

ров, а также за счёт применения приспособлений для отбора угольных проб из скважин.

Из всего сказанного может быть сделан вывод, что при десорбиметрии необходима фиксация во времени момента выбуривания пробы. Первые два-три отсчёта по десорбиметру не следует применять для расчёта показателей газоносности и выбросоопасности пласта (количество отбрасываемых значений P или q следует устанавливать по графику кинетики десорбции). В настоящее время десорбиметрическое тестирование призабойной зоны следует проводить при помощи прямого измерения скорости десорбции. Способы десорбиметрического тестирования, основанные на изменении объёма газа или его давления, должны дорабатываться в процессе дополнительных исследований. Необходимы приспособления для отбора штыба и автоматизация считывания показателей шкалы десорбиметра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Разработка методов и приборов для оценки выбросоопасности / Ноак Е., Янвс Х. // Глюкауф, 1981.- № 13 - с. 10-15.
2. Десорбиметрия как способ прогноза внезапных выбросов./ Ирисов С.Г.// Уголь Украины, 1983.- № 9. - с. 37-38.
3. Закономерность выделения метана из отбитого угля / Скларов Л.А. // Разработка месторождений полезных ископаемых. Респ. межвед. науч.-техн. сб., 1965.- вып. 4 - с. 115-119.
4. Некоторые результаты исследований газоносности призабойной зоны выбросоопасных угольных пластов в условиях шахты им. А.Ф. Засядько / Бокий Б.В., Ирисов С.Г. // Известия Донецкого горного института, 2001.- № 1. - с. 91-92.

УДК 622.816

В.В. Лукинов, В.А. Гончаренко, Д.А. Суворов
ПЕРСПЕКТИВА ИЗУЧЕНИЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМЕ «УГОЛЬ-ГАЗ» С ПОЗИЦИИ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Шляхом удосконалювання моделі Ленгмюра пропонується вивчати механізм сорбції в системі «вугілля-газ».

THE PERSPECTIVE OF STUDY GAS-DYNAMICAL PROCESSES IN SYSTEM "COAL-GAS" WITH POSITION OF QUANT STATISTICAL MECHANIC

By means of perfection of Lengmur's model the study mechanism of sorbtion in system "coal-gas" was proposed.

При рассмотрении процессов сорбции и выделения газа из угольных пластов, основополагающим моментом для построения модели данных явлений является изучение структуры сорбирующего вещества. Сорбционное пространство угольного вещества представляет собой микропористую структуру, образованную микропорами, диаметр которых всего в несколько раз больше диаметра молекул сорбата [1]. Этот факт вызывает неоднозначную трактовку различных физических параметров при рассмотрении механизма сорбции газа

угольным веществом.

В связи с этим можно выделить два направления в моделировании процессов сорбции угольным веществом.

К первому направлению можно отнести изучение механизма сорбции с позиции равновесных процессов. Это означает, что в результате развивающихся процессов в системе «уголь-газ», в конечном итоге система приходит к равновесному состоянию, имеющему стабильные значения различных физических параметров (давление, температура и т.п.). Именно в этом термодинамически равновесном состоянии изучаются основные физико-химические параметры системы.

Однако данных исследований по равновесной сорбции недостаточно, чтобы можно было говорить о структуре угольного вещества.

На практике это связано с тем, что процессы сорбции являются по своей сути неравновесными. Изменение физических параметров, определяющих механизм сорбции, происходит непрерывно во времени, а равновесное состояние – это лишь результат всех этих изменений. Используемые математические модели процессов, происходящих в системе «уголь-газ», также отражают макроскопические параметры (давление, температуру), которые не учитывают неравновесные изменения, происходящие с этой системой на микроуровне [2].

Ко второму направлению можно отнести изучение процессов сорбции и десорбции газа угольным веществом, основанное на рассмотрении неравновесных процессов, происходящих в массиве. Однако и этот подход имеет ряд недостатков. При рассмотрении процессов, происходящих на микроуровне и имеющих неравновесную природу, основное внимание уделяется кинетическим и диффузионным явлениям на микроуровне в системе «уголь-газ».

Таким образом, результатом изучения механизма сорбции с этой позиции, является набор динамических параметров, характеризующих изменение системы в целом, без детального описания процессов, происходящих на микроуровне (отдельные микротрещины и микропоры) [3].

Рассматривая явления, происходящие в системе «уголь-газ», необходимо отметить, что при определенных внешних условиях возможно усиление или ослабление скорости процессов сорбции и десорбции. Используя для анализа этих явлений вышеизложенные два подхода, невозможно однозначно проследить динамику этих процессов, так как они не учитывают изменений в системе на микроуровне.

Учитывая это, можно применить следующий подход к рассмотрению данной проблемы, основанный на более детальном изучении процессов, происходящих в системе «уголь-газ» с позиции статистической квантовой механики [4]. Следует отметить, что данные, полученные с использованием методов рентгеноструктурного анализа [5], показывают, что микропоры неравномерно распределены во всем объеме угольного вещества и образуют объемные структуры небольших размеров, состоящих из конечного числа микропор. Эти объемные структуры и принимаются за сорбирующую среду с равномерно распределенными в пространстве сорбирующими центрами. Предположим, что количество таких центров для данной сорбирующей области равно N . Найдем аналитиче-

ское выражение для коэффициента адсорбции θ . Учитывая то, что N_1 атомов газа могут адсорбироваться на эти N центры $\frac{N!}{N_1!(N-N_1)!}$ способами, общая энергия адсорбируемых атомов газа понизится на энергию ΔE_{N_1} :

$$\Delta E_{N_1} = -N_1 \varepsilon_0,$$

где ε_0 – потенциальная энергия связи атома с сорбирующим центром.

Статистическая сумма N_1 адсорбированных атомов равна [6]:

$$Z(N_1) = \sum e^{-\frac{1}{kT} \Delta E_{N_1}} = \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} \exp\left(\frac{1}{kT} N_1 \varepsilon_0\right),$$

где Z – статистическая сумма газа; k – постоянная Больцмана; T – температура.

В случае происходящих процессов сорбции и десорбции число сорбированных частиц является величиной переменной. Следовательно, для нее необходимо применить Т- μ распределение [7].

Для данного распределения большая каноническая статистическая система имеет вид:

$$\Xi = \sum_{N_1=0}^N Z_{N_1} e^{\frac{1}{kT} N_1 \mu} = \sum_{N_1=0}^N \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} \left[\exp\left(\frac{1}{kT} \cdot (\varepsilon_0 + \mu)\right) \right]^{N_1} = \left[1 + e^{\frac{1}{kT}(\varepsilon_0 + \mu)} \right]^N,$$

где μ - химический потенциал.

Физически величина μ характеризует следующее: для систем с переменным числом частиц изменение внутренней энергии газа будет иметь вид:

$$dU = TdS - PdS + \mu dN,$$

или другими словами химический потенциал может быть истолкован как термодинамический потенциал, отнесенный к одной частице:

$$\mu = \left(\frac{\partial \phi}{\partial N} \right)_{T,P} = \phi(T, P, 1)$$

$$\phi = \mu(T, P) \cdot N$$

$$\mu(T, P) = \frac{\phi}{N},$$

где $\phi = U - TS + PV$ - термодинамический потенциал Гиббса.

Статистически химический потенциал определяется из соотношения:

$$\frac{\partial S(E, N)}{\partial N} = -\frac{\mu}{T}, \quad (1)$$

здесь $S(E, N)$ - значение энтропии для сорбируемого газа с энергией E и числом частиц газа N .

Вероятность того, что N_1 атомов будет сорбировано равна:

$$P_r(N_1) = \frac{Z_{N_1} \exp\left(\frac{1}{kT} N_1\right)}{\Xi}.$$

Среднее число адсорбированных атомов равно:

$$\begin{aligned} \overline{N_1} &= \sum_{N_1=0}^N N_1 P_r(N_1) = \frac{1}{\Xi} \sum_{N_1=0}^N N_1 e^{\beta N_1 \mu} Z_{N_1} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi = \\ &= \frac{1}{\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial \mu} \left[1 + e^{\beta(\epsilon_0 + \mu)} \right]^N = \frac{N}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left[1 + e^{\beta(\epsilon_0 + \mu)} \right] \end{aligned}$$

где $\beta = \frac{1}{kT}$.

При этом для коэффициента адсорбции имеем:

$$\theta = \frac{\overline{N_1}}{N} = \frac{\frac{N}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left[1 + e^{\beta(\epsilon_0 + \mu)} \right]}{N} = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\epsilon_0 + \mu)}}.$$

Таким образом коэффициент адсорбции угля зависит как от свойств газа (величина μ), так и от свойств угля (ϵ_0).

Следует отметить, что в большинстве случаев при изучении газодинамических процессов, происходящих в угольных массивах, для расчета коэффициента адсорбции используется изотерма Ленгмюра, которая является следствием использования в выражении для θ вместо фактического значения величины химического потенциала μ [8], значение $\mu_{уд.}$ для идеального газа, т.е.:

$$\mu_{уд.} = kT \ln \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{8\pi m kT} \right)^{3/2} = kT \ln \left[\left(\frac{h^2}{2\pi m kT} \right)^{3/2} \cdot \frac{P}{kT} \right],$$

где h – постоянная Планка.

Такой подход не является корректным, так как приводит к тому, что не учитывается ряд факторов, влияющих на ход газодинамических явлений. К одному

из таких факторов можно отнести теоретически обоснованную зависимость изменения коэффициента десорбции угля от величины химического потенциала адсорбируемого газа.

Присутствующий в уравнениях параметр ϵ_0 характеризует энергию связи адсорбирующего центра и адсорбируемых атомов газа. В различных теориях адсорбции этот параметр чаще всего находится методом моделирования. В общем случае, потенциал взаимодействия между адсорбируемым атомом и центром адсорбции, является собственным значением оператора энергии при решении нестационарного уравнения Шредингера. Однако в теории адсорбции этот параметр понимается как решение стационарной задачи о поведении атома вблизи сорбирующего центра. Задача о поведении газа вблизи сорбирующей поверхности является многопараметрической и в конечном счете сводится к практически неразрешимой задаче о N_1 взаимодействующих атомах, при наличии N адсорбирующих центров, где $N_1, N \rightarrow \infty$. Решение такой задачи действительно привело бы к определению параметра ϵ_0 . Однако даже в этом случае точное значение ϵ_0 не раскрывает полностью механизма сорбции для системы «уголь-газ» на данной стадии метаморфизма. Так как процессы, происходящие в угольных пластах, являются динамическими и так как явления сорбции и десорбции газа угольным массивом являются следствием этих процессов, необходимо в уравнениях, определяющих коэффициент сорбции θ , рассматривать параметр ϵ_0 как характеристику взаимодействия газа с угольным веществом на данной стадии метаморфизма. Такой подход означает учет динамики изменения энергии взаимодействия сорбента с сорбатом в системе «уголь-газ» с позиции процессов метаморфизма, происходящих в угольных массивах.

Вместе с тем следует отметить, что теория адсорбции, предложенная Ленгмюром, базируется на следующих допущениях:

1. предполагается, что адсорбирующая поверхность представляет собой набор энергетических центров, которые адсорбируют молекулы газа;
2. каждый такой центр адсорбирует только одну молекулу;
3. адсорбция на данном энергетическом центре не изменяет адсорбцию на других центрах.

Уравнение Ленгмюра можно представить в виде [9]:

$$a = a_m \frac{b \cdot p}{1 + b \cdot p},$$

где b – адсорбционный коэффициент, равный K_p^{-1} ; K_p – постоянная равновесия; a – число занятых адсорбционных центров; a_m – полное число адсорбционных центров; p – давление газа.

Химизм процесса адсорбции определяет связь константы равновесия $K_p = b^{-1}$ со стандартным значением изобарного потенциала:

$$\ln b = \frac{\Delta G^0}{RT} = \frac{\Delta H^0}{RT} - \frac{\Delta S^0}{R}$$

или

$$b = e^{-\Delta S^0 / R} \cdot e^{\Delta H^0 / RT},$$

И тем самым модель Ленгмюра характеризует то [10], что дифференциальная теплота ΔH^0 и энтропия S^0 не зависят от степени заполнения поверхности адсорбата. Физически это означает, что при рассмотрении системы «уголь-газ» необходимо в равенстве (1) энтропию сорбируемого газа считать величиной, не зависящей от поведения сорбата, а это означает независимость её и от химического потенциала, определяющего физико-химические свойства всей системы.

Классическая модель Ленгмюра рассматривает всю адсорбирующую систему как совокупность энергетических центров, сорбирующих молекулы газа, без учета физических свойств самого газа. Если же рассматривать сорбент как совокупность микропор и микротрещин, на которых происходят процессы сорбции и десорбции, то физически необходимо рассматривать сорбат не как систему, обладающую свойствами идеального газа, а как систему, обладающую определенными физико-химическими свойствами, в частности с зависящим от T значением химического потенциала.

Все параметры, определяющие значения коэффициента сорбции и десорбции, определяются динамикой изменения газодинамических процессов, а это значит, что для их расчета необходимо использовать физико-химические параметры, зависящие от термодинамического состояния системы. К таким параметрам относятся потенциал взаимодействия газа с сорбирующей поверхностью и величина химического потенциала газа. Изучить влияние данных параметров на поведение системы «уголь-газ» можно только методами квантовой статистической механики.

Таким образом, при рассмотрении газодинамических явлений, происходящих в системе «уголь-газ», необходимо учитывать, что в процессе сорбции и десорбции газа изменяются не только основные термодинамические параметры угольного массива, но происходит изменение числа атомов газа в сорбирующих микропорах угля. Использование изотерм Ленгмюра при расчете коэффициента сорбции учитывает изменение основных термодинамических параметров на макроуровне, т.е. в объемах угольного массива намного превышающем объемы микротрещин и микропор. А это приводит к потере ряда эффектов, связанных с микроструктурой угля.

Поэтому более точным и корректным является метод расчета коэффициента сорбции, основанный на методе квантовой статистической механики, учитывающей не только изменение термодинамических параметров всей макросистемы «уголь-газ», но и зависимость данного коэффициента от квантовых параметров потенциала взаимодействия сорбируемого газа с угольным массивом и химического потенциала этого газа. Использование методов квантовой статистической механики позволяет не только провести корректный расчет этих величин, но и проследить характер изменения этих величин в ходе физико-

химических процессов, протекающих как на макро- так и на микроуровне в угольных массивах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Саранчук В.И., Айруни А.Т., Ковалев К.Е. «Надмолекулярная организация, структура и свойства угля». Киев. Наукова Думка, 1988. – 190 с.
2. Айруни А.Т. «Прогнозирование и предотвращение газодинамических явлений в угольных шахтах». – М.: Наука, 1987. – 310 с.
3. Петросян А.Э. «Выделение метана в угольных шахтах». М. Наука. 1975.- 175 с.
4. К. Хуанг «Статистическая механика», «Мир», 1966. - 420 с.
5. Артемов А.В., Бинеев Э.А., Степовой Г.И. «Исследования пористой структуры ископаемых углей методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей». Изв. научного центра высшей школы. Технические науки. – 1979. - №4 – С. 92-94.
6. Р. Кубо «Статистическая механика» – М. «Мир», - 452 с.
7. Боголюбов Н.Н. «Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, 1946. – 310с.
8. Бранауэр С. «Адсорбция газов и паров», пер. с англ.. 1948. – 315 с.
9. де Бур Я. «Динамический характер адсорбции». пер. с англ. М., 1962. –254 с.
10. Адсорбция и пористость, под. ред. М.М. Дубинина, М. 1976. – 320 с.

УДК 622.451.001.57:533.6

Т.В. Бунько

ЗАКОНОМЕРНОСТИ, СВЯЗЫВАЮЩИЕ СТРУКТУРУ И АЭРОДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ШАХТНОЙ ВЕНТИЛЯЦИОННОЙ СЕТИ

Наведено результати досліджень якісних та кількісних закономірностей, які пов'язують структуру та аеродинамічні параметри шахтної вентиляційної мережі.

REGULARITIES, WHICH CONNECTS THE STRUCTURE AND AIR- DYNAMICAL PARAMETERS OF MINE-VENTILATION NETWORK

The results of investigations of the qualitative and quantitative regularities, which connects the structure and air-dynamics parameters of mine-ventilation network was bring.

Шахтная вентиляционная сеть (ШВС), как технологическая структура, характеризуется двумя разноплановыми наборами параметров:

- топологическими (ветви, узлы, специальным образом закодированные места установки средств активного и пассивного регулирования воздушных потоков и главных вентиляторных установок (ГВУ), и т.д.);
- аэродинамическими (аэродинамическое сопротивление, расход воздуха, депрессия, длина, площадь поперечного сечения ветви, температура воздуха в ней, и т.д.).

Изучение указанных наборов параметров и использование их для оптимизации потокораспределения в ШВС производится, как правило, отдельно. Именно, строится структура ШВС и для ее элементов определяются замерным или аналитическим путем значения аэродинамических параметров, после чего сформированная имитационная модель сети используется для проведения оптимизационных расчетов.

Вместе с тем, как показали исследования последних лет, аэродинамические параметры выработок шахты не всегда определяются лишь их геометрическими