

刘鹏,秦跃平,郝永江. 基于密度差驱动流的非线性瓦斯吸附研究:实验与数值解算[J]. 煤炭学报,2018,43(3):735-742. doi:10.13225/j.cnki.jccs.2017.0724

LIU Peng, QIN Yueping, HAO Yongjiang. Investigation of non-linear gas adsorption in coal based on density-gradient driven flow: Experiments and numerical solutions[J]. Journal of China Coal Society, 2018, 43(3): 735-742. doi:10.13225/j.cnki.jccs.2017.0724

# 基于密度差驱动流的非线性瓦斯吸附研究： 实验与数值解算

刘 鹏<sup>1</sup>, 秦跃平<sup>1</sup>, 郝永江<sup>2</sup>

(1. 中国矿业大学(北京)资源与安全工程学院,北京 100083; 2. 太原科技大学 环境与安全学院,山西 太原 030024)

**摘要:**煤瓦斯吸附规律及其数学表征是进行煤层瓦斯含量评估、煤层气产出预测、突出危险性判别的理论基础。在理论描述煤瓦斯吸附时,经典菲克扩散模型仅考虑了吸附瓦斯量的变化,忽略了煤基质孔隙空间内的游离瓦斯,并且煤的孔隙尺度分布广泛,不同尺度孔隙中气体流动机制应有差异,因此仅采用菲克扩散解释瓦斯吸附行为可能不够有效。为对煤瓦斯非线性吸附过程进行精确表征,首先进行了不同尺度煤块在不同初始压力下的瓦斯变压吸附实验,得到瓦斯吸附量随时间的变化曲线;根据菲克模型的推导过程,将吸附瓦斯与游离瓦斯一并计为瓦斯密度,提出基于密度差驱动流的瓦斯非线性吸附数学模型(密度模型);其次,利用有限差分法编制了求解代码分别对菲克模型与密度模型进行了数值解算;最后将两种模型的解算结果与实验结果进行对比,发现:菲克模型计算的瓦斯吸附曲线一定程度上偏离实验曲线,而密度模型的计算曲线与实验曲线吻合良好。结果表明密度模型能更加精确的描述瓦斯非线性吸附。

**关键词:**非线性瓦斯吸附;密度差驱动;菲克定律;实验;数值解算

中图分类号:TD712

文献标志码:A

文章编号:0253-9993(2018)03-0735-08

## Investigation of non-linear gas adsorption in coal based on density-gradient driven flow: Experiments and numerical solutions

LIU Peng<sup>1</sup>, QIN Yueping<sup>1</sup>, HAO Yongjiang<sup>2</sup>

(1. School of Resource and Safety Engineering, China University of Mining & Technology (Beijing), Beijing 100083, China; 2. College of Environment and Safety, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

**Abstract:** Coal gas adsorption and its mathematical characterization plays a theoretical basis to estimate coal seam gas content, forecast coalbed gas production, classify the coal/gas outburst. When theoretically describing coal gas adsorption, only considering adsorbed gas to compute gas content in coal and only involving Fick's mass influx may lead to an erroneous prediction due to the pore size in coal ranging widely and it should be a multi-mechanism process in multi-scale pores. In order to theoretically characterize the gas adsorption process in high accuracy, a series of experiments were conducted under different initial pressures with different grain size samples, and the changing curves of the gas adsorption amount with time were obtained. Following this, recalling to the derivation of Fick model, the concept of gas density was employed to compute gas content consisting of adsorbed gas and free gas, the non-linear gas adsorption model (Density model) was proposed with an assumption that the gas transport in coal was density-gradient driven

flow, and the numerical model of Density model was presented by using the finite difference method. Numerical code to solve the two models was developed independently. Afterward the two sets of simulated results obtained by numerical solving the Fick model and Density model were compared to the measured data, and it shows Density model owns a higher accuracy over Fick model in terms of modeling gas adsorption, implying the proposed Density model may be more effective in describing the non-linear gas transport behaviors in coal.

**Key words:** non-linear gas adsorb; density-gradient drive; Fick's law; experiments; numerical solutions

煤瓦斯流动规律一直是国内外瓦斯工作者的研究重点和热点,是有关煤层瓦斯含量及突出危险性评估、采落煤瓦斯涌出预测及瓦斯抽采,煤层气开采数值建模等瓦斯防治与利用的理论基础<sup>[1-3]</sup>。

煤瓦斯吸附模型或解吸模型作为描述煤中瓦斯吸附解吸过程,研究吸附解吸特性的理论手段,很早就引起了国内外学者的广泛关注,提出了多种瓦斯吸附解吸模型。煤的瓦斯扩散模型是理论描述煤中瓦斯吸附解吸过程的重要手段。在煤的瓦斯扩散模型演化进程中,不断有新的扩散模型被提出。国外最早由 BARRER 通过研究沸石中天然气扩散,推导出了经典扩散模型,并导出了扩散量的精确解及其简化式<sup>[4]</sup>。NANDI 等进行了煤的瓦斯扩散研究,并采用经典扩散模型计算扩散系数<sup>[5-6]</sup>。RUCHENSTEIN 等在经典模型的基础上,提出了双孔隙扩散模型<sup>[7]</sup>,SMITH 等采用双孔隙模型计算煤瓦斯扩散,取得了比经典单孔隙模型更好的拟合精度<sup>[8]</sup>。CLARKSON 和 DURUCAN 等为了改善双孔隙扩散模型在描述烟煤瓦斯扩散中的拟合精度,提出了改进的双孔隙模型<sup>[9-10]</sup>。经典模型与双孔模型因其严格的推导过程和明确的物理意义,较好的解释了瓦斯扩散想象,得到了广泛认同与应用。除此之外,还有一些其他的模型,如双指数模型<sup>[11]</sup>、简化双孔隙模型<sup>[12]</sup>等。

国内最早由文献[13-17]报道了有关煤与瓦斯吸附解吸的理论研究,论文通过比较瓦斯扩散模型的计算结果与煤粒瓦斯扩散实验结果,发现二者有较高的匹配度,从而认为煤粒瓦斯流动符合菲克定律,并且得出  $\ln[1 - (Q_t/Q_\infty)^2]$  与放散时间  $t$  ( $Q_t$  为累积瓦斯解吸量,  $Q_\infty$  为极限瓦斯解吸量) 符合一定的线性关系。聂百胜等考虑了边界层表面的扩散阻力,以经典扩散模型为基础,建立了具有第三类边界条件的扩散模型<sup>[18]</sup>。刘彦伟等将双扩散模型推广至三级扩散模型,以此为基础进行了瓦斯扩散实验的拟合<sup>[19]</sup>。李志强等以经典扩散模型为基础,推导了具有动扩散系数的瓦斯扩散模型<sup>[20]</sup>。除此之外,文献[21-22]根据达西定律研究煤的瓦斯吸附解吸行为,认为在一定尺度煤粒中,用达西定律

描述瓦斯扩散过程更为准确。

在现有的关于瓦斯扩散过程数学表征中,多以菲克定律作为理论基础。煤中的孔隙结构复杂并且孔径尺度分布从埃米级到微米级<sup>[23-25]</sup>,不同尺度孔隙中气体流动机制应有一定差异,因此仅采用菲克定律描述多尺度孔隙中的气体运移可能不够有效。本文从自然界中最为普遍的概念,即密度,出发,提出考虑了吸附瓦斯与自由瓦斯,基于密度差驱动流形式的非线性瓦斯吸附模型,并用吸附实验数据论证了该模型相较于菲克模型的优势,以期对煤瓦斯扩散机理及数学表征方面提供借鉴。

## 1 实 验

### 1.1 实验系统

实验系统主要由温控、瓦斯吸附和信息采集 3 个子系统组成,其结构如图 1 所示。利用该装置对不同粒度煤样在不同的初始压力下,分别进行恒温条件下的瓦斯变压吸附实验。

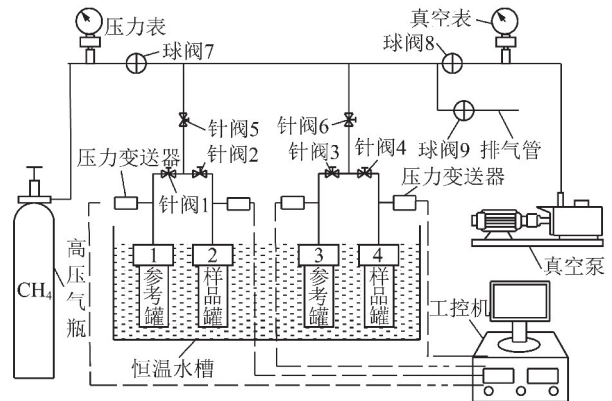


图 1 实验系统示意

Fig. 1 Schematic of experimental apparatus used for the adsorption/desorption experiments

### 1.2 煤样制备

实验煤样取自山西煤矿,现场取新鲜落煤装袋密封保存,实验前用真空干燥箱烘干,取出放入干燥器冷却至室温,然后进行挑选和筛分。为达实验目的,制备出不同粒度的煤样 4 组:1 号 4 000 ~ 4 750  $\mu\text{m}$ ; 2 号 1 000 ~ 1 180  $\mu\text{m}$ ; 3 号 425 ~ 550  $\mu\text{m}$ ; 4 号 250 ~ 270  $\mu\text{m}$ , 每组煤样 50 g。

### 1.3 实验过程

实验首先开启温控开关将系统温度稳定在30℃,并检测系统的气密性,保证其封闭;然后运用真空充氮法测定样品罐、参考罐以及样品罐自由空间体积,抽真空后向参考罐中通入一定量的瓦斯,当参考罐内压力稳定后,贯通样品罐和参考罐,当样品罐内达到一定压力时,迅速关闭样品罐,让煤样进行吸附。期间保持样品罐封闭,待样品罐内的瓦斯压力稳定时,结束实验。本次实验取4个压力点,即吸附平衡后样品罐内瓦斯压力分别为0.55, 1.05, 2.13, 4.1 MPa。

信息采集系统记录了样品罐内每一时刻的瓦斯压力数据。根据样品罐内前后两个时间点的压差,计算样品罐内自由空间瓦斯的减少量,该瓦斯减少量即为该时间段内的瓦斯吸附量,然后将各个时间段内的吸附量累加可得到累积瓦斯吸附量为

$$Q_t = \sum_{j=1}^t \frac{(p_{j-1} - p_j) V_f V_m}{GzRT} \quad (1)$$

式中, $Q_t$ 为第 $t$ 时刻煤样累积瓦斯吸附量, mL/g;  $p_j$ 为第 $j$ 时刻样品罐瓦斯压力, MPa;  $V_f$ 为样品罐自由空间的体积;  $V_m$ 为对应温度下的气体摩尔体积, mL/mol;  $G$ 为煤样的质量, g;  $z$ 为 $p_j$ 压力条件下气体的压缩因子;  $R$ 为通用气体常数, 8.314 J/(mol·K);  $T$ 为实验温度, K。

## 2 菲克模型

### 2.1 数学模型

根据菲克第二定律,在单位时间内通过垂直于扩散方向的单位截面积的扩散流量与该截面处的浓度梯度和扩散系数成正比,应用于球形煤粒内的瓦斯流动可表示为式(2)。该模型假定煤粒中扩散系数均匀分布,且不随浓度发生变化。

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial X}{\partial r} \right) \quad (2)$$

式中, $X$ 为单位体积煤体瓦斯含量,  $\text{m}^3/\text{m}^3$ ;  $D$ 为扩散系数,  $\text{m}^2/\text{d}$ ;  $r$ 为煤粒径向距离, m。

根据第1节中的变压吸附实验,将初始条件和边界条件设定为

$$\begin{cases} X|_{0 \leq r \leq R_0} = 0, t = 0, \\ \left\{ \frac{\partial X}{\partial r} \right\}_{r=0} = 0, t > 0, \\ X|_{r=R_0} = X_w, t > 0 \end{cases} \quad (3)$$

式中, $X_w$ 为煤粒表面瓦斯含量,  $\text{m}^3/\text{m}^3$ 。

当瓦斯在封闭煤样罐内吸附时,外部压力随着吸附过程不断降低,煤粒表面的瓦斯含量也随之减少,

这使得模型的外表面边界条件不断改变。煤粒外部的瓦斯压力可通过理想气体状态方程求得,即

$$p_w = p_{w0} - \frac{GQzRT}{V_f V_m} \quad (4)$$

式中, $p_{w0}$ 为开始吸附时煤粒外表面瓦斯压力, MPa;  $p_w$ 为扩散过程中煤粒外表面瓦斯压力, MPa;  $Q$ 为累计瓦斯吸附量, mL/g。

根据朗格缪尔方程和式(4)可得 $X_w$ 的计算式为

$$X_w = \frac{\rho_c ab(p_{w0} V_f V_m - GQzRT)}{V_f V_m + b(p_{w0} V_f V_m - GQzRT)} \quad (5)$$

式中, $a, b$ 为吸附常数,  $\text{m}^3/\text{t}, 1/\text{MPa}$ ;  $\rho_c$ 为煤的视密度,  $\text{t}/\text{m}^3$ 。

### 2.2 差分模型

笔者采用有限差分法对菲克模型进行数值求解。首先,对球形煤粒进行网格划分,将煤粒沿径向划分为多个球壳和一个中心小球,如图2所示。

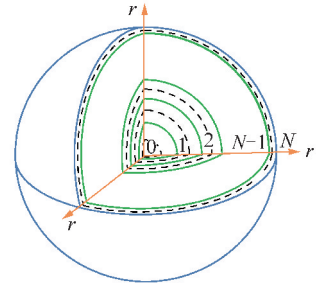


图2 球形煤粒网格划分示意

Fig. 2 Mesh generation for spherical coal particle

根据质量守恒定律,单位时间内节点球壳内的瓦斯变化量等于通过该球壳表面流入瓦斯量净量,对于1至 $N-1$ 节点,可建立节点的差分方程为

$$\begin{aligned} & \frac{(X_{i+1}^j + X_{i+1}^{j-1}) - (X_i^j + X_i^{j-1})}{r_{i+1} - r_i} (r_i + r_{i+1})^2 - \\ & \frac{(X_i^j + X_i^{j-1}) - (X_{i-1}^j + X_{i-1}^{j-1})}{r_i - r_{i-1}} (r_i + r_{i-1})^2 = \\ & \frac{X_i^j - X_i^{j-1}}{3D\Delta t_j} [(r_{i+1} + r_i)^3 - (r_{i-1} + r_i)^3], \\ & (i = 1, 2, \dots, N-1) \end{aligned} \quad (6)$$

式中,下标 $i-1, i, i+1$ 为节点编号;上标 $j-1$ 和 $j$ 为时间节点编号; $\Delta t_j$ 为第 $j$ 个时间步长。

对于0节点,即中心小球球心处,没有瓦斯流出,根据质量守恒定律可得

$$(X_1^j + X_1^{j-1}) - (X_0^j + X_0^{j-1}) = \frac{X_0^j - X_0^{j-1}}{3D\Delta t_j} r_1^2 \quad (7)$$

在 $N$ 节点处,球状煤粒的外表面瓦斯含量随外部压力不断变化,根据式(5)可得

$$X_N^j = \frac{\rho_c ab(p_{w0} V_f V_m - GQ_{j-1} zRT)}{V_f V_m + b(p_{w0} V_f V_m - GQ_{j-1} zRT)} \quad (8)$$

式中,  $Q_{j-1}$  为煤粒从开始到第  $j-1$  个时间步长内的瓦斯吸附量, mL/g。

由式(13)~(15)共  $N+1$  个独立方程, 构成了第  $j$  时刻以  $N+1$  个节点瓦斯含量为未知量的完备方程组。该方程组具有线性特征, 可直接采用高斯消去法进行求解。

求得各时刻各节点的瓦斯含量后, 可根据菲克定律, 计算第  $t$  时刻单位质量煤粒累积瓦斯吸附量为

$$Q_t = \sum_{j=1}^t \frac{3\Delta t_j D (X_N^j + X_N^{j-1}) - (X_{N-1}^j + X_{N-1}^{j-1})}{2\rho_c R_0 (r_N - r_{N-1})} \quad (9)$$

### 3 基于密度差驱动流的瓦斯扩散模型

#### 3.1 数学模型

煤中瓦斯以游离态和吸附态存储, 其中吸附态瓦斯占 90% 左右。由于吸附相气体的压力难以界定, 而吸附/自由项气体系统中, 密度是可以定义的。若没有吸附项, 则密度梯度与压力梯度成正比。若吸附项是主要考虑的, 则密度梯度总是高于压力梯度。当煤体内的气体密度低于外部空间的气体密度时, 形成由外而内的密度梯度, 引发瓦斯在密度梯度的作用下在煤的孔隙系统内运移, 进而吸附在孔隙表面或存储在孔隙中。1855 年, Fick 为描述分子扩散过程中传质通量与浓度梯度之间的关系提出了菲克第一定律<sup>[26]</sup>, 可表示为

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial X} \quad (10)$$

式中,  $J$  为单位时间内瓦斯气体通过单位面积的扩散质量,  $\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ ;  $\frac{\partial C}{\partial X}$  为瓦斯沿扩散方向的浓度梯度,  $\text{kg}/\text{m}^4$ 。

根据菲克第一定律, 假设传质通量与密度梯度之间的关系为: 单位时间内通过垂直于瓦斯流动方向的单位截面积的瓦斯流量与该截面处的密度梯度和流动系数成正比。参照菲克扩散模型(式(2)), 可建立密度差驱动的非线性瓦斯吸附模型为

$$\rho_c \frac{\partial m_c}{\partial t} = \frac{\lambda}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \rho}{\partial r} \right) \quad (11)$$

式中,  $\rho$  为煤中瓦斯密度, 即瓦斯质量(吸附态瓦斯质量和自由态瓦斯质量之和)与其所占体积之比,  $\text{t}/\text{m}^3$ ;  $\lambda$  为密度差驱动流中的传质系数,  $\text{m}^5/(\text{t} \cdot \text{d})$ ;  $m_c$  为吨煤瓦斯含量, 是气体压力或密度的函数,  $\text{m}^3/\text{t}$ ,  $m_c$  可表示为

$$m_c = \frac{abp}{1+bp} + \frac{\varphi p}{\rho_c p_0} \quad (12)$$

式中,  $p$  为煤中孔隙内的气体压力, MPa;  $\varphi$  为孔隙率;

$p_0$  为标准状况下的压力, 101 325 Pa。

单位质量煤体中的瓦斯质量  $m_{me}$  可以表示为

$$m_{me} = m_s + m_f \quad (13)$$

式中,  $m_s$  为单位质量煤中吸附瓦斯质量,  $\text{t}/\text{t}$ ;  $m_f$  为单位质量煤中游离瓦斯质量,  $\text{t}/\text{t}$ 。

其中,  $m_s$  可表示为

$$m_s = \frac{abp}{1+bp} \rho_g \quad (14)$$

式中,  $\rho_g$  为标况下瓦斯密度,  $\text{t}/\text{m}^3$ 。

根据理想气体方程, 可计算  $m_f$  为

$$m_f = \frac{p\varphi M}{RTz\rho_c} \quad (15)$$

式中,  $M$  为瓦斯的摩尔质量,  $\text{g}/\text{mol}$ 。

从而, 煤中瓦斯密度  $\rho$  可以用瓦斯质量与其所占体积之比来表示:

$$\rho = \rho_c \left( \frac{abp}{1+bp} \rho_g + \frac{\varphi Mp}{RTz\rho_c} \right) \quad (16)$$

孔隙压力  $p$  可表示为密度  $\rho$  的函数:

$$p = \frac{RTz}{2\varphi bM} \left[ \rho b - ab\rho_c \rho_g - \frac{\varphi M}{RTz} + \sqrt{\left( ab\rho_c \rho_g + \frac{\varphi M}{RTz} - \rho b \right)^2 + 4 \frac{\varphi Mb}{RTz} \rho} \right] \quad (17)$$

将式(17)代入式(12), 然后代入式(11), 可得

$$H(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\lambda}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \rho}{\partial r} \right) \quad (18)$$

其中:

$$H(\rho) = \frac{RTz\rho_c}{2\varphi bM} \left[ \frac{ab}{(1+bF(\rho))^2} + \frac{\varphi}{\rho_c p_0} \right] \left\{ b - \frac{1}{2} \left[ \left( ab\rho_c \rho_g + \frac{\varphi M}{RTz} - \rho b \right)^2 + 4 \frac{\varphi Mb}{RTz} \rho \right]^{-\frac{1}{2}} \right. \\ \left. \left[ 4 \frac{\varphi Mb}{RTz} - 2b \left( ab\rho_c \rho_g + \frac{\varphi M}{RTz} - \rho b \right) \right] \right\} \quad (19)$$

其中:

$$F(\rho) = \frac{RTz}{2\varphi bM} \left[ \rho b - ab\rho_c \rho_g - \frac{\varphi M}{RTz} + \sqrt{\left( ab\rho_c \rho_g + \frac{\varphi M}{RTz} - \rho b \right)^2 + 4 \frac{\varphi Mb}{RTz} \rho} \right] \quad (20)$$

式(18)~(20)为以瓦斯密度为未知量的非线性偏微分方程, 即为完整的密度差驱动流的瓦斯扩散模型(密度模型)。边界条件和初始条件为

$$\left. \begin{aligned} &[\rho]_{0 \leq r \leq R_0} = 0, t = 0, \\ &\frac{\partial \rho}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, t > 0, \\ &[\rho]_{r=R_0} = \rho_c \left( \frac{abp_w}{1+bp_w} \rho_g + \frac{\varphi Mp_w}{\rho_c RTz} \right), t > 0 \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

### 3.2 差分模型

本文采用有限差分法对密度模型进行离散求解。煤粒的网格划分方式如图2所示。同样,根据质量守恒,可得到节点1到N-1的差分方程为

$$\begin{aligned} & \frac{4}{3}\pi\left[\left(\frac{r_{i+1}+r_i}{2}\right)^3 - \left(\frac{r_{i-1}+r_i}{2}\right)^3\right] \times \\ & H\left(\frac{\rho_i^j + \rho_i^{j-1}}{2}\right) \frac{\rho_i^{j-1} - \rho_i^j}{\Delta t_j} = 4\pi\left(\frac{r_{i+1}+r_i}{2}\right)^2 \times \\ & \lambda \frac{(\rho_i^j - \rho_{i+1}^j + \rho_{i+1}^{j-1} - \rho_{i+1}^j)}{2(r_{i+1} - r_i)} - 4\pi\left(\frac{r_{i-1}+r_i}{2}\right)^2 \times \\ & \lambda \frac{(\rho_{i-1}^j - \rho_i^j + \rho_{i-1}^{j-1} - \rho_{i-1}^j)}{2(r_i - r_{i-1})} \end{aligned} \quad (22)$$

对于0节点,没有瓦斯流入,则

$$\begin{aligned} & \frac{4}{3}\pi\left(\frac{r_1}{2}\right)^3 H\left(\frac{\rho_0^j + \rho_0^{j-1}}{2}\right) \frac{\rho_0^{j-1} - \rho_0^j}{\Delta t_j} = \\ & 4\pi\left(\frac{r_1}{2}\right)^2 \lambda \frac{\rho_0^j - \rho_1^j + \rho_0^{j-1} - \rho_1^{j-1}}{2r_1} \end{aligned} \quad (23)$$

对于节点N,根据边界条件可得

$$\begin{aligned} \rho_N^j = \rho_c \left[ \frac{ab\left(p_{w0} - \frac{GQzRT}{V_f V_m}\right)}{1 + b\left(p_{w0} - \frac{GQzRT}{V_f V_m}\right)} \rho_g + \right. \\ \left. \frac{\varphi M}{\rho_c RTz} \left(p_{w0} - \frac{GQzRT}{V_f V_m}\right) \right] \end{aligned} \quad (24)$$

方程(22)~(24)即为密度模型的完备差分模型。因该差分模型系数矩阵中含有未知量,是为非线性方程组,在求解时需要进行迭代计算。

通过对差分模型进行解算,得到各节点在任一时刻的密度,由此可计算在t时刻的累积瓦斯吸附量为:

$$\begin{aligned} Q_t = \sum_{j=1}^t \frac{3\Delta t_j \lambda}{2\rho_c R_0} \times \\ \frac{(\rho_N^j + \rho_N^{j-1}) - (\rho_{N-1}^j + \rho_{N-1}^{j-1})}{r_N - r_{N-1}} \end{aligned} \quad (25)$$

### 4 结果分析

根据第2,3节中推导的有限差分模型,在C++编程平台,分别开发了数值解算程序。利用该数值解算程序,对文中吸附实验的整个瓦斯吸附过程进行数值模拟。模拟参数取值见表1,其中a,b,φ和ρ<sub>c</sub>由实验测得,λ和D由解算程序试算得到。

根据实验和模拟得到的瓦斯吸附量Q<sub>t</sub>随时间t的变化关系,分别绘制ln[1-(Q<sub>t</sub>/Q<sub>∞</sub>)<sup>2</sup>]与t关系图,并进行对比。受篇幅所限,此处仅给出部分对比结果,具体如图3所示。

表1 模拟参数取值

Table 1 Simulation parameter value

物理量	取值
吸附常数 a/(m <sup>3</sup> ·t <sup>-1</sup> )	11.8
吸附常数 b/MPa <sup>-1</sup>	0.3
温度 T/K	303
孔隙率 φ	0.032
煤的视密度 ρ <sub>c</sub> /(t·m <sup>-3</sup> )	1.4
标况下瓦斯密度 ρ <sub>g</sub> /(t·m <sup>-3</sup> )	0.716×10 <sup>-3</sup>
流动系数 λ/(m <sup>5</sup> ·(t·d) <sup>-1</sup> )	1×10 <sup>-8</sup> ~ 1×10 <sup>-9</sup>
扩散系数 D/(cm <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> )	1×10 <sup>-7</sup> ~ 1×10 <sup>-5</sup>

由图3可知:

(1)在菲克模拟中,无论当扩散系数D如何变化,ln[1-(Q<sub>t</sub>/Q<sub>∞</sub>)<sup>2</sup>]与t关系图均呈现直线特征,而实验测得的吸附曲线有明显的曲线特征。当扩散系数D取值较大时,模拟曲线在吸附的初始阶段与实验曲线大致相符,然而随着吸附过程的进行,两者的偏差也逐渐增大。但扩散系数D取值较小时,模拟曲线与实验曲线在吸附的初始阶段与接近平衡阶段的有相同取值,而在吸附过程中两曲线有较大偏差。则菲克模型的计算结果无法在整个吸附过程中与实验结果匹配,表明仅采用菲克第二定律计算瓦斯扩散是不够精确的。

(2)在不同初始压力,不同煤样粒度的情况下的整个吸附过程中,密度模型计算的吸附曲线均能与实验曲线良好匹配,二者不仅有共同的变化趋势,取值也相差不大,因此采用密度模型可以对吸附过程进行精确预测。同时也表明,本文提出的密度差驱动的非线性瓦斯吸附模型可以用于煤瓦斯吸附解吸过程预测,且预测精度优于菲克模型。

### 5 讨论

气体通过多孔介质如煤的运移机理较为复杂,尤其是煤具有良好吸附性,孔隙结构分布广泛,各向异性等特征,使得气体在其中的流动方式更为复杂。瓦斯吸附解吸机理及数学表征是煤中瓦斯运移机理的关键组成,这一理论需进行反复的探讨与商榷。

煤中瓦斯以吸附态和游离态两种形式存储,以吸附态瓦斯为主。前人在构建以菲克定律为基础的瓦斯吸附或者解吸模型时,有两个因素可能导致了菲克模型的偏差:一是菲克模型在计算瓦斯含量时,仅考虑了吸附瓦斯,忽略了游离瓦斯。游离瓦斯量与孔隙压力呈正相关,随孔隙压力增大,游离瓦斯量所占总瓦斯量的比例逐步增大。为精确表征瓦斯吸附解吸过程,应考虑游离瓦斯;第二,煤中孔隙结构复杂,尺

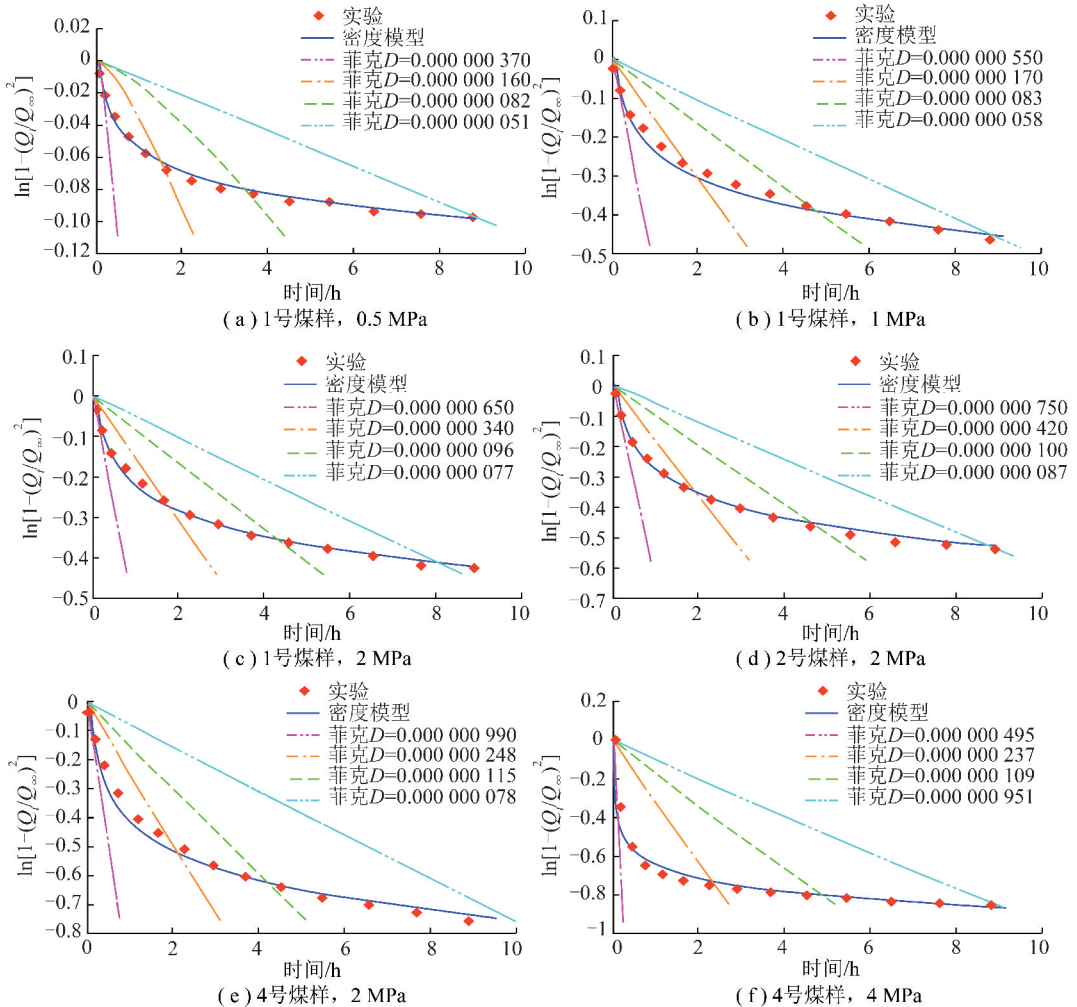


图3 2种模拟结果与实验结果对比

Fig. 3 Contrast curves between two sets of simulated results and measured data

度分布极为广泛。实验发现煤基质中不仅有扩散孔,还存在渗流孔,基质内的瓦斯流动不仅有扩散流动,还存在压力梯度驱动下的达西流<sup>[27-29]</sup>。因此,仅采用菲克定律描述煤瓦斯吸附解吸可能会偏离实际。

煤中瓦斯吸附解吸过程中,可能扩散与渗流并存。扩散过程是浓度差驱动,渗流过程是压力差驱动。精确描述吸附解吸过程的关键在于如何将这两种传质过程进行统一表征。无论是渗流还是扩散,其实质均为传质,可以通过一个通用的物理量将这两种传质方式进行统一整合。密度是一个较为普遍的物理量,且瓦斯含量可以用瓦斯密度表征,浓度差与压力差可通过一定的公式代换转化为密度差。因此,本文从瓦斯密度和传质角度出发,将吸附瓦斯与游离瓦斯一并计为煤中的瓦斯密度,将煤内外浓度/压力梯度驱动下传质理解为密度差驱动传质,从而建立了以瓦斯密度为未知量的非线性瓦斯吸附模型。通过数值计算,分别对基于菲克定律的瓦斯吸附模型与本文提出的密度差驱动模型进行了精确求解,得到两套模

拟吸附量随时间的变化曲线,并将其与实验吸附曲线进行对比,发现菲克模型仅能在吸附过程的初始阶段或平衡阶段匹配实验结果,不能对吸附全过程进行预测,而密度模型的计算结果在整个吸附过程均与实验结果吻合良好,表明本文提出的密度差驱动模型在精确描述瓦斯在煤中吸附过程的有效性。

实质上,若将密度梯度替换为浓度梯度,则流动系数 $\lambda$ 将等效于扩散系数 $D$ ,从而密度模型就等同于浓度梯度驱动的非菲克扩散模型;若将密度梯度替换为压力梯度,则流动系数 $\lambda$ 将等效于渗透率,该模型就等同于压力梯度驱动的达西渗流模型。若忽略模型中的吸附瓦斯项,只计算游离瓦斯,则该模型也可描述非吸附性气体在多孔介质中的流动。此外,密度模型也可用于计算煤基质瓦斯运移,可并入现有的双重孔隙模型以进行煤储层瓦斯运移模拟。

## 6 结 论

(1) 菲克模型的计算结果与实验结果有较大偏

离,而密度模型的计算结果与实验吻合良好,表明仅采用菲克定律描述瓦斯吸附解吸是不够的,本文提出的密度差驱动的瓦斯非线性吸附模型可以精确预测瓦斯吸附过程。

(2)煤与瓦斯吸附过程的实质为多尺度孔隙内的多机理流动,应是扩散流动和达西流并存,仅考虑其中一种流动方式,可能会偏离实际。密度模型从传质的角度,将该两种流动方式统一为密度差驱动流,有机结合了扩散过程和渗流过程。密度模型可同时应用于描述多孔介质中吸附性气体与非吸附性气体的运移,也可用于计算煤基质内的气体运移,可直接并入双重孔隙模型以进行煤层气体运移模拟。

## 参考文献 (References):

- [1] CLARKSON C, BUSTIN R. The effect of pore structure and gas pressure upon the transport properties of coal: A laboratory and modeling study 1: isotherms and pore volume distributions [J]. *Fuel*, 1999, 78(11):1333-1344.
- [2] CUI Xiaojun, MARC R, GREGORY D. Selective transport of CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, and N<sub>2</sub> in coals: Insights from modeling of experimental gas adsorption data [J]. *Fuel*, 2004, 83(3):293-303.
- [3] 谢和平, 高峰, 周宏伟, 等. 煤与瓦斯共采中煤层增透率理论与模型研究 [J]. *煤炭学报*, 2013, 38(7):1101-1108.  
XIE Heping, GAO Feng, ZHOU Hongwei, et al. On theoretical and modeling approach to mining-enhanced permeability for simultaneous exploitation of coal and gas [J]. *Journal of China Coal Society*, 2013, 38(7):1101-1108.
- [4] BARRER R M. *Diffusion in and through solids* [M]. London: Cambridge University Press, 1951:28-29
- [5] NANDI S P, WALKER P L. Activated diffusion of methane in coal [J]. *Fuel*, 1970, 49(3):309-323.
- [6] NANDI S P, WALKER P L. Activated diffusion of methane from coals at elevated pressures [J]. *Fuel*, 1975, 54(4):81-86.
- [7] RUCKENSTEIN E, VAIDANATHAN A S, YOUNGQUIST G R. Sorption by solids with bidisperse pore structures [J]. *Chemical Engineering Science*, 1971, 26(9):1305-1318.
- [8] SMITH D M, WILLIAMS F L. A new technique for determining the methane content of coal [A]. *Proc. Intersoc. Energy Convers. Eng. Conf. [C] (United States)*, 1981.
- [9] CLARKSON C, BUSTIN R. The effect of pore structure and gas pressure upon the transport properties of coal: A laboratory and modeling study. 2. Adsorption rate modeling [J]. *Fuel*, 1999, 78(11):1345-1362.
- [10] SHI J Q, DURUCAN S. A bi-disperse pore diffusion model for methane displacement desorption in coal by CO<sub>2</sub> injection [J]. *Fuel*, 2003, 82(10):1219-1229.
- [11] FLETCHER A J, UYGUR Y, THOMAS K M. Role of surface functional group in the adsorption kinetics of water vapour on micro-porous activated carbons [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2007, 111(23):8349-8359.
- [12] PAN Zhejun, CONNELL L D, CAOMILLERI M et al. Effects of matrix moisture on gas diffusion and flow in coal [J]. *Fuel*, 2010, 89(11):3207-3217.
- [13] 杨其鑫. 煤屑瓦斯放散随时间变化规律的初步探讨 [J]. *煤矿安全*, 1986(4):4-12.  
YANG Qiluan. Experimental research on coal gas Diffusion [J]. *Safety in Coal Mines*, 1986(4):4-12.
- [14] 杨其鑫, 王佑安. 煤屑瓦斯扩散理论及其应用 [J]. *煤炭学报*, 1986(3):89-96.  
YANG Qiluan, WANG Youan. Diffusion theory and application of coal gas [J]. *Journal of China Coal Society*, 1986(3):89-96.
- [15] 杨其鑫. 关于煤屑瓦斯放散规律的试验研究 [J]. *煤矿安全*, 1987(2):9-16.  
YANG Qiluan. Experimental research on coal gas diffusion [J]. *Safety in Coal Mines*, 1987(2):9-16.
- [16] 杨其鑫. 煤屑瓦斯放散特性及其应用 [J]. *煤矿安全*, 1987(5):1-6.  
YANG Qiluan. Diffusion characteristics and application of coal gas [J]. *Safety in Coal Mines*, 1987(5):1-6.
- [17] 杨其鑫, 王佑安. 瓦斯球向流动的数学模拟 [J]. *中国矿业大学学报*, 1988(3):58-64.  
YANG Qiluan, WANG Youan. Mathematical simulation of the radial methane flow in spherical coal grains [J]. *Journal of China University of Mining and Technology*, 1988(3):58-64.
- [18] 聂百胜, 郭勇义, 吴世跃, 等. 煤粒瓦斯扩散的理论模型及其解析解 [J]. *中国矿业大学学报*, 2001, 30(1):19-22.  
NIE Baisheng, GUO Yongyi, WU Shiyue, et al. Theoretical model of gas diffusion through coal particles and its analytical solution [J]. *Journal of China University of Mining & Technology*, 2001, 30(1):19-22.
- [19] 刘彦伟. 煤粒瓦斯放散规律、机理与动力学模型研究 [D]. 焦作:河南理工大学, 2011.  
LIU Yanwei. Study on gas emission rules, mechanism and dynamic model from coal particle [D]. Jiaozuo: Henan Polytechnic University, 2011.
- [20] 李志强, 刘勇, 许彦鹏, 等. 煤粒多尺度孔隙中瓦斯扩散机理及动扩散系数新模型 [J]. *煤炭学报*, 2016, 41(3):633-643.  
LI Zhiqiang, LIU Yong, XU Yanpeng, et al. Gas diffusion mechanism in multi-scale pores of coal particles and new diffusion model of dynamic diffusion coefficient [J]. *Journal of China Coal Society*, 2016, 41(3):633-643.
- [21] 秦跃平, 郝永江, 刘鹏, 等. 封闭空间内煤粒瓦斯解吸实验与数值模拟 [J]. *煤炭学报*, 2015, 40(1):87-92.  
QIN Yueping, HAO Yongjiang, LIU Peng, et al. Coal particle gas desorption experiment and numerical simulation in enclosed space [J]. *Journal of China Coal Society*, 2015, 40(1):87-92.
- [22] 秦跃平, 刘鹏. 煤粒瓦斯吸附规律的实验研究及数值分析 [J]. *煤炭学报*, 2015, 40(4):749-753.  
QIN Yueping, LIU Peng. Experimental study on gas adsorption law in coal particle and its numerical analysis [J]. *Journal of China Coal Society*, 2015, 40(4):749-753.
- [23] SAKUROVS R, HE L, MELNICHENKO Y B, et al. Pore size distribution and accessible pore size distribution in bituminous coals [J]. *International Journal of Coal Geology*, 2012, 100(3):51-64.

- [24] ZHAO Y, LIU S, ELSWORTH D, et al. Pore structure characterization of coal by synchrotron small-angle X-ray scattering and transmission electron microscopy [J]. *Energy & Fuels*, 2014, 28(6): 3704–3711.
- [25] NIE B, LIU X, YANG L, et al. Pore structure characterization of different rank coals using gas adsorption and scanning electron microscopy [J]. *Fuel*, 2015, 158: 908–917.
- [26] FICK A. Ueber diffusion [J]. *Annalen der Physik*, 1855, 170(1): 59–86.
- [27] WEI Z, ZHANG D. Coupled fluid-flow and geomechanics for triple-porosity/dual-permeability modeling of coalbed methane recovery [J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Science*, 2010, 47(8): 1242–1253.
- [28] ZOU M, WEI C, YU H, et al. Modeling and application of coalbed methane recovery performance based on a triple porosity/dual permeability model [J]. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2015, 22: 679–688.
- [29] THARAROOP P, KARPYN Z T, ERTEKIN T. Development of a multi-mechanistic, dual-porosity, dual-permeability, numerical flow model for coalbed methane reservoirs [J]. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2012, 8(9): 121–131.