

## Клеточно-автоматное моделирование кинетики газовыделения в конечном объеме угля

*А.Ю. Немцев, С.Н. Калашиников, О.С. Бабушкина, М.А. Гаун*

*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк*

**Аннотация:** Работа посвящена клеточно-автоматному моделированию на основе класса клеточных автоматов с окрестностью Марголуса. Выполнено моделирование процесса кинетики газовыделения в конечном объеме угля, включающем в себя: конвекцию, диффузию, сорбцию. Для организации подобного рода эволюционного процесса метод клеточно-автоматного моделирования был дополнен методом Монте-Карло.

**Ключевые слова:** клеточный автомат, окрестность Марголуса, метод Монте-Карло, диффузия, конвекция, сорбция, пористая среда, уголь.

### Введение

Рассмотрение пористых материалов как сплошных сред, характеризующихся определенным коэффициентом пористости, теперь не удовлетворяет ни разработчиков новых композитных материалов, ни исследователей горных пород. Во многих случаях необходимо учитывать внутренние свойства материала, среди которых главные - морфология среды и характер взаимодействия стенок пор с проходящим через них газом или жидкостью. Поскольку вычислительные мощности современных суперкомпьютеров позволяют представлять морфологию материала на микроуровне, то становится возможным имитировать прохождение газа или влаги через все извилины и преграды в толще материала [1]. Использовать для этого традиционные математические модели, основанные на дифференциальных уравнениях в частных производных, невозможно из-за трудно описываемых непрерывными функциями границ пор.

Предлагается вероятностный клеточный автомат, минимальная конфигурация которого имитирует три вида движений абстрактных частиц: конвекцию под действием внешней силы, диффузию (растекание) и взаимодействие со стенками. Эту модель можно считать аналогичной диффузионно-конвекционной модели пористой среды, основанной на

---

системе дифференциальных уравнений конвекция-диффузия [2], которая, однако, работает только в прямых пористых каналах.

### Объект

Угольное вещество накапливает метан в различных формах: газ, находящийся в свободном состоянии внутри дефектов сплошности – 2-12%; газ, адсорбированный на поверхностях дефектов сплошности – 8-16%; газ, распределенный в межмолекулярном пространстве (собственно твердый газугольный раствор) – 70-80%; химически сорбированный газ 1-2%; газ в клатратоподобных структурах – 1-3% [3]. Пренебрежём хемосорбцией и клатратными структурами (кроме газугольного раствора).

Неразгруженный от горного давления угольный пласт с прилегающей выработкой представляет собой газоносную пористую систему (дисперсную систему) с замкнутыми порами. Данная система состоит из среды «твердое тело» (газугольный раствор) и фазы «свободный газ» (пора). Коэффициент пористости углей от бурого угля к антрациту (1-0,16), примем пористость каменного угля, но под нагрузкой. Вектор скорости конвекции направлен в сторону выработки.

### Математическая модель

Рассмотрим модель кинетики газовыделения в конечном объеме угля. Изотерма сорбции описывается уравнением Ленгмюра. Конечный объем угля с порами, содержащий сорбированный газ характеризуется равномерным распределением микропор по объему. Перенос газа внутри конечного объема осуществляется диффузией и конвекцией.

Математическая постановка соответствующей двумерной задачи [4]:

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

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

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

где  $\vec{v}$  – вектор скорости;  $C$  – концентрация сорбированного газа;  $D$  – коэффициент диффузии;  $P$  – давление газа;  $C_0$  – начальное значение концентрации;  $a, b$  – коэффициенты уравнения Ленгмюра;  $\Gamma$  – поверхность частицы.

### Клеточный автомат

Клеточный автомат (КА) может мыслиться как стилизованный мир, в котором пространство представлено равномерной сеткой, а каждая клетка кодируется конечным числом битов, время дискретно [5]. Законы перехода состояний клетки определяют состояние каждой клетки на текущем шаге по ее состоянию и состоянию ее соседей на предыдущем шаге по времени. Соседние клетки образуют ее окрестность [6] (фон Неймана или Мура), КА с окрестностью Марголуса может быть преобразован в обычный КА. На рисунке 1 изображены: окрестность Мура; Фон Неймана; эквивалентная окрестности Марголуса, выделенные пунктирной линией, клетки, меняющие свое состояние, выделены черным цветом.

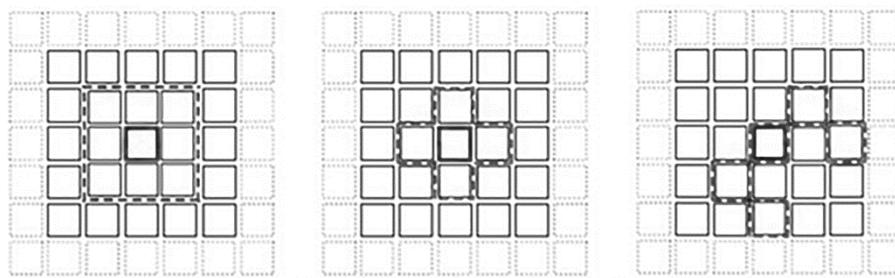


Рис. 1 Окрестность Мура, Фон Неймана, эквивалентная окрестности Марголуса

КА с окрестностью Марголуса [2]:

- 1) Состояния клеток: 0, либо 1;
- 2) Шаг:

2.1) Вся область разбивается на блоки по 4 клетки,

- 2.2) Клетки блока меняются состояниями равновероятно по или против часовой стрелки,
- 2.3) Итерация состоит из двух шагов четного и нечетного;
- 3) Два способа обработки крайних клеток:
  - 3.1) Замыкание,
  - 3.2) Не обрабатываются (рис. 2).

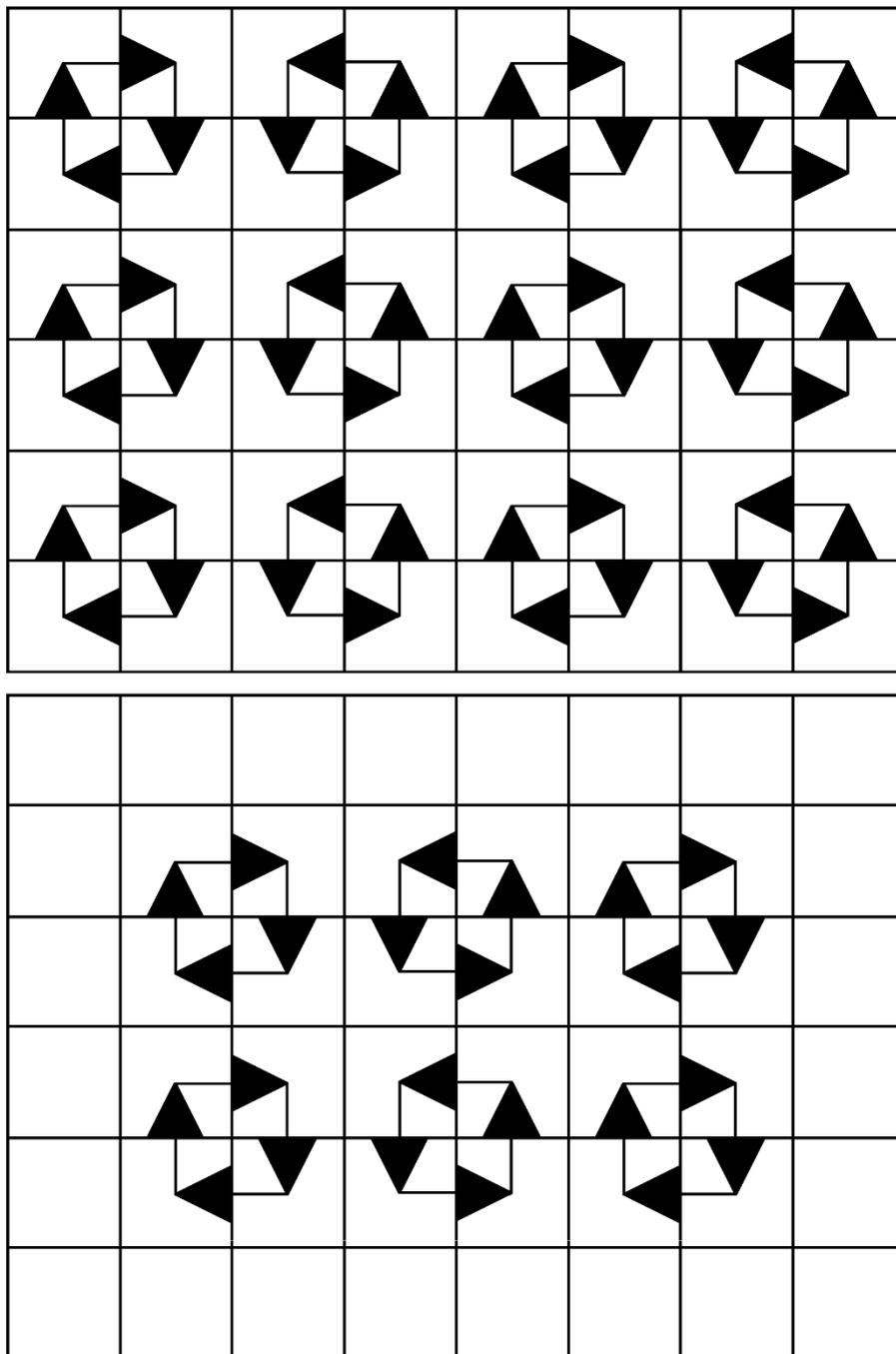


Рис. 2 Схема разбиения массива клеток КА с окрестностью Марголуса

На рисунке 2 изображена схема разбиения массива клеток КА с окрестностью Марголуса, со способом обработки крайних клеток – (не обрабатываются), проиллюстрирована. На рисунке 3 проиллюстрировано изменение состояний, равновероятное по часовой и против часовой стрелки, внутри блока.



Рис. 3 Изменение состояния клетки по и против часовой стрелки

### КА-модель

2D-модель КА с окрестностью Марголуса кинетики газовыделения (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.

Правило перехода для диффузии газа в «твердом теле» без учета граничных условий (3) имеет следующий вид:

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

где  $rand$  – случайное число в интервале  $(0,1)$ ;  $p_D \leq \frac{1}{2}$  – вероятность взаимодействия клетки  $(v_0(i,j))$  с клетками соседями для «твердого тела» при

диффузии. Ряд наиболее известных КА-моделей диффузии описан в [7]. Там же впервые получена величина коэффициента диффузии для этой КА-модели, который в двумерном случае  $D = \frac{3}{2}$ . Строгое доказательство соответствия КА-представления диффузии дифференциальному уравнению Лапласа дано в [8] для КА с окрестностью Марголуса. При  $p_D \leq 1/2$  коэффициент диффузии  $D = \frac{3}{2}$ . Изменяя величину вероятности  $p_D$ , можно моделировать процесс диффузии в широком диапазоне [9].

Правило перехода для «свободного газа» имеет вид:

$$(v_G(i, j)) = \begin{cases} (1, (i, j)), & \text{если } \text{rand} < p_G, \\ (0, (i, j)), & \text{если } \text{rand} \geq p_G, \end{cases}$$

где  $p_G \leq \frac{1}{2}$  – вероятность наполненности клетки молекулой газа  $(v_G(i, j))$  для всего массива «свободного газа». Чем больше  $p_G$  тем больше давление «свободного газа».

Правило перехода для диффузии газа в «твердом теле» на границе со «свободным газом» имеет следующий вид:

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

Правило перехода для конвекции газа в «твердом теле» без учета граничных условий (3) имеет следующий вид:

$$\{(v_0(i, j)), (v_1(i+1, j))\} \xrightarrow{p_C} \{(v_1(i, j)), (v_0(i+1, j))\},$$

где  $p_C$  – вероятность взаимодействия клетки  $(v_0(i, j))$  с клетками - соседями для «твердого тела» при конвекции. Вероятность  $p_C$  принимается равной или близкой к 1, так как это самое быстрое действие. Меняя координаты соседней клетки, можно менять направления вектора скорости конвекции. Изменяя соотношение количества шагов диффузии относительно шагов конвекции, можно задавать скорость конвекции.

Правило перехода для конвекции газа в «твердом теле» на границе со «свободным газом» имеет следующий вид:

$$\{(v_0(i, j)), (v_G(i+1, j))\} \xrightarrow{P_c} \{(v_0(i, j)), (v_G(i+1, j))\} .$$

### Результаты

На рисунке 4 показаны результаты моделирования кинетики газовыделения в конечном объеме угля с 1 микропорой. Использована 2D-модель КА с окрестностью Марголуса, со способом обработки крайних клеток – не обрабатываются. Размеры всего массива - 29x19 клеток, один массив со «свободным газом» - 13x7. 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 (незаполненные).

### Заключение

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 [10], и эта самоорганизация вытекает из локальных взаимодействий, правила которых задаются, а структура возникает сама.

Результаты проведенных численных экспериментов показали, что клеточные автоматы обладают рядом возможностей с точки зрения качественного моделирования газодинамических процессов. Разработанная методология компьютерного моделирования эволюции состояний конечного объема угля предусматривает использование клеточного автомата как инструмента для исследования.

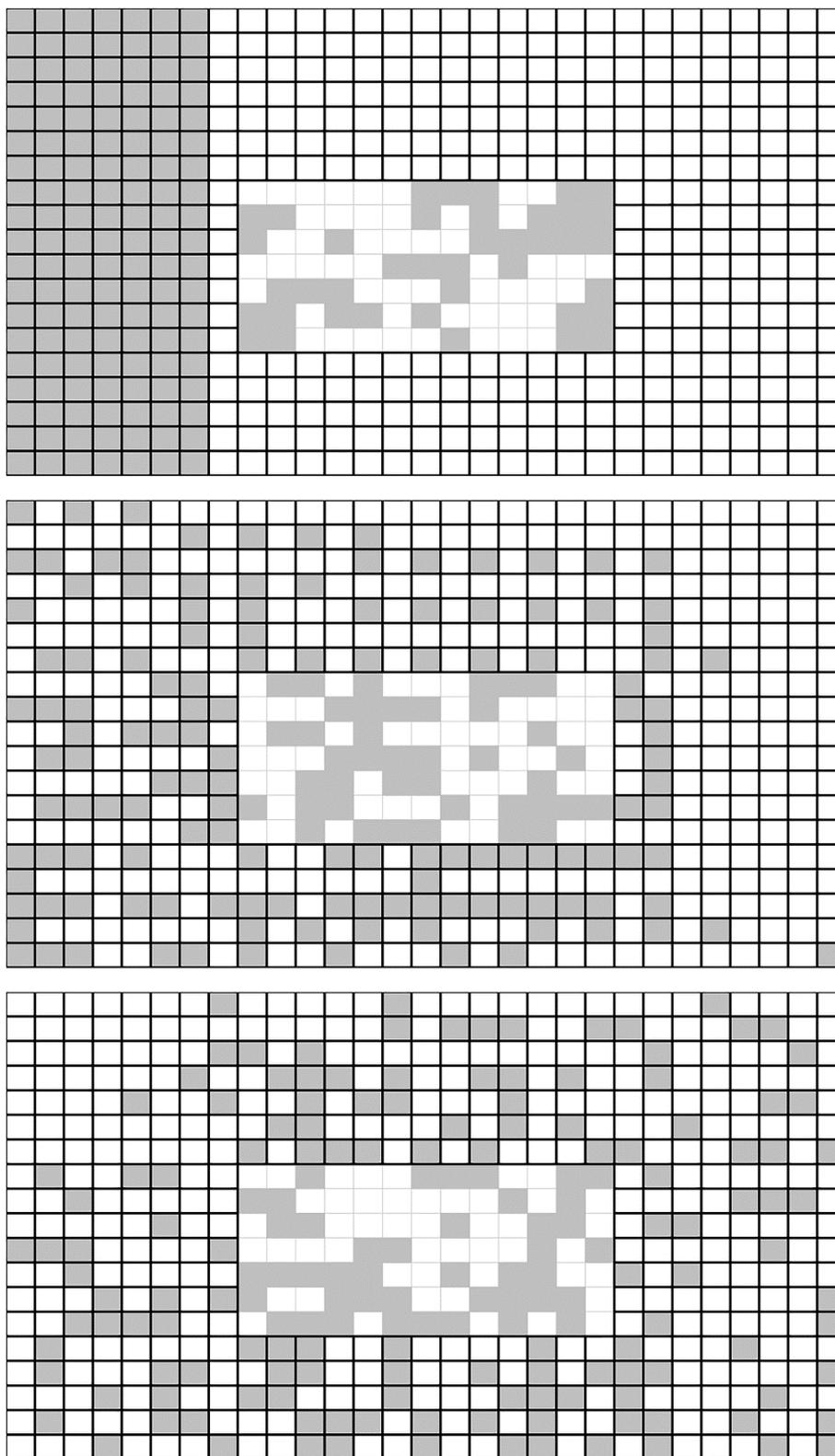


Рис. 4 Результаты клеточно-автоматного моделирования газовыделения в конечном объеме угля: начальное состояние; шестьдесят четвертый шаг; двухсот пятьдесят седьмой шаг.

## Литература

1. Бандман О.Л. Клеточно-автоматный метод исследования свойств пористых сред // Сиб. журн. вычисл. матем. 2010. Т. 13. № 1. С. 1-13.
2. Sahimi M. Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulation annealing // Review in Modern Physics. 1993. V. 65. № 4. pp. 1393-1534.
3. Кригман. Р.Н. Исследование в массиве газопроницаемости выбросоопасных пород // Уголь Украины. 1969. № 3. С. 44-45.
4. Мясников А.А., Садохин В.П., Жирнова Т.С. Применение ЭВМ для решения задач управления метановыделением в шахтах. М.: Недра, 1977. 248 с.
5. Фон Нейман Дж. Теория самовоспроизводящихся автоматов. М.: Мир, 1971. 326 с.
6. Тоффоли Т., Марголюс Н. Машины клеточных автоматов. М.: Мир, 1991. 278 с.
7. Bandman O. Comparative study of cellular automata diffusion models // Lecture Notes in Computer Science. Berlin: Springer. 1999. P. 395.
8. Малинецкий Г.Г., Степанцов М.Е. Моделирование диффузионных процессов клеточными автоматами с окрестностью Марголюса // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1998. Т. 36. № 6. С. 1017-1021.
9. Бандман О.Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. 2006. № 10. С. 59-113.
10. Мелькер А.И. Моделирование эксперимента / Новое в жизни, науке, технике. Физика. М.: Знание, 1991. № 10. 64 с.

## References

1. Bandman O.L. A cellular-automata method for studying porous media properties Num. Anal. Appl. 2010. V. 3. № 1. pp. 1-10.
-



2. Sahimi M. Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulation annealing Review in Modern Physics. 1993. V. 65. № 4. pp. 1393-1534.

3. Krigman. R.N. Ugol' Ukrainy. 1969. № 3. pp. 44-45.

4. Myasnikov A.A., Sadokhin V.P., Zhirnova T.S. Primeneniye EVM dlya resheniya zadach upravleniya metanovydeleniyem v shakhtakh [Computer application for solving problems of methane emission control in mines]. M. Nedra Publishers, 1977. 248 p.

5. Fon Nejman Dzh. Teoriya samovosproizvodyashixsya avtomatov [Theory of Self-reproducing Automata]. M. Mir, 1971. 326 p.

6. Toffoli T., Margolus N. Mashiny` kletochny`x avtomatov [Cellular automata machines: A New Environment for Modeling]. M. Mir, 1991. 278 p.

7. Bandman O.L. Comparative study of cellular automata diffusion models Lecture Notes in Computer Science. Berlin: Springer. 1999. P. 395.

8. Malinetski G.G., Stepantsov M.E. Modelling diffusive processes by cellular automata with Margolus neighborhood Comput. Math. Math. Phys. 1998. V. 36. № 6. pp. 973-975.

9. Bandman O.L. Sistemnaya informatika. 2006. № 10. pp. 59-113.

10. Mel'ker A.I. Modelirovaniye eksperimenta Novoye v zhizni, nauke, tekhnike. Fizika [Simulation of the experiment New in life, science, technology. Physics.]. M. Znaniye, 1991. № 10. 64 p.