

МЕТОДИЧЕСКИЕ  
РЕКОМЕНДАЦИИ  
ПО ПРИМЕНЕНИЮ  
МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ  
ДЛЯ РЕШЕНИЯ  
ГЕНЕТИЧЕСКИХ  
И ПРОГНОЗНЫХ ЗАДАЧ  
НЕФТЕГАЗОВОЙ ГЕОЛОГИИ

1991



МИНИСТЕРСТВО ГЕОЛОГИИ СССР  
СИБИРСКОЕ НАУЧНО–ПРОИЗВОДСТВЕННОЕ ОБЪЕДИНЕНИЕ ПО ГЕОЛОГО–  
ГЕОФИЗИЧЕСКИМ РАБОТАМ (НПО „СИБГЕО“)  
СИБИРСКИЙ НАУЧНО–ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ГЕОЛОГИИ,  
ГЕОФИЗИКИ И МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ (СНИИГГИМС)

Согласовано:  
Начальник отдела  
научно–технического  
прогресса  
Министерства геологии  
СССР

А.И. Кривцов

14. 12. 1990 г.

МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ  
ПО ПРИМЕНЕНИЮ МАТЕМАТИЧЕСКИХ  
МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ГЕНЕТИЧЕСКИХ  
И ПРОГНОЗНЫХ ЗАДАЧ  
НЕФТЕГАЗОВОЙ ГЕОЛОГИИ

Утверждены Ученым советом СНИИГТимСа

Предлагаются новые модели природного процесса образования углеводородов из органического вещества пород. Приводится описание балансово-кинетических и различных модификаций классических кинетических моделей. Разработана новая концепция углеводородогенерирующих систем на основе представлений об единстве процесса генерации и первичной миграции нефти.

Рассчитаны на геологов, геохимиков-нефтяников, а также на широкий круг специалистов, занимающихся вопросами литогенеза.

Ил. 9, список лит. - 17 назв.

Научный редактор А.Э.Конторович

Ответственные за выпуск и составители: Л.М. Бурштейн,  
А.Э.Конторович, В.Н.Меленевский, В.И.Москвин

## ВВЕДЕНИЕ

Главное преимущество математических, и в частности кинетических, моделей перед моделями других типов заключается в наиболее полном учете и объединении геологической, геофизической и геохимической информации. Модели эти к тому же обладают высокой универсальностью, поскольку одними и теми же уравнениями (системами уравнений) можно описать как природные геологические процессы, так и искусственные (экспериментальные) и многие другие.

С применением математических моделей для описания процесса генерации углеводородов (УВ) в нефтяной геологии сложилась парадоксальная ситуация – все исследователи отдают себе отчет в том, что природные системы открытые. Формальный же аппарат, использующийся в моделях, обычно не учитывает процесса материального обмена. Иными словами, процессы генерации и первичной миграции нефти искусственно разделяются. Поэтому большинство моделей генерации формально описывают замкнутые системы, модели же эмиграционные описывают открытые системы (но без самого процесса генерации).

Составителями настоящих методических рекомендаций – Л.М.Бурштейном, А.Э.Конторовичем, В.Н.Меленевским и В.И.Москвиным – разработаны две рекомендации, в которых модели условно разделены на замкнутые и открытые.

В первой рекомендации описывается "гибридная" балансово-кинетическая модель процесса преобразования РОВ, сопровождающегося новообразованием битумоида и газообразных УВ. Данная модель описывает динамику новообразования всех продуктов катагенеза РОВ с учетом их элементного и группового состава. Преобразование керогена представлено процессом независимых параллельных реакций мономолекулярного распада.

Во второй рекомендации совершенствуется классический кинетический подход, основанный на представлении процесса одной обобщенной химической реакции первого порядка образования УВ и ОВ в замкнутой системе. Уточняются также представления о зональности нефтегазообразования. Приводятся конкретные расчеты для отдельных районов Западной Сибири.

В разделе 2.2 разрабатывается новая концепция генерационных систем с точки зрения материального обмена их с внешней средой. На

основе представления о единстве процесса генерации и первичной миграции нефти выделены два основных типа открытых систем – транзитный и аккумулятивный. Получены соотношения, связывающие современную концентрацию  $УВ$  в данных системах, с константой скорости реакции, интенсивностью обмена систем со средой и современной концентрацией  $ОВ$ .

## 1. ОЦЕНКА МАСШТАБОВ ГЕНЕРАЦИИ БИТУМОИДОВ, УГЛЕВОДОРОДОВ И НЕУГЛЕВОДОРОДНЫХ ЛЕТУЧИХ КОМПОНЕНТОВ НА ОСНОВЕ БАЛАНСОВО-КИНЕТИЧЕСКОГО ПОДХОДА

Балансовый подход к оценке масштабов генерации летучих продуктов катагенеза рассеянного ОБ реализован в целом группой методов и моделей, разработанных в основном усилиями школы советских геохимиков-нефтяников. Эти методы базируются на детальном изучении изменения химического состава ОБ в процессе литификации осадков. В этом направлении достигнуты замечательные успехи. Разработаны детальные схемы преобразования РОВ с учетом его химического и функционально-группового состава, состава продуктов преобразования на всех стадиях катагенеза в различных термодинамических и литолого-фациальных обстановках. Построены методы диагностики нефтематеринских отложений и расчета масштабов генерации и эмиграции жидких и газообразных УВ. Все это позволяет достаточно уверенно воспроизводить историю процессов нефтегазообразования в стратосфере.

Существует и несколько отличный подход к описанию динамики процессов генерации УВ. Он в меньшей степени учитывает химическую природу РОВ и основан на идее представления всей огромной совокупности реакций его преобразования в виде ограниченного числа достаточно простых реакций. При этом РОВ представляется как сумма небольшого числа однородных компонентов, каждому из которых соответствует своя реакция преобразования со своими кинетическими параметрами. Первую математическую модель такого рода, позволяющую описать динамику генерации нефти использовали, по-видимому, Ц.Майер и Ф.Циммерли в 1924 г. (изложение по Д.Вайту). Проанализировав результаты опытов по пиролизу ОБ, они предложили формулу для расчета количества битумоида, образовавшегося за определенное время при постоянной температуре. В частности, Вайт приводит данные о том, что при температуре 100 °С ОБ сланцев Грин-Ривер преобразуется на 1 % за 0,84 млн лет.

Впоследствии многие исследователи пытались применить уравнение химической кинетики для описания процессов преобразования ОБ при катагенезе (Абельсон, 1963; Филиппи, 1965; Коннан, 1974 и др.).

6 В большинстве случаев предполагалось, что преобразование ОВ описывается уравнением кинетики первого порядка

$$dC/dt = -kC, \quad (I)$$

где  $C$  - концентрация;  $t$  - время;  $k$  - константа скорости реакции, подчиняется закону Аррениуса:

$$k = A \exp(-E/RT),$$

где  $A$  - предэкспонента или частотный фактор;  $E$  - энергия, или (учитывая сложность процесса преобразования) псевдоэнергия активации;  $R$  - газовая постоянная;  $T$  - абсолютная температура. Параметры  $A$  и  $E$  определялись либо из лабораторных экспериментов, либо из анализов природных данных. Причем характерно, что значение  $E$ , определяемое по данным лабораторного пиролиза (209-271 кДж/моль), превосходит значение  $E$ , определяемое по изменению ОВ в верхних частях разреза (42-62 кДж/моль). Это объясняется тем, что представление преобразования ОВ при катагенезе одной реакцией первого порядка - слишком грубое приближение. Ф.Вайткамп и Л.Гутберлет экспериментально показали, что энергия активации процесса преобразования от нескольких единиц до нескольких десятков килоджоуль на моль. Это заставляет предположить более сложный характер протекания реакций преобразования ОВ.

В 1948 г. В.А.Соколов предположил описывать процесс нефтепреобразования как группу параллельно-последовательных реакций. Идея о представлении образования битумоида (или основных компонентов нефти) как серии параллельно-последовательных реакций первого порядка в полном объеме была развита в работах Б.Тиссо и др., а также позднее в работах А.Кунио. Заметим, что в данном случае рассматривается не группа параллельных реакций с одним исходным веществом, а несколько одностадийных независимых реакций первого порядка с различными по существу исходными веществами.

Б.Тиссо с соавторами рассмотрели несколько упрощенных схем преобразования ОВ. По Б.Тиссо кероген содержит  $l$  лабильных компонентов, каждый из которых распадается под действием нагрева с преобразованием нефтеподобных веществ (битумоида). Распад каждого компонента описывается уравнением кинетики первого порядка (типа I). Причем, каждый компонент керогена характеризуется своей энергией активации  $E_l$ , своим частотным фактором  $A_l$  и своим начальным содержанием  $x_{0l}$ . Сумма  $x_{0l}$  представляет собой долю лабильного вещества в керогене, или, другими словами, начальный генерационный потенциал. Компоненты  $y_l$  ( $l = 1, \dots, N$ ), за которые Б.Тиссо принял хлороформенный экстракт, в дальнейшем подвергаются крекин-

гу с образованием газообразных компонентов. В схеме Тиссо обе группы реакций сопровождаются выделением летучих углеводородных компонентов и конденсированного углеродного остатка. Предполагается, что крекинг нефтеподобных компонентов описывается одной реакцией первого порядка. Система уравнений, предложенная Тиссо, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= -k_i x_i, & k_i &= A_i l^{-\frac{E_i}{RT}}, \\ \frac{dy_j}{dt} &= k_{2j} y_j, & k_{2j} &= A_{2j} l^{-\frac{E_{2j}}{RT}}, \\ y &= \sum y_i, \\ \sum_i x_{oi} + \sum_i y_{oi} + \sum_j u_{jo} &= \sum_i x_i + \sum_i y_i + \sum u_j. \end{aligned}$$

Здесь  $x_i$  - текущее количество керогена с энергией активации  $E_i$ ;  $y_i$  - текущее количество образующихся из  $x_i$  компонентов нефти;  $u_j$  - количество  $j$ -го продукта крекинга нефти;  $x_{oi}$ ,  $y_{oi}$  и  $u_{jo}$  - начальные содержания; коэффициенты  $k$  подчиняются закону Аррениуса.

Можно отметить следующие недостатки указанного подхода:

1. Предложенная модель описывает реакции в системе, закрытой относительно битумоида и более легких УВ-компонентов.
2. Хотя предполагается образование летучих неоднородных компонентов, фактически их образование не учитывалось, как можно заключить из известных нам публикаций.

Первое обстоятельство ведет к существенным затруднениям при калибровке модели по природным данным и заставляет использовать результаты лабораторных экспериментов. Как показал Л.Сноудон, а впоследствии В.Н.Меленевский, такой подход не вполне корректен, во-первых, из-за возможной смены механизма реакции, а во-вторых, из-за нарушения принципа изохимичности.

Второе обстоятельство приводит к систематическому нарушению закона сохранения массы и, по-видимому, завышению количества генерированных УВ. Устранить этот недостаток можно, дополнив систему уравнений Б.Тиссо другой, отражающей поэлементный или групповой баланс вещества, подобно тому как это сделано В.А.Успенским, А.Э.Конторовичем, Е.А.Рогозиной и др. В рамках балансового подхода, ориентированного как раз на расчет количества летучих, количество новообразующегося между двумя стадиями битумоида должно быть каким-либо способом задано. Поэтому кажется целесообразным, обобщить в единых рамках балансовую и кинетическую модели, с тем чтобы полученная математическая модель описывала динамику новооб-



8 разования всех продуктов катагенеза РОВ с учетом их элементного и функционально-группового состава.

В соответствии с рассмотренной выше кинетической моделью преобразование РОВ, точнее, его нерастворимой части – керогена, представимо как группа протекающих одновременно и независимо реакций мономолекулярного распада. Каждой реакции соответствует свой компонент керогена, начальное содержание которого в объеме породы с единичной сухой массой обозначим  $x_{ol}$ . Здесь  $l = I, \dots, m$ , а  $m$  – количество компонентов в керогене. Каждая реакция характеризуется своим частотным фактором  $A_l$ , своей псевдоэнергией активации  $E_l$ . Предположим, что в результате каждой независимой реакции образуется весь спектр продуктов катагенеза – битумоид, легкие и газообразные УВ-соединения,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $H_2S$  и т.д.

Естественно предположить, что для  $l$ -й реакции соотношение между продуктами и их состав остаются постоянными. Обозначим через  $q_k$  – общее содержание керогена в объеме породы с единичной массой, через  $q_j$  – количество  $j$ -го продукта преобразования в том же объеме, а через  $q_{ok}$  и  $q_{oj}$  – те же содержания их в начальный момент времени. Здесь  $j = I, \dots, N$ , а  $N$  – количество продуктов генерации. Через  $\rho_i^k$  и  $\rho_i^j$  обозначим содержание  $i$ -го элемента или функциональной группировки в керогене и  $j$ -м продукте его распада. Поэлементный или групповой баланс вещества для указанного объема породы запишется в виде системы уравнений:

$$\rho_{oi}^k q_{ok} + \sum_j \rho_{oi}^j q_{oj} = \rho_i^k q_k + \sum_j \rho_i^j q_j ; \quad (2)$$

$$\sum_i \rho_{oi}^k = \sum_i \rho_i^k = \sum_i \rho_{oi}^j = \sum_i \rho_i^j = 1.$$

Здесь  $\rho_{oi}^k$  и  $\rho_{oi}^j$  – соответствующие содержания в начальный момент времени. Согласно принятым предположениям, распад компонента керогена  $x_l$  описывается уравнением типа (I), решение которого имеет вид:

$$x_l = x_{ol} \exp \left\{ -A_l \int_0^t l^{-\frac{E_l}{RT}} dt \right\}. \quad (3)$$

Количество новообразованных из  $l$ -й компоненты продуктов обозначим  $y_l$ :

$$y_l = x_{ol} - x_l.$$

Если обозначить долю  $j$ -го вещества в продуктах  $l$ -й реакции через  $\alpha_{jl}$ , то общее количество  $j$ -го продукта в произвольный момент выразится через  $y_l$  следующим образом:

$$q_j = q_{oj} + \sum \alpha_{jl} y_l.$$

Количество  $i$ -го элемента или функциональной группировки в  $j$ -м продукте определяется коэффициентом  $\rho_{il}^j$ , который постоянен для простых продуктов катагенеза ( $\text{CH}_4, \text{NH}_3, \text{CO}_2$  и т.д.). Для битумоида такое предположение в общем случае несправедливо, но можно допустить, что оно выполняется для битумоида, образующегося в каждой  $l$ -й реакции. С учетом сказанного количество  $i$ -го элемента в  $j$ -м продукте катагенеза будет определяться следующим уравнением:

$$\rho_{oi}^j q_j = \rho_{oi}^j q_{oj} + \sum_l \rho_{il}^j \alpha_{jl} y_l. \quad (4)$$

Подставив (4) в (2), получим:

$$\rho_{oi}^k q_{ok} = \rho_{oi}^k q_k + \sum_j \sum_l \rho_{il}^j \alpha_{jl} y_l. \quad (5)$$

Последнее выражение отражает поэлементный или групповой баланс керогена. Общий баланс вещества (закон сохранения массы) применительно к данной системе можно выразить следующим уравнением:

$$q_{ok} = q_k + \sum y_l. \quad (6)$$

Теперь, просуммировав (5) по  $l_i$ , с учетом (2) и (6) выражения, получим на произведение величин  $\rho_{il}^j \alpha_{jl}$  условие

$$\sum_i \sum_j \rho_{il}^j \alpha_{jl} = 1.$$

Обозначим

$$r_{il} = \sum_j \rho_{il}^j \alpha_{jl}$$

и с учетом этого обозначения и формулы (6) перепишем (4):

$$\rho_{oi}^k q_{ok} = \rho_{oi}^k (q_{ok} - \sum_l y_l) + \sum r_{il} y_l.$$

10 И наконец, обозначив в (3) экспоненциальный множитель через  $\xi_l$ , получим:

$$\rho_{oi}^x \sum x_{ol} = \rho_i^x \sum_l x_{ol} \xi_l + \sum_l \tau_{il} x_{ol} (1 - \xi_l). \quad (7)$$

Отсюда найдем содержание  $i$ -го элемента или функциональной группировки в керогене:

$$\rho_i^x = \frac{\rho_{oi}^x \sum x_{ol} - \sum_l \tau_{il} x_{ol} (1 - \xi_l)}{\sum x_{ol} \xi_l}.$$

Таким образом, измеримая величина  $\rho_i^x$  выражена через рассчитываемую  $\xi_l$  и ряд постоянных параметров. Если считать величины  $A_l$  и  $E_l$  известными ( $E_l$  можно задать априорно в виде достаточно частого ряда значений, а  $A_l$  оценить по динамике изменения количества битумоида), то для определения  $\rho_i^x$  необходимо оценить величины  $\rho_{oi}^x$ ,  $x_{ol}$  и  $\tau_{il}$ . Это можно сделать по данным о составе наименее мобильной части природного РОВ-керогена. Исследовав состав (т.е., измерив величины  $\rho_i^x$ ) достаточного числа образцов керогена и восстановив по геологическим данным их температурную историю, можно рассчитать величины  $\xi_l$ , а затем, используя уравнения (2-7), оценить искомые параметры. Если количество измерений достаточно, можно воспользоваться, например, методом наименьших квадратов. Однако если исходить из количества продуктов катагенеза РОВ, рассматриваемых в известных модификациях балансового метода и количества компонентов керогена, которые надо ввести в кинетическую модель для удовлетворительного описания процесса его распада, то количество неизвестных величин может достигнуть 50 и более. Следовательно, такой подход представляется малоперспективным.

Существует, однако, возможность обойти эти вычислительные трудности, возникающие из-за размерности системы. Реально в природе мы всегда наблюдаем зависимость всех параметров РОВ от глубины (или от максимальной температуры), а не от времени. Как показывают опытные расчеты по кинетическим моделям для синхронных отложений, испытывающих преимущественное погружение, существуют некоторые интервалы максимальных температур (глубин), в которых распадается преимущественно один из компонентов керогена. Реакции с более низкими псевдоэнергиями активации уже практически прошли до конца, а с более высокими проходят с пренебрежимо малой скоростью. Если выбирать фактические данные последовательно из таких

интервалов, то это существенно упростит нахождение, по крайней мере, части неизвестных параметров. Кроме того, априорный по существу выбор ряда псевдоэнергий активации оставляет возможность специального подбора таких интервалов при моделировании процессов генерации продуктов катагенеза РОВ конкретных отложений.

Пусть все измеренные значения  $\rho_i^k$  принадлежат интервалу глубин, в котором определяющую роль играет реакция распада компонента керогена с номером  $l'$ . Будем считать, что все компоненты керогена с номерами  $l < l'$  уже распались, а с номерами  $l > l'$  практически стабильны в данном интервале глубин\* (температур):

$$\sum_{l < l'} \gamma_{il} x_{ol} (1 - \xi_l) = \sum_{l > l'} \gamma_{il} x_{ol};$$

$$\sum_{l > l'} \gamma_{il} x_{ol} (1 - \xi_l) \approx 0;$$

$$\sum_{l < l'} \gamma_{ol} \xi_l \approx 0; \quad \sum_{l > l'} x_{ol} \xi_l = \sum_{l < l'} x_{ol};$$

$$\sum_{l < l'} \gamma_{il} x_{ol} (1 - \xi_l) = \gamma_{il'} x_{ol} (1 - \xi_{l'});$$

$$\sum_{l > l'} x_{ol} \xi_l = x_{ol'} \xi_{l'}.$$

Введем новые обозначения:

$$a_i = \rho_{oi}^k \sum_{l'} x_{ol} - \sum_{l < l'} \gamma_{il} x_{ol} - b_i;$$

$$b_i = \gamma_{il} x_{ol'}; \quad c_i = \sum_{l > l'} x_{ol}.$$

Теперь с учетом соотношения (8) выражение для концентрации  $i$ -го элемента в керогене имеет вид:

$$\rho_i^k = (a_i + b_i \xi_{l'}) / (c_i + x_{ol'} \xi_{l'})$$

или, если обозначить

$$\tilde{a}_i = a_i / x_{ol'}, \quad \tilde{b}_i = b_i / x_{ol'},$$

$$\tilde{c}_i = c_i / x_{ol'},$$

(8)

то  $\rho_i^k = (\tilde{a}_i + \tilde{b}_i \xi_{l'}) / (\tilde{c}_i + \xi_{l'})$ .

Для предварительной оценки констант  $\tilde{a}_i$ ,  $\tilde{b}_i$  и  $\tilde{c}_i$  достаточно знать значения  $\rho_i^k$  для трех образцов с различными вычис-

12 ленными величинами  $\xi_{i'}$ , но находящимися в соответствующем интервале глубин. Если существуют более трех таких замеров, можно воспользоваться, например, методом наименьших квадратов.

Вычисления следует начинать с наименее глубоких интервалов разреза. При  $l' = I$ , т.е., когда определяющей является реакция преобразования наименее стабильного компонента керогена, из формулы (8) получим:

$$\begin{aligned}\tilde{a}_{i1} &= \rho_{oi}^k \sum_l \frac{x_{ol}}{x_{oi}} - \gamma_{i1}; \\ \tilde{b}_{i1} &= x_{i1}, \quad \tilde{c}_{i1} = \sum_l \frac{x_{ol}}{x_{oi}},\end{aligned}$$

отсюда для  $\rho_{oi}^k$  и  $\gamma_{i1}$  получим

$$\rho_{oi}^k = (\tilde{a}_{i1} + \tilde{b}_{i1}) / (1 + \tilde{c}_{i1}), \quad \gamma_{i1} = \tilde{b}_{i1}. \quad (9)$$

Кроме того, определено отношение

$$\sum_l x_{ol} / x_{oi} = 1 + \tilde{c}_{i1}.$$

Определив величины  $\tilde{a}_{i1}$ ,  $\tilde{b}_{i1}$  и  $\tilde{c}_{i1}$ , можно перейти к определению параметров во втором интервале глубин (максимальных температур). Из (9) с учетом (8) следует:

$$\begin{aligned}\tilde{a}_{i2} &= \rho_{oi}^k z_{i2} \frac{\sum_{l=1} x_{ol}}{x_{oi}} - \gamma_{i1} \frac{x_{oi}}{x_{o2}} - \gamma_{i2}; \\ \tilde{b}_{i2} &= \gamma_{i2}; \quad \tilde{c}_{i2} = \left( \frac{\sum_{l=1} x_{ol}}{x_{oi}} - \frac{x_{o2}}{x_{oi}} \right) \frac{x_{oi}}{x_{o2}}.\end{aligned}$$

И далее

$$\begin{aligned}\tilde{a}_{i2} \rho_{oi}^k [z_{i2} (1 + \tilde{c}_{i1})] &- \gamma_{i1} z_{i2} - \gamma_{i2}, \\ \tilde{b}_{i2} &= \gamma_{i2}, \quad \tilde{c}_{i2} = z_{i2} \tilde{c}_{i1} - 1,\end{aligned} \quad (10)$$

где  $z_{i2} = \frac{x_{oi}}{x_{o2}}$ .

Очевидно, что система (10) избыточна относительно неизвестной  $z_{i2}$  и, следовательно, можно ограничиться оценкой любой из двух величин  $\tilde{a}_{i2}$  или  $\tilde{c}_{i2}$ . Продолжая описанную здесь процедуру, можно последовательно оценить все величины  $\gamma_{il}$  и  $x_{ol}$  (последние с точностью до одного множителя). Но следует заметить, что описанная схема справедлива, только когда в рассматриваемом интервале глубин (или максимальных температур) содержания  $\rho_i^k$  зависят от

монотонно. Немонотонный характер их поведения указывает на то, что динамика процесса в данном интервале определяется более чем одной реакцией и исходный ряд псевдоэнергий активации должен быть скорректирован.

Предложенная здесь балансово-кинетическая модель в значительной мере сохраняет недостатки "кинетического" и "балансового" подхода. Однако, откалибровав ее надлежащим образом, можно достаточно детально имитировать динамику процесса преобразования РОВ, сопровождающегося новообразованием битумоида и легких УВ-соединений, то, в свою очередь, позволит более объективно решать вопросы о соотношении в пространстве и времени основных фаз нефте- и газобразования.

## 2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГЕНЕРАЦИИ УГЛЕВОДОРОДОВ В КАТАГЕНЕЗЕ НА ОСНОВЕ КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

### 2.1. Условно замкнутые системы

#### 2.1.1. Предварительные замечания

Количественные расчеты прогнозных объемов генерированных УВ основаны на эмпирических и теоретических зависимостях степени разложения керогена от температуры и времени.

Эмпирический подход первоначально был предложен Н.В. Лопатиным [7] путем простейшего расчета суммарного импульса тепла (СИТ), корреляционно связанного с отрицательной способностью витринита,  $R^0$ , который учел эффект времени и температуры на созревание ОВ. Впоследствии на значительно большем объеме фактического материала Н.В. Лопатиным [6] была уточнена зависимость  $R^0 = f(\text{СИТ})$ ; работы подобного плана были проведены также Карповым [3] и Уэллсом; характер зависимости  $R^0 = f(\text{СИТ})$  приведен ниже:

$$R^0 = 1,301 \times (\text{СИТ}) - 0,5282, [3];$$

$$R^0 = 0,4762 \times (\text{СИТ}) - 1,1638, [6];$$

$$R^0 = 0,1974 \times (\text{СИТ}) - 0,9852, [7];$$

$$R^0 = 0,2645 \times (\text{СИТ}) - 0,4841, \text{ Уэллс.}$$

С использованием данных о катагенезе, полученных методом СИТ, осадочном разрезе выделяются ГЗН и ГЗГ. Так, согласно работе [6], начало ГЗН характеризуется значениями СИТ 70-85, максимум в ФН - 160-200, завершение ГФН и выход пород из ГЗН - 400-450.

14 . Хотя в явном виде в этом подходе не используется уравнение кинетики химических реакций, однако в его основе лежит допущение об удвоении скорости реакции при каждом повышении на 10 °С, это справедливо для реакций с энергией активации в интервале 41–83 кДж/моль. На практике вследствие сложности состава химических связей в керогене одной реакции недостаточно для представления практического протекания процесса, который может реализоваться через множество элементарных реакций.

Вторым ограничением метода является то, что он развит применительно к углям, экстраполяция же его на нефтематеринские породы некорректна, вследствие того что сейчас общепризнано существование различных типов ОВ, которые специфически реагируют на палеотемпературные условия.

Следствием этих ограничений является трудность в калибровке универсальной шкалы СИТ в законченном ряду генерации нефти и газа. С практической точки зрения метод Лопатина применительно к бассейнам с высокой скоростью погружения недооценивает степень созревания, т.е. влияние времени имеет значение при низкой температуре, но становится незначительным при высокой. Этот аспект должным образом не воспроизводится в расчетах СИТ. Все это позволяет сделать вывод о том, что метод Лопатина–Уэллса может иметь ограниченное применение при реконструктивных расчетах для оценки степени катагенеза ОВ.

Кинетический подход – или кинетический метод (КМ) – к оценке масштабов генерации УВ осуществляется с использованием кинетических моделей эволюции ОВ, что позволяет непосредственно рассчитывать количество генерированных нефти и газа. Эти модели основаны на классической формулировке кинетики химической реакции первого порядка, приемлемой для реакций разложения, в том числе термического крекинга нефтяных продуктов:

$$\frac{dx_i}{dt} = -k_i x_i,$$

где  $x_i$  – остаточный газонефтегенерационный потенциал ОВ, участвующего в  $i$ -й реакции;  $k_i$  – константа скорости  $i$ -й реакции разложения керогена;  $E$  – энергия активации, связанная с температурой уравнением Аррениуса.

Этот подход, первоначально разработанный для реакций крекинга ОВ, протекающих в лабораторных или промышленных условиях, оказался приемлемым и для геологических условий.

Для изотермических условий степень превращения  $i$ -го компонента в углеводородные продукты дается выражением: 15

$$\alpha_i = 1 - \exp[-t k_0 \exp(-E_i/RT)]. \quad (II)$$

Для неизотермических условий, например, в наиболее часто встречающемся в практике случае нагрева с постоянной скоростью подъема температуры,  $\alpha$  можно рассчитывать путем численного интегрирования уравнения (II), аппроксимируя линейный нагрев ступенчатым.

С теоретическими данными и всей системой уравнений, используемых при моделировании, можно познакомиться в работе [16].

В первом и втором методах расчета генерации УВ в качестве исходных известных данных используются температура в каждой точке погружающегося слоя осадочной породы, для которого производится расчет, и время от начала заложения осадков, т.е., в конечном счете, необходимо иметь кривые погружения и значения палеотермического градиента или палеотектоническую историю исследуемого бассейна.

Многие предложенные тектонические модели образования седиментационных бассейнов позволяют прогнозировать погружение и температуру горизонта в функции времени. Вариации во времени прогнозируемой температуры для большинства моделей нелинейны. Например, модели растяжения литосферы, модель внедрения даек, модели термического растяжения и сжатия и модель глубинного метаморфизма коры для бассейнов растяжения прогнозируют повышенный тепловой поток в начале процесса формирования бассейна с постепенным снижением температурных градиентов по мере "старения" бассейна, имеющиеся прямые и косвенные палеотемпературные показатели не могут, как правило, однозначно разграничить модели.

Все эти тектонические модели учитывают кондуктивный перенос тепла. Однако в некоторых бассейнах конвективная составляющая теплопередачи оказывает значительное влияние на температуру в неглубокозалегающих более пористых осадках. Такие конвективные процессы могут приводить к существенным изменениям по простиранию в температурных градиентах во времени в зависимости от путей миграции флюида. Такие изменения трудно предсказать и смоделировать, даже имея подробную гидродинамическую информацию.

Многообразие тектонических моделей и непредсказуемость конвективных процессов во многих бассейнах обуславливают значительные неопределенности в создании всеобъемлющей палеотемпературной модели.



Кроме температуры и времени, определяемых из палеотектонической реконструкции осадочного бассейна, в качестве исходных данных в кинетическом методе используются также константы — энергии активации и частотный множитель. Определение этих констант производится методом калибровки.

Существуют три метода калибрования, использующие данные одного лишь пиролиза, например, стандартная информация Rock-Eval либо данные пиролиза плюс данные по генерации углеводородов в седиментационных бассейнах или только последние. Первые два метода основаны на экстраполяции экспериментальных данных с помощью уравнения Аррениуса из области высоких температур лабораторного отжига  $OB$  (обычно выше  $300\text{ }^{\circ}C$ ) в области низких (предположительно ниже  $160\text{ }^{\circ}C$ ), характерных для природного процесса катагенеза  $OB$ . Ввиду возможного различия механизма реакций крекинга керогена в этих двух температурных интервалах некорректность данного подхода рассмотрена в работе [10]. К тому же полихронные кинетические модели слишком усложнены, а при их описании отсутствуют приемы, с помощью которых определяются точные значения параметров. Так, в модели Тиссо и Эспителле использован 21 параметр: шесть генетических потенциалов отдельных компонентов керогена, семь величин энергий активаций и соответственно семь предэкспоненциальных множителей и начальное содержание  $UB$  в системе.

С учетом вышеизложенного нами в кинетической модели для расчета генерации нефти использован монохромный вариант с кинетическими параметрами, близкими к найденным из природных наблюдений [5] и последующим их уточнением (калибровкой) для конкретных НГО с известными палеотектоническими историями погребения.

### 2.1.2. Кинетическая модель генерации $UB$

В основе кинетической модели генерации  $UB$  лежит представление о том, что в процессе катагенеза в трехмерном пространстве (глубина—время—температура) протекает необратимая реакция крекинга с образованием нефтеподобных и газообразных углеводородных продуктов, причем в качестве базисного параметра используется степень превращения  $OB$   $\alpha$ , которая однозначно связана через величину остаточного потенциала со стадиями катагенеза. С другой стороны, в предположении о том, что крекинг  $OB$  подчиняется закономерностям химических реакций первого порядка, а температурная зависимость ее скорости — уравнению Аррениуса,  $\alpha$  будет являться функцией температуры и времени. Все это позволяет в конечном счете для

слабоизученных районов, задаваясь определенными палеотектонически-ми моделями их развития, прогнозировать динамику и объемы генерации УВ в этих областях. 17

Рассмотрим сначала общий подход к решению этой задачи, а затем проиллюстрируем особенности его применения для конкретных нефтегазоносных районов Западной Сибири.

Как известно, в составе ОВ уже на стадии диагенеза фиксируется некоторое количество битумоидов, наследующих в значительной мере структурные особенности биомолекул и существенно отличающихся по фракционному и углеводородному составу от битумоидов катагенетически измененного ОВ и нефтей. Имеющиеся данные позволяют считать, что при захоронении аквагенного (сапропелевого) ОВ образуются нерегулярные пространственные сополимеры, в составе которых в качестве мономеров наряду с новообразованными структурами значительную роль играют фрагменты, наследующие углеродный скелет молекул липидно-липоидного комплекса живого вещества. В террагенном (гумусовом) ОВ в структуре сополимера основную роль играют содержащие ароматические кольца мономеры лигнина, а также продуктов реакции меланоидинизации [9]. Роль мономеров, наследующих структуру молекул липидов и липоидов, в них значительно меньше.

Есть основания считать, что, формируясь в седиментогенезе и диагенезе, геосополимеры ОВ захватывают, как бы "консервируют", в полостях между мономерами битумоидные компоненты, т.е. играют по отношению к части продуктов превращений липидов и липоидов роль "хозяина" и образуют с ними соединения включения типа клатратов. Этому в значительной мере способствует наличие аквабитумоидов в наддонных и иловых водах.

Процесс катагенеза ОВ идет неравномерно. В среднем мезокатагенезе (стадия углефикации "Ж") по данным спектроскопии ЭПР в нем фиксируются "разрыхление" структуры сополимера и уменьшения количества парамагнитных центров, что, видимо, связано с разрывом молекулярных связей типа С-О-С и перестройкой структуры. Именно с этим моментом в геологической истории керогена следует связывать наиболее интенсивное разрушение соединений включения и появление условий для участия в первичной миграции ранее захваченных "хозяином" битуминозных компонентов.

Пусть в некотором элементарном объеме  $\Delta V_k$  к концу стадии диагенеза находится масса ОВ  $N_0$ , из части которого  $\beta_{lim}$  в тече-

18 ние всего катагенеза могут новообразовываться битумоиды в количестве

$$P_0 = \beta_{lim} N_0.$$

Назовем массу этих битумоидов начальным нефтегенерационным потенциалом катагенетических превращений ОБ (ННП). Остаточный нефтегенерационный потенциал катагенетических превращений ОБ (ОНП) в любой момент времени  $t$  катагенетической истории ОБ обозначим  $P$ . Методики определения ННП и ОНП с использованием теоретических балансовых расчетов описаны ранее [4, I4]. Пиролитические методы позволяют производить прямое количественное определение этих величин.

Примем в соответствии с работами [I0, I6], что уменьшение ОНП за время  $dt$  описывается уравнением химической реакции первого порядка

$$-dP = k P dt, \quad (I2)$$

где  $k$  — константа скорости реакции при фиксированной температуре.

В интегральной форме решение уравнения (I2) для изотермического процесса имеет вид:

$$P = P_0 \exp(-k t).$$

В соответствии с введенными обозначениями масса битумоида  $b$ , новообразованного к моменту  $t$ , равна разности начального и остаточного потенциалов, т.е.

$$b = P_0 - P = P_0 \left\{ 1 - \exp\left[-t k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)\right] \right\}. \quad (I3)$$

Показатель реализации генерационного потенциала

$$\alpha = 1 - P/P_0. \quad (I4)$$

Очевидно, что  $\alpha$  меняется от 0 до 1, т.е. его можно измерять в долях единицы или, если умножить на 100, в процентах. Из формул (I3) и (I4) получаем

$$\alpha = b/P_0 = 1 - \exp\left[-t k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)\right]. \quad (I5)$$

\* Если в бассейне имеет место погружение осадочных толщ со скоростью  $V_H$ , а геотермический градиент равен  $G_T$ , то

$$V_T = \epsilon_T V_H,$$

$$T = T_0 + \epsilon_T H,$$

где  $T_0$  – температура нейтрального слоя,  $H$  – глубина.

Для неизотермических условий, например, для вышеприведенного случая нагрева материнской породы с постоянной скоростью  $V_T$ , степень превращения можно рассчитывать путем численного интегрирования формулы (15), аппроксимируя линейный нагрев ступенчатым.

Для расчетов по кинетической модели необходимо знать эффективное значение энергии активации  $E$  и константу  $k_0$  реакций битумоидообразования, а также геотермический градиент  $\epsilon_T$  и скорость осадконакопления  $V_H$  в бассейне. Обобщение обширного материала по многим регионам мира, в том числе и по Западно-Сибирской плите и Сибирской платформе, позволяет считать, что в большинстве случаев  $\epsilon_T$  варьирует от 15–20 до 40–50 °C/1000 м, а  $V_H$  – от 10 до 200 м/млн лет. Данных о значениях  $E$  и  $k_0$  значительно меньше. Понятно, что эти величины должны варьировать в зависимости от типа исходного ОБ и условий его фоссилизации, предопределяющих состав и структуру керогена как сополимера. Далее в расчетах приняты  $E = 62,8$  кДж/моль и  $k_0 = 1,7 \cdot 10^7$  (млн лет)<sup>-1</sup>, поскольку при этих значениях расчетное положение ГЗН близко к реально наблюдаемым в нефтегазоносных провинциях Сибири, прежде всего в осадочном чехле Западно-Сибирской плиты [4]. Такой интегральный подход к выбору констант  $E$  и  $k_0$ , конечно, упрощает реальную картину превращений ОБ, однако он вместе с тем позволяет обобщенно учесть сложность химических превращений ОБ, в частности, возможность протекания при некоторых условиях обратных реакций, каталитическое влияние минеральной матрицы и т.п.

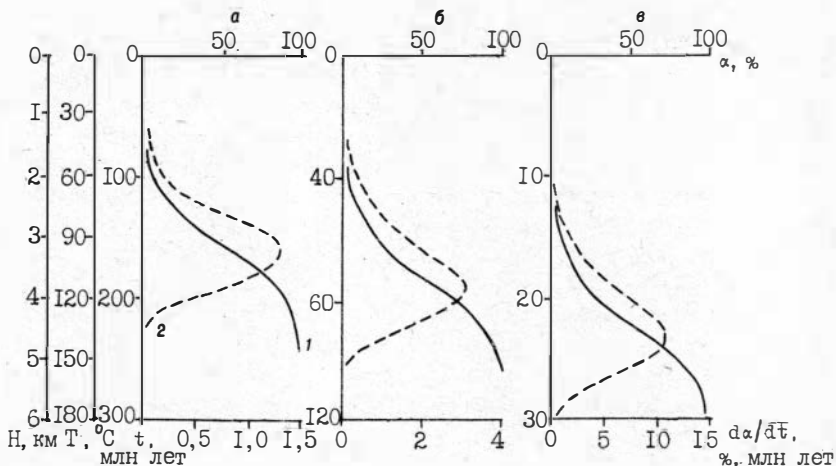
### 2.1.3. Уточнение представлений о зональности нефтегазообразования на основе кинетической модели

Проанализируем влияние различных геологических факторов на степень реализации генерационного потенциала  $\alpha$  и скорость его изменения  $d\alpha/dt$ , или, другими словами, скорость (интенсивность) новообразования битумоидов по мере роста температуры. Можно показать, что при постоянной скорости возрастания температуры

$$\frac{d\alpha}{dt} = V_T \frac{d\alpha}{dT},$$

т.е.  $\frac{d\alpha}{dt}$  и  $\frac{d\alpha}{dT}$  равны с точностью до постоянного множителя.

20. Ограничимся вначале случаем  $\beta_T = 30 \text{ }^\circ\text{C}/1000 \text{ м}$  и будем варьировать скорость погружения осадочной толщи  $V_H$ . Результаты таких модельных расчетов показаны графически на рис. 1.



Р и с . 1. Зависимость степени реализа и генерационного потенциала  $\alpha$  (1) и скорости битумоидообразования  $da/dt$  (2) в катагенезе в седиментационных бассейнах с геотермическим градиентом  $30 \text{ }^\circ\text{C}/\text{км}$  при скоростях погружения  $V_H$ , м/млн лет: а - 20, б - 50, в - 200

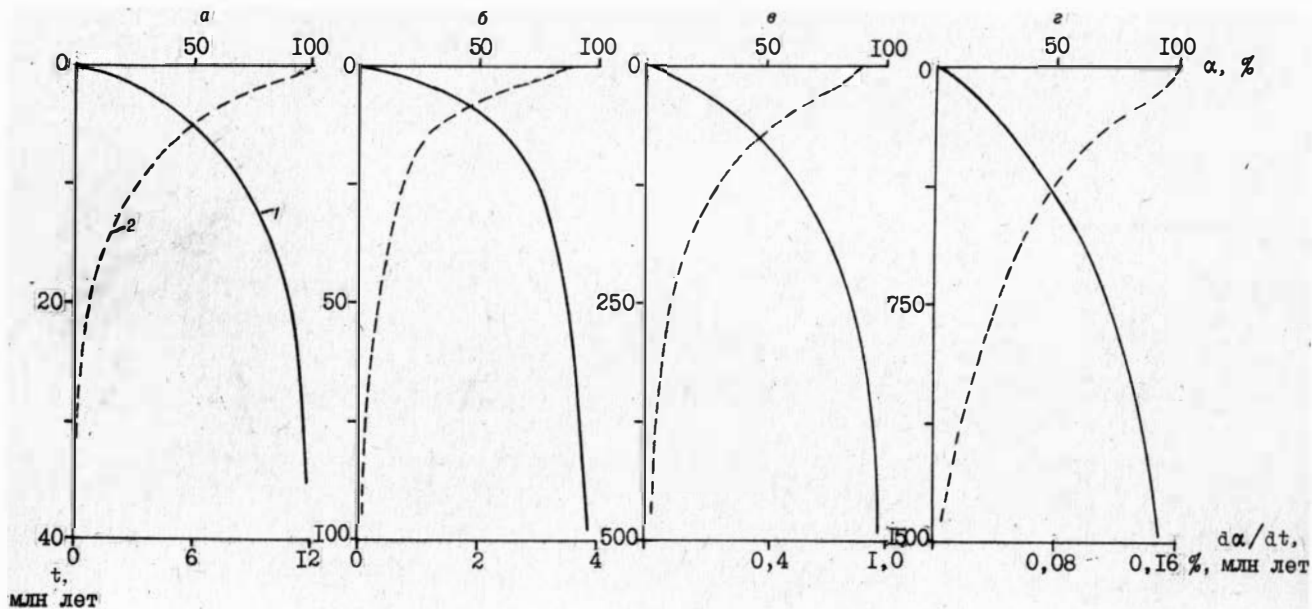
На рис. 1 видно, что при  $V_H = 20$  м/млн лет, т.е.  $V_T = 0,6 \text{ }^\circ\text{C}/\text{млн лет}$ ,  $\alpha$  монотонно возрастает по мере погружения и асимптотически стремится к 1 (становится больше 0,95) на глубинах около 4,5 км, что соответствует температуре около  $130 \text{ }^\circ\text{C}$ . При равномерном погружении такие глубины и температуры достигаются примерно через 220 млн лет после отложения осадков. Скорость новообразования битумоидов за счет период также не остается постоянной. Она сначала возрастает, достигает максимума на глубине 3250 м при температуре  $100 \text{ }^\circ\text{C}$  примерно через 100 млн лет после момента накопления осадка, а затем снижается вновь до очень малых величин. Чем выше скорость погружения отложений, тем при более высоких температурах и на больших глубинах реализуется ГФН. Так, при  $V_H = 50$  м/млн лет ГФН отвечают температуры  $90\text{--}135 \text{ }^\circ\text{C}$  и глубины 3,0-4,5 км, при  $V_H = 200$  м/млн лет -  $110\text{--}155 \text{ }^\circ\text{C}$  и 3,8-5,4 км соответственно. Вместе с тем, ГФН достигается раньше (60 и 18 млн лет) и длится меньше (30 и 8 млн лет), чем при малой скорости погруже-

ния. Существенно различается и величина  $da/dt$  в максимуме. Если 21 при скорости осадконакопления 20 м/млн лет  $da/dt = 1,35 \%$ /млн лет, то при  $V_H$ , равной 50 и 200 м/млн лет, скорость новообразования битумоидов увеличивается до 3,00 и 10,80 %/млн лет соответственно. Таким образом, ГЗН в зависимости от геотермического режима недр и скорости осадконакопления локализуется не только на разных глубинах, но и при разных температурах.

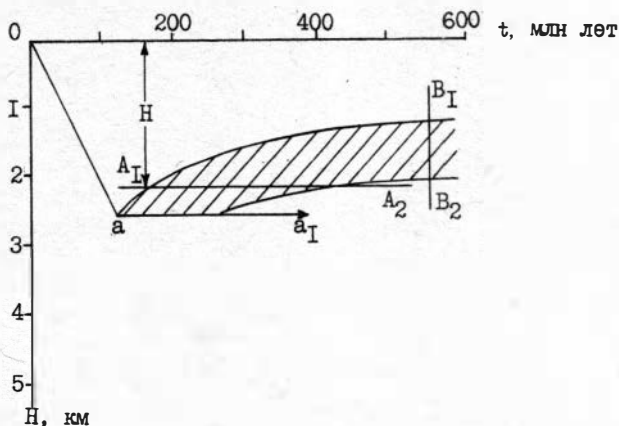
Рассмотрим динамику преобразования ОВ при изотермических условиях. На рис. 2 показаны графики изменения  $\alpha$  и  $da/dt$  во времени для температур 50, 75, 100 и 125 °С. Характерной особенностью динамики новообразования в чисто изотермическом режиме является экспоненциальное возрастание начальных скоростей при увеличении температуры и значительное их уменьшение на завершающей стадии процесса. Понятно, что чем ниже температура, тем больше времени необходимо для изменения  $\alpha$  от 0,20 до 0,90. Например, при температуре 50 °С оно равно примерно 1 млрд лет, а при температуре 100 °С – около 50 млн лет (см. рис. 2). Из этого следует, что на больших глубинах или при высоких геотермических градиентах даже при стабилизации погружения процессы нефтеобразования могут протекать весьма интенсивно.

Любой реальный процесс развития осадочного бассейна может быть аппроксимирован стадиями погружения, воздымания, стабилизации, которые можно формализовать с помощью уравнения (15), т.е., при известной палеотектонической истории бассейна появляется возможность исследования процессов нефтеобразования. Так, например, если осадочная толща монотонно погружается с  $V_H = 20$  м/млн лет в бассейне с  $G_T = 30$  °С/1000 м до глубины, где температура достигает 75 °С (рис. 3, прямая 0a), т.е. только начинает входить в ГЗН, а затем погружение прекращается (см. рис. 3, прямая aa<sub>1</sub>), то изменение  $\alpha$  от 0,20 до 0,90 будет длиться примерно 130 млн лет, причем, в соответствии с вышеизложенным, достигнет максимума в конце погружения (см. рис. 3, точка a). Процесс превращений ОВ, отвечающий условиям ГЗН при монотонном погружении, в изотермических условиях будет длиться примерно в 2 раза дольше.

Из рассмотрения изотермического процесса превращений ОВ вытекают и другие весьма важные для прикладной геохимии выводы. Заштрихованная полоса показывает изменение во времени глубины залегания отложений, в которых  $\alpha$  меняется от 0,20 до 0,90. Проведем на рис. 3 любую линию  $A_1A_2$ , параллельную оси абсцисс. Линия  $A_1A_2$  пересекает ось ординат в точке  $H$ . Тогда значения абсцисс точек пересечения этой линии с заштрихованной полосой есть время, когда



Р и с . 2 . Зависимость степени реализации генерационного потенциала  $\alpha$  (1) и относительной скорости битумоидообразования  $d\alpha/dt$  (2) для изотермических условий от времени при температуре, °C: а - 125, б - 100, в - 75, г - 50



Р и с . 3 . Изменения во времени глубин расположения ГЗН (заштрихованная область) для отложений, испытавших непрерывное погружение (линия  $Oa$ ) с последующей стабилизацией тектонического режима (линия  $aa_1$ )

на глубине  $H$   $\alpha$  достигает значений 0,20 и 0,90, а разность этих координат — длительность процесса, или, другими словами, длительность изотермического процесса, в течение которого  $OB$  претерпевает такие же изменения, как при ГФН в погружающейся толще. Из рис. 3 видно, что чем меньше глубина залегания толщи, тем позднее начнутся и дольше будут длиться эти изменения. Примером толщи, в которой  $OB$  "созревало" крайне медленно, могут служить отложения кюнамской свиты в восточной части Анабарской антеклизы на Сибирской платформе, которые, несмотря на кембрийский возраст, достигли зрелости, отвечающей всего лишь концу прото- и началу мезокатагенеза.

Вертикальная линия  $B_1B_2$  на рис. 3 пересекает заштрихованную полосу в точках с ординатами, равными наименьшей и наибольшей глубинам, на которых  $OB$  претерпевает превращения, отвечающие ГФН в момент времени  $t$ . Из рис. 3 видно, что чем древнее толща, тем на меньших глубинах будет при прочих равных условиях располагаться, так сказать, ГЗН.

Эти особенности битумоидообразования в зонах с малыми скоростями осадконакопления, как правило, не учитываются при историко-генетических реконструкциях.

На рис. 4 показана зависимость локализации ГЗН и времени ГФН для разных  $V_H$  при  $\theta_T = 40, 30$  и  $20$  °С/км. В обобщенном виде на



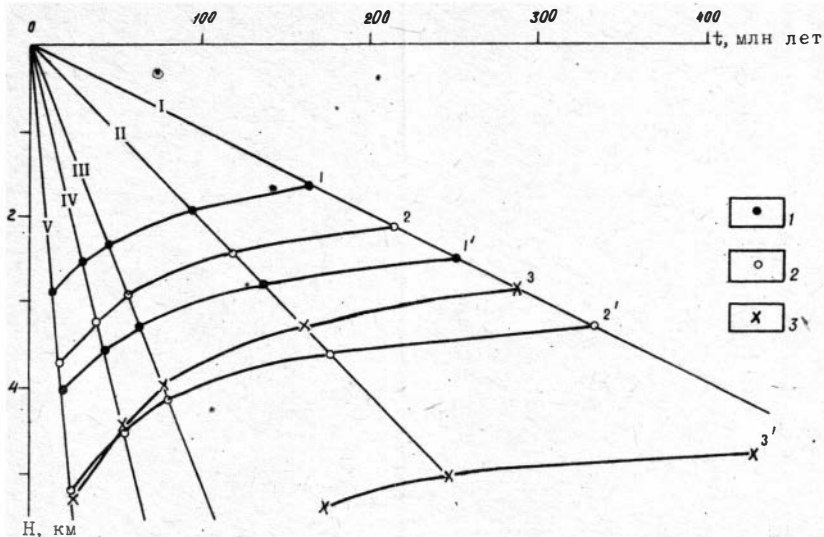
24 толщ рассчитывается в соответствии с абсолютной длительностью их отложения [I], общая мощность толщи составляет 5 км.

2. Непрерывное погружение, происходившее в течение 100 млн лет со скоростью 25 м/млн лет (см. рис. 5,б, линия 00'), было прервано застойным режимом длительностью 50 млн лет (линия 0'0''), после чего погружение происходило с прежней скоростью (линия 0''С). В результате стабилизации в рассматриваемой толще частично отсутствуют отложения позднемелового, раннепалеогенового возраста, а мощность ее составляет 3,75 км. Геотермический градиент и поверхностная температура те же, что и в варианте 1.

3. В течение 100 млн лет погружение со скоростью 25 млн лет (см. рис. 5,в, линия 00), далее, в течение 50 млн лет воздымание той же скоростью, в результате которого были эродированы и размывты отложения позднеюрского (частично) и мелового возраста, последующее погружение могло происходить со скоростью 25 млн лет (вариант 1, линия 0'С<sub>1</sub>) или 75 млн лет (вариант 2, линия 0'С<sub>2</sub>). Мощности разрезов для вариантов 1 и 2 составляют 2,5 и 5,0 км соответственно (см. рис. 5,в). Геотермический градиент и поверхностная температура те же, что и в варианте 1.

Результаты расчетов зависимостей  $\alpha=f(H)$  и  $da/dt=f(H)$  представлены в графическом виде на рис. 5.

Для модели равномерного непрерывного погружения, компенсированного осадконакоплением (РАНЕО) (см. рис. 5,а) оказалось, что ГЗФ охватывает в интервале глубин 1,75–3,9 км, в пределах которого залегают отложения нижнего мела – верхней кры. В случае этой модели  $\alpha$ ,  $da/dt=f(H)$  соответствуют не только современному моменту времени в развитии ОПБ, но и могут быть использованы для палеорекострукции этих величин в прошлом. Поскольку  $H=V_H t$ , для любого момента времени в прошлом можно определить значения  $\alpha$  и  $da/dt$  для соответствующего момента времени  $t$ , например, ОП раннеюрских отложений 100 млн лет назад достигло степени реализации ОПП  $\alpha = 50\%$  при скорости битумоидообразования  $da/dt = 1\%/млн лет$  и т.д. Величины  $\alpha$  и  $da/dt$  позволяют рассчитать абсолютные значения массы и скорости образования УВ. Так, для вышеприведенного примера, исходя из предположения, что рассматриваемые отложения представлены ОВ аквагенного типа с начальным значением НП, равным  $50\% УВ/С_{орг}$ , при плотности породы  $2,5 т/м^3$  и содержании органического углерода  $10\%$  масса образовавшихся О будет составлять  $0,06 т/м^3$ , а скорость битумоидообразования  $1,2 кг УВ/млн лет$  в  $1 м^3$  породы.



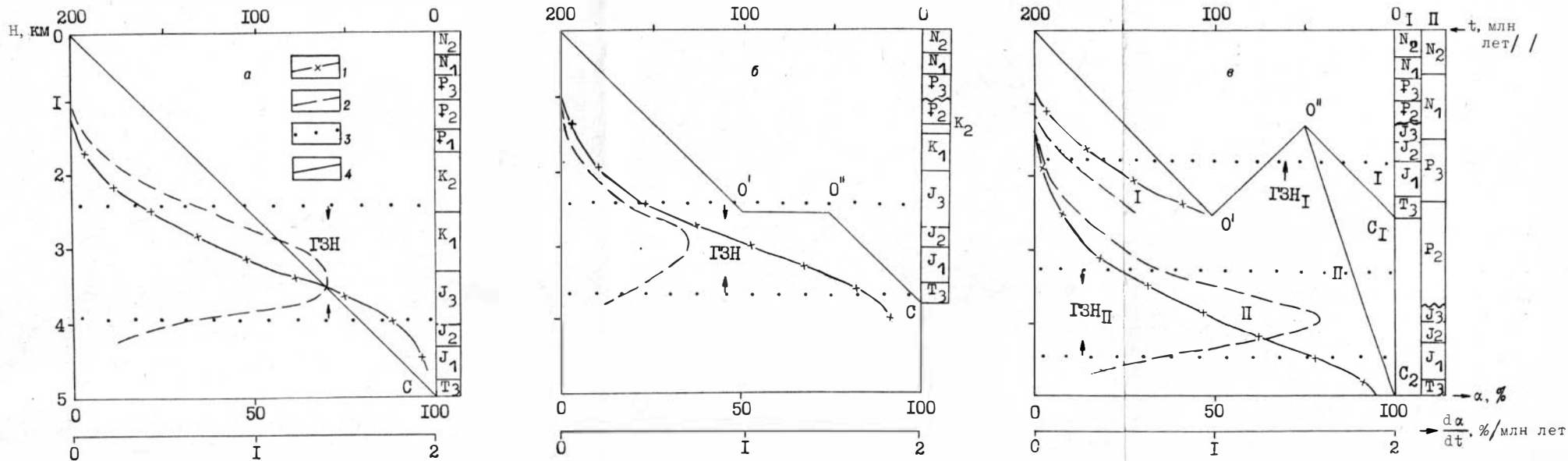
Р и с . 4 . Схема пространственно-временной локализации ГЗ и ГЗ' для осадочных бассейнов со средними геотермическими градиентами,  $^{\circ}\text{C}/\text{км}$ : I - 40, 2 - 30, 3 - 20 и со скоростями седиментации, м/млн лет: I - 10, II - 20, III - 50, IV - 100, V - 200. Цифры без штрихов на соответствующих прямых погружения отвечают времени и глубине вхождения осадочной толщи в ГЗ, цифры со штрихами - выходу из ГЗ.

нем отражены отмеченные выше закономерности. Сходный результат ранее получил Н.В.Лопатин [6].

• Поскольку реальный процесс развития осадочного бассейна может быть аппроксимирован суммой отдельных стадий - погружения, воздымания, стабилизации, каждую из которых можно формализовать с помощью уравнения (15), совершенно естественно, что следующим шагом должно быть усложнение геологической модели, используемой в расчетах, с целью дальнейшего применения предложенного метода для любого осадочно-породного бассейна.

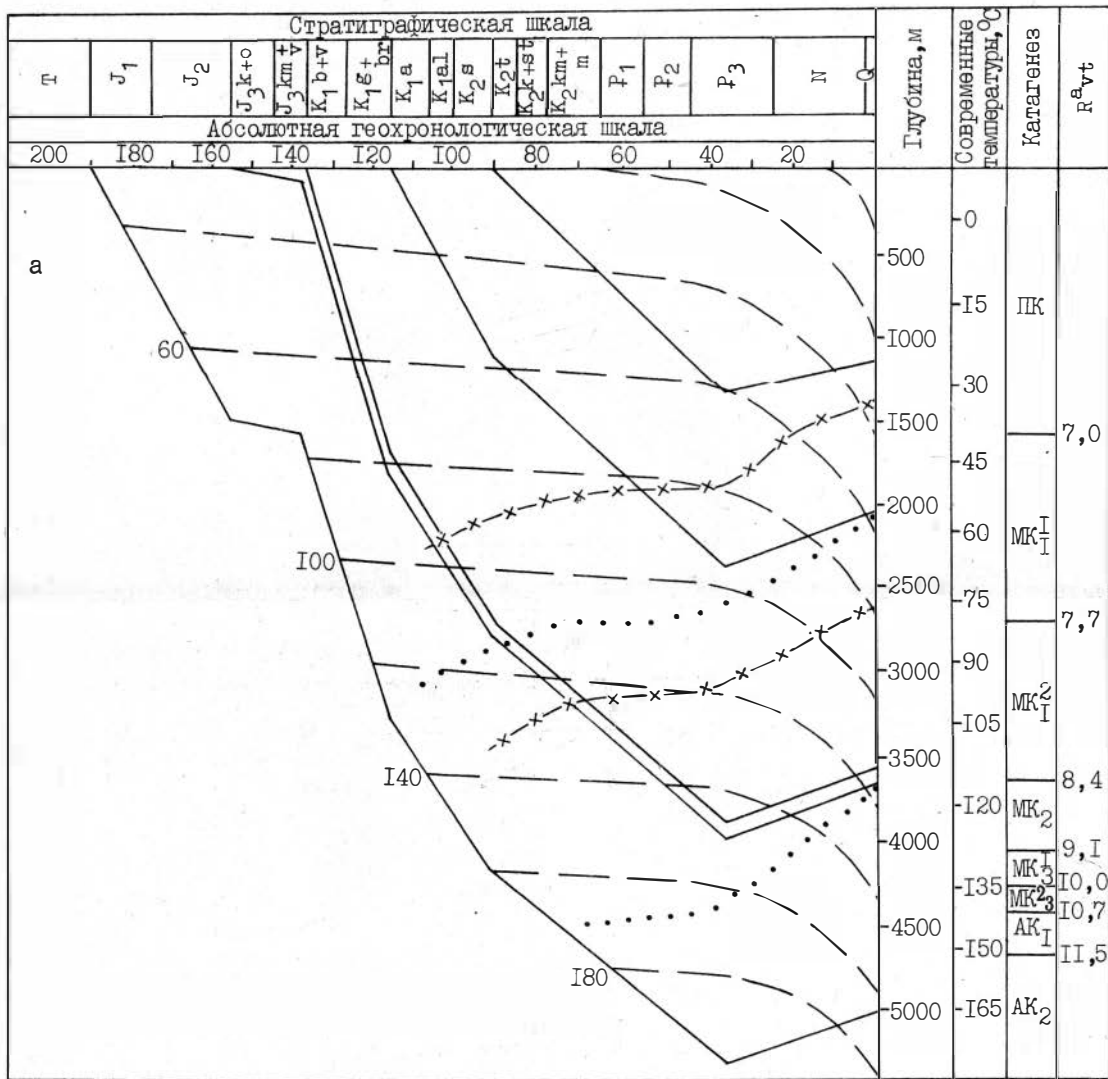
Рассмотрим три варианта нефтематеринской толщи, низ которой выполнен поздне триасовыми отложениями с абсолютным возрастом 200 млн лет.

I. Непрерывное равномерное погружение (рис. 5,а) со скоростью 25 млн лет при постоянном геотермическом градиенте  $\beta_T = 25^{\circ}\text{C}/\text{км}$ , температура поверхности  $T_0 = 15^{\circ}\text{C}$ , хромоглубинная зональность отражается прямой ОС, мощность отдельных возрастных



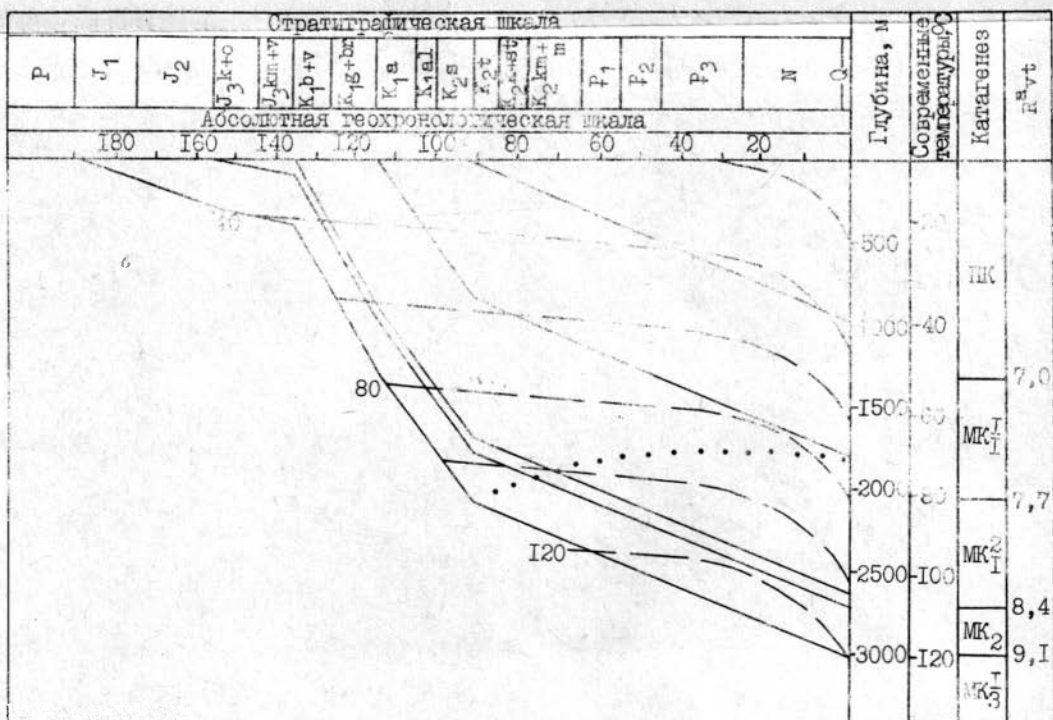
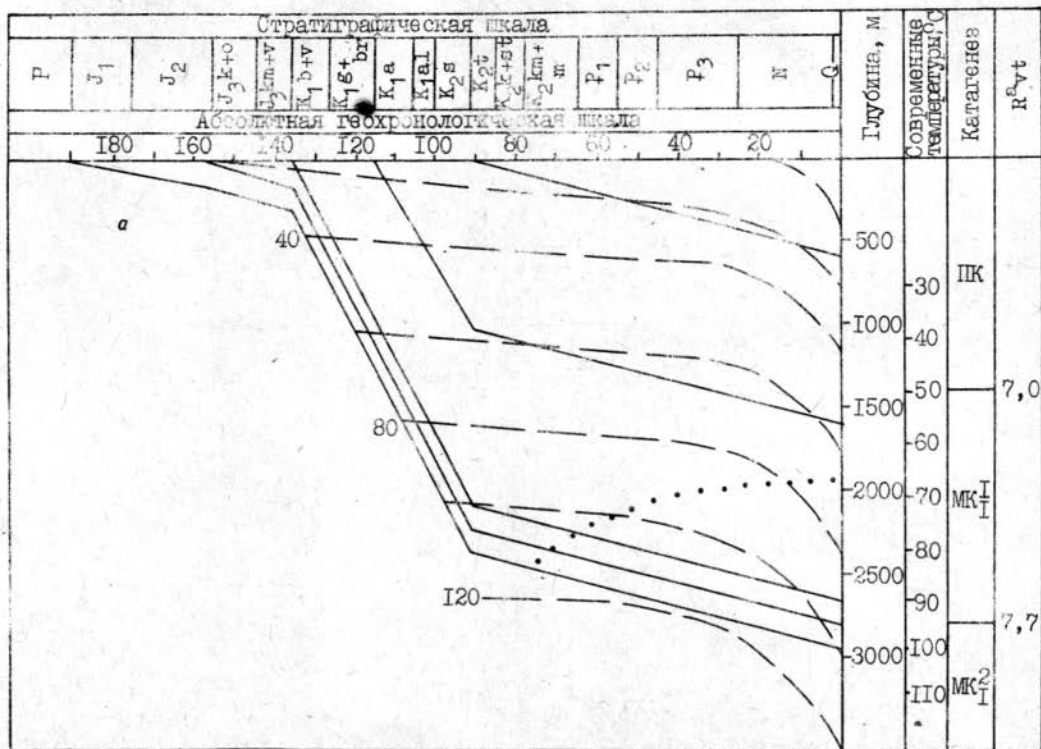
Р и с . 5 . Схемы пространственно-временной локализации ГЗН для моделей: а - непрерывного погружения (ОС), б - непрерывного погружения, осложненного перерывом в осадконакоплении (ОО'О''С), в - непрерывного погружения, осложненного воздыманием с последующим погружением со скоростью 25 м/млн лет (I вариант - ОО'О''С<sub>I</sub>) и 75 м/млн лет (II вариант - ОО'О''С<sub>II</sub>)

I - степень реализации НПП ( $\alpha$ ); 2 - скорость битумоидообразования ( $\frac{d\alpha}{dt}$ ); 3 - границы ГЗН; 4 - линия, отражающая модель погружения осадочных отложений



Р и с . 6 . Реконструкция палеотемператур и положений ГЗН в разрезе мезозойских отложений ЗСП на примере Уренгойской площади

1 - положение ГЗН, рассчитанное для  $E = 72,3$  кДж/моль и  $k_0 = 1,7 \cdot 10^7$  (млн лет)<sup>-1</sup>; 2 - то же для  $E = 59,7$  кДж/моль и  $k_0 = 1 \cdot 10^5$  (млн лет)<sup>-1</sup>; 3 - линии погружения; 4 - палеоизотермы



Р и с . 7 . Реконструкция палеотемператур и положений ГЭГ на примерах Бузунской (а) и Черемшанской (б) площадей

Расчеты для двух остальных случаев проводились поэтапно, поскольку на каждом следующем этапе развития ОПБ необходимо было учитывать изменения на предыдущем этапе.

Соответственно, в отличие от варианта I зависимости  $\alpha, da/dt = f(H)$  представленные на рис. 5 б, в, характеризуют преобразование ОВ только для настоящего момента времени. Резюмируя полученные результаты, можно отметить, что для варианта 2 в сравнении с моделью РАНЕО (см. рис. 5, а) мощность отложений, находящихся в ГЗН, уменьшилась, причем в их составе преобладают более древние ( $J_1 - T_3$ ) и в то же время скорость битумоидообразования уменьшилась примерно в 2 раза.

Как видно из вышеизложенного, достоверность расчетов с использованием предлагаемой методики для описания процессов нефтеобразования в реальных геологических объектах не в последнюю очередь будет определяться "точностью" палеотектонических, геотермических, фациальных реконструкций, лежащих в основе геологической модели. Однако актуальность данного метода не вызывает сомнений, особенно для тех отложений, для которых отсутствуют определения стадий катагенеза, поскольку результирующим параметром в расчетах служит  $\alpha$  - степень реализации НТП, которая непосредственно связана с величиной  $\theta$  (остаточным нефтегазогенерационным потенциалом), определяемой экспериментально, что, в свою очередь, может служить основой (или критерием) сравнения теоретических наблюдений с практическими.

При одинаковой по форме динамике процесса битумоидообразования во времени абсолютная его интенсивность вообще, и в ГФН в частности, существенно различается в зависимости от скорости осадконакопления в бассейнах и геотермического режима. Различия эти, как было показано выше, настолько значительны, что при вялом тектогенезе (малые скорости осадконакопления, низкий тепловой поток и т.п.) выделять ГФН как решающий фактор нефтенакопления в бассейне, видимо, вообще не имеет смысла. Понятно, что при этом должна учитываться не только величина относительной скорости битумоидообразования ( $da/dt$ ), но и содержание ОВ в материнских породах и его генерационный потенциал. Это исключение, которое мы предлагаем при низких в течение всего процесса превращения ОВ значениях  $da/dt$  независимо от степени зрелости ОВ ГФН не выделять, только подчеркивает главное в этом понятие: ГФН следует рассматривать, как проявление неравномерности битумоидообразования в катагенезе, как этап резкой и интенсивной фазы этого процесса.

## 2.1.4. Математическое моделирование катагенеза ОВ в отдельных нефтегазоносных областях Западной Сибири

Для апробации предложенной методики были взяты три площади на территории Западно-Сибирской плиты: Уренгойская, Пудинская и Черемшанская. Палеотектонические реконструкции развития ОВ этих районов проведены с использованием фактических данных, материала, приведенного в работах [2,8]. В качестве эталонного объекта была выбрана Уренгойская площадь, где имелась представительная выборка замеров по отражательной способности витринита и температуры. Результаты расчетов палеоразвития ГЗН при значениях энергии активации и частотного множителя, использованных ранее, показана на рис. 6. Несоответствие расчетной и фактической зональности на современном этапе развития ОВ было снято путем изменения энергии активации (с 62,0 до 51,8 кДж/моль) и частотного множителя (с  $1,7 \cdot 10^7$  до  $1 \cdot 10^5$  (млн)<sup>-1</sup>). Для новых значений кинетических параметров получено удовлетворительное совпадение теоретических и эмпирических данных по ГЗН [6].

Верхнеюрские отложения (рис. 6, 7) вошли в ГЗН примерно 70-90 млн лет тому назад.

Для реконструкции положения ГЗН в разрезе отечественные и зарубежные исследователи широко используют метод "суммарного теплового импульса" (СИТ), предложенный Н.В.Лопатиным [6,7]. Для сравнения с полученными результатами нами были рассчитаны значения СИТ ( $\sum \tau$ ) для ОВ, преобразованного до  $МК_1^1 - МК_1^2$  ( $R_a = 7,7$ ). Для Уренгойской, Пудинской и Черемшанской площадей оценки  $\sum \tau$  равны соответственно 1020, 800, 320. Согласно работам [6,7], этим оценкам отвечают градации катагенеза от  $МК_2$  до АК.

Не обсуждая подробно причины значительного расхождения в определении места положения ГЗН, полученного двумя методами, сделаем следующие предварительные выводы. ●

Если выполненные палеотектонические построения адекватны истинным, то метод СИТ требует калибровки для каждого конкретного ОПБ; либо, если этот метод "абсолютен", то необходимо произвести новые палеотектонические построения, которым, в этом случае, должны соответствовать меньшие значения палеотемператур.

## 2.2. Открытые генерирующие системы

Само по себе использование понятий "материнская порода" и "коллектор" неизбежно приводят к признанию (хотя и неадекватным обра-

28 зом) открытости нефтегенерирующих систем. Исторически же в нефтяной геологии сложился подход раздельного изучения процессов генерации и эмиграции нефти. Кратко данную ситуацию с точки зрения типов систем по материальному обмену можно охарактеризовать следующим образом: генерация нефти осуществляется в замкнутой системе, первичная миграция — из открытой.

Составители настоящей работы опираются на представление о единстве процессов генерации и первичной миграции нефти. Иными словами, образование нефти, отделение ее от материнского органического вещества (керогена) и перемещение в коллектор — это и есть процесс генерации и первичной миграции.

В 1965 г. А.А.Трофимук и А.Э.Конторович [17] предложили количественную, а С.Г.Неручев и И.С.Ковачева [13] качественную модели эмиграции битумоидов из глинистых толщ. Указанные исследователями было обращено внимание на изменение группового состава битумоида в зависимости от расстояния до пласта-коллектора. По мере приближения к коллектору в битумоиде увеличивается содержание асфальтенов (и, соответственно, гетероэлементов), уменьшается количество углеводородов (УВ) и коэффициент битуминозности ОВ. Позднее подобного рода факты стали отмечаться многими исследователями (Коротков, 1966; Тиссо, Пеле, 1971 и др.). Для нашего исследования важным является то обстоятельство, что в достаточно мощной нефтематеринской толще выделяются две части: внешняя, контактирующая с коллектором, в которой и наблюдается направленное изменение состава и количества битумоида, и внутренняя, отличающаяся относительным постоянством состава и концентрации битумоида. Ясно, что материальный обмен внешней и внутренней частей обуславливается различными факторами. Если во внутренней части доминирующим является региональный фактор (в основном региональный термобарический градиент), то во внешней части это еще и дополнительное дренирующее влияние коллектора.

Для дальнейшего исследования нам понадобятся некоторые новые понятия. Внешнюю часть нефтематеринской толщи, контактирующую с коллектором и находящуюся под его воздействием, будем называть *т р а н з и т н о й* системой, а внутреннюю часть, не испытывающую этого влияния, — *а к к у м у л я т и в н о й*<sup>1</sup>. В химическом смысле обе генерационные системы являются открытыми, но различа-

---

<sup>1</sup>Термины заимствованы у Д.В.Панфилова, предложившего их в 1976 г. для типизации экосистем [15].



ются характером обмена углеводородного вещества. Аккумулятивная система имеет только выход в смежную транзитную, последняя же имеет вход из смежной аккумулятивной и непосредственный выход на коллектор. Для характеристики свойств аккумулятивных систем будет полезным понятие углеводородного сродства  $\gamma_C$ , численно равного количеству УВ (в данном случае нефти), удерживаемых поверхностными силами в единице объема породы при данных термобарических условиях. Укажем несколько значений  $\gamma_C$  юрских нефтематеринских пород Западной Сибири. По нашим данным,  $\gamma_C$  пород баженновской свиты в Полонской скв. 2 (интервал 2508–2524 м) – 10,4 кг/м<sup>3</sup>; в Салымской скв. 147 (интервал 2869–2906 м) – 14,1 кг/м<sup>3</sup>; в продуктивной Салымской скв. 127 (интервал 2803–2837 м) – 15,5 кг/м<sup>3</sup>, что соответствует полному заполнению порового пространства породы. Для аргиллитов тогурской свиты  $\gamma_C$  ниже – в Пономаревской скв. 2 (интервал 3030–3050 м) его значение 6 кг/м<sup>3</sup>.

Обратимся к исследованию выделенных систем. Можно предположить, что для транзитной системы градиент концентраций УВ зависит от величины самой концентрации ( $C_{УВ}$ ), т.е.

$$\frac{d}{dh} C_{УВ} = BC_{УВ}.$$

Интегрирование этого соотношения при начальных условиях  $h = H$ ,  $C_{УВ} = \gamma_C$  дает

$$h = H + a \ln(C_{УВ} / \gamma_C), \quad (16)$$

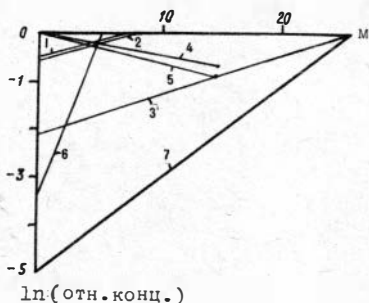
где  $H$  – мощность транзитной системы;  $h$  – расстояние от коллектора до точки с концентрацией  $C_{УВ}$ ;  $a$  – коэффициент пропорциональности  $1/B$ . Согласно полученному соотношению зависимости между логарифмом концентрации УВ (или других компонентов битумоида) и расстоянием до коллектора в транзитной системе должны быть линейными.

На рис. 8 в координатах "логарифм концентрации – расстояние до коллектора" приведены некоторые данные по распределениям коэффициента битуминозности, содержанию гетероэлементов и концентрации УВ. Нетрудно убедиться, что зависимости эти действительно линейные. Мощность транзитной системы определяется дренирующей способностью коллектора (через концентрацию УВ на границе "коллектор–транзитная система"), углеводородным сродством и коэффициентом пропорциональности  $a$ . Физический смысл этого коэффициента можно выяснить, лишь конкретизировав механизм перемещения УВ. К примеру, если миграция нефти осуществляется путем диффузии, то,

30 комбинируя соотношение (16), кинетическое уравнение химической реакции первого порядка и математическое выражение первого закона Фика, получим

$$\alpha = \frac{DS}{kV}, \quad (17)$$

где  $D$  - коэффициент диффузии УВ;  $k$  - константа скорости реакции образования УВ;  $S$  - площадь сечения, через которое проходит поток УВ;  $V$  - объем реактора, в котором происходит нефтеобразование.



Р и с . 8 . Изменение коэффициента битуминозности, состава битумоида и содержания углеводородов в глинистых толщах в зависимости от расстояния до пласта-коллектора

Коэффициент битуминозности: 1 - девон Шкаповского района (Неручев, 1963), 2 - девон Алжира (Гиссо, Пеле, 1971), 3 - нижняя юра Западно-Сибирской плиты. Содержание гетероэлементов в битумоиде ниже-среднеюрских отложений Западной Сибири: 4 - Игритм-Нарыкарский район, 5 - Сургутско-Нижневартовский район. Содержание углеводородов (по данным пиролиза): 6 - георгиевская свита; 7 - тогур-ская свита

ния - это такие состояния, в которых, несмотря на протекающие реакции нефтеобразования, концентрация УВ в системе остается постоянной вследствие эквивалентного генерации вывода УВ из системы во внешнюю среду.

С помощью дифференциального уравнения кинетики химических реакций в открытых системах можно строго показать, как возникает этс

Как видно из соотношения (17), значение этого коэффициента при постоянных термобарических параметрах обуславливается пористостью транзитной системы. Поскольку  $\alpha$  - тангенс угла наклона прямой (см. рис. 8), чем больше пористость, тем меньше  $\alpha$  и тем больше мощность транзитной системы, дренирующей при одной и той же силе коллектора. В примерах, приведенных на рис. 1, мощности транзитных систем варьируют от 7 м в аргиллитах георгиевской свиты Западно-Сибирской плиты, контактирующих с пластом Ю<sub>1</sub>, до 26 м в аргиллитах тогурской свиты, дренируемых крупнозернистыми русловыми песчаниками тюменской свиты.

Исследование свойств выделенных систем - задача самостоятельная. С учетом целей настоящей работы укажем лишь главные из них.

Во-первых, в открытых генерационных системах возникают так называемые стационарные состоя-

состояние. Например, для аккумулятивной системы уравнение это за- 31  
писывается следующим образом:

$$\frac{d}{dt} = k (C_{OB}^0 - C_{yB}) - \beta C_{yB}, \quad (18)$$

где  $C_{OB}^0$  - начальная концентрация материнского ОВ;  $C_{yB}$  - текущая концентрация углеводородов в системе;  $\beta$  - параметр, характеризующий интенсивность обмена системы со средой (для аккумулятивной системы этот параметр есть отношение скорости вывода УВ из системы к ее объему  $V$ ).

Интегрирование уравнения (18) при начальных условиях  $t = 0$ ,  $C_{yB} = 0$  дает следующий результат:

$$C_{yB} = \frac{k C_{OB}^0}{k + \beta} + (C_{OB} - \frac{k C_{OB}^0}{k + \beta}) e^{-(k + \beta)t}.$$

Как видно из приведенного соотношения, спустя время  $t \gg \frac{1}{k + \beta}$   
концентрация в системе будет постоянной и составит

$$\bar{C}_{yB} = \frac{C_{OB}^0}{k + \beta} \quad (19)$$

Время прихода системы в стационарное состояние ранее было названо нами временем стабилизации генерационной системы [12].

Для текущей стационарной концентрации ОВ соотношение (19) будет выглядеть следующим образом:

$$\bar{C}_{yB} = \frac{k}{\beta} C_{OB}.$$

Таким же путем можно получить соотношение для транзитной системы. В связи с тем что вывод этого соотношения довольно громоздкий, приведем только итоговое соотношение

$$\bar{C}_{yB} = \frac{k}{\beta} C_{OB} + C_{yB}^0,$$

где  $C_{yB}^0$  - концентрация УВ в смеси, поступающей из аккумулятивной системы в транзитную.

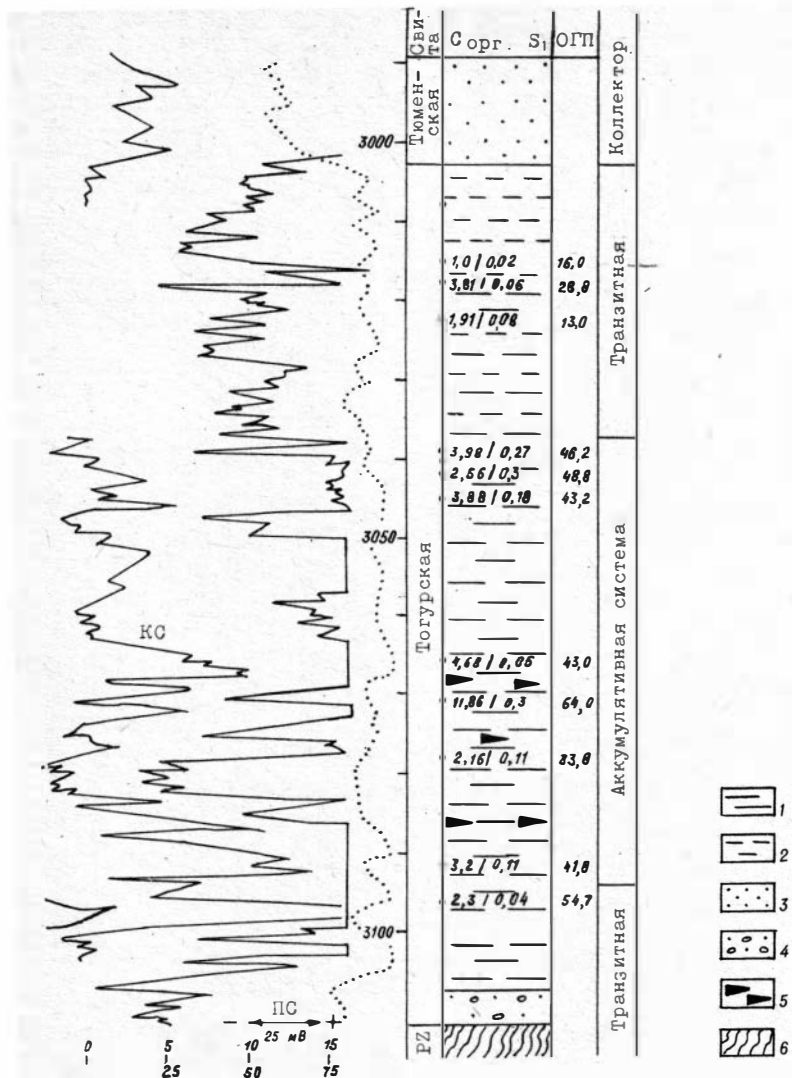
Следует обратить внимание на то, что в отличие от известных в термодинамике необратимых процессов стационарных состояний химических систем рассматриваемые нами состояния нефтегенерирующих природных систем правильнее считать "псевдостационарными", поскольку скорости генерации УВ и их вывода из системы все время

32 снижаются вплоть до момента исчерпания нефтегенерационного потенциала на данной стадии катагенеза.

Второй важной особенностью открытых систем (как транзитных, так и аккумулятивных) является зависимость степени реализации нефтематеринского потенциала ОВ от интенсивности обмена их с внешней средой.

Логично предположить, что вследствие более высокой интенсивности обмена транзитные системы при прочих равных условиях полнее реализуют свой нефтегенерационный потенциал, чем смежные аккумулятивные. Следовательно, транзитные системы отличаются от смежных с ними аккумулятивных большим расходом реакционноспособного материнского ОВ (и в конечном итоге меньшим его современным содержанием) и, соответственно, меньшей величиной остаточного генерационного потенциала (ОПГ). Для иллюстрации сказанного приведем конкретный пример. На рис. 9 изображен фрагмент разреза Пономаревской скв. 2, пробуренной на восточном склоне Пудинского метавала Западно-Сибирской плиты. В указанной скважине аргиллиты тогурской свиты мощностью 101 м залегают на 4,5-метровом базальном слое гравелитов, а перекрываются русловыми среднезернистыми песчаниками тюменской свиты. По каротажной характеристике, цвету, содержанию ОВ, значениям  $S_1$  и ОПГ тогурская свита отчетливо разделяется на три части. Верхняя часть в интервале 3003-3029 м (прилегающая к коллектору) отличается относительно низкими значениями ( $I_0$ -150 Ом м) кажущегося электрического сопротивления зеленовато-серых аргиллитов, невысоким содержанием ОВ ( $C_{орг} - 1,3,81$ ,  $S_1 - 0,02 + 0,08$  %) и малыми значениями ОПГ (13-28,8). Средняя часть в интервале 3029-3095 м сложена темно-серыми (прослоями битуминозными) аргиллитами с повышенными значениями кажущегося сопротивления (50-750 Ом м), высоким содержанием ОВ ( $C_{орг} - 2,56 + 11,86$  %,  $S_1 - 0,18 + 0,3$  %) и более высокими сравнительно постоянными значениями ОПГ (43,0-46,2). Нижняя часть в интервале 3095-3105,5 м характеризуется резким снижением  $S_1$  до 0,04 %. Согласно развиваемым авторами представлениям, средняя часть свиты является аккумулятивной генерирующей системой, а верхняя и нижняя - транзитными.

Итак, транзитные системы отличаются от аккумулятивных современным содержанием углеводородов, современным содержанием органического вещества и полнотой реакции нефтематеринского потенциала. Последнее выражается в малых значениях ОПГ транзитных систем и более высоких - в аккумулятивных. Уже одно это дает возможность по разности средних концентраций ОВ в транзитной и аккумулятивной



Р и с . 9 . Изменение содержаний  $S_{орг}$ , сорбированных УВ ( $S_1$ ) и остаточного генерационного потенциала (ОГП) в тоарских отложениях Пономаревской скв. 22

1 - аргиллиты; 2 - алевролиты; 3 - песчаники; 4 - песчаники, граувелиты, конгломераты; 5 - аргиллиты битуминозные, 6 - метаморфические породы

34 системах оценить массу УВ, отданной транзитной системой в коллектор. Дополнительное количество УВ, отданное породами аккумулятивной системы в коллектор, можно оценить по разности между средним и максимальным значениями ОПТ по методике, предложенной В.Н.Меленевским [II].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Афанасьев Г.Д., Зыков С.И. Геохронологическая шкала фанерозоя в свете новых значений постоянных распада. - М.: Наука, 1975. - 98 с.

2. Историко-генетический метод оценки перспектив нефтегазоносности / Л.Л.Польстер, Ю.А. Висковский, В.А.Николаенко и др. - М.: Недра, 1984. - 200 с.

3. Карпов Н.А. и др. Количественная оценка факторов температуры и геологического времени при углефикации рассеянных углистых остатков и возможности ее применения в нефтяной геологии // Изв. АН СССР. Сер. геол. - 1975. - № 3. - С. 103-113.

4. Конторович А.Э. Геохимические методы количественного прогноза нефтегазоносности. - М.: Недра, 1976. - 250 с.

5. Конторович А.Э., Меленевский В.Н. Учение о главной фазе нефтеобразования и его место в осадочно-миграционной теории нефтидогенеза // Изв. АН СССР. Сер. геол.-1988. - № 1. - С. 3-13.

6. Лопатин Н.В. Историко-генетический анализ нефтеобразования с использованием модели равномерного непрерывного спуска нефтематеринского пласта // Изв. АН СССР. Сер. геол.- 1976. - № 8. - С. 93-101.

7. Лопатин Н.В. Температура и геологическое время как факторы углефикации // Изв. АН СССР. Сер. геол. - 1971. - № 3. - С. 95-106.

8. Максимов С.П., Калинин М.К., Ботнева Т.А. и др. Геотермические условия развития цикла нефтегазообразования // Геология нефти и газа. - 1975. - № II. - С.35-41.

9. Манская С.М., Кокина Л.А. Геохимия лигнина. - М.: Наука, 1975. - 232 с.

10. Меленевский В.Н. Фактор времени и необходимость его учета при перенесении результатов лабораторного моделирования на процессы природного преобразования органического вещества в катагенезе // Геохимические и гидрогеологические предпосылки поисков нефти и газа в Сибири. - Новосибирск: Наука, 1983. - С. 102-107.

11. М е т о д и ч е с к и е рекомендации по применению пиролитического метода в органической геохимии / Под ред. А.Э. Конторовича. - Новосибирск, 1985. - 42 с.

12. М о с к в и н В.И. Катагенез органического вещества // Геология нефти и газа. - 1981. - № 3. - С. 47-51.

13. Н е р у ч е в С.Г., К о в а ч е в а Й.С. О влиянии геологических условий на величину нефтеотдачи материнских пород // Докл. АН СССР. - 1962. - № 4. - С. 913-914.

14. Н е р у ч е в С.Г. Нефтепроизводящие свиты и миграция нефти. - Л.: Недра, 1969. - 240 с.

15. П а н ф и л о в Д.В. Естественно-историческая классификация природных экосистем // Международная география -76. - М., 1976. - Т. 4. - С. 91.

16. Т и с с о Б., В е л ь т е Д. Образование и распространение нефти. - М.: Мир, 1981. - 502 с.

17. Т р о ф и м у к А.А., К о н т о р о в и ч А.Э. Некоторые вопросы теории органического происхождения нефти и проблема диагностики нефтепроизводящих толщ // Геология и геофизика. - 1965. - № 12. - С. 3-14.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	3
1. Оценка масштабов генерации битумоидов, углеводородов и неуглеводородных летучих компонентов на основе балансо-во-кинетического подхода.....	5
2. Математическое моделирование процессов генерации углеводородов в катагенезе на основе кинетических моделей..	13
2.1. Условно замкнутые системы.....	13
2.1.1. Предварительные замечания.....	13
2.1.2. Кинетическая модель генерации УВ.....	16
2.1.3. Уточнение представлений о зональности нефтегазообразования на основе кинетической модели	19
2.1.4. Математическое моделирование катагенеза ОВ в отдельных нефтегазоносных областях Западной Сибири .....	27
2.2. Открытые генерирующие системы.....	27
Список литературы.....	34



МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ПРИМЕНЕНИЮ  
МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ГЕ-  
НЕТИЧЕСКИХ И ПРОГНОЗНЫХ ЗАДАЧ НЕФТЕГА-  
ЗОВОЙ ГЕОЛОГИИ

Редактор Т.А.Воронина  
Технический редактор Т.И.Велигур

Подписано в печать 06.09.91 г. Формат бумаги 60x90/16. Печ.л.2,5.  
Уч.-изд. л. 2,5. Тираж 100 экз. Заказ 1365. Цена договорная.

Ротапринт СНИИГТИМСа. 630104, Новосибирск-104, Красный проспект, 67

### ЗАМЕЧАТЕЛЬНЫЕ ОПЕЧАТКИ

Страница	Строка	Напечатано	Следует читать
5	16-17 сверху	стратосфера	стратисфера
24	-	Читайте как с. 25	
25	-	Читайте как с. 24	
27	12 снизу	кааагенеза	катагенеза

Методические рекомендации по применению  
математических моделей для решения  
генетических и прогнозных задач  
нефтегазовой геологии