

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Сибирский государственный индустриальный университет»

ВК «Кузбасская ярмарка»



Посвящается 300-летию Кузбасса

**НАУКОЕМКИЕ ТЕХНОЛОГИИ
РАЗРАБОТКИ И ИСПОЛЬЗОВАНИЯ
МИНЕРАЛЬНЫХ РЕСУРСОВ**

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

№ 7 - 2021

Главный редактор
д.т.н., проф. Фрянов В.Н.

Редакционная коллегия:
чл.-корр. РАН, д.т.н., проф. Клишин В.И., д.т.н., проф. Никитенко С.М.,
д.т.н. Павлова Л.Д. (технический редактор), д.т.н., проф. Домрачев А.Н.,
д.э.н., проф. Петрова Т.В.

Н 340 Научно-технические технологии разработки и использования минеральных ресурсов : науч. журнал / Сиб. гос. индустр. ун-т; под общей ред. В.Н. Фрянова. – Новокузнецк, 2021. - № 7. – 400 с.

Рассмотрены аспекты развития инновационных наукоемких технологий диверсификации угольного производства и обобщены результаты научных исследований, в том числе создание роботизированных и автоматизированных угледобывающих и углеперерабатывающих предприятий, базирующиеся на использовании прорывных технологий добычи угля и метана, комплексной переработке этих продуктов в угледобывающих регионах и реализации энергетической продукции потребителям в виде тепловой и электрической энергии.

Журнал предназначен для научных и научно-технических работников, специалистов угольной промышленности, преподавателей, аспирантов и студентов вузов.

Номер подготовлен на основе материалов Международной научно-практической конференции «Научно-технические технологии разработки и использования минеральных ресурсов», проводимой в рамках специализированной выставки технологий горных разработок «Уголь России и Майнинг» (Новокузнецк, 1-4 июня 2021 г).

Основан в 2015 г.
Выходит 1 раз в год

Учредитель - Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Сибирский государственный индустриальный университет»

УДК 622.2
ББК 33.1

1 - ОАО «Кузбасгипрошахт», Россия, г. Кемерово	345
2 - Кузбасский государственный технический университет имени Т. Ф. Горбачева, г. Кемерово, Россия	345
ОБОСНОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ МЕХАНИЗИРОВАННОЙ ОТРАБОТКИ ВЕСЬМА МОЩНЫХ ПОЛОГИХ УГОЛЬНЫХ ПЛАСТОВ НА ШАХТАХ КУЗБАССА	352
¹ Разумов Е.А., ¹ Венгер В.Г., ² к.т.н. Пудов Е.Ю., ¹ д.т.н. Калинин С.И.	352
1 – Филиал СФ АО «ВНИМИ», г. Прокопьевск, Россия	352
2 – Филиал КузГТУ, г. Прокопьевск, Россия	352
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ВЫСОКИХ КУПОЛОВ В ПОДГОТОВИТЕЛЬНЫХ ВЫРАБОТКАХ И ОБОСНОВАНИЕ МЕТОДА РАСЧЁТА ПАРАМЕТРОВ КУПОЛОВ И АНКЕРНОЙ КРЕПИ ДЛЯ КРЕПЛЕНИЯ КУПОЛОВ.....	356
¹ Венгер В.Г., ¹ Разумов Е.А., ² к.т.н. Пудов Е.Ю., ¹ д.т.н. Калинин С.И.	356
1 – Филиал СФ АО «ВНИМИ», г. Прокопьевск, Россия	356
2 – Филиал КузГТУ, г. Прокопьевск, Россия	356
ПОСТРОЕНИЕ ЦИФРОВОЙ МОДЕЛИ ПОДГОТОВИТЕЛЬНЫХ РАБОТ НА УГОЛЬНЫХ ШАХТАХ	360
к.т.н. Волошин В.А., Сабиров Р.М., Петров В.И., Балачев С.Н.....	360
Филиал СФ АО «ВНИМИ», г. Прокопьевск, Россия	360
ВЕДЕНИЕ МОНИТОРИНГА СЕЙСМИЧЕСКИХ СОБЫТИЙ ТЕХНОГЕННОГО ХАРАКТЕРА НА ШАХТАХ ЮГА КУЗБАССА	364
¹ Мулев С.Н., ² Разумов Е.А., ¹ к.т.н. Волошин В.А.	364
1 – АО «ВНИМИ», г. Санкт-Петербург, Россия.....	364
2 – Филиал СФ АО «ВНИМИ», г. Прокопьевск, Россия	364
КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ СОРБЦИИ ГАЗА В КОНЕЧНОМ ОБЪЕМЕ УГЛЯ	368
Немцев А.Ю., д.т.н. Калашников С.Н.	368
Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия.....	368
ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ РЕАКЦИИ АЛКИЛИРОВАНИЯ БЕНЗОЛА	371
д.т.н. Калашников С.Н., Бабушкина О.С., Гаун М.А.	371
Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия.....	371
АНАЛИЗ И ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ТРАДИЦИОННЫХ СПОСОБОВ И СРЕДСТВ ДЕГАЗАЦИИ ВЫСОКОГАЗОНОСНЫХ УГОЛЬНЫХ ПЛАСТОВ	374
Крестьянинов А.В., Шмаков И.К., к.т.н. Васильев П.В.	374
Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия.....	374
ИНТЕГРАЛЬНЫЙ МЕТОД ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ОЦЕНКИ УРОВНЯ НАДЕЖНОСТИ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ БЕЗОПАСНОСТИ УГОЛЬНЫХ ШАХТ.....	379
к.э.н. Новоселов С.В.	379
г. Кемерово, Россия	379
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ КЕРАМИЧЕСКОГО КИРПИЧА ОБЪЕМНОГО ОКРАШИВАНИЯ ИЗ ПРИРОДНОГО И ТЕХНОГЕННОГО СЫРЬЯ	382
д.т.н. Столбошкин А.Ю., Акст Д.В., Истерин Е.В., к.т.н. Фомина О.А.	382
Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия.....	382
РЕЗУЛЬТАТЫ ДИСТАНЦИОННОГО МОНИТОРИНГА ЭКОЛОГИИ НАРУШЕННЫХ ЗЕМЕЛЬ НА БОГОСЛОВСКОМ УГОЛЬНОМ МЕСТОРОЖДЕНИИ.....	386
^{1,2} д.т.н. Зеньков И.В.	386
1 - Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнёва, г. Красноярск, Россия.....	386
2 - Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, г. Красноярск, Россия	386
ОЦЕНКА ЭКОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ ГОРНОПРОМЫШЛЕННЫХ ЛАНДШАФТОВ НА ЮЖНОМ УРАЛЕ НА ОТРАБОТАННЫХ УГОЛЬНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЯХ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ СПУТНИКОВОЙ СЪЕМКИ.....	389
^{1,2} д.т.н. Зеньков И.В.	389
1 - Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнёва, г. Красноярск, Россия.....	389

3. Система сейсмического мониторинга GITS / Д.В. Яковлев [и др.] // Сборник научных трудов ВНИМИ. / отв. ред. Д.В. Яковлев. – СПб.: ВНИМИ, 2012. – С. 18-25.

4. Мулёв С.Н., Старников В.Н., Романевич О.А.. Современный этап развития геофизического метода регистрации естественного электромагнитного излучения (ЕЭМИ) // Уголь. – 2019. – № 10. – С. 6-14.

5. Яковлев Д.В., Мулёв С.Н. Опыт применения многофункциональной геофизической аппаратуры АНГЕЛ-М в угольной и рудной промышленности // Уголь. – 2014. – № 10. – С. 14-19.

УДК 539.2: 536.1

КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ СОРБЦИИ ГАЗА В КОНЕЧНОМ ОБЪЕМЕ УГЛЯ

Немцев А.Ю., д.т.н. Калашников С.Н.

Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия

Аннотация. Работа посвящена клеточно-автоматному моделированию на основе класса клеточных автоматов с окрестностью Марголуса. Выполнено моделирование процесса сорбции газа частицей угля. Для организации подобного рода эволюционного процесса метод клеточно-автоматного моделирования был дополнен методом Монте-Карло для реализации краевых условий на границе «твердое тело – газ».

Ключевые слова: клеточный автомат, окрестность Марголуса, моделирование, кинетика газоразделения, газоразделительная смесь, метод Монте-Карло.

При численном решении уравнений в частных производных, описывающих диффузионные процессы, часто используются разностные схемы. Теория сходимости разностных схем показывает, в какой мере последние отражают свойства исходных дифференциальных уравнений [1].

В связи с появлением компьютеров с высокой степенью параллельности, для моделирования диффузионных процессов широко используются КА, при помощи которых были решены некоторые проблемы газодинамики [2].

Клеточный автомат (КА) может мыслиться как стилизованный мир, в котором пространство представлено равномерной сеткой, а каждая клетка кодируется конечным числом битов, время дискретно [3]. Законы перехода состояний клетки, определяют состояние каждой клетки на текущий шаг по ее состоянию и состоянию ее соседей на предыдущем шаге по времени. Соседние клетки образуют ее окрестность [4].

Иногда при решении довольно простых дифференциальных уравнений возникают проблемы, связанные со сложными граничными условиями. Например, при решении параболического уравнения, описывающего диффузию в области со сложной границей (например, в пористой среде) возникают серьезные трудности.

Рассмотрим модель кинетики сорбции газа частицей угля. Изотерма сорбции описывается уравнением Ленгмюра. Частица, представляющая собой конечный объем угля с порами, содержащая сорбированный газ, характеризуется равномерным распределением микропор по объему. Перенос газа внутри частицы осуществляется диффузией по закону Фика.

Математическая постановка соответствующей двумерной задачи [5]:

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

$$C(x, y, t_0) = C_0(x, y), \quad (2)$$

$$C(x, y, t) = \frac{abP(t)}{1+aP(t)}, \quad (x, y) \in \Gamma, \quad (3)$$

где C – концентрация сорбированного газа; D – коэффициент диффузии; P – давление газа; C_0 – начальное значение концентрации; a, b – коэффициенты уравнения Ленгмюра; Γ – поверхность частицы.

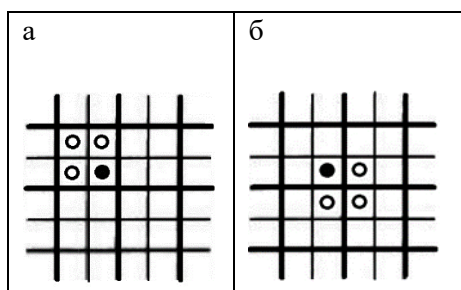
Будем исходить из того, что диффузия газа в твердом пористом теле эквивалентна самодиффузии. Рассмотрим движение отдельной молекулы газа. Столкновение этой молекулы с другими молекулами приводит к тому, что ее движение имеет стохастический характер. Заменим реальную молекулу молекулой «решеточного газа», которая движется скачками единичной длины в дискретные моменты времени по бесконечной решетке с квадратными ячейками. В каждый момент времени все четыре направления движения для частицы равновероятны. Такая модель движения частицы является случайным блужданием [6].

Случайного блуждания хорошо описывает диффузию [7]. Распределение вероятностей для модели случайного блуждания сводится к распределению для континуального движения реальной молекулы. Соответствующий результат получен аналитически [6-8], что было продемонстрировано для двумерного КА [4]. Такое двумерное случайное блуждание очень эффективно реализуется в виде КА с окрестностью Марголуса.

В рассмотренном ранее КА правила эволюции формулировались в терминах локального взаимодействия с использованием окрестности фон Неймана или Мура. Определим другой класс КА – КА с окрестностью Марголуса [4]:

- массив клеток разбит на множество конечных частей – блоков:
- задается правило для блока, правило применяется ко всем блокам, блоки не пересекаются;
- разбиение на блоки меняется от шага к шагу так, чтобы обеспечивалась пересеченность блоков, на соседних шагах.

Используя схему разбиения: массив клеток разбиваем на блоки размером 2×2 – на четных и нечетных шагах по времени производятся два разных разбиения на блоки (рис. 1) – четная решетка сдвинута по отношению к нечетной на одну клетку по вертикали и горизонтали. КА с окрестностью Марголуса может быть преобразован в обычный КА. В зависимости от того, какая решетка используется, клетка с черным кругом, будет иметь окрестностью либо четный, либо нечетный блок.



жирные линии – четная решетка; тонкие линии – нечетная решетка

Рис. 1. Блоки 2×2 окрестности Марголуса: а – четный блок; б – нечетный блок

Существенной частью поставленной с самого начала задачи (1), (2), (3) является реализация граничных условий (2) и (3), которая для клеточного автомата может быть осуществлена, исходя из решеточной модели адсорбции [9], где сложное адсорбционное поле поверхности заменяется на дискретную.

Суть решеточной модели адсорбции состоит в следующем. Имеется решетка из конечного числа центров, причем все центры одинаковы. Каждый центр может находиться в двух состояниях: 1) центр свободен; 2) центр занят молекулой адсорбата. Число адсорбированных молекул соответствует числу занятых центров. Если не учитывать взаимодействия между занятыми центрами, то при математическом описании модели получается уравнение Ленгмюра [9].

Уравнение Ленгмюра в его «решеточном» виде определяет число занятых адсорбционных центров как функцию давления газа. Этим уравнением можно пользоваться как критерием дискретного сорбционного равновесия при задании граничных условий вида (2), (3) для КА.

С учетом изложенного клеточный автомат для исследования кинетики газовой выделенности можно определить следующим образом. На клеточной плоскости выделяется два сорта клеток: клетки «твердое тело» (частица угля) и клетки «свободный газ». Клетки могут находиться в одном из двух состояний: «заполнено молекулой газа» и «пусто».

Клетки свободного газа будем считать находящимися в неопределенном состоянии: каждая из них содержит молекулу газа с некоторой вероятностью. Эта вероятность общая для всего массива клеток типа «свободный газ» и является аналогом давления свободного газа.

Обновление состояния клеток «твердое тело» осуществляется в соответствии с правилом для окрестности Марголуса.

На границе «твердое тело — газ» при разбиении на блоки в один блок попадают клетки обеих фаз. При повороте такого блока молекула газа имеет возможность покинуть «твердое тело». Неопределенное содержимое клетки свободного газа оказывается на границе «твердое тело — газ». Необходимо соотносить их таким образом, чтобы относительное число граничных клеток области сорбента, занятых молекулами, было равно отношению числа адсорбированных молекул к общему числу центров решетки, что обеспечит выполнение граничных условий (2), (3). Молекула

газа, покинувшая «твердое тело», поглощается. Вероятность наличия молекулы в клетке, «внедрившейся» в «твердое тело», равна единице. Этот механизм может быть реализован с помощью метода Монте-Карло, суть метода заключается в следующем: процесс описывается математической моделью с использованием генератора случайных величин.

Клеточно-автоматная диффузия. Ряд наиболее известных КА-моделей диффузии описан в [10]. Строгое доказательство соответствия КА-представления диффузии дифференциальному уравнению Лапласа дано в [11] для КА с окрестностью Марголуса. Там же впервые получена величина коэффициента диффузии $D = \tau d/h^2$ для этой КА-модели, который в двумерном случае $D_{2D} = 3/2$. Далее эта модель будет описана и использована для решения.

2D-модель КА с окрестностью Марголуса двумерной диффузии (1) с краевыми условиями (2), (3) — КА с множеством имен $M = \{(i, j): i = 0, 1, \dots, g; j = 0, 1, \dots, l\}$ и с шаблоном соседства $T\{i, j\} = \{(i, j), (i + 1, j), (i + 1, j + 1), (i, j + 1)\}$. Функция $v(i, j)$ может рассматриваться как булев клеточный массив $\Omega_B = \{(v_m, m)\}$, в котором клетка - это пара символов (v_m, m) , где v_m — переменная состояний, а $m \in M$ - имя клетки из множества имен M , обозначенных парой координат (i, j) в случае 2D-декартова пространства, а в общем случае - одним символом m . Область значений переменных состояний $v_m \in B$, где $B = \{0, 1\}$ — алфавит состояний.

Правила перехода из состояния в состояние вероятностные для «твердого тела» без граничных условий (3) имеющие следующий вид:

$$\begin{aligned} & \{(v_0, (i, j)), (v_1, (i + 1, j)), (v_2, (i + 1, j + 1)), (v_3, (i, j + 1))\} = \\ & = \begin{cases} \{(v_1, (i, j)), (v_2, (i + 1, j)), (v_3, (i + 1, j + 1)), (v_0, (i, j + 1))\}, & \text{если } rand < p_s, \\ \{(v_3, (i, j)), (v_0, (i + 1, j)), (v_1, (i + 1, j + 1)), (v_2, (i, j + 1))\}, & \text{если } rand \geq p_s, \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

где $rand$ — случайное число в интервале $(0, 1)$; $p_s \leq 1/2$ — вероятность взаимодействия клетки $(v_0, (i, j))$ с клетками соседями для «твердого тела». При $p_s = 1/2$ коэффициент диффузии $D = 3/2$.

Режим работы КА синхронный двухтактный. На первом такте подстановка (4) выполняется всеми клетками, у которых имена удовлетворяют условию: $i + j$ — четное число. На втором такте ту же подстановку выполняют клетки, у которых $i + j$ — нечетное число. Изменяя величину вероятности p , можно моделировать процесс диффузии с коэффициентом в широком диапазоне [12] т.е. при уменьшении p коэффициент D пропорционально уменьшается.

Правила перехода из состояния в состояние вероятностные для «свободного газа»:

$$v_m = \begin{cases} 1, & \text{если } rand < p_G, \\ 0, & \text{если } rand \geq p_G, \end{cases} \quad (5)$$

где $p_G \leq 1/2$ — вероятность наполненности клетки молекулой газа $(v_0, (i, j))$ для всего массива «свободного газа». Чем больше p_G тем больше давление «свободного газа».

Краевое условие (2) выполняются для границы «твердое тело – газ» следующим образом. Если в соседстве с клеткой «твердого тела» имеется хотя бы одна клетка «свободного газа», происходит проверка того что эта клетка содержала молекулу газа и одновременно с этим взаимодействовала с клеткой «свободного газа», если проверка успешна, то проводится проверка наполненности остальных клеток «твердого тела» молекулой газа, если они заполнены, то все клетки «твердого тела» будут заполнены, если нет, то между ними случайно выбирается одна из пустых клеток, и она заполняется молекулой газа, что является применением метода Монте-Карло т.е. применения генератора случайных чисел.

Численный эксперимент строится следующим образом. Задается начальное состояние системы (КА) (2), затем выполняется алгоритм (4), (5) и алгоритм для краевого условия (3), возникающего на границе «твердое тело — газ».

На рис. 2 показаны состояния эволюции процесса сорбции газа частицей угля с 4 микропорами. Использована 2D-модель КА с окрестностью Марголуса. Размеры массива 16x16 клеток, четыре массива со «свободным газом» 4x4. На границах «твердое тело — газ» применялось условие (3). Клетки с толстыми черными границами «твердое тело», клетки с тонкими границами «твердое тело — газ», клетки с бледно серыми границами «свободный газ». Серые клетки – наличие молекулы газа (заполненные), белые клетки – отсутствие молекулы газа (пустые).

Соответствующий алгоритм решения уравнения (1) применим для исследования других физических процессов, тепло- и электропроводности, магнитных и электромагнитных потоков и др. В таких компьютерных экспериментах наблюдается самоорганизация материи [13]. Самоорганизация вытекает из локальных взаимодействий, правило которых задаются, а структура возникает сама.

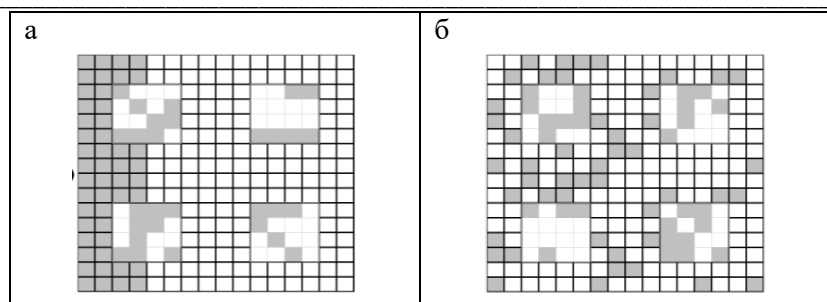


Рис. 2. Клеточно-автоматное моделирование сорбции газа частицей угля: а) начальное состояние; б) сотый шаг

Таким образом, результаты проведенных численных экспериментов показали, что клеточные автоматы обладают рядом возможностей с точки зрения качественного моделирования газодинамических процессов. Разработанная методология компьютерного моделирования эволюции состояний газоугольного раствора предусматривает использование КА как инструмента для исследования. Методология заключается в создании алгоритма, и его компьютерной реализации для исследования эволюции КА, выявления его свойств и анализа свойств газоугольного раствора.

Вывод. Предлагаемый концептуально КА предназначен для моделирования активных сред, отличается от известных КА тем, что клетка имеет одно для всех, фиксированное конкретной эволюции число состояний, для определения которых на каждом шаге решается краевая задача диффузии, а набор правил определяет состояние каждой клетки на текущем шаге по состоянию ее и ее соседей на предыдущем шаге по времени.

Список литературы

1. Самарский А.А., Гулин А.В. Устойчивость разностных схем. – М.: Наука, 1973.
2. Малинецкий Г.Г., Степанцов М.Е. Клеточные автоматы для расчета некоторых газодинамических процессов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1996. – № 5. – Т. 36. – С. 137-145.
3. Дж. фон Нейман. Теория самовоспроизводящихся автоматов. – М.: Мир, 1971.
4. Тоффоли Т., Мареолус Н. Машины клеточных автоматов. – М.: Мир, 1991. – 278 с.
5. Мясников А.А., Садохин В.П., Жирнова Т.С. Применение ЭВМ для решения задач управления метановыделением в шахтах. – М.: Недра, 1977. – 248 с.
6. Спизер Ф. Принципы случайного блуждания. – М.: Мир, 1969. – 137 с.
7. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Том 1. – М.: Мир, 1984. – 128 с.
8. Резибуа П., М.Де Ленер. Классическая кинетическая теория жидкостей и газов. – М.: Мир, 1980. – С. 35-39.
9. Лопаткин А.А. Теоретические основы физической адсорбции. – М.: Изд-во Моск.ун-та, 1983. – 233 с.
10. Bandman O. Comparative study of cellular automata diffusion models // Lecture Notes in Computer Science. – Berlin: Springer, 1999. – P. 395.
11. Малинецкий Г. Г., Степанцов М. Е. Моделирование диффузионных процессов клеточными автоматами с окрестностью Марголуса // Журнал вычислительной математики и математической физики. –1998. – Т. 36. – № 6. – С. 1017-1021.
12. Бандман О. Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. – 2006. – № 10. – С. 59-113.
13. Мелькер А.И. Моделирование эксперимента. Физика / Новое в жизни, науке, технике. – М.: Знание, 1991. – №10. – 64 с.

УДК 544.431.24

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ РЕАКЦИИ АЛКИЛИРОВАНИЯ БЕНЗОЛА

д.т.н. Калашников С.Н., Бабушкина О.С., Гаун М.А.

Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия

Аннотация. В работе представлено исследование процесса превращения углеводородов на примере реакции алкилирования бензола этиленом. Построена математическая модель исследуемого процесса в виде