实验研究手段及其评价

对于煤炭地下气化, 现场试验先行于理论研究和数值模拟研究, 1910 年安森·贝茨提出 4 种方案^[3-5], 1913 年拉姆塞按照第一种方案完成气化试验的设计方案^[6], 1918 年门捷列夫提出现场实施工艺, 1933 年前苏联完成井排钻孔式煤炭地下气化的现场工程实施。室内实验研究主要开始于 19 世纪 70 年代第一次石油危机, 美国花费 10 余年时间充分学习前苏联煤炭地下气化技术, 并在此基础上提出和发展了室内试验技术。波兰中央研究院是煤炭地下气化室内实验研究最多的单位^[12], 2007 年 Kapusta 等^[13] 利用 HUGE 项目建成 $2.6 \text{ m} \times 1.0 \text{ m} \times 1.0 \text{ m}$ 的矩形气化

实验装置, 最高温度可以达到 $1600 \text{ }^\circ\text{C}$, 最高压力达到 5 MPa 。仅 2008—2013 年就进行了 12 项 UCG 模拟实验。2010 年 Gur 等^[14] 在土耳其的伊斯坦布尔大学建立高温高压方箱式实验装置, 探索了常压下气化剂中氧含量对气化产物结果的影响。中国人杨兰和建立了盲孔实验设备, 研究了盲孔煤炭地下开采合成气方法的效益及主要的合成气组分实验, 同时进行了数值模拟的检验研究。

现场先导试验的主要优势在于直接得到试验区内反应条件和反应产物的变化规律, 同时提供该区域的煤炭地下气化正常运行和控制调整的工艺参数。主要不足在于, 需要建立一套完整的工艺流程和设备, 如利用钻完井工程建立煤炭地下气化的初始连接通道、气化剂注入系统、地下点火系统、合成煤气的降温及产出系统, 试验成本巨大。此外, 由于反应在地下进行, 难以有效控制反应的进展和程度。

室内实验的主要优势在于实验条件的可控性和实验结果的直观可测性, 可以定性/定量分析气化过程的一些基本规律, 有助于揭示煤炭地下气化的机理。然而, 由于实验条件与真实煤炭地下气化条件存在较大偏差, 例如高压条件下的高温实验涉及到材料的承压能力问题以及高温条件下反应腔体的密封处理问题, 室内实验的成本、尺度效应、结果在现场项目中的适用性均面临很多挑战。

1.3.2 数值模拟研究手段及其评价

得益于电子计算机的兴起和石油天然气行业数值模拟发展, 煤炭地下气化的数值模拟研究始于 20 世纪 70 年代并在此后得到长足发展^[15-19]。1978 年, 美国利物莫尔实验室研发了第一个煤炭地下气化数值模拟器, 采用一维槽道反应流模型^[16]。该模型可以预测煤炭燃烧气化的反应前缘移动速度、合成煤气的组分组成、气化产物的热值等, 与室内实验结果有良好的一致性^[16], 从诞生至今一直有学者对其进行改进和修正, 已成为煤炭地下气化数值模拟研究的经典模型。随着数值模拟技术的发展和研究需求的增加, 二维模型及三维模型得到提出和发展, 相关进展将在后文中进行介绍。

数值模拟的主要优势在于只要基本机理清楚, 辅助以室内实验和现场先导试验的数据, 就可以建立数学模型, 通过数值方法进行求解可以模拟任意工况条件下的煤炭地下气化工艺过程, 用于开采方案设计和对比评价。不足之处在于, 当机理认识不清

或数据存在偏差时,数学模型的预测能力将大幅度降低,因此必须与室内实验或现场先导试验数据进行对比验证。

1.4 本文主要工作

本文针对煤炭地下气化关键力学问题的数值研究,开展了以下工作:通过分析煤炭地下气化过程划分运行空间,阐明每个运行空间中的物质和关键问题,为煤炭地下气化关键问题的数值研究提供理论基础;将煤炭地下气化过程的关键力学问题归纳为4类,包括流体动力学问题、热力学问题、材料应力问题以及化学反应动力学问题,详细介绍以上问

题数值研究的最新研究成果和发展历程;介绍煤炭地下气化数值研究的工程应用并指出其发展趋势。

2 煤炭地下气化的运行空间和关键问题

2.1 煤炭地下气化的运行空间

煤炭地下气化的工艺结构比较复杂,主要存在6个运行空间,包括顶板岩层、底板岩层、煤层原煤、气化腔、注入井筒和生产井筒等。在分析煤炭地下气化关键问题之前,本文将简要介绍每个运行空间及其所涉及物质(图1),帮助读者建立对煤炭地下气化过程的基本认识。

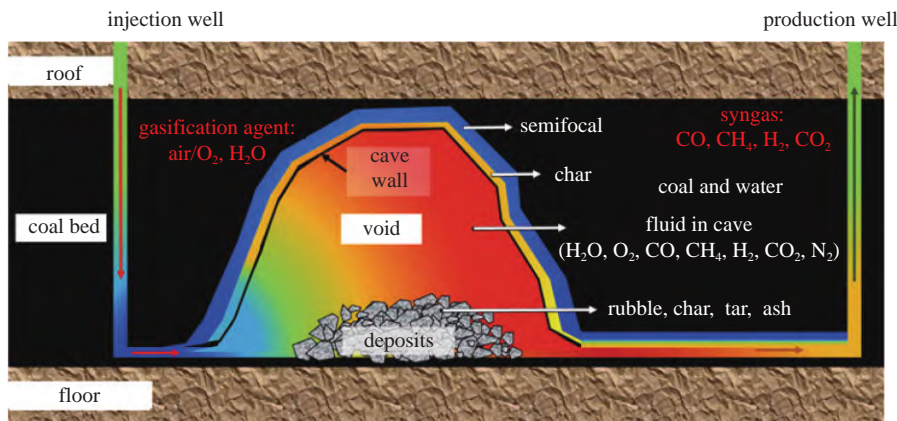


图1 煤炭地下气化过程中运行空间划分及每个运行空间内的物质

Fig. 1 Operating space partition and the materials in each space during UCG

顶板岩层、底板岩层主要是灰岩、泥岩或粉砂岩等岩层,以渗透性较低含水较少的泥岩或粉砂岩为最好选择。

煤层原煤是煤炭地下气化反应的主要原料,根据目前现场经验,以低阶褐煤为主要对象,其他煤阶的煤次之。原煤煤层中的地层水可以作为气化剂补充资源,适当减少注入气化剂中的含水量,但是高含水量的原煤煤层必须先降水然后才能进行煤炭地下气化。

气化腔是煤炭地下气化反应的主要场所,一般将气化腔划分为气化腔边壁、气化腔空腔和气化腔内堆积体等3个部分。

(1) 气化腔空腔是固体碳被消耗后在煤层中形成的洞,气化剂与煤的氧化还原产物和煤气化热解中间产物,在此处混合发生均相化学反应;

(2) 气化腔边壁分为顶底板边界和侧壁边界。对于侧壁边界,由内而外依次为焦化破坏层、半焦

煤、干燥煤、原煤,此处主要发生煤的完全燃烧、不完全燃烧、煤的变形焦化以及损伤崩塌等。对于顶板边界,主要是顶板岩层,此处主要考虑顶板破坏后是否会引起水侵以及地面沉降。对于底板边界,主要是底板岩层,由于温度压力变化较小,一般较少考虑以上因素。

(3) 气化腔堆积体是由气化腔顶部和侧壁煤岩损伤垮塌形成,包括煤灰、煤块、煤焦、碎石、焦油等,此处主要发生均相和非均相化学反应。

注入井筒是气化剂进入气化腔的通道,气化剂为氧气/空气/富氧空气与水/水蒸气,前后两者通过独立通道运输到气化腔中。

生产井筒是采出合成煤气的通道,合成煤气主要包括 CH_4 , CO , CO_2 及 H_2 等。

2.2 煤炭地下气化各运行空间中的关键问题

通过分析国内外先导项目及示范项目,总结出煤炭地下气化过程所涉及的关键问题(图2)。下面将

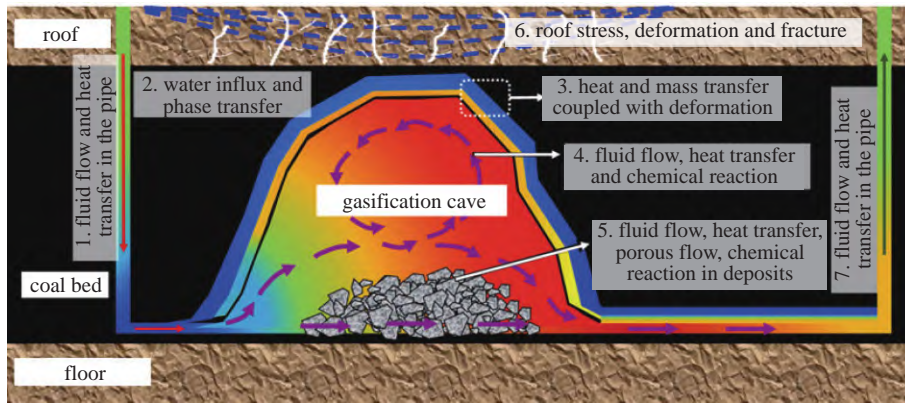


图 2 煤炭地下气化的关键问题
Fig. 2 Key problems during UCG

介绍每个运行空间内的关键问题。

2.2.1 顶板岩层、底板岩层中的关键问题

气化腔的空腔会极大改变应力场分布, 导致顶板出现弯曲、沉降 (图 3), 甚至发育裂缝。气化过程的热作用可能会损伤顶板材料, 加剧以上现象。此外, 顶板岩层具有阻挡上部水层地层水侵入气化腔的作用, 裂缝发育可能会破坏该作用并引起顶板水侵。水侵量大小对煤炭地下气化运行控制极其重要, 水侵量过大会引起气化腔水淹。与顶板相比, 底板所涉及的问题较少。

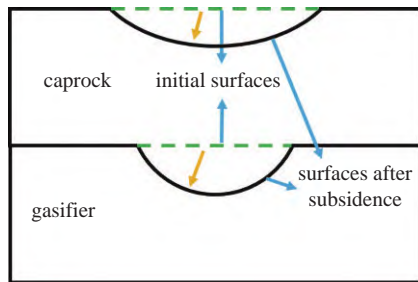


图 3 地面沉降简化示意图
Fig. 3 Illustration of surface subsidence

2.2.2 煤层原煤中的关键问题

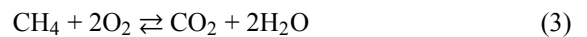
煤层中的水分会在重力和压差作用下向气化腔运移 (侧壁水侵), 与顶板水侵相似, 侧壁水侵速度过大时会导致气化腔水淹。一般情况下原煤渗透率较低, 只需采用渗流描述流体流动即可。但是受气化腔高温影响, 水从原煤区向气化腔流动过程中可能会发生相变, 使得简单的渗流问题变为复杂的非等温渗流问题。

2.2.3 气化腔空腔中的关键问题

煤炭被消耗后形成空腔, 此处的热物理化学作

用十分复杂, 主要包括以下问题。

(1) 空腔内的化学反应主要是流体的均相反应, 以氧化反应为主



以上反应受温度压力影响较大, 是决定反应生成物成分及含量的主要控制点之一。

(2) 空腔内的流体流动为自由流, 当流速较高时出现湍流, 给流动数值模拟带来挑战。

(3) 空腔内的湍流对热对流过程影响很大, 但湍流流动模型和热传递模型的耦合求解仍存在一定挑战。

2.2.4 气化腔边壁中的关键问题

作为煤炭地下气化的另一重要运行空间, 气化腔边壁处的热物理化学作用同样十分复杂, 主要包括以下问题。

(1) 化学反应多样性。化学反应在空间上的分布具有一定规律性 (图 4), 气化腔边壁处化学反应主要包括界面上煤化学反应产生气体与气化腔中流体的均相化学反应、气化腔边壁的煤与气化腔中流体的非均相化学反应、气化腔边壁中煤自身的热解反应等。均相反应见式 (1)~式 (4), 非均相反应如下



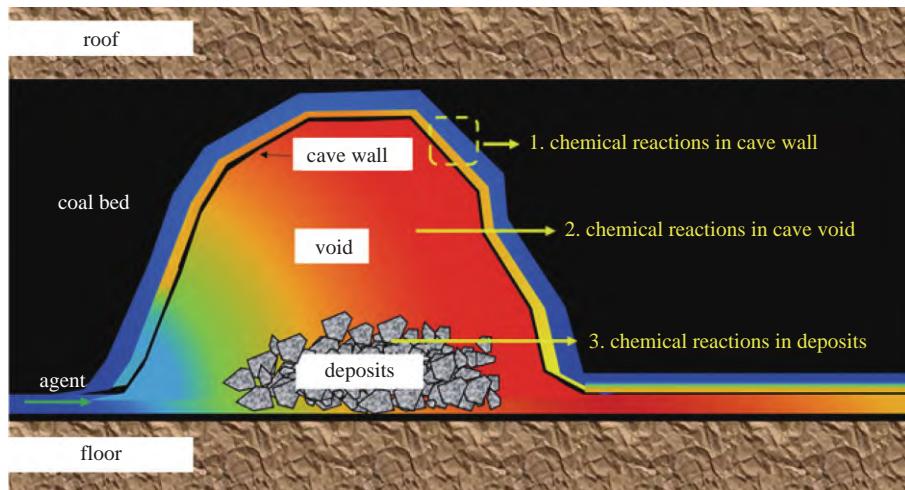
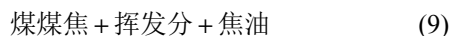


图 4 煤炭地下气化过程中化学反应

Fig. 4 The chemical reactions during UCG

煤热解反应为



(2) 材料热损伤与应力破坏. 在温度和气化剂的影响下, 气化腔边壁处原煤发生干馏、热解、燃烧和气化, 导致材料性质发生改变. 此外, 如图 5 所示, 固体受热会发生膨胀, 进而引起局部应力场发生改变, 当应力达到固体材料强度时, 边壁处开始产生裂缝, 裂缝发育至一定程度后造成固体脱落.

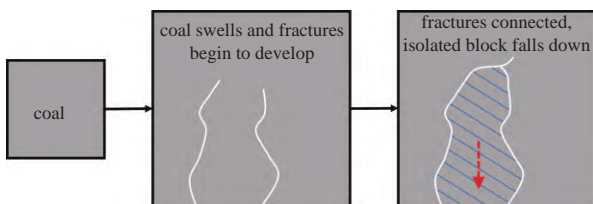


图 5 气化腔边壁损伤和脱落示意图

Fig. 5 Illustration of the thermal damage of the wall and rock collapse

(3) 流体流动复杂性. 煤的材料性质对温度比较敏感, 气化过程的温度分布特点, 使得气化腔边壁孔隙度和渗透率呈现出强非均质性. 再加上裂缝发育的影响, 边壁中的流体流动比较复杂, 以非均匀介质渗流为主.

(4) 热传递方式多样性. 边壁处的热传递方式包含传导、对流和辐射 3 种. 受材料强非均质性影响, 导热系数分布不均; 气化腔温度一般超过 1000 K, 热辐射在边壁处流固热传递中起着不可忽略的作用.

2.2.5 气化腔堆积体中的关键问题

煤炭地下气化过程中, 脱落的碎块、煤焦、煤灰和焦油在气化腔底部聚集形成多孔介质, 该区域

的关键问题如下:

(1) 堆积体的孔隙和裂缝发育, 流体流动规律非常复杂;

(2) 化学反应多样性. 与气化腔边壁相似, 此处发生均相和非均相化学反应.

2.2.6 注入井筒和生产井筒中的关键问题

在注入井筒中, 气化剂通过连续油管不同管路进入到高温高压气化腔中. 氧气/空气/富氧空气通过中心管直接进入气化腔, 中心管的侧管一般注入水或水蒸气, 连续油管的环空一般是循环氮气. 流动过程中, 需要考虑流体管流的摩阻损失、流体相变的热力学问题、管路与周围地层温差引起的热交换问题.

与注入井筒相比, 生产井筒内的温度更高, 需要在流出井口前对合成粗煤气进行喷淋降温, 该措施使得流体流动过程更加复杂.

2.3 煤炭地下气化的关键力学问题

从工艺流程角度讲, 煤炭地下气化主要包括注入井气化剂注入、气化腔内煤炭气化、生产井粗煤气产出. 从物理过程讲, 煤炭地下气化主要包括: 地层流体在注入井与生产井压差的驱动下发生流动; 气化剂与煤炭发生一系列氧化还原反应; 化学反应释放的热量使得气化腔与地层间存在温度差, 进而发生热量传递; 气化腔边壁在温度影响下材料性质发生变化; 气化腔的存在会改变气化腔周围地应力分布, 引起地面沉降. 因此, 煤炭地下气化从本质上讲是多场耦合问题, 可以将煤炭地下气化过程中的关键力学问题归结为以下 T-H-M-C (thermo-hydraulic-mechanical-chemical) 4 个方面: 流体动力学问

题、热力学问题、材料应力问题和化学反应动力学问题. 每个问题的主要研究对象如下:

(1) 对于流体流动问题的数值研究, 主要集中在气化腔中高温高压流体流动、煤层中非等温渗流、气化剂注入管道和合成气产出管道中的流动;

(2) 对于热力学问题的数值研究, 主要集中在气化腔中流体间的热量交换、气化腔内流体与气化腔边壁固体的热量交换、气化腔底部堆积体中块体与块体之间以及块体与流体之间的热量交换、原煤中固体间以及流固间的热量交换;

(3) 对于材料应力问题的数值研究, 主要集中在煤层顶板、气化腔边壁和底部堆积体受热后材料性质发生改变, 以及煤炭地下气化过程中的应力场变化;

(4) 对于化学反应动力学问题的数值研究, 主要集中在化学反应方程、化学反应速率和化学反应常数的确定.

3 煤炭地下气化过程中关键力学问题的数值研究进展

深入理解煤炭地下气化过程中温度场、流动场、应力场和化学场变化, 建立每个场的数学模型, 然后通过数值方法对模型进行耦合求解, 是准确描述煤炭地下气化复杂过程, 预测不同煤阶的煤、气化剂类型和工况下合成粗煤气组分组成及产量大小的重要手段.

3.1 流体动力学问题的研究进展

3.1.1 流体动力学模型最新进展

煤炭地下气化过程的流动模型包括质量守恒方程、动量守恒方程以及相应的边界条件、初始条件和辅助方程等. 目前最新的模型如下.

(1) 质量守恒方程

地层中存在多组分多相(多相: 气相、水相、油相、固相, 多组分: CO, H₂, CO₂, CH₄, H₂S, O₂, N₂, 水、苯、纯碳等), 在表征单元体 (representative elementary volume, REV) 尺度上针对每一相和每一个组分建立质量守恒方程^[20]. 每一相的质量守恒方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi_{\beta}\rho_{\beta}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta}\mathbf{u}_{\beta}) = \dot{\omega}_{\beta} \quad (10)$$

式中, t 表示时间, 下标 β 表示第 β 相, ϕ_{β} 表示第 β 相的体积分数, ρ 表示密度, \mathbf{u} 表示表观速度, $\dot{\omega}$ 表示质

量源汇项.

第 β 相中第 i 个组分的质量守恒方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi_{\beta}\rho_{\beta}Y_{\beta}^i) + \nabla \cdot (\rho_{\beta}\mathbf{u}_{\beta}Y_{\beta}^i) = \nabla \cdot (\rho_{\beta}\mathbf{D}_{\beta}^i\nabla Y_{\beta}^i) + \dot{\omega}_{\beta}^i \quad (11)$$

式中, Y_{β}^i 表示第 i 个组分在第 β 相中的质量分数, \mathbf{D} 表示弥散张量.

(2) 动量守恒方程

第 β 相的动量守恒方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi_{\beta}\rho_{\beta}\mathbf{u}_{\beta}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta}\mathbf{u}_{\beta} \otimes \mathbf{u}_{\beta}) = -\phi_{\beta}\nabla P - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_{\beta} + \mathbf{k} \cdot k_{r,\beta}\mathbf{u}_{\beta} + \phi_{\beta}\rho_{\beta}\mathbf{g} \quad (12)$$

式中, P 表示压力, \mathbf{g} 表示重力向量, \mathbf{k} 表示渗透率张量, $k_{r,\beta}$ 表示第 β 相的相对渗透率, $\boldsymbol{\tau}_{\beta}$ 表示应力张量, 表达式为

$$\boldsymbol{\tau}_{\beta} = -\phi_{\beta}\mu_{\beta} \left[(\nabla\mathbf{u}_{\beta} + \nabla\mathbf{u}_{\beta}^T) - \frac{2}{3}\nabla \cdot \nabla\mathbf{u}_{\beta}I \right] \quad (13)$$

式中, μ 表示流体黏度.

(3) 边界条件

煤炭地下气化过程流动问题的复杂性还在于其边界条件, 受热物理化学作用影响, 气化腔壁面一直向外扩展, 且空腔流体与边壁固体之间存在质量交换. 为准确捕捉以上因素对流动过程的影响, 需要建立气化腔生长速度模型和边壁处质量传递模型. Najafi 等^[21] 基于 11 个矿场测试, 采用非线性回归分析获得气化腔生长速度模型

$$CGR = \frac{0.004 \left(\frac{CCV}{D} \right)^{0.5} (OP)^{0.265} (CM)^{0.185}}{CVM(CA)^{0.25} (CP)^{0.159}} \quad (14)$$

式中, CGR 表示气化腔的生长速度, CCV 表示煤炭热值, D 表示煤层深度, OP 表示工况压力, CM 表示煤炭中水分含量, CVM 表示煤炭中挥发分含量, CA 表示煤炭中灰分含量, CP 表示煤炭渗透率.

从空腔到气化腔边壁的质量传递为

$$J_w^i = -\rho_w h_{m,i} (Y_w^i - Y_g^i) \quad (15)$$

式中, 下标 w 表示气化腔边壁, 下标 g 表示气化腔内的空腔, 上标 i 和下标 i 均表示第 i 个组分, h_m 表示质量传递系数.

(4) 辅助方程

以上流体流动方程的求解还需要一系列辅助方程

$$\sum_{\beta=1}^{n_p} \phi_{\beta} = 1 \quad (16)$$

$$\sum_{i=1}^{n_c} Y_{\beta}^i = 1 \quad (17)$$

式中, n_p 表示相的数量, n_c 表示组分的数量.

以上流体流动模型的优势在于充分考虑了流动过程中的惯性力、压力、黏性力以及重力, 不仅可以描述空腔中的高速自由流, 当流速 u_{β} 非常小时, 还可以退化为多孔介质中的低速渗流. 此外, 由于模型基于每一相和每一组分建立了质量守恒方程, 可以准确描述煤炭地下气化过程中多相多组分体系的流动, 对捕捉组分非均匀分布和准确预测气化腔内化学反应具有十分重要的意义. 目前, 该模型的求解存在一定挑战, 尚处于理论阶段, 未全面应用于煤炭地下气化数值模拟. 在实际应用中往往根据研究重点对模型进行简化, 例如空腔内的流动不考虑包含渗透率的黏性力项, 多孔介质中的流动简化为达西公式 $u_{\beta} = k \cdot k_{r,\beta} \nabla P / \mu_{\beta}$.

3.1.2 流体动力学模型发展历程

(1) Channel 模型

1978 年, Dinsmoor 等^[22] 提出经典的 Channel 模型: 注入井和生产井之间通过圆柱形通道连通, 气化剂从左侧注入, 地层水从侧壁侵入, 气化腔内发生气化反应后产生粗煤气, 在压力驱动下粗煤气从右侧产出. 随着气化反应的进行, 壁面上的煤被消耗, 气化腔沿径向发展. Channel 模型采用拟稳态输运方程表征组分沿轴向流动

$$\frac{d(v_z C_i)}{dt} = -\frac{2}{r_t} \sum R_{si} - \sum R_{gi} + \frac{m_i}{\pi r_t^2} \quad (18)$$

式中, C_i 表示第 i 个组分的浓度, v_z 表示气体在轴向上的速度, R_s 和 R_g 分别表示固体和气体的反应速率, r_t 表示半径, m 表示水侵和分解导致的源汇项. 动量方程为

$$\Delta P = \frac{1}{r_t} \rho v^2 f l \quad (19)$$

式中, f 表示摩擦系数, l 表示轴向长度.

Channel 模型的提出与当时煤炭地下气化技术密切相关: 在基于水平井钻井的 CRIP 技术成熟之前, 钻井主要以直井为主, 注入井与生产井的间距较小, 且通过各种工艺手段 (电力贯通、火力贯通、水力压裂等) 提前建立贯通通道, 气化过程中气化腔沿

正向扩展 (注入井到生产井方向). 在这种背景下, Channel 模型的物理模型假设具有一定的合理性, 在现场使用时能够满足工程需求. 此后, 许多学者对 Channel 模型进行了改进^[23-29]. 总体而言, 该模型已成为煤炭地下气化数值模拟研究的经典模型, 其优势在于计算简便且能够直观的给出碳消耗速度.

(2) 气化腔模型

随着煤炭地下气化技术的进步, 尤其是 CRIP 技术的成熟, 人们越来越关心气化腔的形态, 而数值模拟技术的快速发展正好给二维/三维复杂流动问题的求解提供了有力支持. 在这种背景下, 气化腔模型得以提出和应用. 1994 年, Kuypers 在博士论文里详细介绍了气化腔模型^[30], 如图 6 所示, 该模型可以考虑不同材料在空间上的分布.

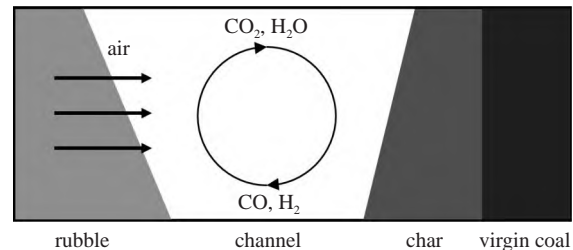


图 6 气化腔模型流体流动示意图 (剖面图)^[30]

Fig. 6 Illustration of fluid flow in a gasification model (cross section)^[30]

假设流体为单相多组分体系, 相的质量守恒方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (20)$$

第 i 个组分的质量守恒方程为

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho \mathbf{D}_i \nabla Y_i) + S_{i,react} \quad (21)$$

式中, $S_{i,react}$ 表示化学反应导致的第 i 个组分的生成和消耗.

第 i 个组分的动量守恒方程为

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u u_i) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \nabla \cdot \mu \nabla \cdot \mathbf{u} + \rho g + \nabla \cdot \mu \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} (\mu \nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (22)$$

式中, \mathbf{x}_i 表示坐标, 其个数由模拟问题的维度决定.

相比于 Channel 模型, 气化腔模型在物理模型和流动模型上均具有很大发展, 突破了圆柱物理模型的束缚, 可以描述二维/三维物理模型中的多组分体系复杂流动和气化腔扩展过程. 此后, 许多学者对

气化腔模型进行了改进^[31-38]。

此外, 1982 年 Genuchten 等^[39] 提出溶质在气化腔周围 (边壁及原煤区) 地层水中的运移方程

$$B \frac{\partial C}{\partial t} + D_{\text{eff}} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (23)$$

式中, B 表示阻滞系数, $B = 1 + (1 - \phi)K_d/\phi$, C 表示溶质的浓度, D_{eff} 表示有效扩散系数, K_d 表示溶质在固相和液相中的分配系数。虽然该模型比较简化, 但对于研究煤炭地下气化过程产生的污染物的运移十分有效。

3.2 热力学问题的研究进展

3.2.1 热力学模型最新进展

热场描述目前主要有两种模型: 基于内能的能量守恒方程和基于温度的能量守恒方程^[40]。数学模型如下。

(1) 基于内能的能量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{\beta} \phi_{\beta} \rho_{\beta} U_{\beta} + (1 - \varepsilon) \rho_r U_r \right] + \sum_{\beta} \nabla \cdot (\rho_{\beta} \mathbf{u}_{\beta} U_{\beta}) = \nabla \cdot (\lambda_{\text{eff}} \nabla T) - \sum_{\beta} \sum_i \nabla \cdot (h_{\beta}^i \mathbf{J}_{\beta}^i) + \dot{q}_{\text{well}} \quad (24)$$

式中, U 表示内能, ε 表示孔隙度, 下标 r 表示岩石, T 表示温度, λ_{eff} 表示热传导系数, h_{β}^i 表示第 β 相中第 i 个组分的焓, $\mathbf{J}_{\beta}^i = -\rho_{\beta} \mathbf{D}_{\beta}^i \cdot \nabla Y_{\beta}^i$, \dot{q}_{well} 表示注入井/生产井引起的能量源汇项。

(2) 基于温度的能量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \left[\sum_{\beta} \phi_{\beta} \rho_{\beta} C_{p,\beta} + (1 - \varepsilon) \rho_r C_{p,r} \right] T \right\} + \sum_{\beta} \nabla \cdot (\rho_{\beta} \mathbf{u}_{\beta} C_{p,r} T) = \sum_{\beta} \phi_{\beta} \alpha_{\beta} T \frac{DP}{Dt} + \nabla \cdot (\lambda_{\text{eff}} \nabla T) - \sum_{\beta} \sum_i \mathbf{J}_{\beta}^i \nabla h_{\beta}^i + \dot{q} \quad (25)$$

式中, $C_{p,\beta}$ 表示第 β 相的比热容, $C_{p,r}$ 表示岩石的比热容, α 表示热膨胀系数, \dot{q} 包括 \dot{q}_{well} 和化学反应释放的热量。

此外, 由于气化腔内的温度非常高, 热辐射效应不可忽略。从空腔到气化腔壁面的热量传递为

$$q_{\text{rad}} = F_{\varepsilon} \sigma (T_g^4 - T_w^4) + h(T_g - T_w) \quad (26)$$

式中, 等号右边第一项表示热辐射引起的热量传递, F 为辐射角系数, σ 表示 Stefan-Boltzman 常数, h 表示对流传热系数。

以上模型充分考虑了热传导、热对流和热辐射对热传递过程的影响, 对于描述煤炭地下气化过程的热力学问题具有很强的适用性。

3.2.2 热力学模型发展历程

煤炭地下气化的热力学模型与流体动力学模型相似, 随着物理模型的演化, 经历了从 Channel 模型到气化腔模型的发展。

(1) Channel 模型

在 Dinsmoor 等^[22] 的 Channel 模型中, 能量守恒方程为

$$\frac{d(\rho v_z C_{p,g} T_g)}{dz} = -\frac{2}{r_t} (h + I)(T_g - T_w) - \sum R_{gi} \Delta H_i \quad (27)$$

式中, I 表示辐射传热系数, ΔH_i 表示第 i 个反应的反应热。该模型对热对流、热传导和热辐射 3 种传热方式进行了简化处理, 没有考虑浓度扩散引起的流体流动对热对流的影响, 忽略了轴向热传导。

(2) 气化腔模型

在 Kuypers 的气化腔模型中^[30], 能量守恒方程为

$$C_p \frac{\partial \rho T}{\partial t} + C_p \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + S_{\text{react}} + S_{\text{rad}} \quad (28)$$

式中, S_{react} 和 S_{rad} 分别表示化学反应和热辐射引起的热源汇项, λ 表示流体导热系数。该方程忽略了固相的热传导和热容以及压力对焓值的影响, 此后随着气化腔模型的发展得以改进。总的来说, 气化腔模型的能量守恒方程考虑热传导并突破了一维物理模型的限制, 实现了二维/三维煤炭地下气化过程热传递描述。

3.3 材料应力问题的研究进展

3.3.1 材料应力模型最新进展

假设介质连续, 温度改变影响应力场分布, 但应力场改变不影响温度, 地应力方程为^[41-42]

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} = 2G \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} - \alpha_T \frac{\partial T}{\partial t} \delta_{ij} \right) + \left(K - \frac{2}{3}G \right) \left(\frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t} - 3\alpha_T \frac{\partial T}{\partial t} \right) \delta_{ij} \quad (29)$$

式中, $G = E/[2(1 + \nu)]$, $K = E/[3(1 - 2\nu)]$, $\varepsilon_{kk} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$, σ_{ij} 表示应力张量的元素, ε_{ij} 表示应变张量的元素, E 表示杨氏模量, ν 表示泊松比, δ_{ij} 表示克罗内克函数, T 表示温度, α_T 表示热膨胀系数。

平衡方程和应变与位移关系式为

$$\sigma_{ij,j} + f_i = 0 \quad (30)$$

$$\varepsilon_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2 \quad (31)$$

式中, f_i 表示净体力, u_i 表示 i 方向位移.

3.3.2 材料应力模型发展历程

1978 年, Advani 等^[43] 对煤炭地下气化过程的地应力进行了研究, 假设燃烧从截面中心开始 (图 7), 沿径向发展, 地应力方程为

$$\sigma_{rr}/\sigma_0 = -\sigma_n \quad (32)$$

$$\sigma_{\theta\theta}/\sigma_0 = -\sigma_n - T/T_0 \quad (33)$$

式中, $\sigma_0 = \lambda ET_0/(1-\nu)$, $\sigma_n = 1/r^2 \int_R^F rT/T_0 dr$, F 表示圆形气化腔的半径, λ 表示热膨胀的线性系数.

2005 年, Yang^[44] 建立了温度差、应力场和渗流场的数学模型, 采用有限元方法进行耦合求解, 其应力场为

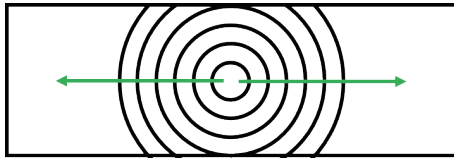


图 7 气化腔模型应力变化示意图 (剖面图)

Fig. 7 Illustration of stress field in a gasification model (cross section)

$$(\sigma'_{ij} + \chi \sigma_{ij} \rho_f \psi)_j + \rho b_i = 0 \quad (34)$$

$$\sigma'_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} - (3\lambda' + 2\mu') \alpha \sigma_{ij} (T - T_0) \quad (35)$$

式中, σ'_{ij} 表示有效应力, χ 表示与饱和度相关的非线性常数, ψ 表示压力水头, b_i 表示体力, C_{ijkl} 表示弹性张量, ε_{kl} 表示应变张量, λ' 和 μ' 表示拉梅常数, α 表示岩石骨架热膨胀系数.

随后, 煤炭地下气化过程的应力问题主要采用商业化软件进行研究. 2014 年, Yang 等^[45] 利用 ABAQUS 软件评估了保加利亚某 UCG 项目的地面沉降; 2014 年, Akbarzadeh 等^[46] 提出顺序耦合方法, 采用 STARS 软件计算流动场和热场, 采用 FLAC3D 软件计算地应力分布; 2016 年, Li 等^[47] 利用 FLAC3D 软件研究地面沉降问题, 提出沉降的预测模型.

3.4 化学反应动力学问题的研究进展

煤炭地下气化过程的化学反应发生在气化腔的边壁、空腔和底部堆积体中. 反应活性对温度和压力很敏感, 且平行反应和竞争反应同时存在, 使得化学反应过程非常复杂. 气化反应的实质是煤、气化剂、气态反应产物相互之间的热化学平衡^[48]. 热化学平衡参数见表 1, 反应类型可以根据反应特征划分为 4 种 (表 2).

表 1 主要的气化反应方程式^[40, 49]

Table 1 Main chemical reaction equations^[40, 49]

No.	Reaction	Reaction formula	$\Delta H_{298 \text{ K}} / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$
R1	incomplete combustion	$\text{C} + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}$	-111
R2	complete combustion	$\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	-393
R3	steam gasification	$\text{C} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	+131
R4	boudouard reaction	$\text{C} + \text{CO}_2 \rightarrow 2 \text{CO}$	+172
R5	hydrogasification	$\text{C} + 2 \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4$	-75
R6	pyrolysis	$\text{drycoal} \rightarrow \text{char} + \text{volatiles} + \text{tar}$	-
R7	H_2 combustion	$\text{H}_2 + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$	-242
R8	CO combustion	$\text{CO} + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	-283
R9	O_2 combustion	$\text{CH}_4 + 2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$	-802
R10	water gas shift	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	-41
R11	inversed CO methanation	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CO} + 3 \text{H}_2$	+206
R12	CO_2 methanation	$\text{CO}_2 + 4 \text{H}_2 \leftrightarrow \text{CH}_4 + 2 \text{H}_2\text{O}$	-164
R13	inversed methane CO_2 reforming	$2 \text{CO} + 2 \text{H}_2 \leftrightarrow \text{CH}_4 + \text{CO}_2$	-247

表 2 煤炭地下气化的反应分类

Table 2 The classification of chemical reactions during UCG

No.	Reaction type							
	Reaction sequence		Reaction trend		Reaction direction		Reactant phase states	
	First order reaction	Second order reaction	Oxidation reaction	Reduction reaction	One-way reaction	Irreversible one-way reaction	Homogeneous reaction	Heterogeneous reaction
R1	√		√		√			√
R2	√		√		√			√
R3	√			√	√			√
R4	√			√	√			√
R5		√	√		√			√
R6	√		-	-	√		-	-
R7		√	√		√		√	
R8		√	√		√		√	
R9		√	√		√		√	
R10		√		√		√	√	
R11		√		√		√	√	
R12		√	√			√	√	
R13		√	√			√	√	

3.4.1 化学反应动力学最新进展

(1) 反应方程的最新研究成果

煤炭地下气化过程中至少存在 13 种化学反应. 对每一种化学反应都进行动态数值模拟, 不仅会耗费巨大计算时间, 还需要充分考虑各种化学反应之间的平行、竞争和连锁关系. 在实际应用中, 为简洁有效地模拟反应动态过程, 需要对多种化学反应进行取舍, 只保留对产出气组分影响较大的反应方程. 现阶段数值模拟研究工作中, 反应方程主要为式 (1)~式 (9), 包含煤炭热解反应 (R6)、均相反应 (R7, R8, R9, R10)、非均相反应 (R2, R3, R4, R5)^[27, 37, 40, 50-52].

(2) 反应速率的最新研究成果

化学反应速率是指化学反应进行的快慢程度 (平均反应速率), 在容积不变的反应容器中, 通常采用单位时间内反应物浓度的减少或生成物浓度的增加来表示. 影响化学反应速率的因素包括: 反应物本身的性质、反应物的混合均匀度、反应物之间的接触面积、反应物状态、环境温度、浓度、压力、催化剂、反应物颗粒大小等. 受化学反应复杂性影响, 煤炭地下气化的反应速率可以分为均相摩尔反应速率、非均相摩尔反应速率、热解反应摩尔反应速率等 3 种. 最新研究成果总结如下.

① 均相反应的摩尔反应速率

均相反应的摩尔反应速率用幂律模型来表示^[31, 53-54]

$$R_{k,\text{chem}} = k_{f,k} \prod_{j=1}^N [C_j]^{n'_{jk}} - k_{b,k} \prod_{j=1}^N [C_j]^{n''_{jk}} \quad (36)$$

式中, N 代表反应物质的数量; C_j 代表物质浓度; $k_{f,k}$ 代表向前反应速率常数; $k_{b,k}$ 代表逆反应速率常数; n 代表反应速率指数, 一般情况下默认为反应 k 中第 j 个反应物或产物的化学计量系数^[54-55]. 该模型不仅能够描述单向不可逆反应和可逆反应, 还可以针对特定反应进行适当调参, 具有良好的通用性.

② 非均相反应的摩尔反应速率

非均相反应的摩尔反应速率可以用简化的 Langmuir-Hinselwood 模型来表示^[31, 56-57]

$$R_k = k_k P_k^n \quad (37)$$

$$R_k = k_k [C_j]^n \quad (38)$$

式中, R_k 代表反应速率, $\text{kmol}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$; k_k 代表反应速率常数, $\text{kg}/(\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{atm}^n)$ ($1 \text{ atm} \approx 101.3 \text{ kPa}$); P_k 代表气相反应物质的分压, atm ; C_j 代表物质浓度, mol/m^3 ; n 代表压力指数, 无量纲. 其中, 将理想气体状态方程代入式 (38) 可以得到式 (37). 在该模型中, 与煤

炭相关的反应主要受气化剂物质浓度和反应压力影响.

③ 热解反应的摩尔反应速率

热解反应的摩尔反应速率可以表示为^[52, 55]

$$R_k = k_k [C_{\text{dry_coal}}] \quad (39)$$

式中, $C_{\text{dry_coal}}$ 是指干燥煤的物质浓度, mol/m³. 在该模型中, 影响煤炭热解效率的主要因素是煤炭的物质浓度.

均相反应、非均相反应、煤炭热解反应的反应速率常数均可采用 Arrhenius 公式进行计算

$$k_{f,k} = AT^\alpha \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (40)$$

$$k_{b,k} = \frac{k_{f,k}}{k_{C,k}} \quad (41)$$

式中, A 代表气化反应的指前因子, s⁻¹; E_k 代表气化反应的活化能, kJ/mol; R 代表气体常数, 8.314 J/(mol·K); T 代表反应温度, K; α 代表反应级数, $k_{C,k}$ 是反应 k 的热力学平衡常数.

在目前的数值模拟研究中, 只对部分化学反应进行表征. 表 3 列举了一些在煤炭地下气化数值模拟中, 应用范围较广的化学反应速率表达式及其参数^[12, 27, 37, 52, 58].

表 3 煤炭地下气化过程中均相及非均相化学反应速率表达式

Table 3 The rate of homogeneous and heterogeneous chemical reactions during UCG

No.	Reaction rate expression	A_k	α_k	E_k
R2	$K_{f,1}[\text{O}_2]$	2.503×10^{17}	1.0	179.4
R3	$K_{f,3}[\text{H}_2\text{O}]^{0.5}$	8.593	0.5	231.0
R4	$K_{f,4}[\text{CO}_2]^{0.5}$	0.8593	0.5	211.0
R5	$K_{f,5}[\text{H}_2]$	2.337×10^{-6}	1.0	150
R7	$K_{f,7}[\text{H}_2]^{1/4}[\text{O}_2]^{2/3}$	2.50×10^{18}	-1	167.4
R8	$K_{f,8}[\text{CO}][\text{O}_2]^{1/4}$	3.98×10^{19}	0	167.4
R9	$K_{f,9}[\text{CH}_4]^{1/2}[\text{O}_2]^{5/4}$	4.40×10^{15}	0	125.5
R10	$K_{f,10}[\text{CO}][\text{H}_2\text{O}] - K_{b,10}[\text{CO}_2][\text{H}_2]$	27.8	0	12.6
R11	$K_{f,11}[\text{CH}_4][\text{H}_2\text{O}] - K_{b,11}[\text{CO}][\text{H}_2]^3$	31.2	0	30.0

Note: The parameters of pyrolysis reaction vary greatly with different coal quality and are not listed in this table

3.4.2 化学反应动力学发展历程

(1) 反应方程的发展历程

如图 8 所示, 随着对煤炭地下气化的认识逐步加深, 描述气化过程的反应方程经历了一系列发展, 由最初的 2 个发展为现在的 9 个. 1976 年, Sawyer 等^[59] 在煤炭地下气化数值模拟中, 通过碳完全燃烧反应 (R2) 和 Boudouard 反应 (R4) 描述气化腔壁面处的传质和能量传递现象. 同年, Winslow^[15] 在模拟一维煤炭燃烧过程时, 增加了蒸汽气化反应 (R3)、加氢气化反应 (R5)、煤炭热解反应 (R6) 和水汽变换反应 (R10). 2005 年, Perkins 等^[56] 在模拟一维半

无限湿煤板的气化过程时, 增加了逆 CO 甲烷化反应 (R11). 2008 年, Perkins 等^[26] 将一氧化碳燃烧反应 (R8) 和甲烷燃烧反应 (R9) 引入煤炭地下气化数值模型中, 可以更加精准地预测产出气组分含量.

(2) 反应速率的发展历程

1976 年, Winslow^[15] 建立了化学反应 R2, R3, R4, R5, R6, R10 的反应速率表达式. 其中, 热解反应 R6、非均相反应 R3 和均相反应 R10 的速率表达式分别为

$$R_6 = \frac{5000\rho_{\text{Dry_coal}}}{M_{\text{Dry_coal}}} \exp(-6039/T) \quad (42)$$

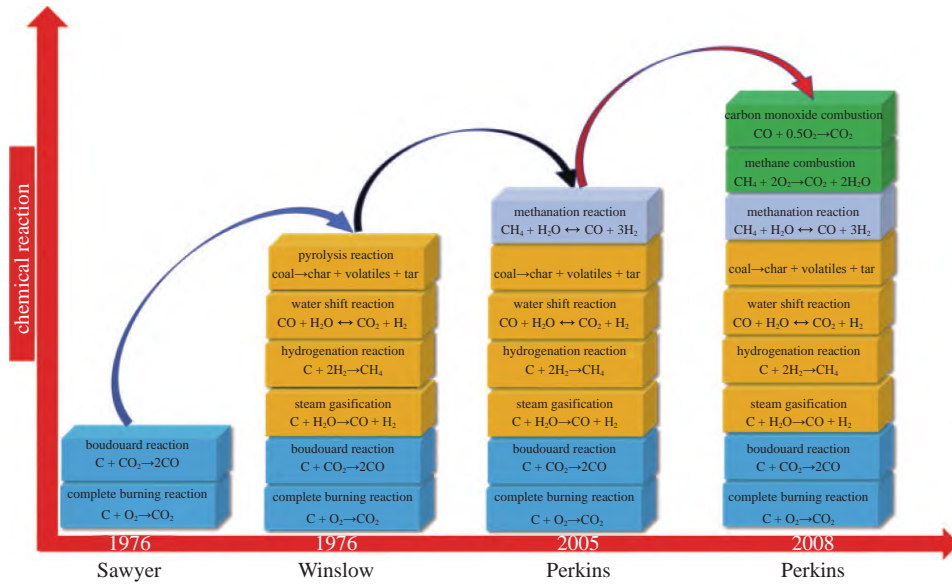


图 8 煤炭地下气化过程中化学反应方程的发展历程图

Fig. 8 The development of the equations used to describe the chemical reaction during UCG

$$R_3 = \frac{10^{-7} \rho_{CH_4} y_{H_2O}^2 P^2}{M_{CH} \exp(5.052 - 12\,908/T)} \cdot \frac{1}{10^{-5} y_{H_2O} P + \exp(-22.216 + 24\,880/T)} \quad (43)$$

$$R_{10} = 30 C_{H_2O} C_{CO} \exp(-7250/T) \quad (44)$$

1987 年, Park 等^[58] 将 Arrhenius 公式引入煤炭热解反应速率表达式

$$-\frac{dV_m}{dt} = -R_{pyrolysis} = K \exp[-E/(RT)](V_m^* - V_m) \quad (45)$$

对非均相反应速率的表达式进行简化

$$R = S \cdot K \cdot C_i^n \quad (46)$$

式中, V_m 是挥发物含量, V_m^* 是煤的有效挥发物含量, S 是反应接触表面积。

2005 年, Perkins^[31] 进一步对煤炭热解反应 (R6), 非均相反应 (R3, R4, R5)、均相反应 (R10, R11) 的反应速率表达式进行了简化

$$R_{pyrolysis,i} = k_{pyrolysis,i} [VM_i] \quad (47)$$

$$R_3 = k_{f,3} [H_2O]^{0.5} \quad (48)$$

$$R_4 = k_{f,4} [CO_2]^{0.5} \quad (49)$$

$$R_5 = k_{f,5} [H_2] \quad (50)$$

$$R_{10} = k_{f,4} [CO][H_2O] - k_{f,10} [CO_2][H_2] \quad (51)$$

$$R_{11} = k_{f,4} [CH_4][H_2O] - k_{f,11} [CO][H_2] \quad (52)$$

2013 年, Seifi 等^[29] 再一次对热解反应速率表达式进行简化, 见式 (39). 此后, 反应速率表达式的研究重点转向反应参数修正^[37, 52].

4 煤炭地下气化数值研究的工程应用及其发展趋势

4.1 煤炭地下气化数值研究的工程应用

美国一直致力于煤炭地下气化的数值研究. 基于对气化腔及其生长规律的现场试验观察, 以及对煤炭地下气化过程的理解, 利弗莫尔实验室开发了 CAVSIM 和 UCG-SIM3D 2 个多场耦合数值模拟软件.

4.1.1 CAVSIM 煤炭地下气化模拟软件及其应用

为了更好地将研究成果应用于实际工程并指导先导试验的设计及实施, 美国利弗莫尔实验室在 20 世纪 70 年代和 80 年代开发了 CAVSIM 软件^[60-61]. 该软件的模型考虑了基本化学、传热、气体传输、水侵、空腔生长、气化腔边壁和底部堆积体中的燃烧、气化腔和生产井入口之间的传热和化学反应, 以及固体 (煤、煤焦、灰和顶板碎石) 在空腔底部的积聚、热解和气化. 与现场试验结果的对比 (图 9), 证明该软件可以准确预测 Centralia 部分煤层 CRIP 测试和 Rocky Mountain 1 CRIP 测试前两个气化腔的空腔形状、水侵量和合成粗煤气组成.

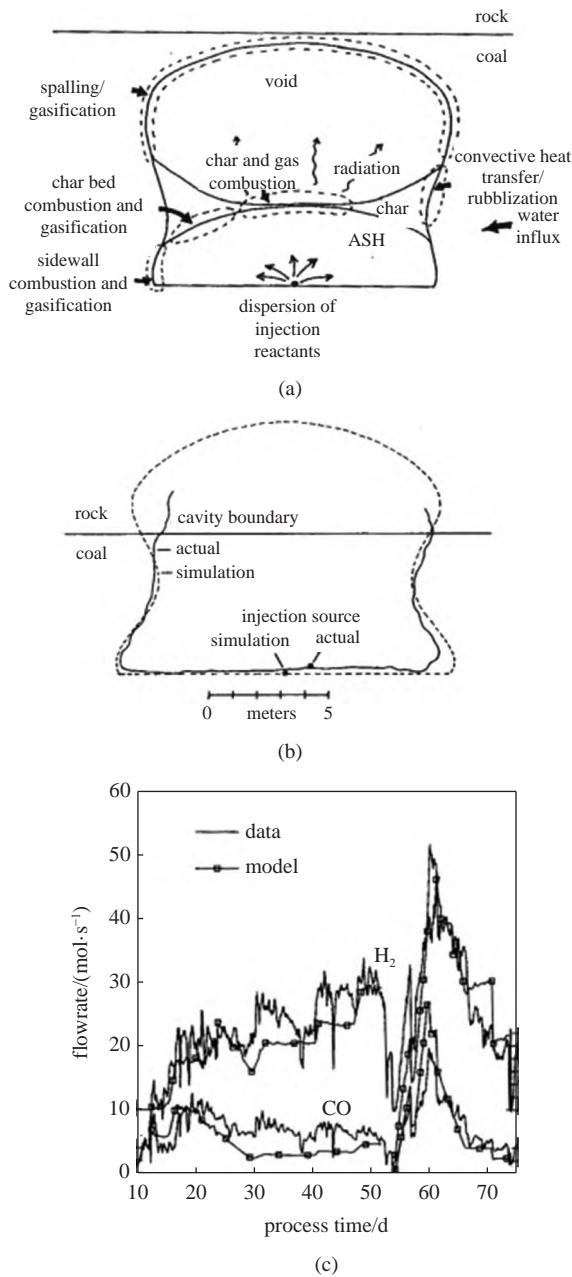


图 9 CAVSIM 模拟结果验证. (a) CAVSIM 软件所建立模型的示意图; (b) Centralia 部分煤层 CRIP 现场试验的气化腔测量形状与预测形状; (c) 落基山 1 号 CRIP 试验前两个气化腔的氢气和一氧化碳的实际产量与预测产量^[60-61]

Fig. 9 Validation of CAVSIM. (a) Schematic diagram of a model built in CAVSIM; (b) The measured and predicted shape of a gasifier in a Centralia coal bed that tested with CRIP; (c) The measured rate and predicted rate of H₂ and CO of the first two gasifiers during Rocky Mountain 1 CRIP experiment^[60-61]

4.1.2 UCG-SIM3D 煤炭地下气化模拟软件及其应用

1995 年, 利弗莫尔实验室的另一团队, 在 CAVSIM 煤炭地下气化模拟软件的基础上开发了 UCG-SIM3 D. 与 CAVSIM 相比, 重要的进步包括: 灵活的三维几何结构, 允许复杂地质建模, 如不同成

分、倾角和渗透率的多个煤层; 先进的算法, 可以预测空腔和堆积体增长以及堆积体组成; 流动、反应和传热的改进三维模型; 三维非等温非饱和水和气体流动模型. 图 10 为 UCG-SIM3 D 与 Hoe Creek III 现场试验结果的对比, 两者具有较好的一致性.

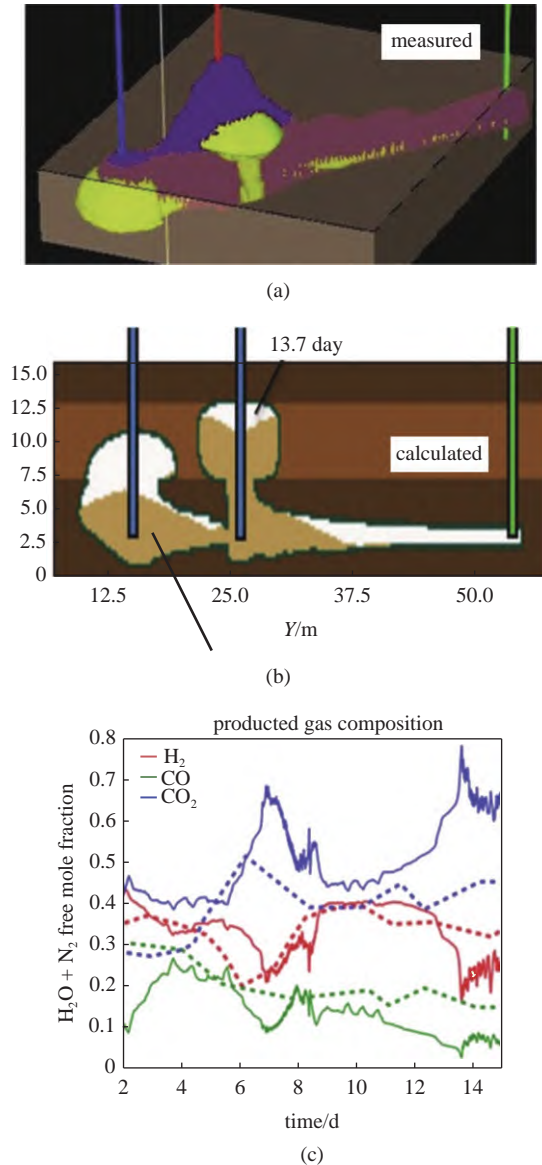


图 10 UCG-SIM3D 模拟结果验证 (Hoe Creek III 现场试验, 第 15 天). (a), (b) 气化腔的测量与预测形状, 两者有较好一致性; (c) 合成气组分含量测量值与预测值^[62-64]

Fig. 10 Validation of UCG-SIM3 D (Hoe Creek III field test, day 15). (a), (b) The measured and predicted shape of the gasifier; (c) The measured and predicted mole fraction of the syngas^[62-64]

4.2 煤炭地下气化数值研究的发展趋势

受限于目前的数值计算方法和计算水平, 第 3 章所介绍的一系列最新模型并不能全面应用于数值模拟, 需要根据具体研究问题忽略或简化处理某

些模型. 在广泛调研和深入分析的基础上, 笔者认为煤炭地下气化数值研究的发展趋势如下:

(1) 开展室内实验和现场先导试验, 深化对煤炭地下气化过程的认识, 进一步明确各个运行空间的气化机理、气化腔扩展规律、边壁裂缝发育状况及其对流体流动规律的影响^[65]等, 在此基础上细化和完善单一模型, 提高每种模型的准确性;

(2) 针对实际问题进行数学建模时, 采用最新模型并增加耦合模型的个数, 实现数学模型对研究问题的全面描述, 保证受力、流动、材料变形以及物化反应全面耦合条件下真实物理过程的仿真;

(3) 针对煤炭地下气化数值模拟中的 THMC 耦合问题, 研究先进的耦合算法以提高数值计算的稳定性和收敛性, 研制高性能数值模拟软件.

5 结论

传统的室内实验和现场试验有助于直观理解气化过程、揭示气化机理, 但煤炭地下气化模拟的工艺要求严格导致实施成本居高不下. 与之相比, 数值模拟方法具有成本低、操作简单、实施周期短等特点, 在研究气化机理和优化控制运行工艺方面展示出巨大优势. 由于煤炭地下气化过程非常复杂, 数值模拟方法在数学建模和数值求解方面均面临巨大挑战, 为梳理数值方法的研究现状并指出其未来发展趋势, 本文开展了以下工作:

(1) 针对煤炭地下气化工艺, 在空间上划分出顶板岩层、底板岩层、煤层原煤、气化腔、注入井筒和生产井筒等 6 个运行空间, 分析每个运行空间中的物质和关键问题, 为煤炭地下气化关键问题的数值研究提供物质及理论基础;

(2) 基于关键问题分析, 归纳出煤炭地下气化的 4 类关键力学问题, 包括流体动力学问题、热力学问题、材料应力问题以及化学反应动力学问题等, 详细介绍了每个关键力学问题数值研究的最新成果和发展历程;

(3) 以利弗莫尔实验室开发的 CAVSIM 软件和 UCG-SIM3 D 软件为例, 介绍了煤炭地下气化数值研究的工程应用;

(4) 结合关键问题分析及关键力学问题的研究现状, 指出煤炭地下气化数值研究的发展趋势: 细化和完善单一模型; 数学建模时增加耦合模型的个数; 提高数值计算的稳定性和收敛性. 此外, 数值模拟技

术可以预测不同工艺参数的开发效果, 与反问题算法相结合时, 有助于了解地层中的开发状况.

参 考 文 献

- 1 Ma H, Chen S, Xue D, et al. Outlook for the coal industry and new coal production technologies. *Advances in Geo-Energy Research*, 2021, 5(2): 119-120
- 2 刘曰武, 高大鹏, 李奇等. 页岩气开采中的若干力学前沿问题. 力学进展, 2019, 49(1): 201901 (Liu Yuewu, Gao Dapeng, Li Qi, et al. Mechanical frontiers in shale-gas development. *Advances in Mechanics*, 2019, 49(1): 201901 (in Chinese))
- 3 Betts AG. Method of utilizing buried coal. U. S. Patent No. 947608, filed 1906, issued 1910
- 4 Betts AG, Process of gasifying unmined coal. Canadian Patent No. 123068, filed 1909, issued 1910
- 5 Betts AG. An improved process for utilizing unmined coal. UK Patent No. 21674, filed 1909, issued 1910
- 6 Klimenko AY. 2-early developments and inventions in underground coal gasification. in: *Underground Coal Gasification & Combustion*, 2018: 11-24
- 7 Derbin Y, Walker J, Wanatowski D, et al. Soviet experience of underground coal gasification focusing on surface subsidence. *Journal of Zhejiang University-Science A*, 2015, 16(10): 839-850
- 8 Thorsness CB, Hill RW, Britten JA. Execution and performance of the CRIP process during the Rocky Mountain 1 UCG field test. Lawrence Livermore National Lab., CA (USA), 1988
- 9 朱铭, 徐道一, 孙文鹏等. 世界煤地下气化的快速发展. 自然杂志, 2012, 34(3): 161-166 (Zhu Ming, Xu Daoyi, Sun Wenpeng, et al. Rapid progress of underground coal gasification in the world. *Chinese Journal of Nature*, 2012, 34(3): 161-166 (in Chinese))
- 10 马驰, 余力, 梁杰. 中国煤炭地下气化技术的发展. 中国能源, 2003, 158(2): 11-15 (Ma Chi, Yu Li, Liang Jie. Development of UCG of China. *Energy of China*, 2003, 158(2): 11-15 (in Chinese))
- 11 李怀展. 无井式煤炭地下气化岩层移动机理与控制研究. 江苏: 中国矿业大学, 2017 (Li Huaizhan. Study on the Strata Movement Mechanisms and Control in UCG without Shaft. Jiangsu: China University of Mining and Technology, 2017 (in Chinese))
- 12 Kostur K, Blistanova M. The research of underground coal gasification in laboratory conditions. *Petrol Coal*, 2009, 51(1): 1-7
- 13 Kapusta K, Wiatowski M, Stanczyk K. An experimental ex-situ study of the suitability of a high moisture ortho-lignite for underground coal gasification (UCG) process. *Fuel*, 2016, 179: 150-155
- 14 Gur M, Eskin N, Okutan H, et al. Experimental results of underground coal gasification of Turkish lignite in an ex-situ reactor. *Fuel*, 2017, 203: 997-1006
- 15 Winslow AM. Numerical model of coal gasification in a packed bed. *Symposium on Combustion*, 1977, 16(1): 503-513
- 16 Thorsness C, Grens E, Sherwood A. A one dimensional model for in-situ coal gasification. Tech. Rep. UCRL-52523, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 1978
- 17 Camp DW. Underground coal gasification research and development in the United States, Lawrence Livermore National Security, LLC under contract No. DE-AC52-07 NA27344 with the U. S. De-

- partment of Energy. Editor: Michael S. Blinderman, Alexander Y. Klimenko, Underground Coal Gasification and Combustion, Woodhead Publishing, 2018: 59-127
- 18 Seifi M. Simulation and modeling of underground coal gasification using porous medium approach. [PhD Thesis]. University of Calgary, 2014
- 19 Khan MM, Mmbaga JP, Shirazi AS, et al. Modelling underground coal gasification: a review. *Energies*, 2015, 8(11): 12603-12668
- 20 Perkins G. Mathematical modelling of in situ combustion and gasification. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, 2018, 232(1): 56-73
- 21 Najafi M, Jalali SME, Khalokakaie R, et al. Prediction of cavity growth rate during underground coal gasification using multiple regression analysis. *International Journal of Coal Science & Technology*, 2015, 2(4): 318-324
- 22 Dinsmoor B, Galland JM, Edgar TF. The modeling of cavity formation during underground coal gasification. *Journal of Petroleum Technology*, 1978, 30(5): 695-704
- 23 van Batenburg D. Heat and mass transfer during underground coal gasification. [PhD Thesis]. Delft University of Technology, 1992
- 24 Coeme A, Pirard JP, Mostade M. Modeling of the chemical processes in a longwall face underground gasifier at great depth. *Situ*, 1993, 17(1): 83-104
- 25 Kreinin EV, Shifrin EI. Mathematical modeling of the gas generation process in a coal reaction chamber. *Journal of Mining Science*, 1995, 31(3): 230-236
- 26 Perkins G, Sahajwalla V. Steady-state model for estimating gas production from underground coal gasification. *Energy & Fuels*, 2008, 22(6): 3902-3914
- 27 Perkins G, Saghafi A, Sahajwalla V. Numerical modeling of underground coal gasification and its application to Australian coal seam conditions//18th Annual International Pittsburgh Coal Conference, 2001
- 28 Perkins G. Coupling dominant surface submodels and complex physical process computational fluid dynamics. *The Anziam Journal*, 2004, 45(45): 817-830
- 29 Seifi M, Abedi J, Chen Z. The analytical modeling of underground coal gasification through the application of a channel method. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 2013, 35(18): 1717-1727
- 30 Kuyper RA. Transport phenomena in underground coal gasification channels. [PhD Theses]. Delft University of Technology, 1994
- 31 Perkins G. Mathematical modelling of underground coal gasification. [PhD Theses]. The University of New South Wales, 2005
- 32 Perkins G, Sahajwalla V. Modelling of heat and mass transport phenomena and chemical reaction in underground coal gasification. *Chemical Engineering Research and Design*, 2007, 85(3): 329-343
- 33 Luo Y, Coertzen M, Dumble S. Comparison of UCG cavity growth with CFD model predictions//Seventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries. Melbourne, Australia: CSIRO; 2009: 1-5
- 34 Luo Y. Computational fluid dynamics modelling of fluid flow and heat transfer for underground coal gasification//Hilton Adelaide, South Australia, Australia. "Chemeca 2010: Engineering at the Edge", 26-29 September 2010: 675-687
- 35 Daggupati S, Mandapati RN, Mahajani SM, et al. Compartment modeling for flow characterization of underground coal gasification cavity. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2011, 50(1): 277-290
- 36 Daggupati S, Mandapati RN, Mahajani SM, et al. Compartment modeling and flow characterization in nonisothermal underground coal gasification cavities. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2012, 51(12): 4493-4508
- 37 Shirazi AS. CFD simulation of underground coal gasification. [PhD Thesis]. University of Alberta, 2012
- 38 Żogała A, Janoszek T. CFD simulations of influence of steam in gasification agent on parameters of UCG process. *Journal of Sustainable Mining*, 2015, 14(1): 2-11
- 39 Genuchten MT, Alves WJ. Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. US Department of Agriculture, 1982
- 40 Perkins G. Underground coal gasification—Part II: Fundamental phenomena and modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2018, 67: 234-274
- 41 Itasca. User's Manual, FLAC 7.0. Itasca Consulting Group Inc, Minneapolis, Minnesota (USA), 2014
- 42 Ekneligoda TC, Marshall AM. A coupled thermal-mechanical numerical model of underground coal gasification (UCG) including spontaneous coal combustion and its effects. *International Journal of Coal Geology*, 2018, 199: 31-38
- 43 Advani SH, Lin YT, Shuck LZ. Thermal and structural response evaluation for underground coal gasification. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 1977, 17(6): 413-422
- 44 Yang L. Theoretical analysis of the coupling effect for the seepage field, stress field, and temperature field in underground coal gasification. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 2005, 48(6): 585-606
- 45 Yang D, Sarhosis V, Sheng Y. Thermal—mechanical modelling around the cavities of underground coal gasification. *Journal of the Energy Institute*, 2014, 87(4): 321-329
- 46 Akbarzadeh H, Chalaturnyk RJ. Sequentially coupled flow-geo-mechanical modeling of underground coal gasification for a three-dimensional problem. *Mitigation and Adaptation Strategies for Global Change*, 2016, 21(4): 577-594
- 47 Li H, Guo G, Zha J, et al. Research on the surface movement rules and prediction method of underground coal gasification. *Bulletin of Engineering Geology and the Environment*, 2016, 75(3): 1133-1142
- 48 邹才能, 陈艳鹏, 孔令峰等. 煤炭地下气化及对中国天然气发展的战略意义. *石油勘探与开发*, 2019, 46(2): 5-14 (Zou Caineng, Chen Yanpeng, Kong Lingfeng, et al. Underground coal gasification and its strategic significance to the development of natural gas industry in China. *Petroleum Exploration and Development*, 2019, 46(2): 5-14 (in Chinese))
- 49 Bhutto AW, Bazmi AA, Zahedi G. Underground coal gasification: From fundamentals to applications. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2013, 39(1): 189-214
- 50 Samdani G, Aghalayam P, Ganesh A. A process model for underground coal gasification – Part-I: Cavity growth. *Fuel*, 2016, 181: 690-703
- 51 Roberts DG, Harris DJ. A kinetic analysis of coal char gasification

- reactions at high pressures. *Energy & Fuels*, 2006, 20(6): 2314-2320
- 52 Wu G, Zagorak R, Thomas HR. Insights into solid-gas conversion and cavity growth during Underground Coal Gasification (UCG) through Thermo-Hydraulic-Chemical (THC) modelling. *International Journal of Coal Geology*, 2021, 237: 103711
- 53 Jowkar A, Sereshki F, Najafi M. Numerical simulation of UCG process with the aim of increasing calorific value of syngas. *International Journal of Coal Science & Technology*, 2020, 7(1): 196-207
- 54 Jowkar A, Sereshki F, Najafi M. A new model for evaluation of cavity shape and volume during Underground Coal Gasification process. *Energy*, 2018, 148: 756-765
- 55 Seifi M, Chen Z, Abedi J. Reaction rate constants in simulation of underground coal gasification using porous medium approach. *Mitigation & Adaptation Strategies for Global Change*, 2016, 21(4): 645-662
- 56 Perkins G, Sahajwalla V. A mathematical model for the chemical reaction of a semi-infinite block of coal in underground coal gasification. *Energy & Fuels*, 2005, 19(4): 1679-1692
- 57 Sarraf Shirazi A, Karimipour S, Gupta R. Numerical simulation and evaluation of cavity growth in in situ coal gasification. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2013, 52(33): 11712-11722
- 58 Park KY, Edgar TF. Modeling of early cavity growth for underground coal gasification. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1987, 26(2): 237-246
- 59 Sawyer WK, Shuck LZ. Numerical simulation of mass and energy transfer in the longwall process of underground gasification of coal//SPE Symposium on Numerical Simulation of Reservoir Performance, Los Angeles, California, 1976
- 60 Britten JA, Thorsness CB. The rocky mountain 1 CRIP experiment: comparison of model predictions with field data. Llnl-Ucrl-98642, or//Proc. 14th An. UCG Symp. , 1988: 138-145
- 61 Britten JA, Thorsness CB. A model for cavity growth and resource recovery during underground coal gasification. *Situ*, 1989, 13: 1-53
- 62 Nitao JJ, Camp DW, Buscheck TA, et al. Progress on a new integrated 3-D UCG simulator and its initial application. Llnl-Conf-50055//Proc. Int. Pittsburgh Coal Conf, Pittsburgh, September 2011
- 63 Camp DW, Krantz WB, Gunn RD. A water influx model for UCG with spalling- enhanced drying//Proc. 15th Intersociety Energy Conversion Engr. Conf. Seattle, August 1980, Amer. Inst. Aero. & Astronautics, paper 809256: 1304-1310
- 64 Camp DW, Nitao JJ, White JA, et al. A 3-D integrated multi-physics UCG simulator applied to UCG field tests. Lawrence Livermore National Lab. (LLNL), Livermore, CA (United States), 2017
- 65 Ye D, Liu G, Gao F, et al. A multi-field coupling model of gas flow in fractured coal seam. *Advances in Geo-Energy Research*, 2021, 5(1): 104-118