

УДК 622.272.6

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ И МОДЕЛЕЙ РАСЧЕТА
СОРБЦИОННОЙ МЕТАНОЕМКОСТИ УГЛЕЙ
НА ОСНОВЕ ИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

В. Н. Опарин^{1,2}, Т. А. Киряева¹, В. П. Потапов³

¹Институт горного дела им. Н. А. Чинакала СО РАН,

E-mail: coalmetan@mail.ru, Красный проспект, 54, 630091, г. Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Россия

³Кемеровский филиал Института вычислительных технологий СО РАН,

E-mail: ict@ict.nsc.ru, ул. Рукавишниковая, 21, 650025, г. Кемерово, Россия

Исследовано влияние физико-химических параметров природных углей на сорбционную метаноемкость и разработан метод расчета сорбционной метаноемкости для условий трехфазного состояния метана. Установлено, что на глубине до 300 м сорбционная метаноемкость, измеренная в лаборатории, может на 30 % превышать значения природной газоносности по геологоразведочным данным, а изменение термодинамического состояния системы “уголь – метан” приводит к необратимым физико-химическим последствиям, выражающимся в изменении соотношений агрегатных состояний ее основных компонентов. Выявлено отсутствие линейной связи между природной газоносностью угольного пласта и сорбционной метаноемкостью по глубине залегания. Приведены результаты применения технологии BIG DATA для обработки и анализа больших объемов и потоков горнотехнической информации. Показано соответствие теоретически предсказанных на основе разработанного метода и экспериментальных данных по метаноемкости угольных пластов Кузбасса.

Углеметановый пласт, влажность, пористость, выход летучих, петрография, сорбция, метаноемкость, потоковая обработка геомеханических и геодинамических данных, неструктурированные массивы информации, изотермы Ленгмюра

Формы связи между углем и метаном оказывают существенное влияние на энергетику внезапных выбросов угля и газа. В общепринятой триаде природных факторов, способствующих внезапным выбросам, — горное давление, метаносность пласта и структура угля — два последних следует объединить, так как физико-химическая система “сорбент (уголь)–сорбат (метан)” составляет единое целое. Основываясь на представлениях об углеметановом пласте как системе “сорбент–сорбат”, во второй половине прошлого века в СССР и за рубежом проведены широкомасштабные исследования этих особенностей. Получены эмпирические зависимости для расчета сорбционной метаноемкости углей, служащие значимым показателем при оценке параметров динамических газопроявлений [1], кинетики газоистощения углеметановых пластов и отбитого угля в процессе ведения горных работ [2, 3].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 17-17-01282).

Разработан и широко применяется в промышленности метод определения природной метаносности пластов по метаноемкости угля при одновременном определении газового давления и температуры угольного пласта. Рассчитываемое значение используется для уточнения изменений метаносности угольных пластов при геологоразведочных работах [4]. Величина метаноемкости как количество поглощенного в определенных условиях углем метана связана с физической структурой угольного вещества — высокопористого природного сорбента [5]. Физико-химические особенности этого процесса весьма сложны и являются предметом изучения в настоящее время.

Глубокие и всесторонние выводы из сорбционных исследований в конце XX в. обеспечили их высокую ценность при решении практически важных задач рудничной газодинамики. Применительно к проблемам безопасности отработки угольных месторождений и газо-массообменным процессам при извлечении метана из продуктивных пластов, в физико-химическом аспекте важнейшую роль играют адсорбционные и абсорбционные процессы в угольном веществе различной стадии метаморфизма, а значит, его молекулярная и надмолекулярная структуры, пористость и трещиноватость — важнейшие характеристики их метаноемкости [6].

Метаноемкость тесно связана с физико-химическими свойствами углей и физико-механической структурой угольного вещества: пористостью, влажностью, зольностью, петрографическим составом и выходом летучих. Ставились задачи: установить, какие физико-химические параметры природных углей оказывают наибольшее влияние на их сорбционную метаноемкость, и разработать метод расчета соответствующих параметров сорбционной метаноемкости.

Для описания процесса адсорбции на поверхности раздела фаз предложено несколько физико-химических теорий [7]. При анализе изотерм сорбции газов в угольных порах аппроксимацию результатов натурных измерений принято выполнять с помощью уравнения Ленгмюра, которое для углей имеет вид

$$X_{\text{л}} = \frac{abP}{1 + bP}, \quad (1)$$

где $X_{\text{л}}$ — сорбционная метаноемкость, м³/т; a — предельная сорбционная метаноемкость, м³/т; b — коэффициент сорбции, 1/МПа; P — давление газа, МПа.

Оценка приемлемости изложенного подхода проводилась с использованием обширных баз геологоразведочных данных, сформированных на основании геолого-газовых разрезов по 57 разведочным линиям Березово-Бирюлинского, Ленинского и Чертинского месторождений, а также Кедровско-Крохоловской синклинали (Хорошеборский участок) Кузбасса [6]. Общая база данных включала 341 скважину и 1805 пластопересечений. Оценка проводилась вне зон “влияния” установленных геологических нарушений и только по “рабочим пластам” в диапазоне изменения их свойств и условий залегания: мощность 2–11 м; угол падения 1–45°; глубина залегания до 925 м; влажность 2–6 %; зольность 2–50 %; выход летучих 14–43 %.

ВЛИЯНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРИРОДНЫХ УГЛЕЙ НА МЕТАНОЕМКОСТЬ

Изучение влияния стадии метаморфизма углей на метаноемкость. Как известно, адсорбционная способность ископаемых углей в значительной степени зависит от их метаморфизма [8, 9]. В качестве показателя стадии метаморфизма углей может быть использован выход летучих веществ.

По мере развития метаморфических процессов в угольном веществе происходят различные изменения в сорбционной активности ископаемого угля. Так, в работе [10] установлено, что сорбционная емкость “бельгийских каменных углей” по отношению к метану медленно нарастает с уменьшением выхода летучих веществ, но в точке, соответствующей примерно 20 %, зависимость резко меняется и увеличение сорбционной емкости идет заметно быстрее. Предполагается, что причина роста сорбционной емкости — освобождение в процессе метаморфизма коллоидальной структуры каменных углей от пропитывающих их битумов.

В [11, 12] подтверждена общая закономерность роста сорбционной емкости для углей месторождений Советского Союза с увеличением степени их метаморфизма, но разброс экспериментальных данных оказался очень велик (угли с одинаковым выходом летучих веществ различаются по сорбционной емкости в 3 раза). С этим связаны предположения о наличии нескольких факторов, влияющих на сорбционные свойства углей.

При метаморфизме углей изменяются как величина, так и свойства их поверхности, т. е. именно то, что определяет способность углей “удерживать газы”. Как отмечается в [12], основным процессом при метаморфизме ископаемых углей является “очищение” их поверхностей от боковых групп химических соединений — полимеризированных линейных цепочек. С уходом из угольного вещества “боковых цепочек” производится обогащение угля углеродом, а поверхность угля, освобожденная от других атомов, становится более свободной для поглощения молекул метана. Таким образом, в процессе метаморфизма каменных углей происходит их активация как сорбентов, т. е. усиление способности к поглощению газов. Эта активация получила название *природной* — в отличие от *искусственной*, отмечающейся при получении активированных углей для химической промышленности. В результате природной активации адсорбционная способность каменных углей возрастает со степенью метаморфизма, т. е. в направлении от газовых углей к антрацитам [9].

Для бурых и длиннопламенных углей зависимость сорбционной способности по отношению к газам имеет несколько иной характер [6]. По мере уменьшения выхода летучих веществ, т. е. с метаморфизмом бурых углей, происходит их природная активация, наблюдаются кроме адсорбционных еще абсорбционные процессы. Это связано с тем, что “скелет” вещества бурых углей является “нежестким” и молекулы газов могут внедряться в твердое вещество, растворяясь в нем. Общая газоемкость бурых углей довольно высокая по сравнению с малометаморфизованными каменными углями. По мере метаморфизации ископаемых углей жесткость “скелета” угольного вещества возрастает и способность углей к абсорбции уменьшается, т. е. отмечается увеличение объема угля (разбухание). Количество хемосорбированного газа, по-видимому, не играет большой роли в балансе поглощенного углем газа [13].

Сорбция метана на угольном образце значительно отличается от таковой в угольном пласте. В первом случае изменяется объем образца угля, во втором — процесс протекает при практически постоянном объеме во всесторонне сжатом (неразгруженном) угольном пласте. При этом в метанонасыщенном пласте возникают напряжения набухания порядка 102 МПа, которые могут заметно сместить сорбционное равновесие.

Таким образом, существует тесная связь между метаноемкостью и стадиями метаморфизма углей.

Изучение влияния пористости, зольности, влажности углей на их метаноемкость. Изучение пористости важно для уточнения знаний о коллекторских свойствах углей, в частности ее влияния на сорбционную метаноемкость. Для этого, с использованием данных каталога метаноемкости углей Кузбасса [14], осуществлялся поиск возможных закономерностей изменения пористости от выхода летучих веществ (рис. 1).

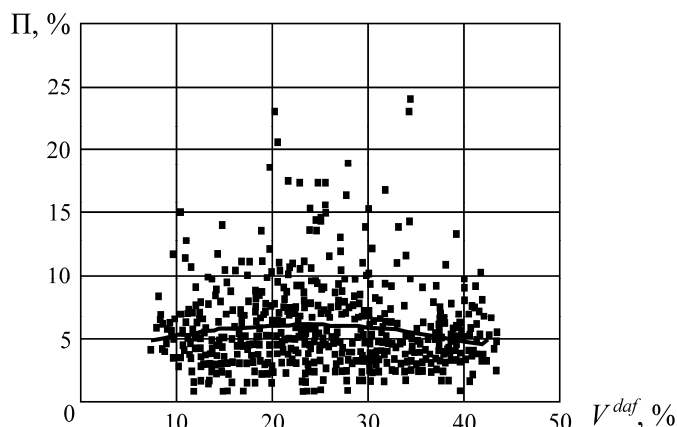


Рис. 1. Зависимость между пористостью Π и выходом летучих веществ V^{daf} для углей Кузбасса: линия тренда представлена полиномом 2-й степени

Видно, что пористость природных углей слабо зависит от выхода летучих веществ (стадий метаморфизма): средние значения (при сравнительно высокой дисперсии данных) описываются слабо “выпуклой” функцией. Поэтому ее влияние на выход летучих веществ в наших дальнейших исследованиях метаноемкости углей учтено не будет.

В [15] отмечается, что нагнетание жидкости в угольный массив приводит к снижению газо-выделения, а это в свою очередь уменьшает возможность внезапных выбросов угля и газа. В результате увлажнения пласта в угле усиливается проявление его пластических свойств, понижаются прочность и скорость газовой выделения. Следовательно, для более точной оценки выбросоопасности угольных пластов необходимо учитывать газовый фактор. Упругую энергию, которую способен выделить расширяющийся газ из угля при его разрушении за время, сопоставимое со временем внезапного выброса (не более 30 с), а также с учетом того, что давление газа при выбросе падает от P_1 до 0.1 МПа, предложено рассчитывать по формуле

$$E = 800V^{daf} \left[1 - \left(\frac{1}{P_1} \right)^{0.24} \right], \quad (2)$$

где V^{daf} — выход летучих веществ, %.

Для исследований влияния влажности [16] использовалась электронная база геологоразведочных данных по 15 600 пластопересечениям 11 месторождений Кузбасса, охватывающая все стратиграфические структуры бассейна. Упругая энергия (2) сопоставлялась с природной влажностью углей по этой базе, полученные результаты представлены на рис. 2. Используемая здесь “рядность” обусловлена известным округлением значений влажности при ее измерении. При увеличении природной влажности углей упругая энергия, которую способен развивать расширяющийся газ за счет внутреннего разрушения, уменьшается. **Увеличение влажности угольного пласта даже на 2 % практически вдвое снижает энергию его газовой компоненты.**

На основе анализа получена зависимость, приведенная на рис. 3. Линия тренда (полином 4-й степени) показывает возрастание влажности угольных пластов при увеличении выхода летучих до 40–45 % (бурые угли). Согласно [16], чем выше стадия метаморфизма углей, тем меньше их влагонасыщение. Высокая влагоемкость бурых углей связана с достаточно “рыхлой” структурой “скелета” и, следовательно, с абсорбцией влаги; в каменных углях средних стадий метаморфизма (от ОС до Ж) содержание влаги колеблется от 1 до 2 %, составляя в среднем около 1.5 % [16]. Данные каталога [14] подтверждают эти выводы, но уже на примере установленной нами зависимости влажности продуктивных пластов от выхода летучих веществ (рис. 3).

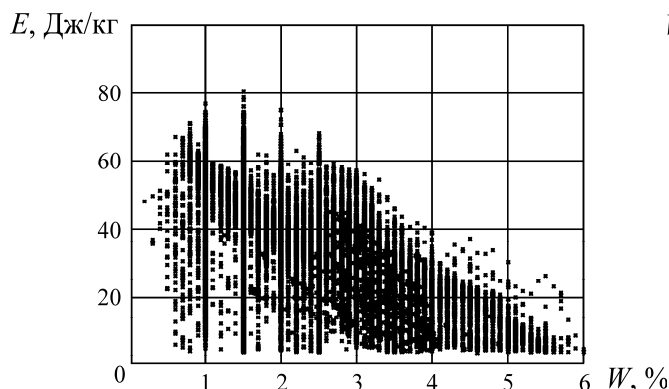


Рис. 2. Изменение удельной энергии E расширяющегося газа с увеличением влажности W угольных пластов

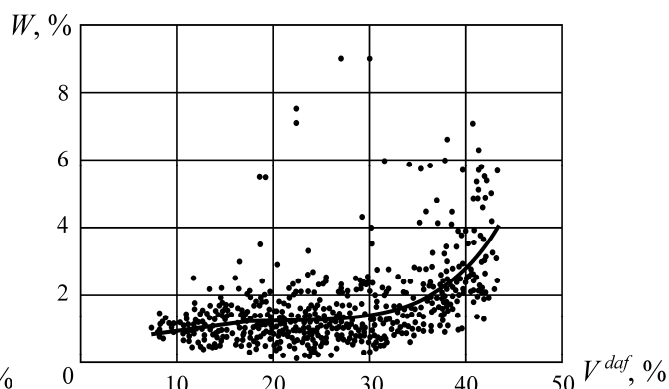


Рис. 3. Зависимость влажности W угольных пластов от выхода летучих веществ V^{daf}

Согласно модели Ван-Кревелена и Ж. Шуера [17], макромолекула угля состоит из ядра ароматического соединения и боковых цепей (так называемой бахромы), содержащих группы CO , CH_2 , NH и др. По классификации, представленной в [18], такие сорбенты могут характеризоваться как “неспецифическими”, так и “специфическими” взаимодействиями. Сорбция молекул со сферически симметричными оболочками (например, насыщенные углеводороды, к которым относится метан) будет иметь неспецифические взаимодействия, а сорбция молекул с группами OH (например, вода) — специфические. Следовательно, молекулы воды обладают большим “сродством” к поверхности угля, чем молекулы метана [16], и присутствие воды в угле значительно снижает его сорбционную метаноемкость.

Для того чтобы управлять процессом увлажнения угольных пластов с целью профилактики внезапных выбросов, необходимо установление закономерностей “внедрения” воды в уголь, позволяющих рассчитать оптимальные условия увлажнения для конкретных горно-геологических условий. Как указывалось в [19], газовыделение из угольных пластов складывается из процессов диффузии газа из тонких пор в трещины угля и фильтрации его из трещин в выработку. В угольном пласте, когда трещины “зажаты”, выделение газа происходит настолько медленно, что его концентрация в тонких порах угля обусловлена давлением газа в трещинах. В этом случае скорость газовыделения описывается законами ламинарного течения и пропорциональна газопроницаемости угля. Если уголь разгружен от горного давления и трещины открыты, то газовыделение из угля только в начальный момент зависит от его газопроницаемости. В дальнейшем, поскольку давление в трещинах быстро падает, равновесие концентрации газа в тонких порах угля и в трещинах нарушается, а скорость газовыделения начинает определяться диффузией газа в тонких порах [20].

По мере проникновения воды в поры угля внутреннее давление заключенного в них газа возрастает, в результате чего растет растворимость метана в воде. Это может привести к более глубокому проникновению воды в уголь и диффузии метана через воду из угля, т. е. к его дегазации. При высоких давлениях нагнетания движущаяся в угле вода распространяется по линиям наименьшего сопротивления — трещинам, оставляя неувлажненными отдельные участки. При этом возрастает количество сорбированного газа в трещинах и макропорах, поверхность которых покрывается пузырьками газа, препятствующими смачиванию ее водой. При невысоких перепадах давления между водой и газом в угле вода равномернее смачивает его поверхность и проникает в тонкие поры. При разрушении угля вода удерживается в тонких порах за

счет капиллярных сил, что снижает скорость газовыделения [15]. **Таким образом, меняя давление и длительность воздействия воды на угольный пласт, можно получить различные эффекты: добиваться “торможения” газовыделения или дегазировать угольный пласт.** Результаты [21] подтверждают известный факт снижения газодинамической активности при увлажнении газоугольного пласта. Следовательно, уменьшается склонность угольного массива к внезапным выбросам угля и газа [22, 23].

Соотношение зольности проб углей Кузбасса и выхода летучих веществ показывает, что зольность несколько возрастает с ростом метаморфизма (рис. 4).

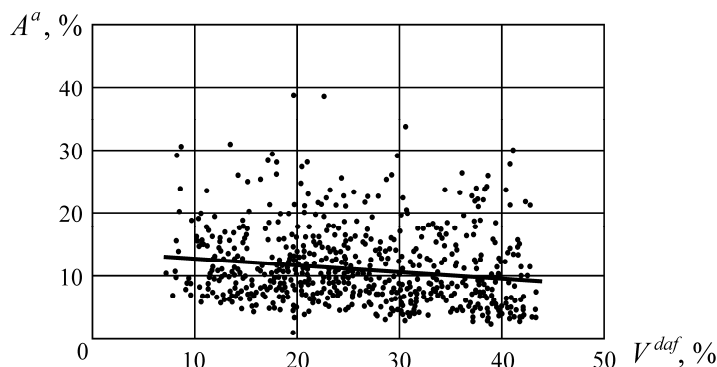


Рис. 4. Соотношение зольности A^a проб углей Кузбасса и выхода летучих веществ V^{daf} (тренд представлен линейной функцией)

Таким образом, способность угля поглощать и удерживать в себе газ повышается с ростом степени метаморфизма и газового давления и понижается с увеличением температуры, влажности и зольности углей [24].

Об изменении метаморфизма природных углей с глубиной их залегания. Трендовый анализ экспериментальных данных [25] показывает, что выход летучих веществ с глубиной залегания угольного пласта преимущественно снижается. Известные отклонения связаны с особенностями проявления регионального метаморфизма углей (рис. 5, 6). Ерунаковская и верхнебалахонская подсерии являются более “молодыми” по геологическому возрасту, но несмотря на то, что они принадлежат разным сериям (кольчугинской и балахонской), выход летучих веществ у них увеличивается с глубиной. Для более “старых” по геологическому возрасту ильинской и нижнебалахонской подсерий выход летучих веществ с глубиной уменьшается. Аналогичная зависимость отмечается и для всего Кузнецкого бассейна, хотя и с невысокой степенью достоверности для соответствующей линии аппроксимации (рис. 5в).

Отсюда следует, что адсорбционная способность ископаемых углей существенно меняется с изменением горно-геологических условий их залегания, зависит от степени их метаморфизма и химического состава. Ее оценка не может быть выполнена по некоторому “обобщенному” показателю, а требует достаточно плотной сетки опробования угольных пластов при геолого-разведочных работах. Разбиение подсерий на отдельные свиты угольных пластов также не выявило однозначных зависимостей выхода летучих веществ углей с глубиной их залегания.

Таким образом, анализ имеющихся данных позволяет прийти к общему выводу о том, что выход летучих веществ из угля является, по-видимому, функцией многих переменных и, пользуясь только этим показателем, нельзя однозначно выявить физико-химические свойства углей и закономерности их изменения.

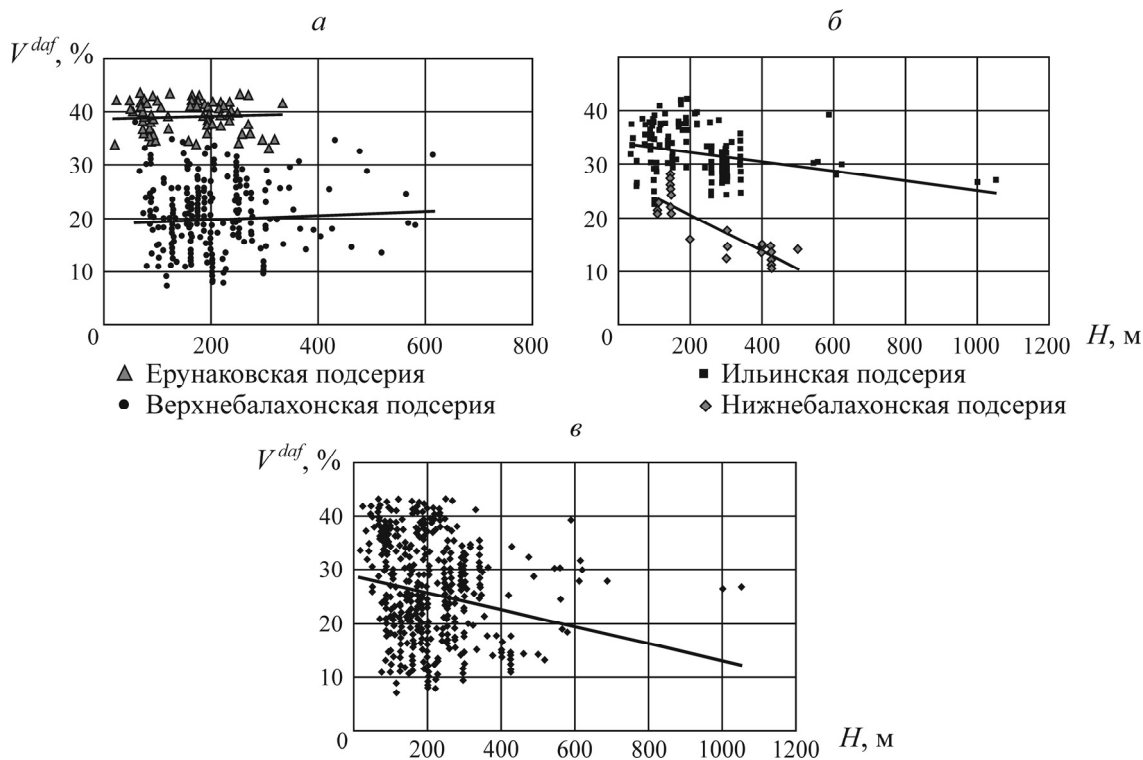


Рис. 5. Изменение выхода летучих веществ для различных подсерий (*a*, *б*) и углей Кузбасса в целом (*в*) с глубиной залегания пластов. Сплошной линией показаны их линейные тренды

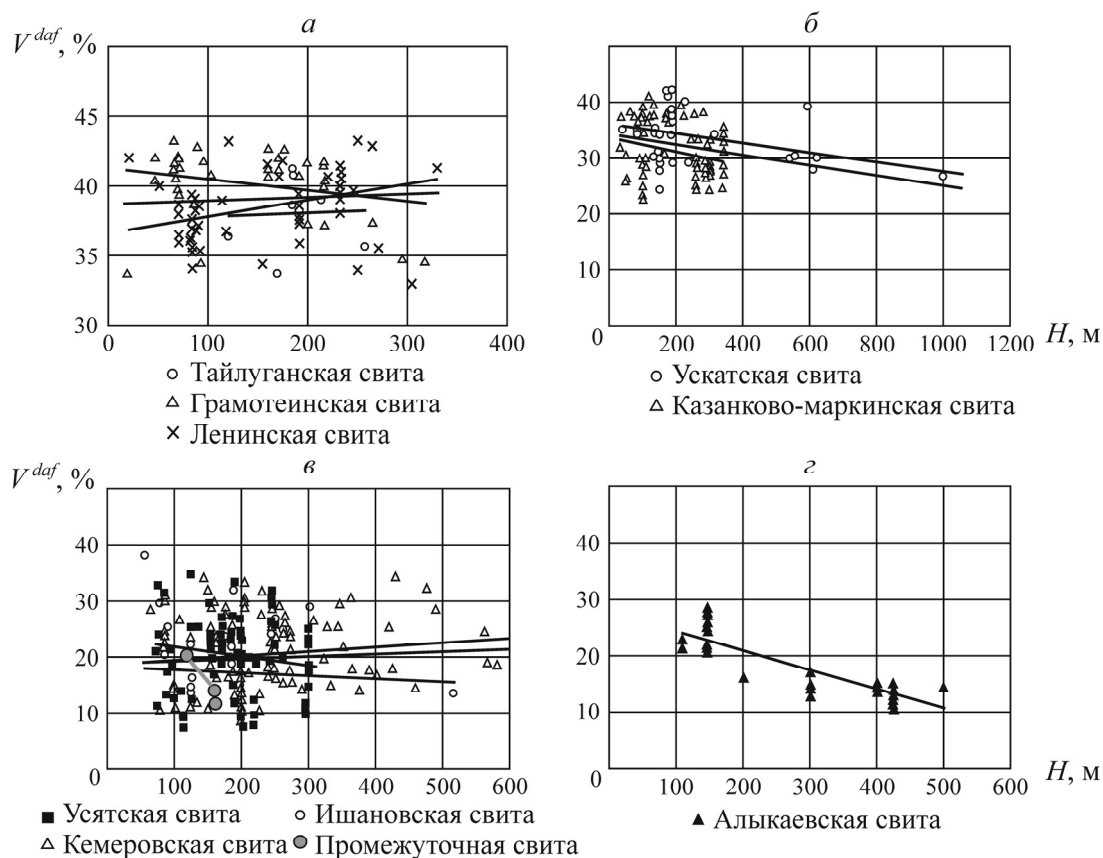


Рис. 6. Изменение выхода летучих веществ для углей различных свит с глубиной залегания пластов: *a* — ерунаковская подсерия; *б* — ильинская; *в* — верхнебалахонская; *г* — нижнебалахонская

Изучение петрографического состава углей Кузбасса. Попытки повысить определенность суждений об изменении физико-химических свойств угля в процессе метаморфизма с помощью других показателей условий возникновения и преобразования углеметановых месторождений предпринимаются постоянно, в том числе и опираясь на данные о петрографическом составе угля. Рассмотрим влияние петрографических характеристик угля на его сорбционную метаноемкость.

Представляет интерес проработать принятый за основу экспериментальный материал по установлению параметров сорбционной способности углей [15] в совокупности с данными петрографического состава. Установить петрографические характеристики конкретных проб при исследованиях сорбционной метаноемкости, выполненных десятилетия назад, как оказалось, не всегда возможно. Наличие сведений об адресах их отбора позволяет сгруппировать соответствующие угольные пробы по свитам Кузбасского угольного бассейна. Показатели петрографического состава были сопоставлены с соответствующими данными по пластам и глубинам залегания в точках отбора проб на сорбционные исследования (таблица) [26].

Петрографические сорбционные свойства углей Кузбасса

Подсерия	Свита	$H_{\text{ср}}$, м	V_{100}^{daf} , %	$Z_{\text{ср}}$, %
Ерунаковская	Тайлуганская	187	37.88	9.7
	Грамотеинская	140	40.56	18.3
	Ленинская	155	37.95	14.3
	Среднее	153	38.94	15.5
Ильинская	Ускальская	232	35.33	10.5
	Казанково-маркинская	213	32.61	11.7
	Среднее	219	33.22	11.3
Верхнебалахонская	Усятская	191	25.12	35.1
	Кемеровская	214	19.54	42.1
	Ишановская	162	17.87	43.1
	Промежуточная	153	22.84	43.6
	Среднее	196	19.49	40.3
Нижнебалахонская	Алыкаевская	305	23.75	40.3

Примечание. $H_{\text{ср}}$ — средняя глубина отбора проб угля на сорбционные исследования по подсериям и свитам; V_{100}^{daf} — средние значения выхода летучих веществ на глубине от поверхности 100 м; $Z_{\text{ср}}$ — средние значения содержания инертинита в углях пластов на глубинах отбора проб для сорбционных исследований (петрографический показатель).

На рис. 7 приведены данные об изменениях с глубиной петрографического состава (по содержанию инертинита $Z_{\text{ср}}$) углей бассейна по стратиграфической колонке. Просматривается две явно выраженные группы точек, соответствующих кольчугинской и балахонской сериям, со скачкообразным изменением свойств на границе. “Явного” влияния петрографических характеристик угля на его сорбционную метаноемкость по данным каталога [14] не установлено.

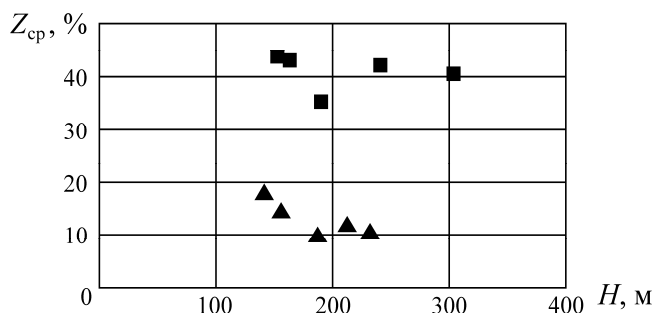


Рис. 7. Зависимость содержания инертинита от средней глубины залегания свит по точкам отбора угольных проб кольчугинской (▲) и балохонской (■) серий Кузбасса

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ BIG DATA ДЛЯ АНАЛИЗА МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Как показано в [27], в настоящее время меняется парадигма обработки горнотехнических данных, что обусловлено: значительным увеличением потоков информации, поступающих от средств измерения; накоплением и структуризацией пространственной информации; появлением новых систем, генерирующих множество разнообразных данных на уровне облаков точек и интерферограмм, отображающих изменение состояния массива.

При этом исследователю приходится иметь дело уже с миллионами данных, что увеличивает требования как к алгоритмам обработки информации, так и к самой методологии. Используемый нами подход связан с технологиями интеллектуальной обработки данных (Data Mining), эффективность применения методов которой проиллюстрируем на примере обработки и анализа приведенных выше данных (подготовленных в рамках упрощенных подходов к их анализу).

CRISP-модель регламентирует все этапы интеллектуальной обработки и анализа экспериментальных данных (рис. 8).

На первом этапе уточняются характеристики исследуемого процесса с точки зрения дальнейшего получения конкретных данных, на втором идет сбор самих данных, организация схем их хранения и, может быть, создание информационных моделей. На третьем этапе происходит очистка данных. Например, заполняются по некоторому алгоритму пропущенные данные, выполняется их фильтрация, проверка на принадлежность конкретным диапазонам значений и наличие аномалий. На следующем этапе осуществляется выбор соответствующих моделей и их расчет. При этом в отличие от классических методов расчеты проводятся по нескольким моделям, количество которых может превышать десятки.

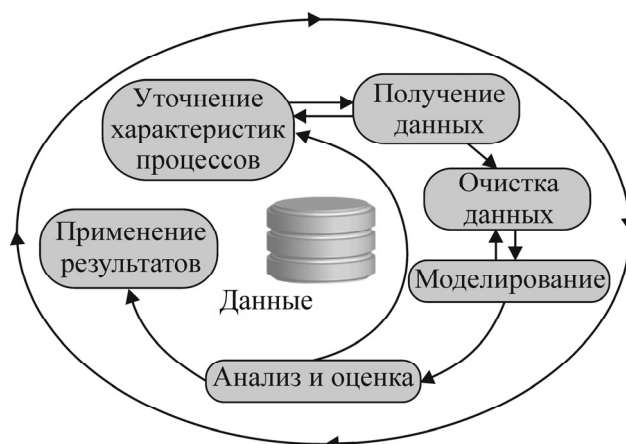


Рис. 8. Общая CRISP-схема организации процессов обработки экспериментальных данных методами интеллектуального анализа

На этапе *анализа и оценки* выполняется окончательный выбор одной или нескольких моделей в зависимости от требований к результатам анализа, и только после этого можно ожидать применение полученных результатов. В некотором смысле такая схема напоминает классические схемы организации геомеханического мониторинга [28], однако отличается от него организацией отдельных этапов, связанных как с моделированием, так и с анализом, оценкой и применением результатов.

Рассмотрим пример обработки данных газодинамического мониторинга с использованием CRISP-схемы. Исследовались данные по Кузбассу, включающие названия серии SER, подсерии PODSER, свиты SVITA, месторождения MESTR, угольного пласта PLAST, шахтоучастка SH_UCH, а также глубину залегания H , м; содержание влаги WA, %; зольность AA, %; выход летучих VR, %; удельный вес DI, DK, кг/м³; метаноемкость горючей массы M01, M05, M1, M15, M20, M25, M30, M40, м³/т, при различных давлениях (0.1, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 4.0 МПа соответственно); предельную сорбционную метаноемкость AV, м³/т; сумму окисленных компонент SOK, %.

Предварительный анализ данных показывает наличие как текстовых (категорийных), так и численных компонент. Большинство классических методов обработки в этом случае оказываются просто неработоспособными либо требуются специальные преобразования, которые только ухудшают проведение комплексного анализа всего множества переменных, существенно ограничивая возможность выявления новых зависимостей. Эти ограничения автоматически снимаются при использовании методов интеллектуального анализа данных, большинство моделей которого могут работать с различными классами переменных [29]. На этапе получения данных определены типы переменных, а также выделены зависимые и независимые переменные. Так как нас интересует метаноемкость углей при различных давлениях и связанные с ней “неявные” закономерности поведения других горно-технологических характеристик, то она задавалась при построении моделей как зависимая переменная. Предварительная обработка или очистка экспериментальных данных заключалась в устранении пробелов в имеющихся таблицах, с использованием хорошо известных моделей восстановления пропущенных значений.

Самым сложным этапом является выбор соответствующей модели, описывающей поведение исследуемого признака. Однако в случае применения методов Data Mining на этом этапе обычно проводятся расчеты по множеству моделей, например входящих в тот или иной пакет; затем выбираются модели, наиболее адекватные анализируемому процессу, для которых и выполняется окончательный расчет. С одной стороны, это несколько усложняет построение моделей, а с другой — расширяет возможности самого анализа. При этом следует учесть, что большинство программных средств интеллектуального анализа данных имеет в своем составе от 10 до 30 моделей, и их выбор зависит от опыта пользователя. Кроме того, необходимо учитывать как однородность данных, так и мощность их множества (многообразие независимых переменных, по которым будет строиться модель). На примере обработки больших объемов экспериментальных данных покажем, как могут изменяться выводы о наличии той или иной зависимости для разного количества переменных при использовании моделей интеллектуального анализа и программных средств, их реализующих.

Из всего многообразия моделей выбраны следующие [29]:

- построение деревьев решений по алгоритму CART (Classification and Regression Tree);
- построение модели в виде регрессионных сплайнов (алгоритм MART-многомерные аддитивные регрессионные деревья);

- обобщенный алгоритм оценки параметров регрессии (Lasso);
- построение случайного множества деревьев решений для классификации и оценки параметров регрессионной модели (Random Forest Tree);
- устойчивые градиентные методы построения дерева решений;
- нейронные сети, включая карты Кохонена [30].

Такой выбор не случаен, он основан на многолетнем опыте обработки горно-технологических данных методами интеллектуального анализа [31]. Выбранные методы входят в большинство имеющихся программных пакетов по обработке данных [32]. В качестве тестового набора использованы многолетние данные по газодинамическим свойствам угольных пластов. Расчеты проводились по всему множеству моделей одного из пакетов обработки (WEKA, R), а затем аналогичные расчеты — в другом пакете (RapidMiner Studio, Knime).

Итоговые результаты проверялись на устойчивость и адекватность моделей с помощью соответствующих статистических оценок. Для оценки построенных моделей выбраны методы визуализации, показывающие важность того или иного предиктора, используемого для конкретной модели анализа. В качестве основной гипотезы предполагалось наличие зависимости метаноемкости горючей массы угольного пласта при различных давлениях (переменные M01, M05, M1, M15, M20, M25, M30, M40) от горно-геологических параметров месторождений. Расчеты проводились по всей шкале давлений (от 0.5 до 4.0 МПа) по схеме, рассмотренной выше. Их основные результаты показаны на рис. 9 – 12.

а

		Variable Importance	
Variable	Score		
AV	100.00		
SHA_UCH	71.92		
PLATS	63.43		
MESTR	51.74		
PODSER	32.07		
SWITA	30.58		
VR	22.00		
WA	12.01		
VA	5.12		
SOK	1.87		
DI	1.63		
AA	0.62		
DK	0.01		

б

		Variable Importance	
Variable	Score		
AV	100.00		
VA	32.97		
SHA_UCH	24.77		
PLATS	18.00		

в

		Variable Importance	
Variable	Score		
AV	100.00		
SHA_UCH	74.36		
PLATS	67.46		
MESTR	52.53		
PODSER	31.33		
SWITA	30.64		
VR	23.01		
WA	13.06		
VA	8.34		
SOK	2.60		
DI	2.56		
AA	1.39		
DK	0.87		
H	0.83		
SER	0.06		

Рис. 9. Влиятельность переменных по моделям: а — CART; б — MARS; в — случайных деревьев (Random Tree) (относительно предельной метаноемкости)

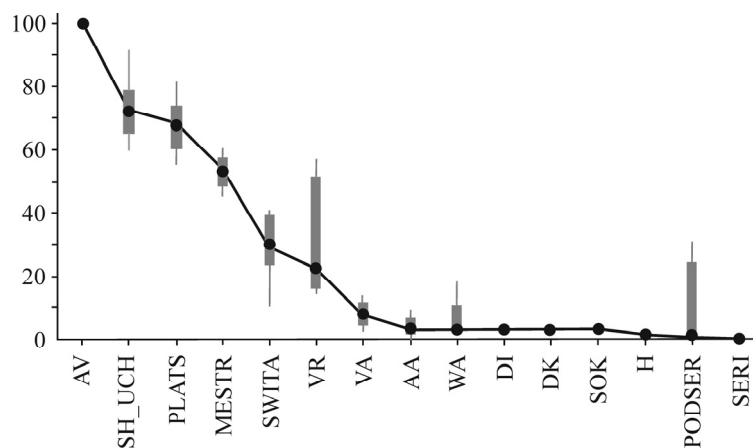


Рис. 10. Влиятельность переменных по улучшенной модели CART (относительно предельной метаноемкости)

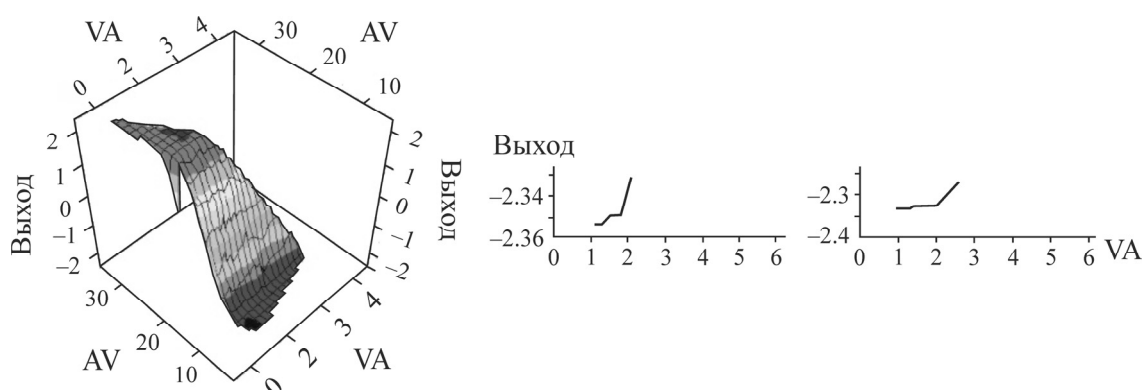


Рис. 11. Оценка влияния двух переменных (предельной метаноемкости и выхода летучих) на метаноемкость горючей массы при давлении 3 МПа

Из выполненных расчетов следует, что наиболее влияющим фактором для расчета метаноемкости горючей массы при различных уровнях ее нагружения являются значения предельной метаноемкости, независимо от используемой модели расчета. В то же время такие параметры, как глубина залегания, зольность и влажность, не так существенны для построения моделей интеллектуального анализа данных (ИАД). Как отмечалось выше, расширение признакового пространства для построения моделей позволяет получать новые закономерности, которые ранее не были известны. Схематично это показано на рис. 12.

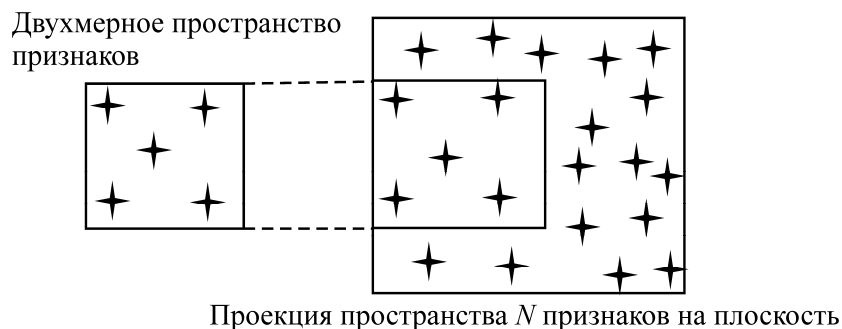


Рис. 12. Схема расширения пространства признаков для ИАД

Для проверки этой гипотезы проведены оценочные расчеты на основе различных моделей ИАД с усеченным множеством характеристик. Использованы данные технического анализа, но без учета горно-технологических параметров залегания угольных пластов (рис. 13, 14). Примечательно, что практически все расчеты показали сходные результаты, которые отличались лишь по степени влияния второстепенных признаков (НМ — глубина залегания пласта, м; VL — выход летучих, %; MPL — мощность пласта, м; AA — зольность пласта, %; WL — влажность пласта, %; ALPHA — угол падения, град; РМЕТ — природная метаноемкость пласта, м³/т).

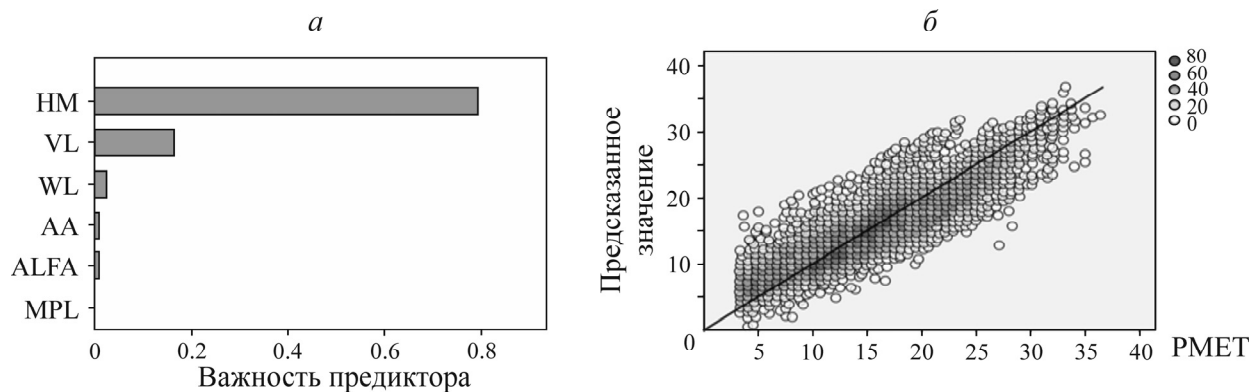


Рис. 13. Расчетные закономерности для природной метаносности по методу линейных опорных векторов: *a* — важность предиктора; *б* — предсказанные против наблюдаемых

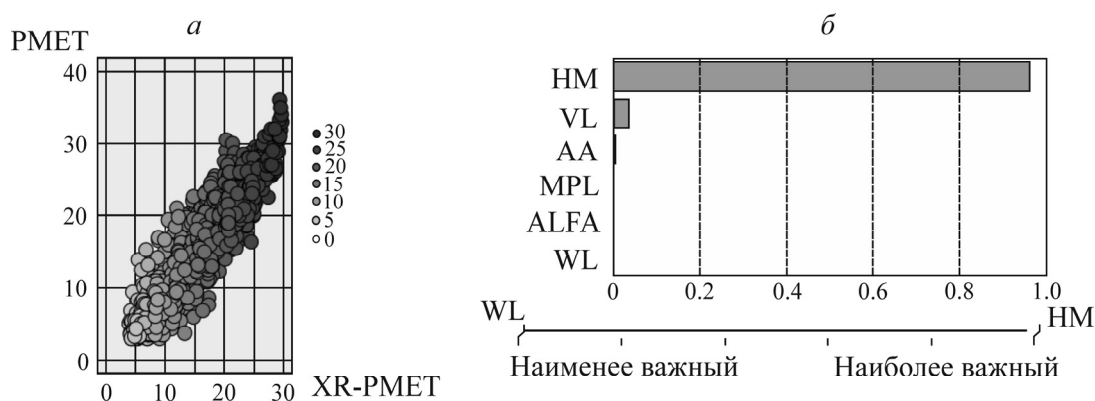


Рис. 14. Расчет для природной метаносности углей Кузбасса по методу решающих деревьев (CHAID [34]): *a* — диаграмма рассеяния с категоризацией; *б* — важность предиктора

Согласно расчетам, наиболее сильными влияющими факторами являются глубина залегания угольных пластов и выход летучих, что совпадает с классическими представлениями.

УТОЧНЕНИЕ ЭМПИРИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ СОРБЦИОННОЙ МЕТАНОЕМКОСТИ УГЛЕЙ КУЗБАССА ОТ ГЛУБИНЫ ЗАЛЕГАНИЯ УГОЛЬНОГО ПЛАСТА НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ РАЗВЕДКИ ПО ГАЗОВОМУ ОПРОБОВАНИЮ

Расчеты сорбционной метаноемкости углей по уравнению Ленгмюра, благодаря широкой экспериментальной адаптации, позволяют решать основные задачи горной практики. Однако, согласно исследованиям [4], в основе этого подхода имеется принципиально важное несоответствие фактических и расчетных данных: полученных на основе теории сорбции в лабораторных экспериментах и натурных значений газосодержания угольных пластов. Примером такого несоответствия могут служить, например, экспериментальные данные по Березово-Бирюлинскому и Чертинскому месторождениям Кузбасса (рис. 15).

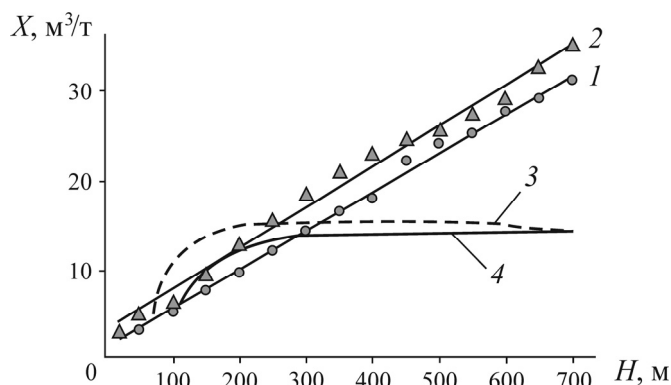


Рис. 15. Изменение фактической и рассчитанной по уравнению Ленгмюра (1) метаноносностей углей от глубины залегания пласта: 1, 2 — фактическая метаноносность Березово-Бирюлинского и Чертинского месторождений соответственно; 3, 4 — расчетная метаноносность тех же месторождений [22]

Расчетные значения метаноносности угольного пласта X на основе теории сорбции устанавливались в [4] по следующим зависимостям:

$$X = X_{\text{л}} + X_{\text{св}}, \quad (3)$$

$$X_{\text{св}} = \frac{m_0 P T_{\text{н}}}{\rho P_{\text{н}} T_{\text{пл}}}, \quad (4)$$

где $X_{\text{л}}$ — сорбционная метаноемкость, определенная по (1), $\text{м}^3/\text{т}$; $X_{\text{св}}$ — количество свободного газа в трещинно-поровом объеме угля, $\text{м}^3/\text{т}$; $m_0 = 0.1$ — пустотность угля; P — давление газа в пласте в зоне влияния подготовительной выработки, МПа; $T_{\text{н}} = 293$ К; ρ — плотность угля, $\text{кг}/\text{м}^3$; $P_{\text{н}} = 0.1$ МПа; $T_{\text{пл}} = 293$ — температура пласта, К.

Из сопоставления кривых на рис. 15 видно, что в пределах глубин реальной угледобычи (до 250–300 м) расчетная метаноносность угольных пластов на основе теории сорбции оказывается до 30 % больше, чем фактическая. Это означает, что количество сорбированного и свободного метана в угольном пласте на 30 % больше, чем общая метаноносность этого пласта. Устранение этого несоответствия возможно путем привлечения гипотезы о твердом углегазовом растворе [34].

Из представлений о существовании в продуктивном пласте метанугольного раствора [28] следует, что геомеханически невозмущенная система “метан – уголь” в неразгруженном угольном пласте состоит только из одной фазы. При наличии метастабильной фазы система неопределенно долго остается в равновесии, и новая фаза самопроизвольно в ней не проявляется. При нарушении метастабильного равновесия в такой системе (например, при разгрузке угольного пласта) происходит практически мгновенный фазовый переход [26]. Геомеханическое возмущение (после вскрытия пласта) приводит к появлению в системе новой фазы — свободного метана.

В процессе разгрузки от горного давления углеметановый пласт теряет свои свойства твердого раствора прямо пропорционально снижению механических напряжений, но не ниже суммарной величины метаноемкости угля как сорбата и удельного объема метана в поровом пространстве угля как коллектора при действующем давлении свободного газа.

На основании этого можно записать соотношение [4]:

$$X_{\text{ф}} = X_{\text{т}} + X_{\text{л}} + X_{\text{св}}, \quad (5)$$

где X_ϕ — природная метаноносность угольного пласта, определенная по данным геологоразведочных работ, м³/т; X_τ — часть метаноносности пласта, обусловленная существованием твердого “метанугольного раствора”, м³/т.

Если пренебречь содержанием свободного метана в угольном пласте, то в результате сопоставления сорбционных характеристик углей различной стадии метаморфизма и параметров метаноносности пластов с соответствующим выходом летучих веществ можно установить [6], что

$$X_\phi = \frac{a}{A}(A - X_\tau) \frac{bk_1 H}{1 + bk_1 H}, \quad (6)$$

где a — предельная сорбционная метаноемкость, м³/т; A — предельная метаноносность, м³/т; b — коэффициент сорбции, 1/МПа; H — глубина залегания угольного пласта; $k_1 = 0.01$ — коэффициент для определения гидростатического давления.

Тогда с учетом (6) имеем

$$X_\phi = X_\tau + \frac{abk_1 H}{1 + bk_1 H} - \frac{X_\tau abk_1 H}{A(1 + bk_1 H)}, \quad (7)$$

откуда следует, что

$$X_\tau = \frac{X_\phi - \frac{abk_1 H}{1 + bk_1 H}}{1 - \frac{abk_1 H}{A(1 + bk_1 H)}}. \quad (8)$$

Использование формул (5)–(8) позволяет получить зависимости, доказывающие отсутствие “прямой” связи между природной газоносностью угольного пласта и сорбционной метаноемкостью (рис. 16) по глубине залегания. На сравнительно малых глубинах (до 300 м) сорбционная метаноемкость, измеренная в лаборатории, может на 30 % превышать значения природной газоносности, так как в пласте часть метана может находиться в состоянии “твердого углегазового раствора”.

Разгрузка угольного пласта способна приводить к распаду твердого углегазового раствора. Анализ теоретических и экспериментальных данных показал, что период такого распада достигает нескольких суток [35]. Исходя из анализа уравнений состояния твердого углегазового раствора (5) и (8), можно сделать вывод, что изменение термодинамического состояния системы “уголь – метан” приводит к необратимым физико-химическим последствиям, выражающимся в изменении соотношений агрегатных состояний ее основных компонентов [35].

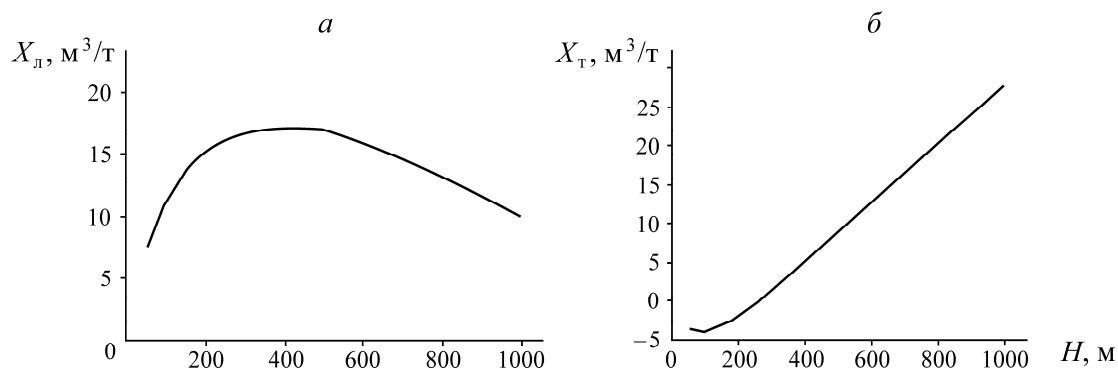


Рис. 16. Теоретическая зависимость: a — сорбционной метаноемкости X_ϕ от глубины залегания пласта H по (6); b — составляющей X_τ от глубины залегания пласта H по (8)

Этим, как представляется, можно объяснить то, что при исследовании сорбционной метаноемкости в лабораторных условиях количество сорбированного угля превышает значение газоносности (рис. 16а). При этом часть метаноемкости пласта, обусловленная существованием твердого “метанугольного раствора”, имеет “отрицательные” значения (рис. 16б).

Принимая давление газа в угольном пласте вне зоны влияния горных работ равным гидростатическому, можно определить долю газоносности, представленную сорбированным метаном. Однако для условий трехфазного (свободный, сорбированный, растворенный в угле) состояния метана необходимо вводить поправку на снижение с глубиной сорбционного потенциала угля в углеметановом пласте.

На основании уравнения газового баланса трехфазного состояния метана (5) в [6] получена полуэмпирическая зависимость для расчета газоносности 5-го пласта Чертинского месторождения Кузбасса:

$$X_{\text{расч}} = X_0 + K_{\text{г,х}} \frac{AB(P + P_{\text{л}})(1 - e^{-\beta(P + P_{\text{л}})})}{1 + B(P + P_{\text{л}})(1 - e^{-\beta(P + P_{\text{л}})})}, \quad (9)$$

где $X_{\text{расч}}$ — расчетное значение метаноемкости, $\text{м}^3/\text{т}$; X_0 — метаноемкость пласта у границы зоны газового выветривания, $\text{м}^3/\text{т}$; A — предельная газоносность пласта, $\text{м}^3/\text{т}$; B — градиент метаноемкости, $1/\text{МПа}$; $P = 0.1$ — нормальное атмосферное давление, МПа; $P_{\text{л}}$ — литологическое давление, МПа; β , $K_{\text{г,х}}$ — эмпирические коэффициенты.

На рис. 17 представлены соответствующие формулам (6) и (9) эмпирические зависимости газоносности углеметановых пластов и их сорбционной способности от глубины залегания для 5-го пласта Чертинского месторождения (количество газа, которое может сорбироваться в угле при гидростатическом давлении; общее количество метана; данные геологической разведки газоносности пласта; количество растворенного метана — разность между фактическими значениями газоносности и расчетными в соответствии с полученными зависимостями).

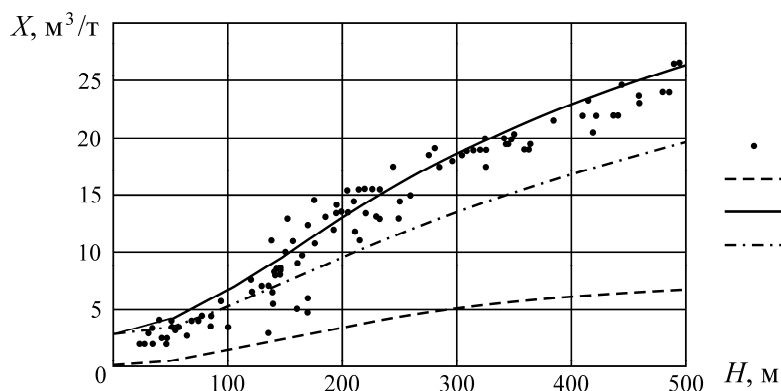


Рис. 17. Изменение газоносности углеметановых пластов и сорбционной способности угля (пласт 5, Чертинское месторождение, Кузбасс) с глубиной залегания: 1 — геологоразведочные данные; 2 — сорбированный метан; 3 — расчетная газоносность; 4 — растворенный метан

Таким образом, изотерма Ленгмюра применительно к метаноемным угольным пластам на глубине залегания 200–300 м имеет вид S-образной кривой. Это объясняет несоответствие фактических и расчетных (на основе теории сорбции и лабораторных экспериментов) значений газосодержания угольных пластов.

С учетом современного подхода к обработке и анализу информационных данных больших и сверхбольших объемов, генерируемых современными мониторинговыми системами в горном

деле, получен график соответствия теоретически предсказанных и экспериментальных значений метаноемкости угольных пластов Кузбасса на основе используемой в данной работе модели нейронной сети (рис. 18).

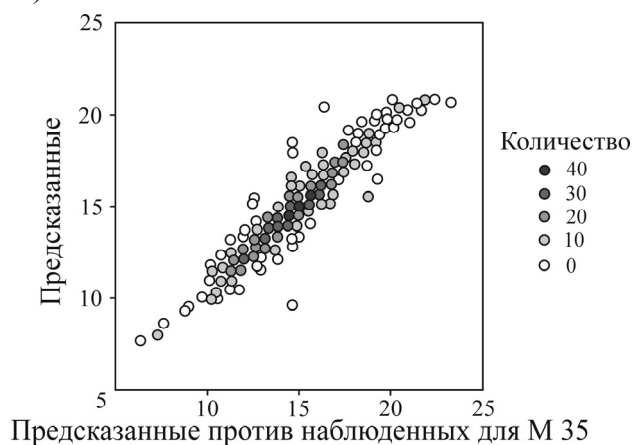


Рис. 18. График соответствия теоретически предсказанных и экспериментальных значений метаноемкости угольных пластов Кузбасса при давлении 3.5 МПа, полученный на основе модели нейронной сети

Как видно, “полуэмпирические” зависимости метаноемкости от глубины залегания для 5-го пласта Чертинского месторождения полностью подтвердились и при обработке экспериментальных данных по Кузбассу в целом.

ВЫВОДЫ

Проведенный комплекс теоретических и экспериментальных исследований позволяет отметить следующие важные результаты.

Существует тесная связь между метаноемкостью и стадиями метаморфизма углей. В качестве показателя стадии метаморфизма углей может быть использован выход летучих веществ. В процессе метаморфизма каменных углей происходит их активация как сорбентов, которая выражается в усилении способности к поглощению газов, возрастающей, как правило, со степенью метаморфизма, т. е. в направлении от газовых углей к антрацитам. Для бурых и длиннопламенных углей зависимость сорбционной способности по отношению к газам имеет несколько иной характер: по мере метаморфизации ископаемых углей жесткость “скелета” угольного вещества возрастает и, следовательно, способность углей к абсорбции уменьшается.

Пористость природных углей достаточно слабо зависит от выхода летучих веществ (стадий метаморфизма): средние значения (при сравнительно высокой дисперсии данных) описываются слабо “выпуклой” функцией зависимости пористости от выхода летучих. Поэтому ее влияние на выход летучих веществ можно не учитывать.

В результате увлажнения пласта в угле усиливается проявление его пластических свойств, понижаются соответственно прочность и скорость газовыделения. Молекулы воды обладают бóльшим “сродством” к поверхности угля, чем молекулы метана, и присутствие воды в угле значительно снижает его сорбционную метаноемкость. Установлено, что увеличение влажности угольного пласта даже на 2% практически вдвое снижает энергию его газовой компоненты. Меняя давление и длительность воздействия воды на угольный пласт, можно получить различные эффекты: добиваться “торможения” газовыделения или дегазировать угольный пласт.

Изменение метаморфизма природных углей зависит от глубины их залегания. Трендовый анализ экспериментальных данных выхода летучих веществ показал возрастание стадий метаморфизма природных углей с глубиной залегания угольных пластов. Известные отклонения,

по-видимому, связаны с особенностями проявления регионального метаморфизма и геологического возраста угольных пластов. Существенного влияния петрографических характеристик угля на его сорбционную метаноемкость установлено не было.

Таким образом, метаноемкость углей тесно связана с их физико-химическими свойствами и физико-механической структурой угольного вещества: пористостью, влажностью и выходом летучих. При этом адсорбционная способность ископаемых углей существенно меняется с изменением горно-геологических условий их залегания, зависит от степени метаморфизма и химического состава. Способность угля поглощать и удерживать в себе газ повышается с ростом степени метаморфизма и газового давления и понижается с увеличением температуры, влажности и зольности углей.

Разработан метод расчета сорбционной метаноемкости в зависимости от физико-химических характеристик угольного пласта (согласно уравнению Ленгмюра). Современные технологии, рассчитанные на обработку больших объемов и потоков данных, совершенно меняют подходы к получению новых закономерностей и даже ставшие привычными представления о взаимодействии компонент горного массива. Проведенные расчеты по различным моделям Data Mining подтверждают друг друга и позволяют получить новые сведения о характеристиках процессов, происходящих в угольном пласте, заранее не опираясь на физические представления о них.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Полевщиков Г. Я. Динамические газопроявления при проведении подготовительных и вскрывающих выработок в угольных шахтах. — Кемерово: Институт угля и углехимии СО РАН, 2003. — 317 с.
2. Руководство по дегазации угольных шахт. — М.: Недра, 1990. — 186 с.
3. Руководство по проектированию вентиляции угольных шахт. — Макеевка-Донбасс: ротاپринт МакНИИ, 1989. — 319 с.
4. Киряева Т. А. Разработка метода газодинамической активности угольных пластов по геологоразведочным данным на примере Кузбасса: дис. ... канд. техн. наук. — Кемерово, 2005. — 97 с.
5. Эттингер И. Л., Шульман Н. В. Распределение метана в порах ископаемых углей. — М.: Наука, 1975. — 111 с.
6. Полевщиков Г. Я., Киряева Т. А. Газодинамическая устойчивость углеметана // ГИАБ. Отд. вып. 7. Кузбасс-1. — 2009. — С. 146–149.
7. Киряева Т. А. Природные и техногенные риски в угольных шахтах // Совершенствование системы управления, предотвращения и демпфирования последствий чрезвычайных ситуаций регионов и проблемы безопасности жизнедеятельности населения: материалы науч. конгр. — Новосибирск: СГГА, 2013. — С. 81–85.
8. Киряева Т. А. Развитие модельных представлений о генезисе накопления углеводородов в угленосной толще и техногенной динамике движения газа // Естественные и технические науки. — 2011. — № 6. — С. 178–183.
9. Oparin V. N., Kiryayeva T. A., Gavrillov V. Yu., Shutilov R. A., Kovchavtsev A. P., Tanaino A. S., Efimov V. P., Astrakhantsev I. E., Grenev I. V. Interaction of geomechanical and physicochemical processes in Kuzbass coal, J. of Mining Science, 2014, Vol. 50, No. 2. — P. 191–214.
10. Coppens L. Annales des Mines de Belgique, 1934, Vol. 35, No. 1. — P. 20–31.
11. Докукин А. В., Чирков С. Е., Норель Б. К. Физические основы математического моделирования газонасыщенного угольного пласта // Науч. сообщ. ИГД им. А. А. Скочинского. — 1979. — Вып. 172. — С. 3–11.
12. Эттингер И. Л. Свойства углей, влияющие на безопасность труда в шахтах. — М.: Госгортехиздат, 1960. — 95 с.
13. Эттингер И. Л. Напряжение набухания в системе газ-уголь как источник энергии в развитии внезапных выбросов угля и газа // ФТПРПИ. — 1979. — № 5. — С. 78–87.

14. Каталог метаноемкости углей Кузбасса. — Кемерово: ВостНИИ, 1969. — 32 с.
15. Ходот В. В., Яновская М. Ф., Премыслер Ю. С. и др. Физико-химия газодинамических явлений в шахтах. — М.: Наука, 1973. — 139 с.
16. Ходот В. В. Влияние влажности на метаносность ископаемых углей // Изв. АН СССР, ОТН. — 1952. — № 12.
17. Ван-Кревелен Д. В., Шуер Ж. Наука об угле. — М.: Госгортехиздат, 1960. — 304 с.
18. Киселев А. В., Яшин Я. И. Газоадсорбционная хроматография. — М.: Наука, 1967. — 256 с.
19. Ходот В. В., Яновская М. Ф., Премыслер Ю. С. Газовыделение из угля при его разрушении // ФТПРПИ. — 1966. — № 6. — С. 3–11.
20. Gunter J. Etude de la liaison gas – charbon, Rev. Industrie Mivrale, Octobre, 1965, Vol. 47, No. 10. — P. 693–708.
21. Киряева Т. А. О влиянии режима увлажнения на газовыделение из угля и предупреждении внезапных выбросов угля и газа // Естественные и технические науки. — 2012. — № 3. — С. 481–485.
22. Опарин В. Н. К теоретическим основам описания взаимодействия геомеханических и физико-химических процессов в угольных пластах // ФТПРПИ. — 2017. — № 2. — С. 3–19.
23. Жоу Айтао, Кай Ванг, Киряева Т. А., Опарин В. Н. О закономерностях движения двухфазного газового потока при внезапных выбросах угля и газа в шахтах // ФТПРПИ. — 2017. — № 3. — С. 119–130.
24. Киряева Т. А. Особенности устойчивых состояний искусственных и природных углеметановых систем // Естественные и технические науки. — 2011. — № 4. — С. 309–318.
25. Киряева Т. А., Плаксин М. С., Рябцев А. А. Локальный прогноз газодинамической активности угольного пласта по геологоразведочным данным // ГИАБ. — 2011. — № 8. — С. 66–69.
26. Арцер А. С., Протасов С. И. Угли Кузбасса: происхождение, качество, использование. Кн. 1. — Кемерово: КузГТУ, 1999. — 177 с.
27. Бычков И. В., Владимиров Д. Я., Опарин В. Н., Потапов В. П., Шокин Ю. И. Горная информатика и проблема “больших данных” в построении комплексных мониторинговых систем безопасности недропользования // ФТПРПИ. — 2016. — № 6. — С. 163–179.
28. Малышев Ю. Н., Трубецкой К. Н., Айруни А. Т. Фундаментально-прикладные методы решения проблемы угольных пластов. — М.: ИАГН, 2000. — 519 с.
29. Mohammed J. Zaki, Vagner Meira Jr. Data mining and analysis. Fundamental concepts and algorithm, Cambridge University Press, N. Y., 2014. — 607 p.
30. Self organizing map applications and novell algorithm design, Edited by Josohat Igadwa Mwasiagi, INTECHWEB.ORG, Printed in India, 2011. — 702 p.
31. Потапов В. П. Математическое и информационное моделирование геосистем угольных предприятий. — Кемерово: Институт угля и углехимии СО РАН, 1999. — 211 с.
32. Philipp K. Janert. Data analysis with open source tools, Reilly Media Inc. Beijing. Cambridge, Tokyo, 2011. — 509 p.
33. Oded Maimon, Lior Rokach. Data mining and knowledge discovery handbook, Springer, N. Y., Heidelberg, London, 2010. — 1285 p.
34. Алексеев А. Д., Айруни А. Т., Зверев И. В. и др. Свойства органического вещества угля образовывать с газами метастабильные однофазные системы по типу твердых растворов // Диплом № 9 на научное открытие. — АЕН, 1994.
35. Киряева Т. А. К вопросу об определении остаточной газоносности угольных пластов и ее связи с растворенным в угле метаном // Недропользование. Горное дело. Направления и технологии поиска, разведки и разработки месторождений полезных ископаемых. Геоэкология: сб. материалов междунар. науч. конф. — Новосибирск: СГУГиГ, 2016. — Т. 3. — С. 109–115.

Поступила в редакцию 28/VI 2017