工程热物理所煤热解模型研究取得进展

煤的热解是煤所有热化学转化过程的共性过程和基础，关于热解过程的研究也一直是煤科学研究领域的热点。针对煤热解过程的研究，除实验研究外，模型研究也是一种重要的研究手段。通过比较相同条件下实验结果与模拟结果的异同，可对建立模型所使用假设的正确性进行判断，从而得到一些无法通过实验观察到的反应过程信息。模型研究在催化以及材料领域的计算方面得到了广泛而成功的应用，但对于煤而言，从微观角度看，其单元结构包含的巨量原子导致巨大的计算量，无法使用量子化学计算方法。因此，现有关于煤热解反应的模型(例如FG-DVC模型、CPD模型)一般仍属宏观模型，在假设的反应网络中引入若干经验参数，通过实验得到参数后即可应用模型进行预测。

结合微观研究和宏观研究的优点，中国科学院工程热物理研究所能源动力研究中心科研人员从介观角度对煤的热解过程进行了研究。通过对煤热解过程共价键"断裂-生成"机制和共价键反演产物渗透理论的假设，联合使用Boltzmann-Monte Carlo方法和渗透方程，建立了煤热解过程的Boltzamann-Monte Carlo-Percolation模型。该模型可在不包含经验参数的条件下对煤热解过程的键合结构变化以及产物生成趋势进行定量模拟，也可在引入一个经验参数的情况下对不同煤的挥发分产率、煤气产率、轻油以及焦油产率进行定量/半定量预测。

相关研究成果发表在Fuel和Fuel Processing Technology上。该研究得到了国家自然科学基金、国家重点研发计划的资助。

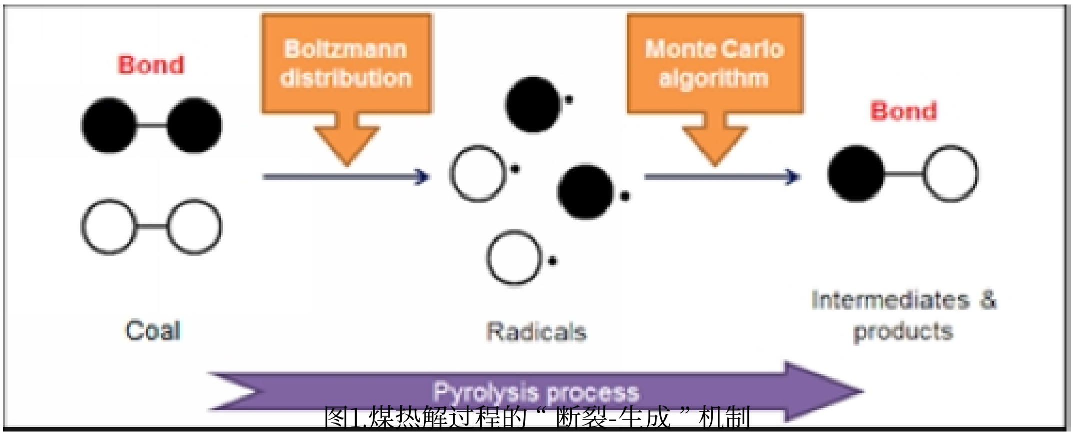

图1.煤热解过程的"断裂-生成"机制

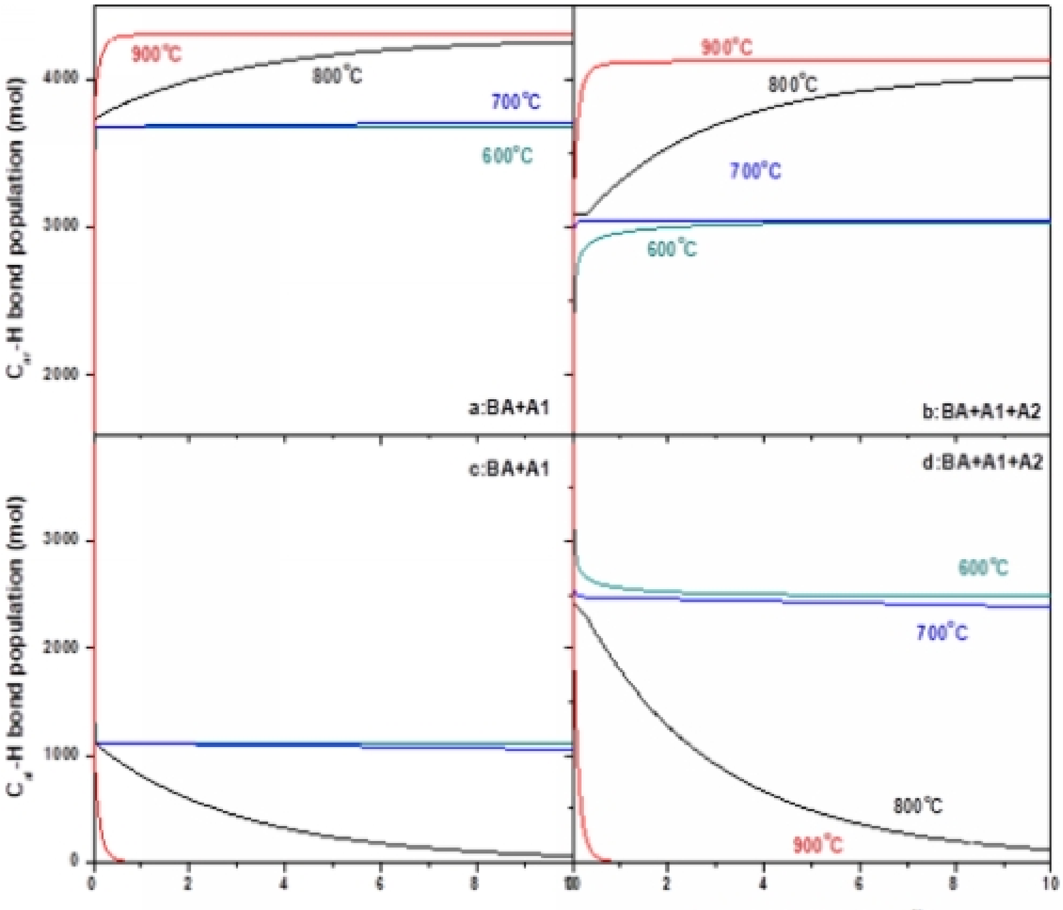

图2.B-M-P模型对煤共价键变化的预测

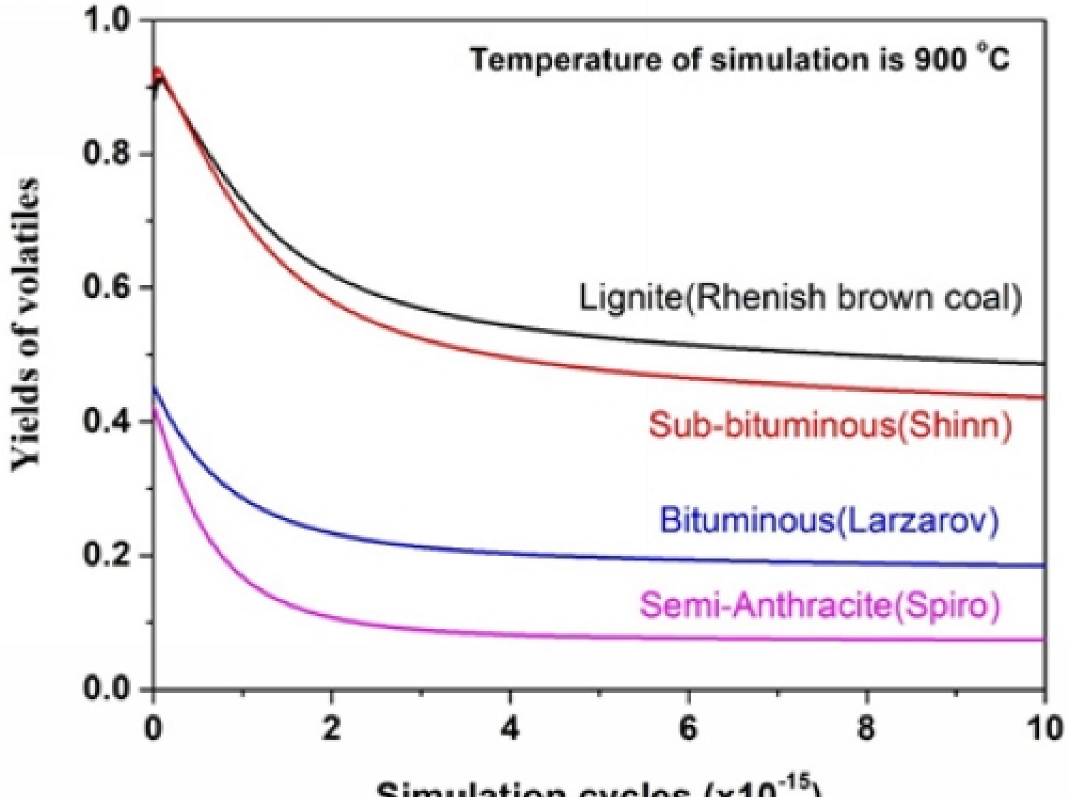

图3.B-M-P模型对不同煤挥发分产率的预测

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/118674.html