

УДК 606 / 622.8

Тайлаков А.А., преподаватель Инженерной школы «УникУм»
Кемерово.

Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф.
Горбачева

Taylakov A.A., teacher at the Kemerovo school of engineer “UnikUm”
T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University

**ВКЛАД ПИРИТ-ОКИСЛЯЮЩИХ И МЕТАНОГЕННЫХ
БАКТЕРИАЛЬНЫХ СООБЩЕСТВ В ВЫДЕЛЕНИЕ ТЕПЛА И
ВЫХОД МЕТАНА ИЗ УГЛЯ**

**CONTRIBUTION OF PYRITE-OXIDIZING AND
METHANOGENIC BACTERIAL COMMUNITIES TO HEAT
GENERATION AND METHANE RELEASE FROM COAL**

Метан в угольных шахтах представляет угрозу для промышленной безопасности [1]. Этот газ может образовываться двумя путями – геотермическим и биогенным. Термогеный метан возникает при термическом разложении угля при высоких температурах и давлениях, тогда как биогенный продуцируется анаэробными археями, расщепляющими органику в угле [2].

Биогенный метан идентифицируется путем изотопного анализа. У микробного метана повышенное количество углерода с изотопом ^{12}C , в то время как термогеный метан содержит больше углерода ^{13}C [3].

В пласте действуют сложные микробные сообщества, превращающие высокомолекулярные углеродсодержащие компоненты угля в метан. Классические метаногены потребляют ацетат или H_2/CO_2 , но для разложения твёрдого угля необходимы деградирующие бактерии и грибки, обрабатывающие полимеры угля до более простых соединений [2].

Недавние исследования выявили уникальные термофильные метаногены, способные превращать ароматические компоненты угля напрямую в метан [4, 5].

Эти данные указывают, что биогенный метан существенно дополняет термогеный, помимо всего прочего в обнаруженных микробных сообществах найдены бактерии, способные повышать температуру изолированного пористого участка пласта путем разложения пирита содержащей фракции угля.

В ходе этого окислительного метаболизма бактерии выделяют значительное количество тепла, поскольку реакции окисления пирита экзотермичны.

Кроме того, повышение температуры стимулирует десорбцию газов, в частности, метана из угольной породы, усиливая выделение горючего газа.

В связи с данной информацией, целью исследования является дополнение уравнения газового баланса, которое позволит повысить точность прогнозирования эмиссии метана в выдержаных участках пласта. Для реализации поставленной цели необходимо построение математической модели, способной выполнять предиктивный анализ синтеза биогенного метана и повышения десорбции метана в связи с жизнедеятельностью термогенных бактерий.

Кинетика биометаногенеза описывается уравнением Гомперца (1).

$$G(t) = G_0 \exp \left[-\exp \left(\frac{R_{\max}}{G_0} (\lambda - t) + 1 \right) \right] \quad (1)$$

где G_0 – общий выход метана, $\text{мл}\cdot\text{г}^{-1}$; R_{\max} – максимальный суточный выход метана, $\text{мл}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{сут}^{-1}$; λ – лаг-фаза, сут.; t – время анаэробного сбраживания, сут.

Микробное окисление пирита бактериями *Acidithiobacillus ferrooxidans* и родственными термофильными формами описывается скоростью реакции первого порядка (2).

$$r_{ox}(t) = r_{ox,max} \cdot O_{sat}(t) \cdot \frac{[FeS_2]}{K_{FeS_2} + [FeS_2]} \quad (2)$$

где $r_{ox}(t)$ – скорость окисления пирита, $\text{г}\cdot\text{сут}^{-1}$; $r_{ox,max}$ – максимальная скорость окисления при насыщении кислородом; $[FeS_2]$ – концентрация пирита в породе, $\text{г}\cdot\text{г}^{-1}$; K_{FeS_2} – константа полунасыщения пиритом $O_{sat}(t)$ – степень насыщения шахтного участка кислородом и влагой.

Тепловыделение от микробного окисления пирита описывается балансом энергии (3):

$$C_{th} \frac{dT}{dt} = f_{heat} \Delta G_{rxn} r_{ox}(t) - k_{loss}(T - T_{env}) \quad (3)$$

где C_{th} – теплоёмкость системы, $\text{Дж}\cdot\text{°C}^{-1}$; f_{heat} – доля тепла, переходящая в породу (0–1); ΔG_{rxn} – удельная энергия реакции окисления пирита, $\text{Дж}\cdot\text{г}^{-1}$; k_{loss} – коэффициент теплоотдачи, $\text{Дж}\cdot\text{°C}^{-1}\cdot\text{сут}^{-1}$; T_{env} – температура окружающей среды, $^{\circ}\text{C}$.

С применением моделей (1,2,3) выполнена оценка динамики метаногенеза в шахтной атмосфере (рисунок 1).

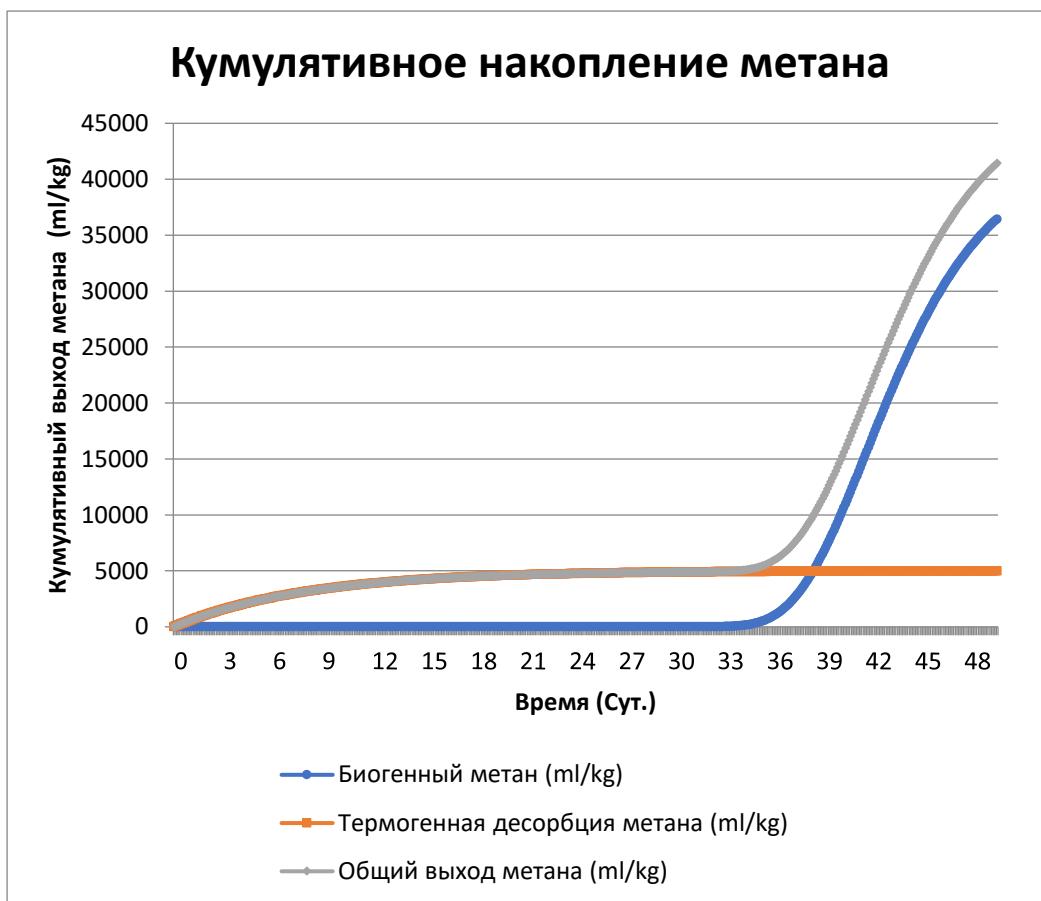


Рис.1

На графике (Рис.1) показаны три кумулятивные кривые. Срок симуляции составляет 50 дней, в ранней фазе первые $\approx 0-30$ дней вклад десорбции доминирует. Кумулятивная десорбция, вызванная микробным нагревом, даёт ранний вклад в суммарный выход CH_4 , что является быстрым, но ограниченным всплеском, который обусловлен запасом адсорбированного газа. На ~ 36 сутки биогенная кривая Гомпертца разгоняется и становится доминирующим источником метана.

Микробная лаг-фаза, которая начинается спустя 30 суток, сопровождается быстрым ростом бактериальной популяции и биометаногенезом. Данная фаза пересекает линию термогенной десорбции, становясь ведущим вкладом в суммарный выход.

Представленная модель является обобщённой с такими упрощениями, как пространственно-однородный объём, простая модель для активности пирит-окисляющих бактерий, демонстрирующая логистоподобный рост на графике, усреднённый коэффициент превращения химической энергии в тепло f_{heat} , а также первый порядок десорбции.

Данные допущения необходимы для получения легко настраиваемой модели, которая может служить основой обучающих алгоритмов для предиктивных нейросетей.

Список литературы.

1. Wang Z, Wang X. Promotion effects of microwave heating on coalbed methane desorption compared with conductive heating. *Sci Rep.* 2021;11(1):9618. Published 2021 May 5.
2. Iram, A., Akhtar, K. & Ghauri, M.A. Coal methanogenesis: a review of the need of complex microbial consortia and culture conditions for the effective bioconversion of coal into methane. *Ann Microbiol* **67**, 275–286 (2017).
3. Тайлаков О.В. // Определение источников газовыделения в атмосферу выемочного участка на основе измерений изотопного состава углерода метана // Тайлаков О.В., Макеев М.П., Герасимов А.В., Коровин Д.С. // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2017. № 5 (123). С. 73-79.
4. M. K. Lloyd, E. Trembath-Reichert, K. S. Dawson, J. Feakins, M. Mastalerz, V. J. Orphan, L. Sessions, J. M. Eiler. Methoxyl stable isotopic constraints on the origins and limits of coal-bed methane // *Science*. 2021.
5. Mayumi D, Mochimaru H, Tamaki H, Yamamoto K, Yoshioka H, Suzuki Y, Kamagata Y, Sakata S. Methane production from coal by a single methanogen. *Science*. 2016 Oct 14;354(6309):222-225.