

Минеев С.П., д-р техн. наук, профессор,
Прусова А.А., канд. техн. наук, ст. научн. сотр.
(ИГТМ НАН Украины)
Янжула А.С., магистр,
Гулай А.А., магистр
(ПАО «ШУ «Покровское»)
Рыжова С.А., инженер
(ИГТМ НАН Украины)

ЗАКОНОМЕРНОСТЬ ПРОЦЕССА ДЕСОРБЦИИ МЕТАНА ИЗ ЗОНЫ НАРУШЕННОСТИ УГОЛЬНОГО ПЛАСТА

Мінєєв С.П., д-р техн. наук, профессор,
Прусова А.А., канд. техн. наук, ст. наук. співр.
(ІГТМ НАН України)
Янжула О.С., магістр,
Гулай О.О., магістр
(ПАТ «ШУ «Покровське»)
Рижова С.О., інженер
(ІГТМ НАН України)

ЗАКОНОМІРНІСТЬ ПРОЦЕСУ ДЕСОРБЦІЇ МЕТАНУ ІЗ ЗОНИ ПОРУШЕНОСТІ ВУГІЛЬНОГО ПЛАСТА

Mineyev S.P., D.Sc.(Tech), Professor,
Prusova A.A., Ph.D (Tech), Senior Researcher
(IGTM NAS of Ukraine)
Yanzhula A.S., M.Sc (Tech),
Gulay A.A., M.Sc (Tech)
(PJSC «CG «Pokrovskoe»)
Ryzhova S.A., M. Sc (Tech)
(IGTM NAS of Ukraine)

PHYSICS OF METHANE DESORPTION FROM A DISTURBED COAL-BED ZONE

Аннотация. На основе молекулярной механики выполнено моделирование десорбционного процесса метана из зоны нарушения угольного пласта с учетом межмолекулярных и сорбционных взаимодействий в системе «метан-уголь».

При моделировании использовалась теория Пейса-Дейтинера, наиболее полно связывающей параметры молекулярной структуры угля с его диффузионной способностью и основанная на учете локальных взаимодействий между молекулами газа и сегментами структурной угольной цепочки. Задачу о десорбции метана в зоне нарушения угольного пласта свели к задаче о диффузии метана во фрагменте угля, которая описывается уравнением диффузии в сферических координатах с коэффициентом диффузии, учитывающим межмолекулярные взаимодействия и энергию активации десорбции метана в угле.

В результате решения уравнения диффузии методом Фурье было получено соотношение, определяющее изменение концентрации десорбирующегося метана в зоне нарушенности угольного пласта с учетом параметров нарушенности и упаковки угольных фрагментов.

Выполненные расчеты позволили построить графические зависимости изменения концентрации десорбирующегося метана во времени от энергии активации конформационных перестроек в микроструктуре нарушенного угля (E_a^k).

Установлены аппроксимирующие функции, описывающие усредненную закономерность изменения концентрации сорбированного метана в выбросоопасном угле. Анализ полученных результатов показал, что десорбция происходит более активно при больших энергиях активации конформационных перестроек в угольном пласте. Время выравнивания составляет 8 ч для $E_a^k \max$ и 11 ч для $E_a^k \min$. То есть при больших энергиях активации конформационных перестроек в микроструктуре угля выравнивание концентрации десорбирующегося метана происходит быстрее. При этом если исследуемый промежуток времени составляет не более 10 ч, то закономерность изменения концентрации сорбированного метана можно описать экспоненциальной функцией, а более 10 ч – логарифмической функцией.

Ключевые слова: нарушенный угольный пласт, метан, межмолекулярные взаимодействия, десорбция, диффузия, энергия активации.

Процесс нарушения сорбционного равновесия в газонасыщенном угольном пласте и, как следствие, развитие в нем десорбции метана предопределяет, как известно, развитие фильтрации метана в угле, степень его газоотдачи и газодинамической опасности при ведении горных работ. Это касается как тектонически нарушенных, так и ненарушенных угольных пластов. В последнем случае в настоящее время выполнен уже достаточно большой объем исследований [1], а для нарушенного угля данный вопрос остается не изученным. В связи с этим, в работе была поставлена цель на основе молекулярной механики и динамики выполнить моделирование десорбционного процесса метана из зоны нарушенности угольного пласта с учетом межмолекулярных сорбционных взаимодействий в системе «метан-уголь» и установить закономерность его изменения во времени.

Основным фактором, определяющим нарушенность угольного пласта, является степень его структурной дезинтеграции, которая в первую очередь, характеризуется такими параметрами молекулярной структуры угля [1,2], как среднее расстояние между структурными сегментами угольного вещества, измеренное вдоль оси структурной цепи – λ и средняя эффективная константа деформации валентного угла на единицу длины сегмента – β , а также потенциальной энергией связи молекул метана с углем – ε . При изменении нарушенности угольного пласта параметры λ и β будут существенно изменяться, а параметр ε^* при высокой степени нарушенности можно считать соответствующей энергии взаимосвязи молекул метана с плоской поверхностью [1], которая приведена в таблице 1.

Для установления энергии активации десорбции в случае физической сорбции метана углем была использована модель Пейса-Дейтинера [1], наиболее полно связывающая параметры молекулярной структуры угля с его диффузионной способностью и основанная на учете локальных взаимодействий между

молекулами газа и сегментами структурной цепи. Уравнение связи энергии активации десорбции метана с физическими и молекулярными свойствами сорбента, в соответствии с этой моделью, определяется следующим соотношением [1]:

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

где ε^* и r^* – средние значения параметров потенциала Леннарда-Джонса для молекулярной структуры угля; λ – среднее расстояние между сегментами угольного вещества, измеренное вдоль оси структурной цепочки; β – средняя эффективная константа деформации валентного угла на единицу длины сегмента; $d' = d + r^*$ – эквивалентный диаметр молекулы метана; d – газокинетический диаметр молекулы метана; l – расстояние между цепями угольного вещества; m^* – молекулярная масса единицы длины сегмента угольного вещества; L – длина диффузионного скачка молекулы метана.

Некоторые параметры модели Пейса-Дейтинера, которые можно считать неизменяемыми в нарушенной структуре выбросоопасного угля, приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Некоторые параметры модели Пейса-Дейтинера для выбросоопасного угля.

Параметр модели Пейса-Дейтинера	Значение параметра 89,10
d , нм	0,416
ε^* , Дж/моль	422,2
r^* , нм	0,347
m , а. е. м.	13,6
L , А°	0,875

Коэффициент диффузии, который численно равен диффузионному потоку через единицу площади при единичном градиенте концентрации десорбирующегося метана с учетом межмолекулярных взаимодействий в системе «метан-уголь» можно определить используя также теорию Пейса-Дейтинера, в соответствии с которой коэффициент твердотельной диффузии определяется соотношением [1]:

$$D = (9.1 \times 10^{-4}) \frac{\bar{L}^2}{\lambda^2} \left(\frac{\varepsilon^*}{r^*} \right)^{5/4} \left(\frac{\sqrt{\beta}}{m^*} \right)^{1/2} \frac{d'}{\partial \Delta E / \partial d} \exp\left(-\frac{\Delta E}{RT}\right), \quad (2)$$

где R – газовая постоянная; T – температура.

При моделировании процесса десорбции метана в нарушенной зоне угольного пласта предполагали, что начальная концентрация десорбирующегося метана в сферическом фрагменте угля радиусом R_0 описывается функцией $\varphi(r)$, а концентрация метана в трещинах, полностью или частично окружающих его, постоянна и составляет c_R . Тогда задачу о десорбции метана в зоне нарушенности угольного пласта можно свести к задаче о диффузии метана во фрагменте угля [3], которая описывается уравнением диффузии в сферических координатах:

$$\frac{\partial c(r,t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c(r,t)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c(r,t)}{\partial r} \right), \quad (3)$$

где $c(r,t)$ – концентрация газа; t – время; r – радиальная координата; D – коэффициент диффузии с учетом сорбционных взаимодействий, определяемый соотношениями (1) и (2).

Начальное и граничное условия будут иметь вид:

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

Для решения этой задачи необходимо определить изменение размеров ненарушенных фрагментов угля по мере изменения нарушенности угольного пласта. Делалось это следующим образом. В начале предполагалось, что при входе в переходную зону области нарушенности размер ненарушенного фрагмента угля составляет, в соответствии с данными работы [4], $12,4 \cdot 10^{-4}$ см. По мере приближения к нарушенной зоне ненарушенный фрагмент угля дробится трещинами на более мелкие, достигая в центральной зоне значения $1,7 \cdot 10^{-4}$ см [4]. Исходя из характера изменения пористости в этой зоне [5], было получено выражение для количества фольмеровских трещин по мере увеличения степени нарушенности угля в следующем виде:

$$N_{mp} = 6,7 * \exp(-0,023L), \quad R_2=0,99, \quad (5)$$

где L – расстояние до центра нарушенной зоны, м.

Это выражение позволяет определить изменение размера ненарушенного фрагмента угля с изменением степени нарушенности угольного пласта.

Тогда зависимость размера ненарушенного фрагмента угля от расстояния до центра нарушенной зоны составит:

$$R = \frac{R_0}{6,7 * \exp(-0,023L) + 1}, \quad (6)$$

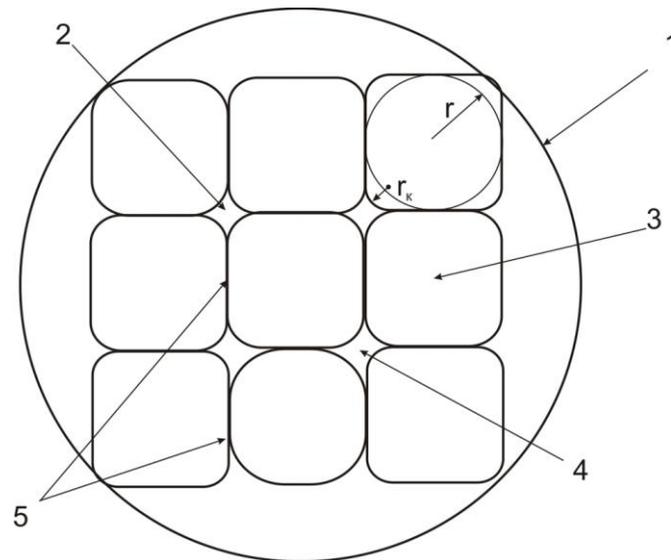
где R_0 – средний радиус ненарушенного фрагмента угля, равный $12,4 * 10^{-4}$ см.

Использование выражения (6) позволяет определить изменение концентрации метана в ненарушенном угольном фрагменте угля различной степени нарушенности. При этом концентрация метана на границе ненарушенного угольного фрагмента c_R будет переменной, поскольку десорбируемый метан будет занимать образующиеся в процессе тектонических изменений микропоры и трещины. Таким образом, по мере уменьшения размеров ненарушенного угольного фрагмента концентрация метана на его границе будет возрастать. Это возрастание будет пропорциональным степени дробления ненарушенного фрагмента, описываемой выражением (6), то есть, от рассчитанного в работе [1] значения $c_R = 3 \times 10^{24} \text{ м}^{-3}$ концентрация метана на границе ненарушенного фрагмента будет возрастать до некоторого значения, соответствующего новому равновесному значению. Указанное изменение определялось, исходя из того, что суммарная концентрация метана, сорбированного в межпоровом пространстве угля и находящегося порах и трещинах угля, является постоянной. Как показано в работе [1], эти два значения концентрации метана связаны следующим выражением:

$$c_0 = \frac{c_R}{(0,1 \div 0,25)} - c_R. \quad (7)$$

Выражение $(0,1 \div 0,25)$ в знаменателе (7) определяет долю свободного метана, которая может различаться для различных марок угля. При этом следует учитывать, что только часть поверхности частиц задействована в десорбции метана. Если учитывать, что частица угля каждого масштабного уровня имеет все-таки несферическую форму, то определенная часть поверхности такой частицы будет исключена из процесса десорбции. Это продемонстрировано на рисунке 1.

Как видно из рисунка 1, если принять форму частиц угля как кубическую со скругленными краями с радиусом кривизны r_k , то стыки между отдельными частицами угля с учетом несферичности частиц (5 на рис. 1) занимают определенную часть поверхности этих частиц. Десорбция при этом будет протекать вдоль поверхности частиц, либо же через поверхность частиц из одной в другую. Таким образом, объем десорбирующегося метана в трещины и поры большего масштабного уровня будет зависеть от близости формы частиц угля к сферической. Кроме того, площадь поверхности, из которой выделяется метан, будет зависеть также и от плотности упаковки частиц угля меньшего масштабного уровня в исследуемой частице.



1 – исследуемая частица угля; 2– трещины, в которых реализуется диффузия; 3 – частицы угля меньшего масштабного уровня, в которых реализуется твердотельная диффузия; 4 – трещина, ширина которой изменена вследствие различного радиуса кривизны частиц угля меньшего масштабного уровня; 5 – области соприкосновения частиц угля меньшего масштабного уровня

Рисунок 1 – Схема расчетов плотности источников десорбции метана для частицы угля

Исходя из этого, основной объем метана, десорбирующегося из частиц меньшего масштабного уровня будет определяться площадью поверхности сегмента сферы этой частицы, доступным трещине, проходящей через частицу угля данного масштабного уровня. Расчет этой площади поверхности производили согласно расчетной схеме, представленной на рисунке 2.

Площадь поверхности заштрихованной области на рисунке 2 равна:

$$S = 2r_k h \gamma, \quad (8)$$

где r_k – радиус кривизны частицы угля; γ – половина угла, образованного центром радиуса кривизны частицы угля и точками соприкосновения с другими частицами угля, измеряемый в радианах; h – длина соприкосновения частиц угля.

Поверхность, представленная на рис. 2, определяет площадь, из которой происходит десорбция метана в пору или трещину угольного вещества. Чтобы связать ее с расчетами для диффузии метана в сфере, в качестве радиуса частицы примем приведенный радиус частицы, равный среднему значению вписанной и описанной окружности вокруг принятой кубической частицы со скругленными краями. Радиус вписанной в куб окружности равен $R_{en}=a/2$, где a – длина ребра куба. Радиус описанной окружности равен $R_{on}=a\sqrt{3}/2$. Соответственно, средний радиус равен:

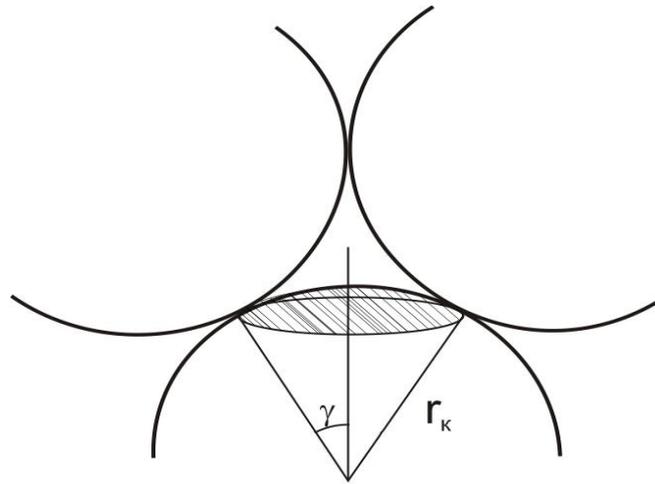


Рисунок 2 – К расчету площади поверхности частицы угля, из которой происходит десорбция метана

$$R_{cp} = (R_{оп} + R_{вп}) = \frac{1}{2} \left(\frac{a}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} a \right) = \frac{a}{4} (1 + \sqrt{3}). \quad (9)$$

Радиус поры, образованной контактом частиц угля в данном случае будет связан с радиусом кривизны частицы, согласно рис. 3, следующим образом:

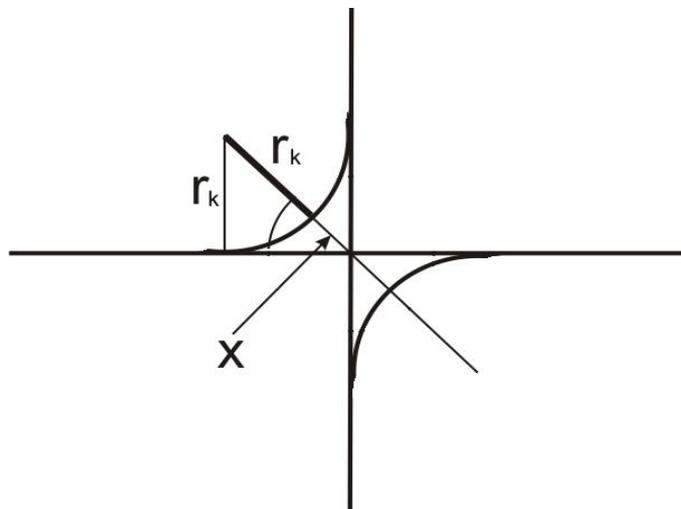


Рисунок 3 – Расчетная схема к определению радиуса поры между стыками частиц угля

$$\frac{r_k}{r_k + x} = \sin \alpha, \quad \text{где } \alpha = 45^\circ \quad (10)$$

Откуда:

$$x = r_k \left(\frac{2}{\sqrt{2}} - 1 \right). \quad (11)$$

Уравнение (3) решалось методом Фурье. В результате, с учетом упаковки угольных фрагментов в нарушенном угле, было получено следующее уравнение, определяющее изменение концентрации десорбирующегося метана в угле:

$$C(r,t) = \frac{6}{\pi R_0 (1 + \sqrt{3})} \frac{2r_k r \gamma}{\pi R^2} \left(\frac{4R_0}{(1 + \sqrt{3})} - \frac{d_{\min}}{\sin \alpha} \right) \times \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(c_0 - c_R) R_0}{n \pi r} (-1)^{n+1} \sin \frac{n \pi r}{R_0} \exp\left(- \frac{n^2 \pi^2 D_T t}{R_0^2} \right) + c_R \right). \quad (12)$$

Коэффициент диффузии в этом соотношении устанавливается с учетом параметров молекулярной структуры угля и энергии активации десорбции метана в ней. Поэтому этот параметр определяли по формуле Пейса-Дентинера (2), с учетом того, что для угля характерно не одно значение энергии активации конформационных переходов вследствие неоднородности угольной структуры, а диапазон энергий, который может изменяться в пределах от 0 до 150 кДж/моль [1]. Результаты расчета влияния структурных параметров λ и β на коэффициент твердотельной диффузии метана в угле, представлены на рисунках 4 и 5.

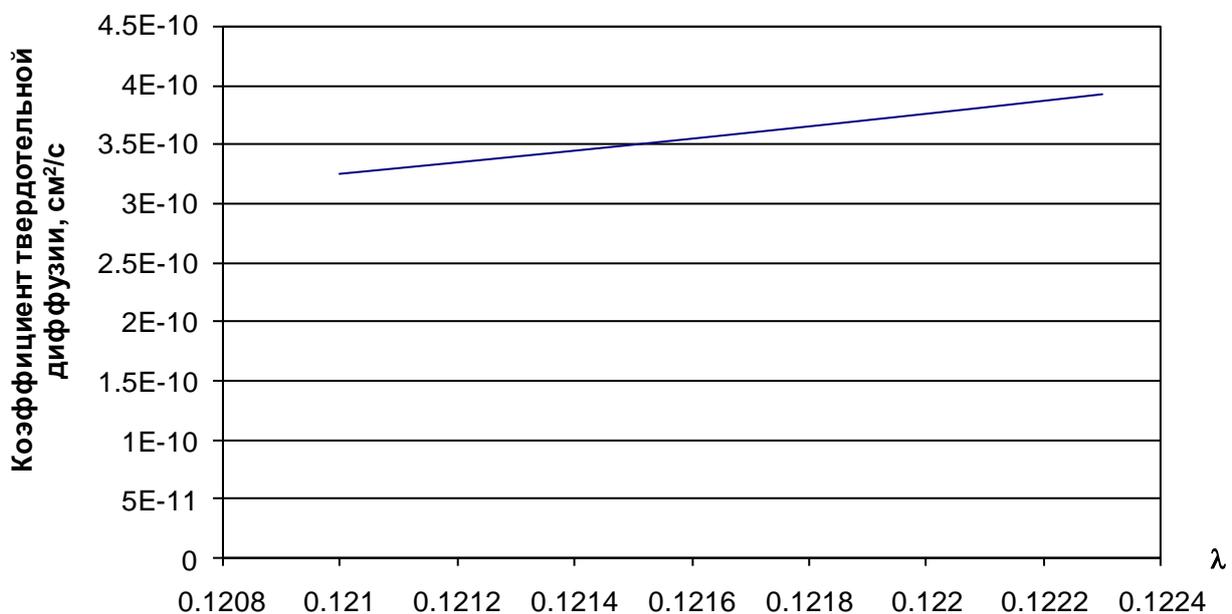


Рисунок 4 – Зависимость коэффициента твердотельной диффузии метана от параметра λ для выбросоопасного угля

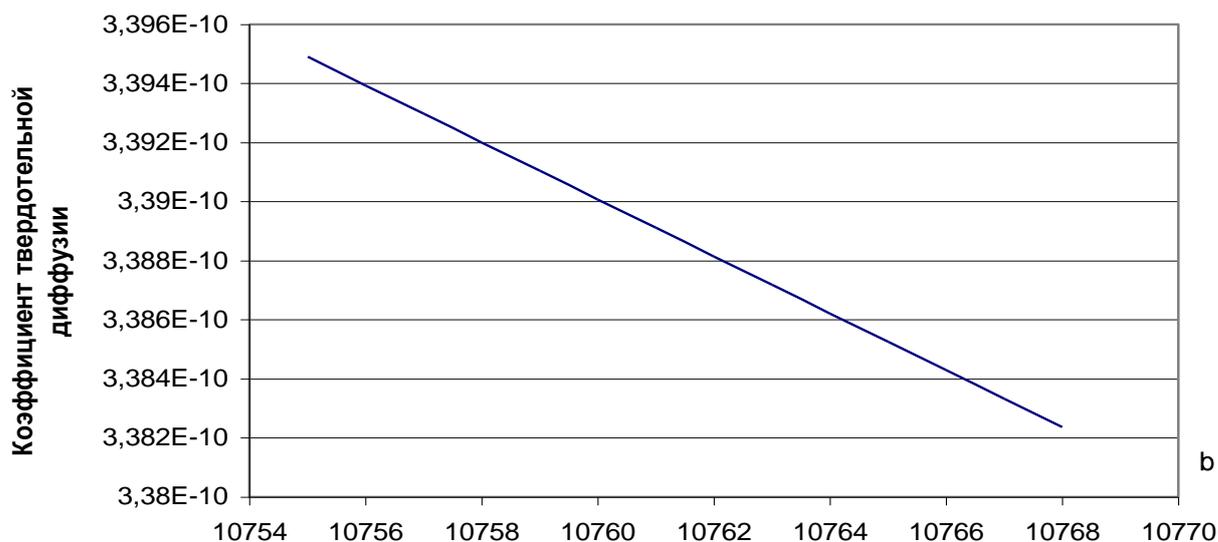
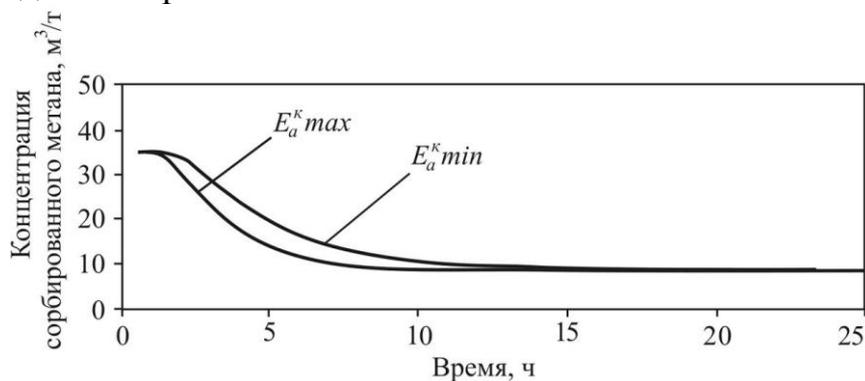


Рисунок 5 – Зависимость коэффициента твердотельной диффузии метана от параметра λ для выбросоопасного угля

Как видно из рисунка 5, зависимость коэффициента твердотельной диффузии метана от параметров λ и β , является линейной. В целом же коэффициент диффузии возрастает при увеличении параметра λ и уменьшается с возрастанием параметра β .

При установленных выше средних значений исходных данных, результаты расчета закономерности изменения концентрации десорбирующегося метана во времени в зависимости от энергии активации конформационных перестроек (E_a^k), а также ее среднего значения представлены на рисунках 6, 7.

Из графиков, представленных на рисунках 6 и 7 видно, что по истечении времени, концентрация сорбированного метана начинает уменьшаться. Причем десорбция происходит более активно при больших энергиях активации конформационных переходов в угольном пласте. Время выравнивания составляет 8 ч для E_{amax}^k и 11 ч для E_{amin}^k . То есть при больших энергиях активации конформационных переходов в угле выравнивание концентрации десорбирующегося метана происходит быстрее.



E_a^k - энергия активации конформационных перестроек:
 min – 50 кДж/моль, max – 100 – 150 кДж/моль.

Рисунок 6 – Пределы изменения концентрации десорбирующегося метана в выбросоопасном

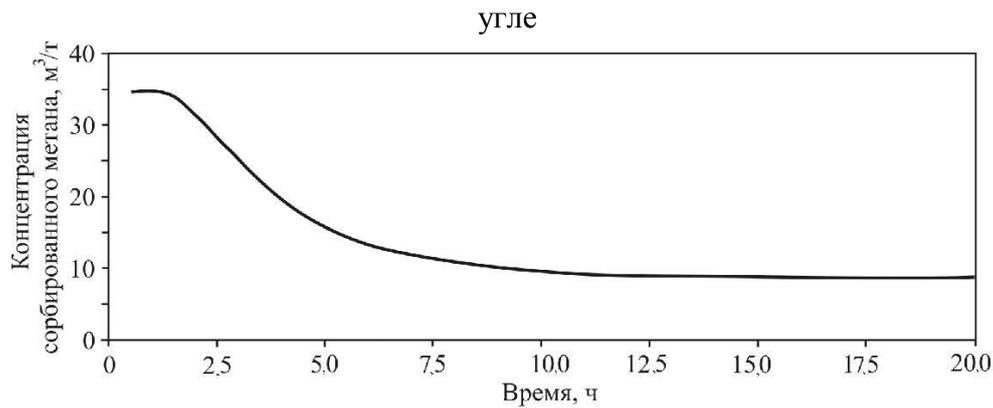


Рисунок 7 – Среднее значение изменения концентрации десорбирующегося метана в выбросоопасном угле.

Аппроксимирующие функции, описывающие усредненную закономерность изменения концентрации сорбированного метана в выбросоопасном угле (рис. 7), в зависимости от исследуемого периода времени представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Аппроксимирующие функции закономерности изменения концентрации сорбированного метана от времени в выбросоопасном пласте

Промежуток времени, ч	Аппроксимирующая функция изменения концентрации сорбированного метана $C(t)$ [м³/т]	Точность, %
2,5	$38,185e^{-0,1171t}$	94
5,0	$42,899e^{-0,1979t}$	97
10,0	$41,329e^{-0,1838t}$	98
15,0	$-10,645\text{Ln } t+34,109$	95
24,0	$-10,645\text{Ln } t+39,113$	95

Таким образом, из таблицы 2 видно, что в случае, если исследуемый при дегазации угольного массива промежуток времени составляет не более 10 ч, то закономерность изменения концентрации сорбированного метана описывается экспоненциальной функцией, а более 10 ч – логарифмической функцией.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Минеев, С.П. Активация десорбции метана в угольных пластах / С.П. Минеев, А.А. Прусова, М.Г. Корнилов – Днепропетровск: Вебер, 2007. – 252 с.
2. Саранчук, В. И. Надмолекулярная организация, структура и свойства угля / В.И. Саранчук, А.Т. Айруни, К.Е. Ковалев – К.: Наукова думка, 1988. – 190 с.
3. Годунов, С. К. Уравнения математической физики / С. К. Годунов – М.: Наука, 1979. – 393 с.
4. Ковалева, И. Б. О возможности использования физико-механических характеристик угля для оценки способности угольных пластов к метаноотдаче / И.Б. Ковалева, Е.А. Соловьева - [Электронный ресурс] – <http://www.seminar-1.narod.ru/sem10/d10.htm>. – М. ИПКОН РАН, 2001. – 6 с.– Семинар ИПКОН РАН– Заглавие с экрана.
5. Ольховиченко, А. Е. Прогноз выбросоопасности угольных пластов / А.Е. Ольховиченко – М. Недра, 1982 – 278 с.
6. HyperChem Release 5.0 for Windows Reference Manual. –Canada: Hypercube, 1996. – 349 p.

REFERENCES

1. Mineev, S.P., Prusova, A.A. and Kornilov, M.G. (2007), *Aktivatsiya desorbtsiyi metana v ugolnikh plastakh* [Activating desorption of methane in coal beds], Veber, Dnepropetrovsk, UA
2. Saranchuk, V.E., Iruni, A.T. and Kovalyev, K.E. (1988), *Nadmolekularnaya organizatsiya, struktura i svoystva uglya* [Over-molecular organization, structure and properties of coal], Naukova dumka, Kiev, SU.
3. Godunov, S. K. (1979), *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equalizations of mathematical physics], Nauka, Moscow, SU.
4. Kovaleva, E.B. and Solovyova, I.A. (2001), "About possibility of the use physics of mechanical descriptions of coal for the estimation of ability of coal beds to methane return", available at: <http://www.seminar-1.narod.ru/sem10/d10.htm>. Moskow, IPKON RAN, 2001. p. 6– Seminar IPKON RAN
5. Olhovichenko, A.I. (1982), *Prognoz vybrosoopasnosti ugolnikh plastov* [Prognosis of emission danger of coal beds], Nedra, Moskow, SU.
6. *HyperChem Release 5.0 for Windows Reference Manual* (1996) –Canada: Hypercube.

Об авторах

Минеев Сергей Павлович, доктор технических наук, профессор, зав. отделом управления динамическими проявлениями горного давления Института геотехнической механики им. Н.С. Полякова НАН Украины (ИГТМ НАН Украины), Днепропетровск, Украина, sergminee@gmail.com

Прусова Алла Андреевна, кандидат технических наук, старший научный сотрудник, старший научный сотрудник в лаборатории исследования структурных изменений горных пород Института геотехнической механики им. Н.С. Полякова НАН Украины (ИГТМ НАН Украины), Днепропетровск, Украина

Янжула Алексей Сергеевич, магистр, главный инженер ПАО «Шахтоуправление «Покровское», Красноармейск, Украина

Гулай Алексей Александрович, магистр, заместитель главного инженера ПАО «Шахтоуправление «Покровское», Красноармейск, Украина

Рыжова Светлана Алексеевна, инженер в отделе управления динамическими проявлениями горного давления Института геотехнической механики им. Н.С. Полякова НАН Украины (ИГТМ НАН Украины), Днепропетровск, Украина

About the authors

Mineev Sergei Pavlovich, Doctor of Technical Sciences (D.Sc.), Professor, Head of Department of Pressure Dinamic Control in Rocks of the N.S. Polyakov Institute of Geotechnical Mechanics National Academy Science of Ukraine (IGTM NAS of Ukraine), sergminee@gmail.com

Prusova Alla Andreevna, Candidate of Technical Sciences (Ph.D), Senior Reseacher, Senior Reseacher in Laboratory of research of structural changes of mountain breeds of the N.S. Polyakov Institute of Geotechnical Mechanics National Academy Science of Ukraine (IGTM NAS of Ukraine)

Yanzhula Aleksey Sergeevich, Master of Science, Chief Engineer of «Colliery Group, «Pokrovskoe», Krasnoarmeysk, Ukraine

Gulay Aleksey Alexandrovich, Master of Science, Deputy Chief Engineer of «Colliery Group, «Pokrovskoe», Krasnoarmeysk, Ukraine

Rizhova Svetlana Alekseevna, Master of Science, Engineer in the Department of Pressure Dinamic Control in Rocks of the N.S. Polyakov Institute of Geotechnical Mechanics National Academy Science of Ukraine (IGTM NAS of Ukraine)

Анотація. На основі молекулярної механіки виконано моделювання процесу десорбції метану із зони порушеності вугільного пласта з урахуванням міжмолекулярних і сорбційних взаємодій в системі "метан-вугілля". При моделюванні використовувалась теорія Пейса-Дейтинера, яка найповніше зв'язує параметри молекулярної структури вугілля, з його дифузійною здатністю і ґрунтованою на обліку локальних взаємодій між молекулами газу і сегментами структурного вугільного ланцюжка. Задачу про десорбцію метану в зоні порушеності вугільного пласта звели до задачі про дифузію метану у фрагменті вугілля, яка описується рівнянням дифузії в сферичних координатах. В результаті рішення цього рівняння методом Фур'є було отримано співвідношення, що визначає зміну концентрації метану, що де-

сорбується, в зоні порушеності вугільного пласта з урахуванням параметрів порушеності і упаковки вугільних фрагментів. За результатами розрахунку побудовані графічні залежності зміни концентрації метану, що десорбується, в часі від енергії активації конформаційних перебудов (E_a^k), а також її середнього значення. Встановлені апроксимуючі функції, що описують усереднену закономірність зміни концентрації сорбованого метану у викидонебезпечному вугіллі. Аналіз отриманих результатів показав, що десорбція відбувається активніше при великих енергіях активації конформаційних переходів у вугільному пласті. Час вирівнювання складає 8 ч для $E_a^k \max$ і 11 ч для $E_a^k \min$. Тобто, при великих енергіях активації конформаційних переходів у вугіллі вирівнювання концентрації метану, що десорбується, відбувається швидше. При цьому якщо досліджуваний проміжок часу складає не більше 10 г, то закономірність зміни концентрації сорбованого метану можна описати експоненціальною функцією, а більше 10 г - логарифмічною функцією.

Ключові слова: порушений вугільний пласт, метан, міжмолекулярні взаємодії, десорбція, дифузія, енергія активації.

Abstract. On the basis of molecular mechanics, a model of a process of methane desorption from a disturbed coal-bed zone was created with taking into account intermolecular and sorption interactions in the system "methane-coal". The model is based on the Peys-Deytiner theory, which most fully connects parameters of the coal molecular structure with the coal diffusibility, and takes into account local interactions between the gas molecules and segments of coal structural chain. The problem of methane desorption in a disturbed coal-bed zone was reduced to a problem of methane diffusion in a coal fragment; the problem is described by an equation of diffusion in spherical coordinates with a coefficient of diffusion with taking into account intermolecular interactions and energy of methane-desorption activation in coal. As a result of solving the equation of diffusion by method of Fourier correlation, a ratio was obtained which specified a change of desorbing-methane concentration in the disturbed coal-bed zone with taking into account parameters of the coal fragments' disturbance and packing. The calculations made helped building graphic dependences between in-time changes of desorbing-methane concentration and energy of activated conformational transformations in the disturbed coal microstructure (E_a^k).

Approximating functions describing average regularity of changing retained-methane concentration in outburst-prone coal were specified. The analysis of the results showed that desorption was more intensive at high energies of activated conformational transformations in a coal bed. Smoothing time makes 8 hours for $E_a^k \max$ and 11 hours for $E_a^k \min$. That is, at high energies of activated conformational transformations in a coal microstructure, smoothing of desorbing-methane concentration is quicker. And, if an investigated interval of time makes not more than 10 hours, then physics of changed retained-methane concentration can be described by an exponential function, and in case of more than 10 hours - by a logarithmic function.

Keywords: disturbed coal bed, methane, intermolecular interactions, desorption, diffusion, activating energy.

Стаття постуила в редакцію 18.09.2015

Рекомендовано к печати д-ром техн. наук В.Г. Шевченко