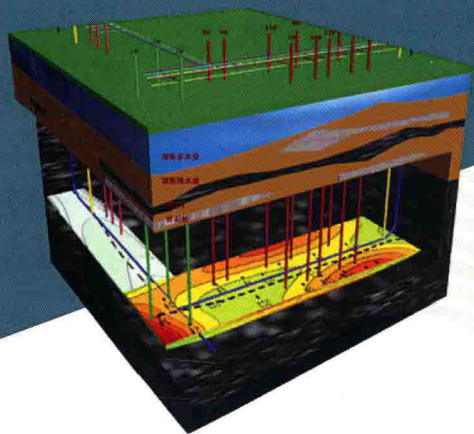


煤炭地下气化基础

基于三区分布的煤炭地下气化 物料与能量平衡模型

梁 杰 王张卿 著



科学出版社

国家高技术研究发展计划（863 计划）资助项目

煤炭地下气化基础

基于三区分布的煤炭地下气化物料与能量平衡模型

梁 杰 王张卿 著

科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

本书是国家高技术研究发展计划(863计划)课题“煤炭地下气化过程模拟及评价系统”研究成果的一部分——基于三区分布的煤炭地下气化物料与能量平衡模型。将煤炭地下气化过程氧化区、还原区和干馏干燥区(三区)的分布特征与地面煤气化系统平衡模型相结合,建立了煤炭地下气化物料与能量平衡模型;通过不同煤种和不同温度下的热解实验,建立了热解过程各元素的迁移方程;通过不同气化通道、注气方式、涌水量和气化剂组成条件下的地下气化模型试验,研究了“三区”比例对出口煤气组分的影响规律,验证了“三区”温度范围的合理性,从而获得了以“三区”比例来表征的气化反应碳转化控制方程和水煤气变换反应的控制方程及其控制常数;开发了煤炭地下气化过程物料及能量平衡模型计算软件;对煤炭地下气化现场试验的计算表明,该模型在预测出口煤气组分和热效率方面,具有较高的实用价值。

本书可供煤炭地下气化、燃气工程、煤化工、能源科学领域的教学、科研人员以及煤炭转化与利用、新能源和洁净煤技术开发方面的工程技术人员参考,也可作为相关专业本科生和研究生的教学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

煤炭地下气化基础:基于三区分布的煤炭地下气化物料与能量平衡模型/梁杰,王张卿著. —北京:科学出版社,2017

ISBN 978-7-03-042937-7

I. 煤… II. ①梁… ②王… III. 煤炭-地下气化-研究 IV. TD844

中国版本图书馆CIP数据核字(2014)第309803号

责任编辑:杨震 张淑晓/责任校对:杜子昂

责任印制:张伟/封面设计:耕者设计工作室

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京教图印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2017年10月第一版 开本:720×1000 1/16

2017年10月第一次印刷 印张:11

字数:210 000

定价:78.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

煤炭地下气化（underground coal gasification, UCG）就是将处于地下的煤炭进行有控制地燃烧，通过煤的热作用及化学作用而产生可燃气体的过程。这一过程将建井、采煤、地面气化三大工艺合而为一，摒弃了庞大、笨重的采煤设备和地面气化设备，变传统的物理采煤为化学采煤，具有安全性好、投资少、效率高、污染少等优点。煤炭地下气化可以回收老矿井废弃的煤炭资源，也可以用于开采井工难以开采的或开采经济性、安全性差的薄煤层、深部煤层和“三下”压煤，以及高硫、高灰、高瓦斯煤层等。煤炭地下气化过程燃烧的灰渣留在地下，无固体物质排放，减少了对地表环境的影响。地下气化出口煤气可以集中净化，得到洁净的煤气，该煤气可作为燃料用于民用、发电、工业锅炉燃烧，也可以作为原料气生产天然气、合成氨、甲醇、二甲醚、汽油、柴油等或用于提取纯氢。因此煤炭地下气化技术将环境保护的重点放在源头，而非末端治理，是一项符合可持续发展需要的环境友好的绿色技术，是我国洁净煤技术研究的重要方向。

中国矿业大学（北京）煤炭工业地下气化工程研究中心，自1984年开始进行煤炭地下气化技术的研究，建立了具有世界先进水平的煤炭地下气化模型试验台，开展了煤炭地下气化基础研究和工程技术研究，2005年完成了国家高技术研究发展计划（863计划）课题——煤炭地下气化过程稳定控制技术的研究，2006年完成了国家自然科学基金项目——煤层热解及热解产物迁移规律的研究和国家高技术产业化重大项目——煤炭地下气化技术工业性试验，2014年完成了国家高技术研究发展计划（863计划）课题——煤炭地下气化过程模拟及评价系统。在江苏徐州、河北唐山、山东新汶、山西昔阳、内蒙古乌兰察布等地完成了工业性试验，在此基础上构建了煤炭地下气化技术体系，技术体系包括气化煤层地质评价、煤炭地下气化基础研究和煤炭地下气化工程技术开发三部分。

煤炭地下气化技术虽然比传统的采煤技术对煤层有更大的适应性，但不是所有的煤层都可以进行地下气化，有些煤层利用现有的地下气化技术开采不具有经济性，因此要建立地质评价模型，对气化煤层从地质条件、煤层情况、煤质情况、水文条件等进行评价。

煤炭地下气化基础研究主要涉及实体煤层的燃烧、热解、气化、贯通特性，包括气化过程特征场的演化规律；涉及煤层覆岩在煤层气化高温作用下的热物性变化及冒落规律；涉及地下煤气化污染物在燃空区的富集及向地层中扩散迁移的

规律，包括地下气化过程全生命周期评价模型；涉及数学模型及计算机模拟，包括物料、能量平衡模型。通过上述基础研究，揭示煤炭地下气化过程的发生与发展规律。

基于煤炭地下气化理论研究的煤炭地下气化工程技术，主要涉及地下气化工程的建炉技术、稳定气化工艺、燃空区控制技术、污染物控制技术及地下气化过程测控技术，在上述技术不断完善的基础上，形成煤炭地下气化生产装置工艺包，实现煤炭地下气化技术的推广与应用。

本书重点介绍煤炭地下气化基础研究内容的一部分——基于三区分布的煤炭地下气化物料与能量平衡模型。全书共分6章。第1章介绍煤炭地下气化技术的基本原理和研究现状，分析煤炭地下气化过程模拟和煤气化系统物料与能量平衡模型的研究历程及优缺点，提出煤炭地下气化物料与能量平衡模型的研究思路。第2章介绍煤热解过程元素迁移规律，对三个煤种进行 N_2 气氛下的慢速热解实验，获得元素迁移比例与热解终温的关联式，即元素迁移方程。第3章介绍碳转化控制方程及控制常数，比较气化通道结构、注气方式和气化剂组成对“三区”比例的影响，建立了以“三区”比例来表征的碳转化控制方程。第4章分析煤炭地下气化过程中水煤气变换反应的特点和影响因素，建立了水煤气变换平衡常数与氧化区比例和还原区比例之间的关联式。第5章分析地下气化过程中涌水的形成及其对气化过程的影响，描述顶板涌水与气化反应区中“三区”比例的相互关系，建立了涌水量与“三区”比例的关联式。第6章介绍煤炭地下气化物料与能量平衡模型的开发与应用，将平衡模型计算值与现场试验值进行比较，验证平衡模型的实用性。

感谢国家高技术研究发展计划（863计划）课题（2011AA050106）的支持，感谢中国矿业大学（北京）煤炭工业地下气化工程研究中心全体师生在模型试验过程中给予的支持。

由于知识所限，书中不妥之处在所难免，恳请读者批评指正。

作者

2017年7月于北京

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 煤炭地下气化原理及研究概况	1
1.1.1 煤炭地下气化过程原理及工艺	1
1.1.2 煤炭地下气化技术的研究现状	5
1.2 煤炭地下气化数学模型	7
1.2.1 煤炭地下气化过程模拟	7
1.2.2 煤气化系统物料与能量平衡模型	10
1.3 研究目的和意义	15
1.4 主要研究内容和技术路线	16
1.4.1 主要研究内容	16
1.4.2 技术路线	17
1.5 本章小结	19
第 2 章 煤热解过程元素迁移规律	20
2.1 实验煤种及煤质分析	20
2.1.1 实验煤种	20
2.1.2 煤质特征分析	22
2.2 热解实验及热解产物	23
2.2.1 热解实验装置及流程	23
2.2.2 不同煤种热解产物的产率	23
2.2.3 不同煤种热解煤气组分	25
2.2.4 元素迁移比例计算	27
2.3 煤热解过程元素迁移规律	28
2.3.1 不同煤种中碳元素的迁移规律	28
2.3.2 不同煤种中氢元素的迁移规律	32
2.3.3 不同煤种中氧元素的迁移规律	37
2.3.4 不同煤种中氮元素的迁移规律	41
2.3.5 不同煤种中硫元素的迁移规律	43
2.4 本章小结	46

第3章 碳转化控制方程及控制常数	48
3.1 煤炭地下气化过程碳转化控制方程	48
3.2 试验煤样及模型试验系统	49
3.2.1 试验煤样煤质分析	49
3.2.2 煤炭地下气化模型试验系统	50
3.3 模型试验过程及试验方法	51
3.3.1 模型试验过程	51
3.3.2 煤层结构	52
3.3.3 注气方式	53
3.3.4 二维温度场图	54
3.4 不同气化工艺下碳转化控制方程及控制常数	54
3.4.1 空气连续气化工艺	54
3.4.2 富氧-CO ₂ 气化工艺	58
3.4.3 富氧-水气化工艺	67
3.4.4 富氧连续气化工艺	77
3.5 本章小结	83
第4章 水煤气变换平衡常数	86
4.1 煤炭地下气化过程水煤气变换反应	86
4.1.1 水煤气变换反应机理	86
4.1.2 煤气化过程水煤气变换反应及特点	88
4.1.3 UCG过程影响水煤气变换反应的因素分析	89
4.2 水煤气变换反应试验过程	91
4.2.1 灰渣催化性能评价试验过程	91
4.2.2 地下气化过程水煤气变换平衡常数关联式	91
4.3 地下气化灰渣对水煤气变换反应的催化效果	92
4.3.1 纯氧-水蒸气气化灰渣(1 [#])样品试验	92
4.3.2 富氧-CO ₂ 气化灰渣(2 [#])样品试验	93
4.4 地下气化水煤气变换反应平衡常数的关联式	95
4.4.1 平衡常数 K_p 的理论分析	95
4.4.2 富氧-CO ₂ 气化工艺 K_p 值	96
4.4.3 DCRA气化工艺 K_p 值	99
4.5 本章小结	102
第5章 顶板涌水对“三区”比例的影响	103
5.1 涌水对地下气化过程的影响	103

5.1.1 涌水的形成过程	103
5.1.2 涌水与气化过程之间的关联性	106
5.2 煤炭地下气化过程涌水试验过程	106
5.3 顶板涌水对“三区”比例的影响	108
5.3.1 涌水条件下的富氧-CO ₂ 气化工艺	108
5.3.2 注水条件下 DCRA 气化工艺	121
5.4 本章小结	123
第 6 章 平衡模型的开发与应用	124
6.1 平衡模型的开发过程	124
6.1.1 开发技术基础	124
6.1.2 原始需求	124
6.1.3 需求分析	126
6.1.4 系统架构设计	128
6.1.5 软件应用效果	128
6.2 平衡模型的应用	131
6.2.1 现场试验工艺参数	131
6.2.2 平衡模型的输入参数	132
6.2.3 模型计算过程说明	132
6.2.4 计算结果	134
6.2.5 结果比较	135
6.3 本章小结	136
参考文献	137
主要符号表	145
附录 A 模型算法程序	149
附录 B 计算结果和工艺参数的输入、输出程序	156

第1章 绪 论

本章介绍煤炭地下气化技术的基本原理和研究现状，分析煤炭地下气化过程模拟和煤气化系统物料与能量平衡模型的优缺点，在此基础上提出了研究思路，即将二者的优势结合起来建立煤炭地下气化物料与能量平衡模型，利用煤炭地下气化反应区比例关联煤气化平衡模型中的经验参数，并提出研究内容和技术路线。

1.1 煤炭地下气化原理及研究概况

1.1.1 煤炭地下气化过程原理及工艺

煤炭地下气化技术可以对煤层进行原位气化，通过连通地面和煤层的气流通道和气化通道将气化剂输入到煤层的气化工作面，将煤气输出到地面，见图 1.1。

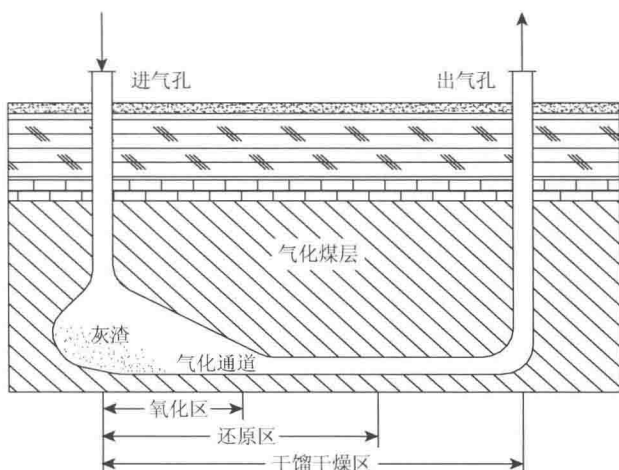


图 1.1 煤炭地下气化实现过程

煤层气化过程发生于气化通道的气化工作面，所需的能量来自于煤层自身的燃烧过程，气化结束后灰渣留在地下，因此，与传统的采煤和气化技术相比，煤炭地下气化技术是一种清洁、安全、环保、低成本的煤炭加工技术，与碳捕集、

制氢和发电等技术相结合，可提高能源利用率^[1-5]。

煤炭地下气化过程基本原理见图 1.2。

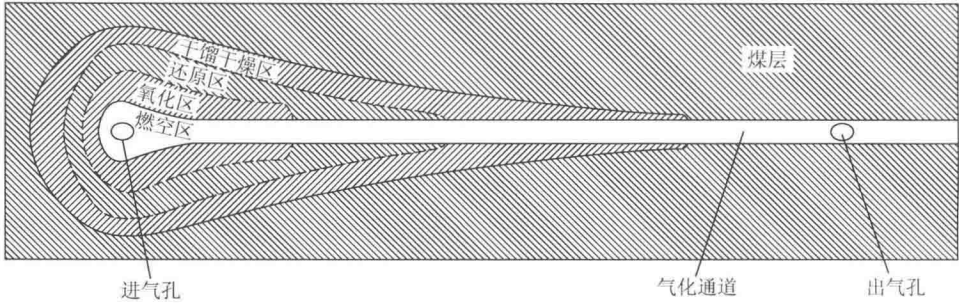
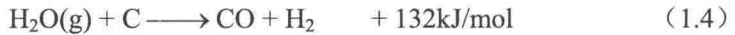
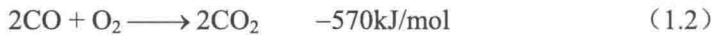


图 1.2 煤炭地下气化过程基本原理（俯视图）

煤炭地下气化炉主要由进气孔、出气孔和气化通道组成，在气化通道中煤层与气化剂进行一系列的气化反应，因此气化反应区被分为氧化区、还原区和干馏干燥区，即“三区”，各反应区主要发生的化学反应为^[6,7]



各反应区在整个气化反应区中所占的比例为“三区”比例，即氧化区比例 α_{ox} 、还原区比例 α_{red} 、干馏干燥区比例 α_{dis} ，以氧化区比例 α_{ox} 为例，其计算过程见式 (1.7)。

$$\text{氧化区比例}(\alpha_{\text{ox}}) = \text{氧化区面积} / \text{气化反应区面积} \quad (1.7)$$

式中：气化反应区面积 = 氧化区面积 + 还原区面积 + 干馏干燥区面积（图 1.2）。

煤炭地下气化技术在实施过程中，必须参考煤层所处的地质环境和原煤的物化性质来确定气化炉的施工方法、气化通道结构、供气方式和气化剂的组成等，因此在气化炉的施工和运行过程中形成了不同的气化工艺^[8,9]。

根据气化炉的施工方法，气化工艺可分为矿井式（有井式）和钻井式（无井式），矿井式气化工艺是指气化炉依靠人力在地下施工，气化通道是人工掘进的煤巷，可以简化为一种无固相填充的自由通道 [图 1.3 (a)]^[10,11]。钻井式气化工艺是指气化炉的进、排气孔由地面打钻施工，连接进、排气孔的气化通道可以用定向钻进、火力贯通、水力压裂、电力贯通等技术进行贯通^[12,13]，初始气化通道的截面积比较小，煤层随着裂隙发育而冒落并使块煤堆积在气化通道中，气化通道可以简

化为一种由松散块煤填充而成的多孔的渗流通道 [图 1.3 (b)]。同时, 气化工艺按照气化通道的结构可以分为自由通道气化工艺和渗流通道气化工艺^[14-16]。

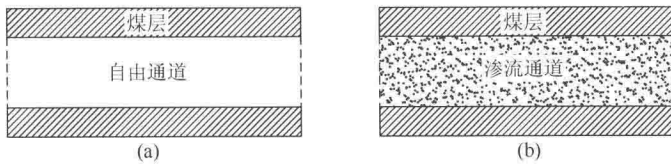


图 1.3 气化通道结构^[15]

根据气化剂的组成, 气化工艺可以分为空气气化工艺、富氧气化工艺、富氧(纯氧)- H_2O (水蒸气或水)气化工艺、富氧- CO_2 气化工艺等^[17-21]; 根据气化剂的供气方式, 气化工艺可以分为正向气化工艺、逆向气化工艺和后退式气化工艺等^[8, 22-27]。

(1) 空气气化工艺, 是一种连续向气化炉内注入空气生产空气煤气的地下气化工艺, 由于空气中氮气含量较高, 使煤气中可燃组分含量相对较低, 只能生产热值在 $4.18MJ/Nm^3$ 左右的低热值的空气煤气, 该煤气可作为燃料用于锅炉燃烧或发电。

(2) 富氧气化工艺, 是一种向气化炉内连续注入富氧空气(或纯氧)生产富氧煤气的地下气化工艺, 该工艺煤气有效组分($H_2 + CO + CH_4$)和热值随氧浓度的增加而有所提高, 可作为燃料用于工业窑炉燃烧或发电, 也可用于分离 H_2 和 CH_4 。

(3) 富氧(纯氧)-水蒸气气化工艺, 是一种向气化炉内连续注入富氧和水蒸气(或纯氧和水蒸气)生产半水煤气的地下气化工艺, 该工艺煤气中 H_2 含量显著提高, 除作为燃料外, 也可作为化工合成气。

(4) 富氧(纯氧)-水气化工艺, 是一种向气化炉内连续注入富氧和水(或纯氧和水)生产半水煤气的地下气化工艺, 该工艺可得到与富氧(纯氧)-水蒸气气化工艺相同质量的煤气。添加水蒸气气化是地面煤气化成熟工艺, 但地下气化煤层距离地面几百米到上千米, 水蒸气在钻孔中冷凝, 到达煤层后大部分冷凝成水而难以达到气化工作面, 因此在注入富氧(纯氧)的同时向气化炉内注水是地下气化常用的工艺。

(5) 富氧- CO_2 气化工艺, 是一种向气化炉内连续注入氧气和 CO_2 混合气体、生产合成气的地下气化工艺, 在氧气中加入 CO_2 可减少富氧空气气化 N_2 对合成气组分的影响。

(6) 正向气化工艺, 是指气相流动方向与气化工作面移动方向相同的一种气化方式, 正向气化时, 煤层的初始气化位置位于进气口与气化通道的交叉点, 由进气井注入气化剂, 气化反应区随气流方向向前推进而逐渐移动到气化通道末端,

即氧化区逐渐移动到出气井一侧。

(7) 逆向气化工艺，是指气相流动方向与气化工作面移动方向相反的一种气化方式，逆向气化时，煤层的初始气化位置位于出气口与气化通道的交叉点，通过控制气化剂的流量来控制气化剂在气化区的流速，当煤层燃烧的放热量大于下游带走的热量（包括气相带走的热量和以导热、辐射向下游传递的热量）时，气化工作面（火焰）则逆着气流方向移动，即气化工作面向进气井方向移动。试验表明当气体流速小于 1m/s 时则会出现逆向气化。逆向气化要控制气流速度，因此单工作面产能受到了限制。逆向气化是煤炭地下气化点火和火区扩展的重要方法。

(8) 后退式气化工艺 [控制后退注气点 (controlled receding injection point, CRIP) 气化工艺]。煤炭地下气化料层不能移动，而要依靠气化工作面的移动来保持气化过程的连续，在正向和逆向气化工艺中，气化工作面的移动是依靠气流流动自然推进，可控性差。利用注气点的后退移动注气可人为控制气化工作面的移动，从而实现对气化工作面的有效控制。控制后退移动注气点的方法是在气化通道中设置注气管，利用注气管间断后撤，实现注气点间断后退移动，见图 1.4。

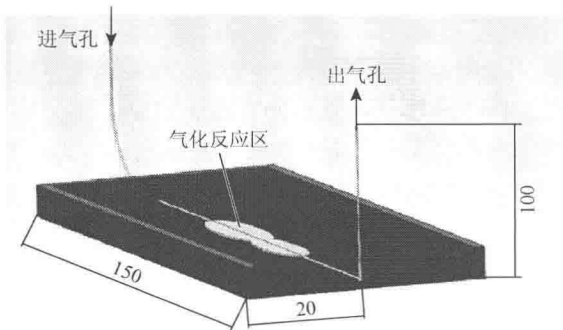


图 1.4 控制后退注气点气化方法

美国劳伦斯国家实验室首先采用了 CRIP 工艺。该工艺中，生产井为直井，注入井为连通了生产井的定向井，一旦井之间的通道建立起来，供氧管直接将氧气和水蒸气送到气化工作面，注入井末端在煤层内的水平段处开始进行气化反应，当反应腔附近的煤燃烧用尽后，采用切管的方法将注气点后退一定的距离，重新点火，形成新的气化反应区，控制注气点随着气化工作面的移动而后退。

CRIP 工艺为间断式后退工艺，在形成新的气化工作面时会导致煤气组分的波动，为此中国矿业大学（北京）煤炭工业地下气化工程研究中心开发了一种新的气化工艺——分离控制注气点后退-水雾化气化工艺 (discrete control technology of receding injection point and water atomization for UCG, DCRA)，其气化系统见图 1.5。

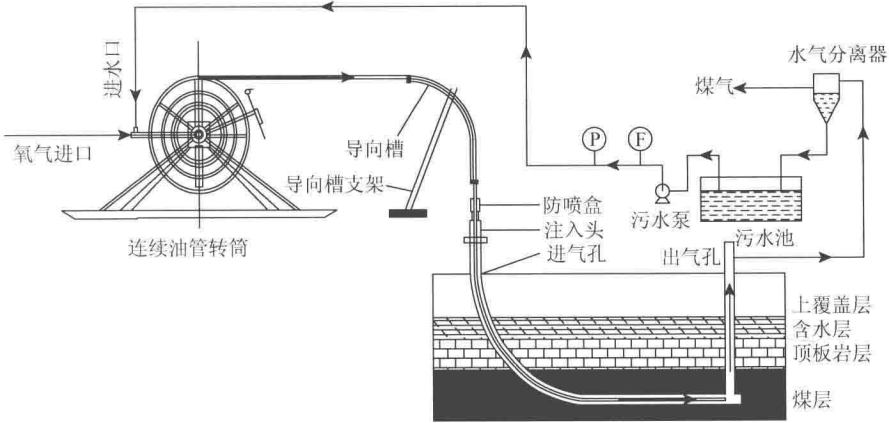


图 1.5 分离控制注气点后退-水雾化气化系统

DCRA 系统由双套管分离控制-水雾化装置、双套管后退反馈控制装置、地下气化炉、煤气冷凝水（净化废水）收集注入装置组成；将富氧或纯氧和水分离输送，利用地面到地下水的压力势能和防回火水雾化混合喷头将水在径向和轴向上雾化，径向水雾喷向煤壁，防止煤层回火燃烧，轴向水雾与富氧或氧气在地下混合后作为气化剂，喷入气化反应区，见图 1.6。以出口煤气组分和喷头温度为指标，采用变频和液压反馈控制系统，调整气水比和双套管后退时间和速度，实现连续后退和循环气化，从而实现地下气化过程的连续和稳定。

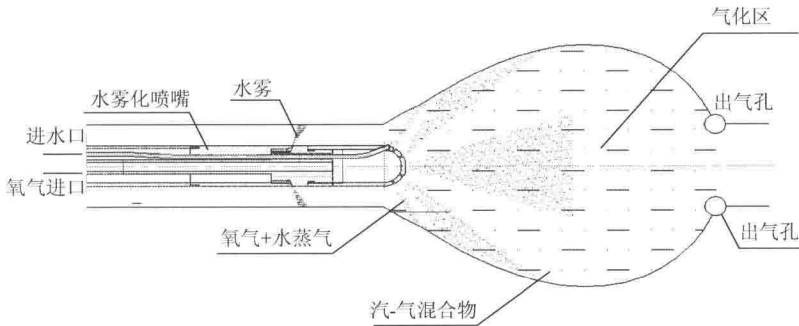


图 1.6 控制注气点后退-水雾化气化状态及效果

1.1.2 煤炭地下气化技术的研究现状

煤炭地下气化技术在进行工业性试验过程中，矿井式煤炭地下气化技术主要应用于老矿井中废弃煤炭资源的回收利用，在中国的江苏徐州、河北唐山、山东新汶、山西昔阳等地进行了多次工业试验^[10, 28-31]，其中在河北唐山刘庄所进行的“长通道、大断面、两阶段”气化试验中 9[#]煤层连续气化 95 天，日平均产气量为

7.69 万 Nm^3 ，平均热值为 $4.2\text{MJ}/\text{Nm}^3$ ，证明了该技术在中国推广应用的可行性^[32]。钻井式煤炭地下气化技术结合煤层裂隙发育情况和地面钻孔技术来气化地下煤层，世界各国从 20 世纪 50 年代开始进行钻井式地下气化技术工业试验，直到 20 世纪 70 年代后才取得比较显著的成果^[33]；美国汉娜地下气化试验（1972~1979 年）采用反向燃烧技术共气化煤炭 15741t，煤气平均热值为 $6\text{MJ}/\text{Nm}^3$ ；1983 年美国 CRIP 试验成功后，比利时、德国和西班牙等欧盟国家相继进行了 CRIP 气化试验，气化效果良好，运行稳定^[34]；2000 年以后，中国、澳大利亚、美国、欧盟等国家和地区积极开展钻井式地下气化项目，并与碳捕集、制氢和发电等技术相结合^[1-3]，提高能源利用率。

在理论研究方面，国内外从气化炉内部发生的物理和化学现象出发，对影响地下气化过程稳定性和煤气组分的因素进行了大量研究^[35-39]。受气化通道温度和压力的影响，气化剂和煤气会随着气化过程的进行呈现不同的流动形态^[40]，导致气流的扩散速率发生改变，并使气化通道中的气固和气相等一系列气化反应速率在不同的时间和区域出现差异^[16, 41]；其中煤与气化剂中 O_2 所进行的氧化反应是整个气化过程的能量来源，而煤与 CO_2 和 $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ 所发生的还原反应决定了煤气组分，二者的反应强度受气化剂组成的影响，相互作用，共同决定了煤层温度场的状态、煤气组分和燃空区的扩展过程^[7, 42-44]；同时，燃空区是煤经一系列气化反应后形成的空腔，其表面是气固的反应界面，燃空区的扩展过程对煤气组分、气化反应动力学和热力学条件、温度场的状态也造成了一定影响；Stanisław Porada 等对气化反应的热力学和动力学也进行了研究^[13, 45-47]；中国学者对渗流通道中流体的非线性流体特征、温度场和渗流条件对浓度场的影响以及渗流介质中渗流场、压力场和温度场的耦合数学模型进行了研究^[16, 40, 48]；Benoît Debelle 等在图林地下气化工业试验基础上，模拟了逆向燃烧气化过程中流体在自由和渗流通道中基于传质过程的扩散情况^[49]。

“十二五”期间，在国家高技术研究发展计划（863 计划）的支持下，中国矿业大学（北京）煤炭工业地下气化工程研究中心完成了“煤炭地下气化产业化关键技术”研究，建立了煤炭地下气化过程模型试验研究平台和现场试验技术示范系统，以褐煤和乌兰察布 UCG 工程为主要研究对象，通过模型试验和现场试验，形成了煤炭地下气化产业化关键技术。

(1) 开发了可控注气点“条采-面采”地下气化炉新炉型，得到了适合于产业化应用的钻井式地下气化炉结构、气化通道机械贯通方法及合理的气化通道长度等参数，构建了钻井式煤炭地下气化炉井和炉型建设技术体系。

(2) 形成了地下气化工作面综合探测技术，包括地面测氢技术、移动热电偶地下测温技术、地应力监测系统；地下火区温度与地面氢异常呈指数正相关关系，开发了关系数据库和数据解释软件。

(3) 地下气化炉上覆煤岩“三带”发育特征为：冒落带最大，约为采高的2倍，裂隙带发育高度接近燃烧煤层厚度的5倍，弯曲下沉带明显，不具有导水性；气化区地表沉降水平与垂直变化幅度均小于±20mm；形成了集气化炉选址、水位预警、水量突水预警、涌水量预测、降压减排、炉井防漏、燃空区抽排水的综合控水技术。

(4) 获得了褐煤富氧、富氧-水蒸气、移动供风和反向供风等气化过程稳定控制工艺参数，富氧气化适合的氧浓度在40%~60%、汽氧比为0.8~1.8；气化炉日产低热值煤气21.7万Nm³，煤气热值平均为3.96MJ/Nm³；气化炉日产合成气平均达12.4万Nm³，平均热值为6.64MJ/Nm³，有效组分(H₂+CO+CH₄)之和为40%~51%。

(5) 褐煤气化灰渣、半焦、泥岩、粉砂泥岩等均对污染物具有强烈的物理吸附作用，气化区围岩对污染物迁移具有良好的封闭作用及较强的承受能力；控制气化压力小于煤层静水压力，可使气化区处于降落漏斗内，将煤层水污染范围控制在气化工作面，并有效控制污染物向煤层邻近含水层的迁移；提高气化剂中氧气的含量，单位煤气化所产生的污染物排放量显著降低；抽提处理可以使燃空区主要污染快速衰减，燃空区污染物具有较强的自然衰减作用；长周期的地下水水质监测数据及地下水质量评价表明，气化区上含水层系统、顶板含水层系统的地下水水质仍然维持在原有的地下水质量等级范围内。

(6) 获得了煤层（大尺度煤块）燃烧、热解、气化过程特征参数和动力学模型，尺度越大，反应速率越小；开发了分离控制注气点后退-水雾化UCG技术，获得其气化区特征场及出口煤气组分、覆岩应力场的演化规律；开发了UCG过程数值模拟系统，得到了煤层特征场二维分布云图；开发了强制氧化和固体燃料点火技术，褐煤着火点、活化能、指前因子随压力升高而下降；建立了UCG地质评价模型、过程物料及能量平衡模型和全生命周期评价模型；编制了UCG工业化生产装置工艺包。

1.2 煤炭地下气化数学模型

1.2.1 煤炭地下气化过程模拟

煤炭地下气化过程模拟的目标是模拟气化通道中的煤层所发生的反应过程，通过改变模型的输入参数，可以相应地改变煤层的化学反应进程和物理条件，获得与现场试验相同的气化效果，降低试验的成本。随着煤炭地下气化技术的发展，过程模拟模型主要包括两种：化学反应模型和物理过程模型。化学反应模型以气化通道中的化学反应为主，在质量守恒、能量守恒和动量守恒定律的基础上，预测气化工艺参数和出口煤气组分；物理过程模型在化学反应模型的基础上，考虑了气化通道

中发生的各种物理过程与化学反应之间的相互关系，能够提高模型的模拟精度。

在 20 世纪 50~70 年代期间，美国建立了多个钻井式地下气化试验现场，同时 Magnani 等^[50,51]和 Loison^[52]建立相应的数学模型对地下气化通道中的传热和传质等气化过程进行了描述，但是由于该模型过度简化了气化过程，无法从理论上合理地解释煤炭地下气化过程中出现的物理和化学现象，导致地下气化过程的试验煤种一直以高变质程度煤种为主，而对一些透气性较高的年轻褐煤的气化试验较少，所以 Gunn 等^[53]针对美国汉娜的褐煤地下气化试验现场建立了一维线性数学模型，模拟了具有天然裂隙的褐煤煤层的正向渗透气化过程，当气化工艺参数在较大区间内变化时，该一维模型的计算结果均与气化现场的试验结果相吻合，准确地模拟了地下气化通道中的温度、7 种物质的浓度和地下水对煤气热值的影响过程，定量地解释了煤层的气化过程，并提供合理的气化参数，如气化剂的流速、预热温度和汽氧比等。Gunn 等所建立的一维模型设定了 8 个边界条件，需要对 11 个偏微分方程进行计算，包括 10 个状态方程和 1 个能量平衡方程，在计算过程中，模型还引入与热传导、气体扩散和反应动力学相关的物理和化学模型，因此该模型比较复杂。为了简化模型的求解过程，模型引入变量 $\eta = x - vt$ (x 为气化工作面长度； v 为气化工作面移动速度； t 为气化时间)，使气化工作面在气化通道中随气化过程的进行而不断向前移动，而在这个移动坐标系中其他的参数保持不变，既形象地描述了地下气化通道中气化工作面的特征，又简化了计算过程，将偏微分方程组转换为常微分方程组。不足之处是该一维模型不能够反映地下气化通道结构的变化和气化反应的强度。

与 Gunn 等建立的一维线性模型相比，Thorsness 等^[54]的一维模型也能够预测气化工艺参数，计算气化工作面的移动速度，并模拟不同工艺参数下的气化过程。两个模型的气相状态表达式中均使用了质量守恒方程、能量守恒方程和气体流速表达式^[55]，见式 (1.8) ~ 式 (1.10)。

$$\frac{dc_i}{dx} = \frac{1}{v} \left[-c_i \frac{dv}{dx} + \sum_j a_{ij} R_j \right] \quad (1.8)$$

$$\frac{dT}{dx} = -\frac{1}{vC_g} [h_T(T - T_s) + H_g] \quad (1.9)$$

$$\frac{dv}{dx} = \frac{-v}{P} \frac{dP}{dx} + \frac{v}{T} \frac{dT}{dx} + \frac{RT}{P} \left[\sum_i \sum_j a_{ij} R_j \right] \quad (1.10)$$

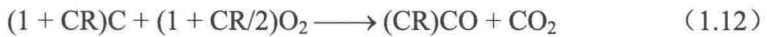
式中： c_i 为气体组分 i 的浓度， mol/m^3 ； v 为混合气体的流速， m/s ； a_{ij} 为化学反应 j 中组分 i 的化学计量系数； R_j 为化学反应 j 的反应速率， $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ ； T 为气相温度， K ； T_s 为固相温度， K ； C_g 为气相比热容， $\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ； h_T 为气固相之间的换热系数， $\text{J}/(\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K})$ ； H_g 为气相热源， $\text{J}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ ； R 为摩尔气体常量， $\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ； P 为气相压强， Pa 。

但是 Gunn 模型主要应用于美国汉娜的褐煤地下气化试验,而 Thorsness 模型将能够应用于不同煤种的气化过程,考虑了更加复杂的气化环境,参与模型计算的化学反应和煤气组分更多,导致该模型更加复杂^[55]。为了获得上述计算结果,该模型需要对 17 个方程进行求解,这些方程包括 12 种物质的物料衡算方程、气相和固相中的能量平衡计算方程和气化过程的达西渗流动量方程,这些计算涉及了参与 11 种化学反应的物质之间的传热和传质过程,这些反应包括气化剂与煤焦的燃烧和还原反应、水煤气变换反应、煤的干燥和热解过程和煤气在扩散过程中可能发生的二次燃烧反应,而上述化学反应的反应速率均来自于反应动力学。在求解过程中,模型需要根据不同的气化条件确定相应的输入参数,如与煤层的颗粒直径相对应的渗透系数、扩散系数、热导率、反应速率常数、热力学特性等,所以该模型在应用过程中复杂程度较高。

在 Gunn 等建立的一维线性模型的基础上,Jennlngs 等^[56]将一系列的偏微分方程简化为 4 个主反应的化学反应式,见式 (1.1)、式 (1.4)、式 (1.6) 和式 (1.11)。



同时,将式 (1.1) 和式 (1.11) 组合成为一个独立的碳氧化方程,并引入“ $\text{CR} = \text{CO}/\text{CO}_2$ ”来根据气化工工艺的特征调节燃烧产物中 CO 和 CO_2 的比例,见式 (1.12)。



将这些主反应进行组合,并设置相应的化学计量数可以获得气化过程中出现的其他氧化、还原和水煤气变换反应,见式 (1.2)、式 (1.3) 和式 (1.5),再通过调节氧化反应方程中的 CR 值,最后求解多个方程组,能够获得气化过程出口煤气的组成;另外,模型所需要的已知量还包括原料(煤、水蒸气和涌入水等)的初始温度、灰渣和出口煤气的温度等,这些参数应用在能量平衡的计算中,以求解气化通道中火焰的前进速度和煤气的流速。Jennlngs 等所简化的数学模型不包括任何动力学参数,输入参数较少,该模型被 Galli 等^[57]应用于美国怀俄明州的急倾斜次烟煤层的地下气化试验中,该气化试验分为四个阶段,每个阶段分别向气化炉中注入不同的气化剂,主要是空气、水、氧气的组合,使气化炉出现不同的气化效果,而在模型的计算过程中,通过设置不同的热损失率和 CO/CO_2 的比值 CR,模型的计算结果均能够吻合每个试验阶段的试验结果,证明该工艺模型的建模方法是可行的。

上述化学模型均以气化反应为主要因素,当气化工作面的煤层不断参与气化反应,而形成不同形状的燃空区时,位于气化通道顶部的煤层经历了裂隙发育、膨胀和冒落三个阶段,同时气化通道的截面积先变大后变小,气体将以自由和渗流流动的混合形态流动,这些物理过程改变了气化反应的有效比表面积和气化剂的扩散速率而影响气化反应速率,同时气化通道的温度和压力也发生变化,可见气化过程中的物理过程和化学反应相互影响,因此煤炭地下气化数学模型在发展