

УДК 622.831: 642.411

<https://doi.org/10.15407/geotm2018.141.099>**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕСОРБЦИИ МЕТАНА, АДсорБИРОВАННОГО В УГОЛЬНОМ ПЛАСТЕ С УЧЕТОМ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОРБЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ****¹Минеев С.П., ¹Прусова А.А., ²Минеев А.С.**¹*Институт геотехнической механики им. Н.С. Полякова НАН Украины, ²Национальный технический университет «Днепропетровская политехника»***МОДЕЛЮВАННЯ ДЕСОРБЦІЇ МЕТАНУ, АДсорБОВАНОГО В ВУГІЛЬНОМУ ПЛАСТІ З УРАХУВАННЯМ МІЖМОЛЕКУЛЯРНИХ СОРБЦІЙНИХ ВЗАЄМОДІЙ****¹Мінієєв С.П., ¹Прусова А.А., ²Мінієєв О.С.**¹*Институт геотехнічної механіки ім. М.С. Полякова НАН України, ²Національний технічний університет «Дніпровська політехніка»***SIMULATION OF DESORPTION OF METHANE ADSORBED IN THE COAL SEAM WITH CONSIDERING OF INTERMOLECULAR SORPTION INTERACTIONS IN THE SYSTEM****¹Minieiev S.P., ¹Prusova A.A., ²Minieiev O.S.**¹*Institute of Geotechnical Mechanics named by N. Poljakov of National Academy of Sciences of Ukraine, ²National Technical University «Dnipro Polytechnic»*

Аннотация. В настоящее время разработка и внедрение в промышленность высокоэффективных технологий добычи угля и газа связана с необходимостью учета метана, связанного с углем сорбционной связью. На основе выполненного анализа этапов развития десорбции метана, адсорбированного в угольном пласте, моделирование этого процесса базировалось на рассмотрении его как активационного процесса диффузии. При этом было установлено, что межмолекулярные сорбционные взаимодействия в системе «метан-уголь» необходимо описывать потенциалом Леннарда-Джонса с учетом полимерной природы молекулярной структуры угля. Поэтому в работе был выполнен анализ современных теорий кинетики неравновесных сорбционных процессов в высокомолекулярных материалах. Этот анализ показал, что комплекс основных молекулярных факторов в системе «метан-уголь» наиболее корректно можно учесть, используя молекулярные параметры Пейса-Дейтинера. А коэффициент диффузии учитывает энергию активации диффузионного процесса, межмолекулярные сорбционные взаимодействия в системе «метан – уголь», параметры микроструктуры угля, физические свойства метана и величину его диффузионного скачка. Установлены граничные условия уравнения диффузии применительно к горному массиву и выполнен его аналитический расчет, который позволяет определять закономерности десорбционного процесса в различных горно-геологических условиях ведения горных работ. Разработанная модель десорбционного процесса метана в угольном пласте представлена уравнением диффузии с коэффициентом диффузии, учитывающем энергию активации диффузии, а также комплекс структурных параметров молекулярной структуры угля, физические свойства метана позволяет установить величину его диффузионного скачка в данной молекулярной структуре. Полученное при моделировании аналитическое выражение для расчета закономерности десорбционного процесса имеет экспоненциальный вид. С учетом граничных условий, полученных для угольного массива, это уравнение позволяет устанавливать десорбционные закономерности метана в различных горно-геологических условиях ведения угледобычных работ.

Ключевые слова: моделирование, уголь–метан, сорбция, диффузия, свойства.

Введение. В настоящее время разработка и внедрение в промышленность высокоэффективных технологий добычи угля и газа связана с необходимостью учета метана, связанного с углем сорбционной связью [1-5]. Закономерности его выделения - десорбции определяют подготовку и развитие различных типов газодинамических проявлений горного давления [6,7]. Однако при расчетах газоотдачи этого газа в настоящее время, в основном, используют теорию Ленгмюра, которая не позволяет учитывать межмолекулярные сорбционные

взаимодействия в системе «метан-уголь» [8], определяемые структурными параметрами молекулярной структуры угля и свойствами метана. Это важно, поскольку данные характеристики обуславливают [9] энергию активации десорбции и диффузию десорбирующегося метана, а, следовательно, и закономерность десорбционного процесса метана в угольном массиве. В связи с этим, в работе была поставлена цель: выполнить моделирование десорбции метана, адсорбированного в угольном пласте, с учетом межмолекулярных сорбционных взаимодействий в системе «метан-уголь».

Методика. Известно [9], что десорбция представляет собой отделения сорбата от сорбента и в общем случае делится на следующие этапы: нарушение сорбционного равновесия, обуславливающее активацию десорбционного процесса, и диффузию десорбирующегося газа, которая осуществляет его перенос через микропористый объем в макропористый или непосредственное удаление газа из среды. Первый этап в угле определяется характерным строением его молекулярной структуры. Эта структура, как известно [10, 11], состоит из двух или более типов мономерных звеньев различной химической природы с их хаотическим чередованием. Ее относят к сополимерам, поэтому ее можно отнести к высокомолекулярным средам [12]. Основным параметром первого этапа десорбционного процесса, характеризующегося нарушением сорбционного равновесия, является энергия, которая достигла величины, достаточной для перехода сорбированного метана из состояния покоя к движению – энергия активации десорбции E_a . Этот параметр является основным и при определении коэффициента диффузии D во втором этапе описания процесса десорбции метана. При этом межмолекулярные взаимодействия адсорбированного метана с углем необходимо учитывать на основе того, что эта взаимосвязь обусловлена, преимущественно, физической сорбцией [13]. Эта сорбция подразумевает взаимодействие фазовых состояний посредством сил Ван-дер-Ваальса [14], которые определяются потенциалом Леннарда-Джонса [15, 16].

Таким образом, исходя из того, что молекулярную структуру угля можно отнести к высокополимерным материалам, в работе был выполнен анализ существующих классических теорий кинетики неравновесных сорбционных процессов в подобных средах. При этом были проанализированы модели, среди которых можно выделить два подхода. Первый - состоит в том, что диффузия рассматривается как термически активированный процесс – молекулярные модели [17- 19 и др.]; второй – феноменологические теории свободного объема, [20, 21 и др.]. В результате для моделирования выбрана молекулярная теория, описываемая параметрами Пейса – Дейттинера [19], которые наиболее полно позволяют учесть полимерную природу молекулярной структуры угля и ее структурные особенности, а также межмолекулярные взаимодействия дисперсного типа в системе «метан-уголь», определяемые ван-дер-ваальсовыми силами.

Результаты и их обсуждение. Исходя из описанных в методике этапов, десорбция метана, связанного с углем межмолекулярной сорбционной связью, представляет собой диффузию газа в угле. Этот процесс реализуется при

достижении молекулами метана энергии активации десорбции E_a . В связи с этим, изменение концентрации метана при его десорбции в сферическом фрагменте угля радиусом R_0 с начальной концентрацией $\varphi(r)$, которая намного больше концентрации свободного метана в угольном массиве [1], можно описать уравнением диффузии в сферических координатах следующим образом [22, 23]:

$$\frac{\partial c(r,t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c(r,t)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c(r,t)}{\partial r} \right), \quad (1)$$

где $c(r,t)$ – концентрация метана; t – время; r – радиальная координата; D – коэффициент диффузии.

Уравнение связи коэффициента диффузии молекул метана с физическими и молекулярными свойствами системы «метан- уголь в соответствии с работой [19] можно записать в виде:

$$D_d = (9,1 \times 10^{-4}) \frac{\bar{L}^2}{\lambda^2} \left(\frac{\varepsilon^*}{r^*} \right)^{5/4} \left(\frac{\sqrt{\beta}}{m^*} \right)^{1/2} \frac{d'}{\partial E_a / \partial d} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \quad (2)$$

где \bar{L} – длина свободного диффузионного скачка молекулы метана; ε^* и r^* – средние значения параметров потенциала Леннарда-Джонса [16] для элементов структурной цепи угля; λ – среднее расстояние между сегментами; β – константа, характеризующая деформацию валентного угла на единицу длины сегмента с молекулярной массой m^* ; $d' = d + r^* - l$ – эквивалентный диаметр молекулы метана; l – расстояние между структурными цепями;

$$E_a = 5,23 \left(\frac{\beta}{d'} \right)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon^* r^*}{\lambda^2} \right)^{3/4} \left\{ \begin{array}{l} 0,077 \left[\left(\frac{r^*}{l} \right)^{11} (l - 10d') - r^* \left(\frac{r^*}{r^* + d} \right)^{10} \right] \\ -0,580 \left[\left(\frac{r^*}{l} \right)^5 (l - 4d') - r^* \left(\frac{r^*}{r^* + d} \right)^4 \right] \end{array} \right\}^{3/4}. \quad (3)$$

Если концентрация метана в трещинах полностью или частично окружающих фрагмент постоянна и составляет c_R , то начальные и граничные условия в общем случае будут иметь вид:

$$c(r,0) = c_0; \quad c(R_0,t) = c_R. \quad (4)$$

Данную одномерную задачу о диффузии метана решали с использованием метода Фурье [22,23]. В результате решение получили в виде:

$$c(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(c_0 - c_R)R_0}{n\pi r} (-1)^{n+1} \sin \frac{n\pi r}{R_0} \exp\left(-\frac{n^2\pi^2 Dt}{R_0^2}\right) + c_R. \quad (5)$$

Таким образом, уравнение (5) описывает изменение во времени концентрации сорбированного метана в угольном фрагменте радиусом R_0 , при его начальной концентрации c_0 когда на границе поддерживается постоянная концентрация метана c_R . А концентрация десорбирующегося метана $c_d(r,t)$ будет определяться разницей между начальной концентрацией метана в угле c_0 и изменением концентрации при диффузии метана $c(r,t)$.

Определим постоянные, входящие в уравнение (5). Концентрация сорбированного метана в ненарушенных фрагментах угля может быть оценена по известному распределению форм существования метана в угле [10], которое составляет для сорбированного газа около 80 – 90% от общего содержания газа в пласте. Поэтому для случая безостаточной десорбции метана в рассматриваемом фрагменте угля c_0 можно определить из соотношения:

$$c_0 = \frac{c_K}{0,2} - c_K. \quad (6)$$

Давление метана на границе ненарушенных фрагментов угля с фильтрационным пространством угольного пласта с учетом закона Менделеева-Клайперона [14] можно считать равным:

$$P_2 = k\gamma H = \frac{N_m}{V} \frac{RT}{N_A}. \quad (7)$$

где k – коэффициент бокового распора; γ – объемный вес пород, вмещающий угольный пласт; H – глубина залегания пласта; V – объем фильтрационного пространства; N_m количество молекул газа; N_A – число Авогадро, равное $6 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹; R – универсальная газовая постоянная; T – температура пласта.

Величина N_m/V в правой части уравнения (7) представляет собой концентрацию метана в фильтрационном пространстве угольного пласта. Решив уравнение (7) относительно этой величины, будем иметь:

$$c_R = \frac{k\gamma H N_A}{RT}. \quad (8)$$

В качестве примера был выполнен расчет изменения концентрации сорбированного метана в угольном фрагменте на глубине 1000 м когда деформации в горном массиве не привели к изменению молекулярной структуры угля, характеризующиеся в ней конформационными перестройками. Тогда можно использовать численное значение коэффициента диффузии, установленное в работе [3] и равное $D=8,4 \cdot 10^{-15}$ м²/с. Для глубины залегания пласта 1000 м, где температура составляет, в среднем 308 К [6], и объемного

веса пород 13 N/m^3 , а также 20% - ной концентрации свободного газа в массиве, численное значение постоянной c_R будет равно $3 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$, а $c_0 = 12 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$.

Результаты расчета представлены на рис. 1.

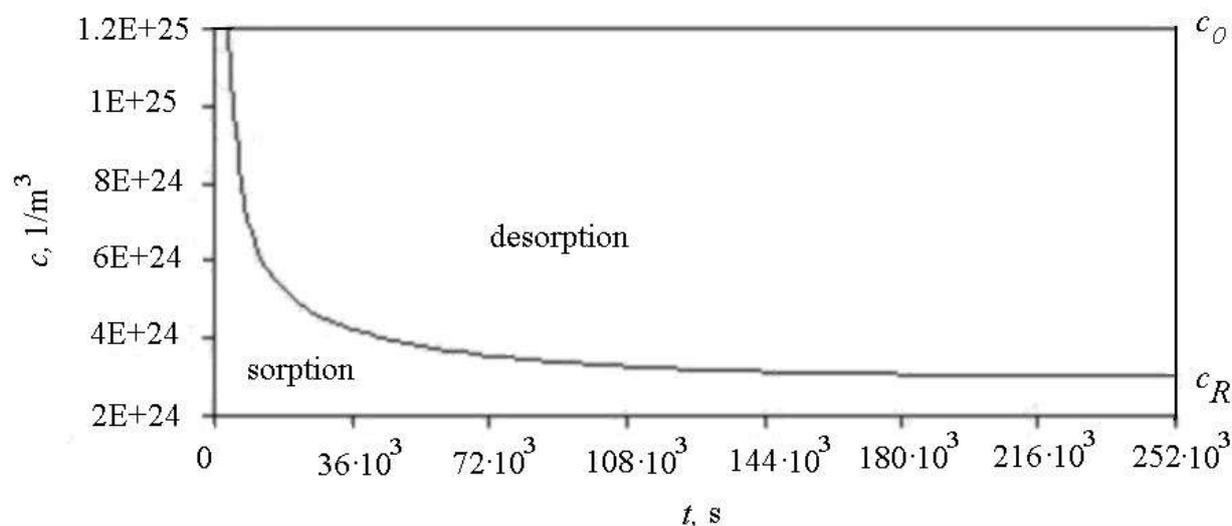


Рисунок 1 - Распределение концентрации сорбированного метана во времени при отсутствии конформационных перестроек в микроструктуре угольного фрагмента

Из рисунка видно, что с течением времени объем выделившегося метана из угольного фрагмента при его десорбции увеличивается по экспоненциальному закону. При этом наиболее интенсивная десорбция происходит, примерно, на протяжении 8-10 часов. Далее интенсивность десорбции снижается. А по истечении 50 часов процесс десорбции прекращается, и концентрация сорбированного метана во всем фрагменте сравнивается с концентрацией газа в фильтрационном пространстве.

Таким образом, в результате проведенных исследований были сделаны следующие выводы:

1. Установлено, что основой моделирования десорбции метана в угольном массиве является рассмотрение ее как активированного диффузионного процесса в высокополимерной среде с учетом того, что сорбционную межмолекулярную взаимосвязь в системе «метан- уголь» можно описать потенциалом Леннарда-Джонса.

2. Модель десорбционного процесса метана в угольном пласте представлена уравнением диффузии (1) с коэффициентом диффузии (2), учитывающем энергию активации диффузии (3), а также комплекс структурных параметров молекулярной структуры угля, физические свойства метана, величину его диффузионного скачка в данной молекулярной структуре и параметры потенциала Леннарда-Джонса.

3. Полученное при моделировании аналитическое выражение для расчета закономерности десорбционного процесса имеет экспоненциальный вид (5). С учетом граничных условий, полученных для угольного массива (6) и (8), это уравнение позволяет устанавливать десорбционные закономерности метана в

различных горно-геологических условиях ведения угледобычных работ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алексеев А. Д., Синолицкий В. В. Кинетика поглощения и выделения газа пористыми твердыми телами // Инж.-физ. журн. 1985. Том 49. №4. С. 648 – 654.
2. Minieiev S. *Properties of gas-saturated coal*. Edited by S. Minieiev. Dnipropetrovsk: NSU, 2009.
3. Минеев С.П., Прусова А.А., Корнилов М.Г. Об энергии активации диффузии метана в угольном пласте // Геотехнічна механіка: Міжвід. зб. наук. праць. Дніпропетровськ, 2007, Вип. 69. С. 68-74.
4. Lyakh V.V., Mineev S.P. Mathematical simulation of vibration action upon a gas-saturated coal seam. *Prikladnaya Matematika i Mekhanika*. 1994.
5. Bulat A.F., Mineev S.P., Prusova A.A. Generating methane adsorption under relaxation of molecular structure of coal. *Journal of Mining Science*, 2016, vol. 52, no.1, pp. 70-79.
6. Минеев С.П., Рубинский А.А., Витушко О.В., Радченко А.Г. Горные работы в сложных условиях на выбросоопасных угольных пластах. Донецк: Східний видавничий дім, 2010. 604 с.
7. Минеев С.П. Прогноз и способы борьбы с газодинамическими явлениями на шахтах Украины. Мариуполь: Восточный издательский дом, 2016. 258 с.
8. Kuznetsov S., Trofimov V. The main task of gas filtration in coal seams // *Journal of Mining Science*. 1999. № 5. С. 13-18
9. Minieiev S., Prusova A., Kornilov M. Dynamics of methane adsorption in coal micropores. *Geo-Technical Mechanics*. Dnipropetrovsk: IGTM NAS of Ukraine, 2006. № 67. Pp. 179-184
10. Саранчук В.И., Айруни А.Т., Ковалев К.Е. Надмолекулярная организация, структура и свойства угля. Киев: Наукова думка, 1988. 190 с.
11. Скляр М.Г., Солдатенко Е.М., Валтерс Н.А. О некоторых особенностях молекулярного и надмолекулярного строения углей // Структура и свойства углей в ряду метаморфизма. К.: Наукова думка, 1985. С. 3-15.
12. Кричко А.А., Гагарин С.Г., Скрипченко Г.Б. Характер химических связей в углях и их реакционная способность // Структура и свойства углей в ряду метаморфизма. К.: Наукова думка, 1985. С. 42-66.
13. Дубинин М.М. Микропористые структуры углеродных адсорбентов // Адсорбция в микропорах, М.: Наука, 1983. С. 186-192.
14. Kuzmichev V. The laws and formulas of physics. Kyiv: Naukova Dumka, 1989.
15. Буркерт У., Эллингджер Н. Молекулярная механика. М: Мир, 1986. 364 с.
16. Бобин В.А., Зимаков В.Н., Одинцев В.Н. Оценка энергии межмолекулярного отталкивания молекул сорбата в микропорах угля // ФТПРПИ. 1989. № 5. С. 48-56.
17. Klopffer M.H., Flaconnache B. Transport Properties of Gases in Polymers: Bibliographic Review // *Oil & Gas Science and Technology*. Rev. IFP. 2001. Vol. 56. No.3. pp. 223-244.
18. George S. C., Thomas S. Transport phenomena through polymeric system // *Prog. Polym. Sci*. 2001. Vol. 26. pp. 985-1017.
19. Kiparissides C., Dimos V., Boulouka T., Anastasiadis A., Chasiotis A. Experimental and Theoretical Investigation of Solubility and Diffusion of Ethylene in Semicrystalline PE at Elevated Pressures and Temperatures // *Journal of Applied Polymer Science*. 2003. Vol. 87. pp. 953-966.
20. Ganesh K., Nagarajan R., Duda J. L. Rate of Gas Transport in Glassy Polymers: A Free Volume Based Predictive Model // *Ind. Eng. Chem. Res*. 1992. Vol. 31. pp. 746-755.
21. Kalospiros N. S., Ocone R., Astarita G., Meldon J.H. Analysis of Anomalous Diffusion and Relaxation in Solid Polymers // *Ind. Eng. Chem. Res*. 1991. Vol. 30. pp. 851-881.
22. Араманович И.Г., Левин В. И. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1969. 287 с.
23. Годунов С. К. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1979. 393 с.

REFERENCES

1. Aleksieiev A. and Synolytskyi V. (1985), «Kinetics of absorption and gas evolution by porous solids», *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, no. Vol. 49, no. 4, pp. 648 - 654
2. Minieiev S. (2009). *Properties of gas-saturated coal*. Edited by S. Minieiev. Dnipropetrovsk: NSU
3. Minieiev S.P., Prusova A.A. and Kornilov M.G. (2007), «On the activation energy of methane diffusion in a coal rock», *Geo-Technical Mechanics*, no. 69, pp. 68-74
4. Lyakh V.V., Mineev S.P.(1994), «Mathematical simulation of vibration action upon a gas-saturated coal rock», *Prikladnaya Matematika i Mekhanika* .
5. Bulat A.F., Mineev S.P. and Prusova A.A. (2016), «Generating methane adsorption under relaxation of molecular structure of coal», *Journal of Mining Science* , Vol. 52, no. 1, pp. 70-79.
6. Minieiev S.P., Rubinsky A.A., Vitushko O.V. and Radchenko A.G. (2010), *Gornye raboty v slozhnykh usloviyakh na vybrosoopasnykh ugolnykh plastakh* [Mining in difficult conditions on outburst coal rocks], Skhidnyy vidavnychy dim, Donetsk, UA.
7. Mineev S.P. (2016), *Prognoz i sposoby borby s gazodinamicheskimi yavleniyami na shakhtakh Ukrainy* [Forecast and ways of dealing with gas-dynamic phenomena in the mines of Ukraine], Oriental Publishing House, Mariupol, UA.
8. Kuznetsov S. and Trofimov V. (1999). «The main task of gas filtration in coal rocks», *Journal of Mining Science*, no. 5, pp. 13-18

9. Mineev S.P., Prusova A.A. and Kornilov M.G. (2006), «Dynamics of methane adsorption in coal micropores», *Geo-Technical Mechanics*, no. 67, pp. 179-184
10. Saranchuk V.I., Ayruni A.T. and Kovalev K.Ye. (1988), *Nadmolekulyarnaya organizatsiya, struktura i svoystva uglya* [Supramolecular organization, structure and properties of coal]. Naukova Dumka, Kyiv, SU.
11. Sklyar M.G., Soldatenko Ye.M. and Valters N.A. (1985), «On some features of the molecular and supramolecular structure of coal», *Structure and properties of coal in a series of metamorphism*, Naukova Dumka, Kyiv, SU, pp. 3-15.
12. Krichko A.A., Gagarin S.G. and Skripchenko G.B. (1985). «The nature of chemical bonds in coal and their reactivity», *Structure and properties of coal in a series of metamorphism*, Naukova Dumka, Kyiv, SU, pp. 42-66.
13. Dubinin M.M. (1983), «Microporous structures of carbon adsorbents», *Adsorption in micropores*, Nauka, Moscow, SU, pp. 186-192.
14. Kuzmichev V. (1989), *The laws and formulas of physics*. Naukova Dumka, Kyiv, SU,
15. Burkert U. and Ellinger N. (1986). *Molekulyarnaya mekhanika* [Molecular mechanics], Mir, Moscow, SU.
16. Bobin V.A., Zimakov V.N. and Odintsev V.N. (1989), «Estimation of the energy of intermolecular repulsion of sorbate molecules in the micropores of coal», *Journal of Mining Science*, no. 5, pp. 48-56.
17. Klopffer M.H. and Flaconneche B. (2001), «Transport Properties of Polymers: Bibliographic Review», *Oil & Gas Science and Technology. Rev. IFP*, Vol. 56, no 3, pp. 223-244.
18. George S.C. and Thomas S. (2001), «Transport laws through the polymeric system», *Prog. Polym. Sci.*, Vol. 26, pp. 985-1017.
19. Kiparissides C., Dimos V., Bouloutouka T., Anastasiadis A. and Chasiotis A. (2003), «Experimental and Theoretical Investigation of Solubility and Diffusion of Ethylene in Semicrystalline PE at Elevated Pressures and Temperatures», *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 87, pp. 953-966.
20. Ganesh K., Nagarajan R. and Duda, J.L. (1992), «Rideaty of Gas Transport in Glassy Polymers: A Free Volume Based Predictive Model», *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 31, pp. 746-755.
21. Kalospiros N.S., Ocone R., Astarita G. and Meldon J.H. (1991), «Analysis of Anomalous Diffusion and Relaxation in Solid Polymers», *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 30, pp. 851-881.
22. Aramanovich I.G. and Levin V.I. (1969), *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equations of mathematical physics], Nauka, Moscow, SU.
23. Godunov S.K. (1979), *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equations of Mathematical Physics], Nauka, Moscow, SU.

Об авторах

Минеев Сергей Павлович, доктор технических наук, профессор, заведующий отделом управления динамическими проявлениями горного давления, Институт геотехнической механики им. Н.С. Полякова НАН Украины (ИГТМ НАН Украины), Днепр, Украина, sergmineeov@gmail.com.

Прусова Алла Андреевна, кандидат технических наук, старший научный сотрудник отдела управления динамическими проявлениями горного давления, Институт геотехнической механики им. Н.С. Полякова НАН Украины (ИГТМ НАН Украины), Днепр, Украина

Минеев Александр Сергеевич, кандидат технических наук, доцент Национального технического университета «Днепропетровская политехника», Днепр, Украина

About the authors

Minieiev Serhii Pavlovych, Doctor of Technical Sciences (D.Sc.), Professor, Head of the Department of Pressure Dynamics Control in Rocks of the Institute of Geotechnical Mechanics by N. Poljakov of National Academy of Sciences of Ukraine (IGTM NAS of Ukraine), Dnipro, Ukraine, sergmineeov@gmail.com.

Prusova Alla Andriivna, Candidate of Technical Sciences (Ph.D.), Senior Researcher in the Department of Pressure Dynamics Control in Rocks of the Institute of Geotechnical Mechanics by N. Poljakov of National Academy of Sciences of Ukraine (IGTM NAS OF UKRAINE), Dnipro, Ukraine

Minieiev Oleksandr Serhiiovych, Candidate of Technical Sciences (Ph.D.), Associate Professor of the National Technical University "Dnipro Polytechnic", Dnipro, Ukraine

Анотація. У даній час розробка і впровадження у промисловість високоефективних технологій видобутку вугілля і газу пов'язана з необхідністю врахування метану, пов'язаного з вугіллям сорбційним зв'язком. На основі виконаного аналізу етапів розвитку десорбції метану, адсорбованого в вугільному пласті, моделювання цього процесу базувалося на розгляді його як активаційного процесу дифузії. При цьому було встановлено, що міжмолекулярні сорбційні взаємодії в системі «метан-вугілля» необхідно описувати потенціалом Леннарда - Джонса з урахуванням полімерної природи молекулярної структури вугілля. Тому в роботі був виконаний аналіз сучасних теорій кінетики нерівноважних сорбційних процесів в високомолекулярних матеріалах. Цей аналіз показав, що комплекс основних молекулярних факторів у системі «метан- вугілля» найбільш коректно можна врахувати, використовуючи молекулярні параметри Пейсах-Дейтінера. А коефіцієнт дифузії враховує енергію активації дифузійного процесу, міжмолекулярні сорбційні взаємодії в системі «метан - вугілля», параметри мікроструктури вугілля, фізичні властивості метану і величину його дифузійного стрибка. Встановлено граничні умови рівняння дифузії стосовно до гірського масиву і виконаний його аналітичний розрахунок, який дозволяє

визначати закономірності десорбційної процесу в різних гірничо-геологічних умовах ведення гірничих робіт. Розроблена модель десорбційної процесу метану у вугільному пласті представлена рівнянням дифузії з коефіцієнтом дифузії, що враховує енергію активації дифузії, а також комплекс структурних параметрів молекулярної структури вугілля, фізичні властивості метану дозволяє встановити величину його дифузійного стрибка в даній молекулярній структурі. Отримане при моделюванні аналітичний вираз для розрахунку закономірності десорбційної процесу має експонентний вигляд. З урахуванням граничних умов, отриманих для вугільного масиву, це рівняння дозволяє встановлювати десорбційну закономірності метану в різних гірничо-геологічних умовах ведення угледобичних робіт.

Ключові слова: моделювання, вугілля -метан, сорбція, дифузія, властивості.

Abstract. Presently development and introduction in industry of high-effectively technologies of coal and gas mining is related to the necessity of account of the methane related to the coal by sorbtioning communication. Having analyzed the stages of desorption of methane adsorbed in the coal seam, this process was simulated basing on its consideration as an activation process of diffusion. It was found that intermolecular sorption interactions in the «methane-coal» system should be described by the Lennard-Jones potential and with taking into account polymeric nature of the coal molecular structure. Because of this, modern theories on kinetics of nonequilibrium sorption processes in high-molecular materials were analyzed. This analysis shows that it is most correctly to take into account a complex of the main molecular factors in the system “methane-coal” by using the Pace-Deutiner molecular parameters, while diffusion coefficient takes into account activation energy of the diffusion process, intermolecular sorption interactions in the «methane-coal» system, parameters of the microstructure of coal, physical properties of methane and magnitude of its diffusion jump. Boundary conditions were determined for the diffusion equation and its analytical calculation of was performed, which allowed determining the patterns of desorption process in various geological conditions of mining operations. The developed model of the methane desorption process in a coal seam is represented by a diffusion equation with a diffusion coefficient that takes into account the diffusion activation energy, as well as a set of structural parameters of the molecular structure of coal, and the physical properties of methane allows us to determine the magnitude of its diffusion jump in a given molecular structure. The analytical expression obtained during modeling for calculating the laws of the desorption process has an exponential form. Given the boundary conditions obtained for the coal mass, this equation allows us to establish the desorption patterns of methane in various mining and geological conditions of coal mining operations.

Keywords: modeling, coal – methane, sorption, diffusion, properties.

Стаття надійшла до редакції 23.07.2018.

Рекомендовано до друку д-ром техн. наук С.А. Курносовим