

На правах рукописи



КАШАПОВ Роман Сергеевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ
УГЛЕВОДОРОДОВ И КИНЕТИКИ ПРОЦЕССА
ПИРОЛИТИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ
ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА БАЖЕНОВСКОЙ
СВИТЫ**

1.6.11 – Геология, поиски, разведка и эксплуатация нефтяных и
газовых месторождений

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата геолого-минералогических наук

Новосибирск – 2024

Работа выполнена в лаборатории геохимии и пластовых нефтей акционерного общества «Томский научно-исследовательский и проектный институт нефти и газа» (АО «ТомскНИПИнефть»)

Научный руководитель:

Гончаров Иван Васильевич,

доктор геолого-минералогических наук, начальник управления лабораторных исследований пластовых флюидов, технологических жидкостей и реагентов АО «ТомскНИПИнефть»

Официальные оппоненты:

Бушнев Дмитрий Алексеевич,

доктор геолого-минералогических наук, Институт геологии имени академика Н.П. Юшкина Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией органической геохимии, г. Сыктывкар;

Сафронов Павел Иванович,

кандидат геолого-минералогических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука Сибирского отделения Российской академии наук, научный сотрудник лаборатории теоретических основ прогноза нефтегазоносности, г. Новосибирск.

Ведущая организация:

ФГБУ «Всероссийский научно-исследовательский геологический нефтяной институт», г. Москва.

Защита состоится «23» октября 2024 г. в 10:00 на заседании диссертационного совета 24.1.087.03 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука Сибирского отделения Российской академии наук (ИНГГ СО РАН), в конференц-зале, г. Новосибирск, просп. Акад. Коптюга, 3.

Отзыв в одном экземпляре, оформленный в соответствии с требованиями Минобрнауки России (см. вклейку), просим направлять по адресу:

630090, г. Новосибирск, просп. Акад. Коптюга, 3

факс (8-383) 330-28-07, e-mail: KostyrevaEA@ipgg.sbras.ru

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на официальном сайте ИНГГ СО РАН

<http://www.ipgg.sbras.ru/dissertations/kashapov2024/Диссертация.pdf>

Автореферат разослан «15» августа 2024 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета, к.г.-м.н.

8(383)3309517



Е.А. Костырева

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы и степень ее разработанности

Осадочный нефтегазоносный бассейн подобен химическому реактору, в котором рассеянное органическое вещество (ОВ) генерирует углеводороды. Однако, в отличие от реактора, где исходный и конечный состав продуктов, продолжительность реакций, температура и давление контролируются техническими средствами, в осадочных бассейнах мы можем лишь с некоторым приближением реконструировать процесс генерации нефти и газа. Лучшим средством для этого являются компьютерные системы моделирования эволюции осадочных бассейнов [Галущкин, 2007].

В основе бассейнового моделирования лежит компьютерная симуляция региональных процессов седиментогенеза и литогенеза, структурообразования, генерации, миграции и аккумуляции углеводородов, поэтому его без преувеличения можно считать квинтэссенцией всей нефтегазовой геологии. Об изученности осадочного бассейна можно судить по количеству информации о каждом из вышеперечисленных процессов.

Применение метода пиролиза для исследования осадочных пород стало настоящим прорывом в оценке нефтегазоматеринских свойств их органического вещества. Впервые стало возможно говорить о количестве генерируемых породой углеводородов, ее термической зрелости, степени окисленности и ряде других характеристик. В дальнейшем оказалось, что недостаточно владеть только этой информацией, важно знать, как происходит во времени реализация генерационного потенциала в процессе естественной термической эволюции (погружения) осадочных пород, длящейся миллионы лет. Требовалось установить зависимость между временем, температурой и количеством генерируемых углеводородов.

В процессе лабораторного пиролиза реализация генерационного потенциала ОВ занимает 20 минут при температурах пиролиза 300–700 °С, в природном осадочном бассейне на этот процесс уходят десятки и сотни миллионов лет при пластовых температурах 60–150 °С.

Кинетические пиролитические исследования – метод, позволяющий связать время и температуру, которые требуются для реализации генерационного потенциала органического вещества пород в ходе лабораторного пиролиза и естественной термической эволюции. Они являются неотъемлемой частью бассейнового моделирования, поэтому корректное восстановление кинетических параметров деструкции органического вещества является важной научно-практической задачей.

Баженовская свита – основная нефтематеринская порода Западной Сибири, с которой генетически связано более 80 % общей массы геологических ресурсов нефти [Конторович и др., 1999]. Ее геохимические исследования являются неотъемлемым этапом в прогнозе нефтегазонасности региона. К сожалению, кинетические исследования органического вещества баженовской свиты в литературе освещены весьма скупо [Астахов, 2015; Бурштейн и др., 1997; Гончаров и др., 2006; Конторович и др., 2021; Лопатин и др., 1998; Leushina et al., 2021]. Обычно они ограничиваются итогом в виде модели (гистограмма, схемы, спектра), характеризующей распределение генерационного потенциала органического вещества по энергиям активации. При этом отсутствует информация о какой-либо корреляции с реальными геологическими и геохимическими данными. Поэтому, несмотря на высокую изученность баженовской свиты [Гурари и др., 1980, 1988; Конторович и др., 1975, 1994, 1998, 2013; Панченко и др., 2016; Фомин и др., 2005; Шурыгин и др., 2000], кинетические модели пиролитической деструкции ее органического вещества являются наиболее уязвимым местом компьютерного (бассейнового) моделирования формирования залежей генетически связанных с ней флюидов.

Объектом исследований является баженовская свита южной части Внутренней области Западно-Сибирской геосинеклизы (Среднеобская региональная ступень).

Целью работы является выявление закономерностей изменения кинетических параметров органического вещества баженовской свиты с ростом термической зрелости и усовершенствование подхода к обработке результатов кинетических исследований.

Научная задача заключается в разработке алгоритма проведения кинетических исследований для материнской породы на различных стадиях катагенеза (естественной термической эволюции) и обобщения полученных результатов.

Этапы исследований:

1. Метрологическая оценка определения основных пиролитических параметров осадочных пород на приборе Rock-Eval 6 Turbo;

2. Оценка изменения кинетических параметров органического вещества по разрезу баженовской свиты;

3. Оценка изменения кинетических параметров органического вещества баженовской свиты с ростом катагенеза (степени трансформации);

4. Усовершенствование подхода к кинетическим исследованиям;

5. Сопоставление реализации генерационного потенциала по различным кинетическим моделям;

6. Моделирование генерации углеводородов в ходе лабораторного пиролиза и получение двухкомпонентной кинетической схемы.

Фактический материал и методы исследования. На основе обобщения результатов пиролиза 5248 образцов пород и 515 кинетических исследований органического вещества баженовской свиты выбран 81 образец из 39 скважин юга Западной Сибири (Рисунок 1). Все они исследованы пиролитическим методом на приборе Rock-Eval 6 Turbo.

Для 78 образцов из 36 скважин выполнены кинетические исследования, их обработка велась с использованием программного продукта Optkin фирмы Veicip-Franlab.

Из скважин Арчинской, Комсомольской и Южно-Сургутской площадей, находящихся на значительном удалении друг от друга (более 200 км), отобрано по одному незрелому образцу баженовской свиты (ПК₃-МК₁¹, $T_{\max} = 423\text{--}427\text{ }^{\circ}\text{C}$, $R^{\circ}_{\text{vr}} = 0,50\%$). С каждым из них на экспериментальной установке проведены эксперименты по моделированию генерации углеводородов в ходе пиролиза, которые исследованы методами хроматографии, хромато-масс-спектрометрии и изотопной масс-спектрометрии.

Степень достоверности. Достоверность научных результатов основана на изучении представительной коллекции фактического материала и использовании общепризнанного комплекса методов лабораторных исследований с применением гостированных, метрологически аттестованных или стандартизованных методик, поверенных средств измерений, использованием межлабораторных и внутрилабораторных стандартов.

Защищаемые научные результаты:

1. *Часть разреза баженовской свиты со стабильными значениями пиролитических параметров (T_{\max} , HI, OI) можно рассматривать в качестве материнской породы, реализация генерационного потенциала которой описывается одной кинетической моделью.*

Водородный (HI) и кислородный (OI) индексы соответственно являются аналогами атомных соотношений Н/С и О/С в керогене, а параметр T_{\max} является мерой термической стабильности органического вещества породы [Espitalie et al., 1985]. Постоянство этих трех величин подразумевает стабильность состава органического вещества баженовской свиты.

2. *Доказана неизохимичность преобразования органического вещества материнской породы в ходе лабораторного пиролиза природному катагенезу.*

Кинетические модели, как и Rock-Eval пиролиз, выполненные для незрелого образца материнской породы не учитывают процессы

поликонденсации органического вещества, которые идут на протяжении всей эволюции и ведут к увеличению его термической устойчивости.

3. *Впервые предложен математический алгоритм обработки результатов пиролиза материнской породы на различных стадиях катагенеза для расчета кинетических параметров с переменным значением предэкспоненциального множителя (частотного фактора).*

Научная новизна работы. Впервые на представительной выборке баженовской свиты различной термической зрелости (ПК₃-МК₂, $T_{\max} = 414\text{--}458\text{ }^{\circ}\text{C}$, $R_{\text{vt}} = 0,40\text{--}1,15\%$) проведены кинетические исследования и обобщены их результаты. Предложен подход к обработке результатов пиролитических исследований, который учитывает изменение кинетических параметров органического вещества с ростом катагенеза (степени трансформации).

Выполнено моделирование генерации углеводородов в ходе лабораторного пиролиза баженовской свиты в открытой системе (продукты пиролиза удаляются из зоны реакции). Отражены зависимости изменения молекулярных параметров катагенеза (MPI-1, K_i, 4МДБТ/1МДБТ), изотопного состава органического углерода газообразных продуктов пиролиза (C₁–C₄), относительного содержания углеводородных и неуглеводородных компонентов (CO, CO₂, H₂S, N₂) в газообразных продуктах пиролиза от степени трансформации органического вещества породы. Полученные результаты сопоставлены с литературными данными о природных газах, ассоциированных с нефтями различного типа (баженовский, тогурский, палеозойский) [Гончаров и др., 2012].

Теоретическая и практическая значимость работы. Полученные в результате выполненных исследований данные существенно дополняют знания о кинетических характеристиках органического вещества баженовской свиты. Они были использованы при выполнении реконструкции истории генерации, миграции и аккумуляции нефти в баженовской свите при бассейновом моделировании [Дифференцированная оценка перспектив..., 2016].

Композиционная кинетическая модель использовалась специалистами АО «ТомскНИПИнефть» для выполнения бассейнового моделирования в районе Александровского свода.

Моделирование генерации углеводородов в ходе лабораторного пиролиза образцов баженовской свиты выполнялось по заказу АО «Томскнефть» ВНК и использовалось для выявления участков с наиболее высокой перспективой продуктивности баженовской свиты.

Предложенный в работе подход к обработке результатов пиролитических исследований органического вещества материнских

пород будет полезен профильным специалистам, занимающимся бассейновым моделированием.

Апробация работы и публикация результатов. Основные научные результаты диссертации изложены в 12 публикациях, в том числе в 4 статьях в рецензируемых научных журналах категории К1, рекомендованных ВАК («Нефтегазовая геология. Теория и практика», «Геология нефти и газа», «Нефтяное хозяйство», «Геохимия»).

Результаты работы обсуждались на различных конференциях российского и международного уровня: Международный симпозиум имени академика М.А. Усова студентов и молодых ученых (Томск, 2014, 2015), 21th International Symposium on Analytical and Applied Pyrolysis (Nancy, France, 2016), Международная конференция «Химия нефти и газа» (Томск, 2018), 29th International Meeting on Organic Geochemistry (Gothenburg, Sweden, 2019), 30th International Meeting on Organic Geochemistry (Montpellier, France, 2021), Успехи органической геохимии (Новосибирск, 2022).

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, 9 глав и заключения. Объем диссертации составляет 161 страницу машинописного текста, включая 63 рисунка, 23 таблицы и 4 приложения. Список литературы содержит 122 наименования, включая 46 иностранных работ.

Личный вклад автора. В основу работы легли материалы пиролитических исследований баженовской свиты, выполненные автором в лаборатории геохимии и пластовых нефтей АО «ТомскНИПИнефть» в 2007–2019 годах. Эти данные позволили сформировать представительную выборку из образцов для кинетических исследований. В 2016 г. в ПО Microsoft Office (Excel) автором создана программа для расчета кинетических параметров, а в 2018 г. собрана установка для моделирования генерации углеводородов в ходе лабораторного пиролиза и проведены эксперименты.

Благодарности

Автор работы выражает глубокую благодарность своему научному руководителю – доктору геолого-минералогических наук, профессору Гончарову Ивану Васильевичу за внимание, критику и всестороннюю поддержку, оказанную на всех этапах становления этой работы.

Автор также благодарен всему коллективу лаборатории геохимии и пластовых нефтей АО «ТомскНИПИнефть» за помощь, оказанную на разных этапах проведения исследований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В первой главе «**Пиролиз в геохимии**» обсуждается применение пиролиза в геохимии нефти и газа. Особое внимание уделено пиролизу по методу Rock-Eval в температурном цикле «BulkRock», который используется для исследования свойств и катагенетической зрелости органического вещества осадочных пород. Здесь рассматриваются температурные профили нагрева, условия интегрирования площадей, перечень определяемых и расчетных параметров, методические вопросы и факторы, которые оказывают влияние на результаты пиролитического эксперимента. Итогом работы по определению внутрилабораторных погрешностей стало получение свидетельства об аттестации методики измерений № 08-47/363.01.00143-2013.2016 ««Методика (метод) измерений пиролитических параметров проб осадочных пород методом пиролиза с применением пиролизатора Rock-Eval 6 Turbo (цикл BulkRock)»» (Таблица 1).

Особо стоит отметить пионерные исследования в разработке метода пиролиза керогена французских ученых Дж. Эспиталье, Ф. Марке, Дж. Барсонни, Дж. Лапорта, М. Маце, Г. Деру, Дж. Рукаше, Ж. Трише. Советские исследователи Н.В. Лопатин, Т.П. Емец, В.Н. Литвинова, А.Н. Прохоров, В.Н. Меленевский, М.Л. Сазонов и Л.И. Жильцова создали пиролизаторы различной конструкции, основное отличие которых от системы Rock-Eval заключается в разделении углеводородов ряда C_1-C_7 на индивидуальные компоненты с последующим определением их содержания.

Во второй главе «**Кинетические исследования**» рассматриваются теоретические основы проведения кинетических экспериментов нефте- и газообразования из органического вещества пород [Лопатин, 1971; Tissot, 1969; Tissot, Espitalie, 1975; Burnham, Sweeney, 1989; Sweeney, Burnham, 1990; Ungerer, 1990; Morrow, Issler, 1993; Welte et al., 1997]. Описываются условия проведения кинетических экспериментов на приборе Rock-Eval (цикл Optkin) и приводится поэтапный алгоритм обработки полученных экспериментальных данных в рамках линейного и нелинейного регрессионного математического анализа. Полученные результаты обработки (кинетические модели) сопоставляются с результатами обработки экспериментальных данных в ПО Optkin, отмечается их отличная корреляция.

Обсуждаются методические вопросы, связанные с условиями проведения эксперимента и с математическим алгоритмом обработки экспериментальных данных.

Отдельно рассматриваются многокомпонентные кинетические модели, проблемы их получения и пути решения этих проблем [Espitalie et al., 1988; Tang, Stauffer, 1994; Behar et al., 1997].

Таблица 1 – Диапазоны измерений, значения показателей повторяемости, внутрилабораторной прецизионности и точности при доверительной вероятности $P = 0,95$

Определяемый параметр	Диапазон измерений	Показатель повторяемости	Показатель внутрилабораторной прецизионности	Показатель точности
S_1	(0,5–10,0) мг УВ/г породы	10 %	13 %	25 %
S_2	(1,0–200,0) мг УВ/г породы	6 %	9 %	18 %
ТОС	(1,0–30,0) % масс.	4 %	5 %	10 %
T_{\max}	(410–460) °С при $S_2 \geq 1,0$ мг УВ/г породы	2 °С	2 °С	4 °С

где

- S_1 – количество свободных углеводородов в поровом пространстве породы, термодесорбирующихся при температуре 300 °С (мг УВ/г породы);
- S_2 – остаточный генерационный потенциал осадочной породы, то есть та ее часть, которая еще не успела превратиться в нефть и газ в ходе ее естественной эволюции (мг УВ/г породы);
- T_{\max} – температура максимума пика S_2 (°С);
- $ТОС$ (Total Organic Carbon) – массовая концентрация органического углерода в породе (% масс.).

В третьей главе «**Моделирование генерации жидких и газообразных углеводородов в процессе пиролиза органического вещества**» обсуждается один из важнейших вопросов моделирования жидких и газообразных углеводородов в ходе лабораторного эксперимента: «В

какой степени лабораторные эксперименты способны охарактеризовать природные процессы?» [Рогозина, 1967; 1983; Глебовская, 1974; Уров и др., 1976; Duvall, Bartke, 1978; Ефимов и др., 1979; Лопатин и др., 1979; Wang, 1984; Галимов и др., 1990; Tomic et al., 1995; Behar et al., 1997, 2008; Volkov, Stelmakh, 1999; Бушнев и др., 2004; Бушнев, 2007; Бушнев, Бурдельная, 2013].

Описывается постановка эксперимента по моделированию генерации углеводородов в ходе пиролиза, приводится схема установки и условия проведения экспериментов.

В четвертой главе **«Краткая геолого-геохимическая характеристика района исследований»** обозначается район исследований (см. рисунок 1), приводится краткий обзор его стратиграфии, палеогеографии, тектоники, а также факторов, контролировавших условия накопления органического вещества в баженовской свите [Конторович А.Э. и др., 1994; 2013; Шурыгин и др., 2000; Конторович В.А. и др., 2001; Решение 6-го МСС..., 2004].

В пятой главе **«Материал, схема исследования и методы исследования»** дана характеристика фактического материала. Приведена схема исследования образцов. Описаны используемые методы исследований, среди которых Rock-Eval пиролиз, хромато-масс-спектрометрия, хроматография, изотопная масс-спектрометрия.

Шестая глава **«Кинетические исследования органического вещества баженовской свиты»** включает в себя четыре раздела.

В первом разделе рассмотрено **изменение кинетических параметров по разрезу баженовской свиты**, на примере скважины Западно-Угутской площади. Здесь исследования позволили установить зависимость между величинами значений энергий активации и частотного фактора. В зарубежной литературе эта зависимость сформулирована в виде «Правило 1–2–3» и заключается в том, что увеличение/уменьшение энергии активации на 1 ккал/моль компенсируется 2-кратным увеличением/уменьшением предэкспоненциального множителя в рамках лабораторных скоростей нагрева. Экстраполяция изменения энергии активации на 1 ккал/моль на геологические условия (скорость нагрева 3 °С/млн лет) ведет к смещению кривой реализации генерационного потенциала на 3 °С при пятидесятипроцентной степени трансформации органического вещества [Peters et al., 2018].

На основе этой закономерности автором диссертации сделано предположение о том, что разрез баженовской свиты описывается единой кинетической моделью, а наблюдаемые вариации в значениях кинетических параметров связаны с погрешностью их определения.

Подтверждением данного предположения служат очень близкие результаты кинетических исследований образцов баженовской свиты скважины Западно-Угутской площади, рассчитанные при близких значениях частотного фактора (Рисунок 2):

- значения предэкспоненциального множителя результатов моделирования сосредоточено в узком диапазоне от $40,6 \times 10^{12}$ до $44,5 \times 10^{12} \text{ с}^{-1}$;

- пик распределения везде приходится на 52 ккал/моль;

- распределение генерационного потенциала заключено в интервале между 50 и 60 ккал/моль;

- более 95% генерационного потенциала приходится на диапазон от 50 до 54 ккал/моль.

Очевидно, что кинетические параметры очень похожи друг на друга. Вариации в том, какая доля генерационного потенциала приходится на каждую энергию активации, в большей степени обусловлены типом исходных биопродуцентов, обстановкой осадконакопления, преобразованиями органического вещества в диагенезе и катагенезе, и в меньшей – условиями проведения эксперимента, математическим алгоритмом обчета.

Таким образом, на основании результатов кинетических исследований можно утверждать, что часть разреза баженовской свиты со стабильными значениями пиролитических параметров (T_{\max} , HI , OI) нужно рассматривать в качестве материнской породы, реализация генерационного потенциала которой описывается одной кинетической моделью. Остается открытым вопрос о виде этой модели, о том при каком значении частотного фактора она должна рассчитываться.

Во втором разделе рассмотрено **изменение значений кинетических параметров баженовской свиты с ростом катагенеза**. Здесь сопоставляются общепринятая кинетическая модель эволюции ОВ (Рисунок 3), предложенная Тиссо и Эспиталье в 1975 году, и результаты кинетических экспериментов с образцами баженовской свиты различной термической зрелости (Рисунок 4).

В рамках классической кинетической модели (см. рисунок 3) в процессе термической эволюции уменьшается генерационный потенциал органического вещества, при этом не происходит изменения частотного фактора или смещения энергий активации. На пирограммах реализация генерационного потенциала сопровождается уменьшением площади пика S_2 и смещением его в сторону более высоких температур T_{\max} , T_{peak} .

Результаты кинетического моделирования органического вещества баженовской свиты различной степени термической зрелости показывают, что классические представления не полностью учитывают природные

процессы. На рисунке 4 (красные точки) видно, что с ростом катагенеза (параметра T_{\max}) происходит смещение пика распределения генерационного потенциала в сторону более высоких энергий активации. На это обращают внимание в своих работах [Jarvie, 1991; Гончаров и др., 2006; Галушкин, 2007]. Однако имеет право на существование и альтернативная точка зрения, предлагаемая автором диссертации, согласно которой энергия активации остается постоянной (см. рисунок 4, зеленые точки), а ее кажущийся рост полностью обеспечен погрешностью измерений. Она больше соответствует классическим представлениям.

Детальный анализ каждого из этих утверждений ведет к тому, что в осадочном бассейне реализация генерационного потенциала органического вещества баженовской свиты идет медленнее, чем по существующим кинетическим моделям. Связано это с процессами поликонденсации, которые идут на протяжении всей эволюции и ведут к увеличению термической устойчивости органического вещества [Гончаров, Харин, 1982; Бурштейн и др., 1997]. Это доказывает неизохимичность преобразования органического вещества материнской породы в ходе лабораторного пиролиза природному катагенезу.

Анализируя рисунок 4 можно сделать еще один очень важный вывод о том, что в кинетических параметрах органического вещества баженовской свиты пик распределения генерационного потенциала обычно соответствует энергиям активации равным 50, 52 и 54 ккал/моль. С высокой долей вероятности можно предположить, что истинный пик приходится на 52 (± 2) ккал/моль.

Таким образом, на основании результатов кинетических исследований органического вещества баженовской свиты различной термической зрелости можно построить несколько кинетических моделей, отражающих различные сценарии реализации генерационного потенциала в процессе эволюции (Рисунок 5).

В третьем разделе сопоставляется реализация генерационного потенциала органического вещества баженовской свиты в ходе естественной термической эволюции с его реализацией по кинетическим моделям.

Для изображения реализации генерационного потенциала с ростом катагенеза органического вещества различных типов керогена или материнских пород обычно используется диаграмма $HI - T_{\max}$ [Espialie et al., 1985]. В настоящей работе она построена на основе результатов пиролитических исследований 5248 пород баженовской свиты на различных стадиях катагенеза (Рисунок 6). Исследования проводились в лаборатории геохимии и пластовых нефтей АО «ТомскНИПИнефть» в 2007–2017 годах.

Совместно с данными пиролиза на диаграмму $HI - T_{\max}$ (см. рисунок 6) нанесена реализация генерационного потенциала по кинетическим моделям, отображенным на рисунке 5. Анализ рисунка 6 позволяет утверждать, что реализация генерационного потенциала органического вещества баженовской свиты в осадочном бассейне и по кинетическим моделям (см. рисунок 5) отличается.

В четвертом разделе шестой главы рассматриваются различные **возможности корректировки расхождений между кинетическими моделями и природными данными**. Корректировка кинетических моделей осуществляется в соответствии с геологическими, геохимическими и т.д. данными. В качестве таковых наиболее часто выступают тепловой поток или его аналоги ($R_{\text{вр}}^{\circ}$, T_{\max} , MPI-1 и др.) и степень трансформации материнской породы. Конечной целью корректировки является совпадение степени трансформации органического вещества материнской породы в осадочном бассейне со степенью трансформации по кинетической модели на различных этапах термической эволюции.

Корректировку кинетической модели проводят тремя способами:

1) варьируя значение частотного фактора, что ведет к линейному увеличению/уменьшению скорости всех параллельных химических реакций;

2) смещая реализацию генерационного потенциала в сторону более высоких/низких энергий активации, что ведет к экспоненциальному уменьшению/увеличению скорости всех параллельных химических реакций;

3) меняя вид распределения долей генерационного потенциала по энергиям активации, что ведет к увеличению/уменьшению скоростей реакций с определенными энергиями активации.

На примере смещения распределения генерационного потенциала по энергиям активации кинетической модели образца породы Западно-Чистинной площади (см. рисунок 5) на +0.6 ккал/моль показано, что скорректированная модель лучше коррелирует с природными данными (Рисунок 7).

В седьмой главе обсуждается **совершенствование подхода к кинетическим исследованиям**. Здесь в качестве альтернативы классическим кинетическим моделям с общим значением частотного фактора для всех энергий активации рассматривается зависимость вида:

$$E_a = \alpha + \beta \times \log A, \quad (1)$$

где E_a – энергия активации, ккал/моль; A – частотный фактор (предэкспоненциальный множитель), с^{-1} ; α и β – положительные константы.

Эта зависимость является типичной для серий однотипных химических реакций [Рогинский, Хаит, 1960]. В теории кинетические модели построенные на основе (1) должны гораздо лучше описывать термическую эволюцию органического вещества пород. К сожалению, в литературе отсутствует информация о том, каким образом зависимость (1) может быть получена для процесса пиролиза органического вещества.

На основе результатов кинетических экспериментов с образцами баженовской свиты различной термической зрелости была определена корреляционная зависимость между частотным фактором и энергией активации:

$$E_a = 1,569756 \times \ln A + 2,957029 \quad (2)$$

Использование этой зависимости при расчете кинетических параметров для образцов баженовской свиты различной термической зрелости (катагенеза) и предложенный алгоритм объединения полученных результатов, позволили построить композиционные модели № 1 и № 2 (Рисунок 8).

В восьмой главе проводится **сопоставление реализации генерационного потенциала с использованием разных кинетических моделей**. На основе сопоставления современных пластовых температур баженовской свиты из базы данных по скважинам АО «ТомскНИПИнефть» и степени трансформации органического вещества по результатам Rock-Eval пиролиза сделаны следующие выводы:

1) Скважины с температурами баженовской свиты менее 80 °С (палеотемпература 100 °С) содержат незрелое органическое вещество. Степень трансформации его составляет около 5–10 % (на основе анализа данных по скважинам Арчинской, Лугинецкой, Чагвинской и Южно-Мыльджинской площадей).

2) Скважины с температурами баженовской свиты около 95 °С (палеотемпература 115 °С) содержат зрелое органическое вещество. Степень трансформации его варьируется в диапазоне 40–50 % (на основе анализа данных по скважинам Глуховской, Галяновской, Кондаковской, Южно-Галяновской площадей).

3) Скважины с температурами баженовской свиты около 135 °С (палеотемпература 155 °С) содержат зрелое органическое вещество. Степень трансформации его составляет около 90 % (на основе анализа данных по скважине Западно-Салымской площади).

На основе литературных данных, а также на основе значений современных пластовых температур баженовской свиты, рассчитаны линейные скорости нагрева с учетом и без учета максимальных значений палеотемператур.

Применение рассчитанных скоростей нагрева к кинетическим моделям на рисунках 5, 7 и 8 (Рисунок 9) позволило сделать вывод о том, что с учетом максимальных значений палеотемператур очень хорошо со сделанными выводами коррелирует композиционная кинетическая модель № 2, изображенная на рисунке 8, б.

Также в этой главе построены зависимости степени трансформации органического вещества баженовской свиты по кинетическим моделям от отражательной способности витринита (Рисунок 10).

Полученные результаты (см. рисунок 10) отлично коррелируют с данными, приведенными в [Самойленко, 2011; Гончаров и др., 2013]. При степени отражательной способности витринита равной 0,65 % молекулярный параметр 4МДБТ/1МДБТ равен 1,5 и ему соответствует степень трансформации органического вещества баженовской свиты на уровне 20–25 % для Пурпейско-Васюганского фациального района [Самойленко, 2011]. На рисунке 10 этому же значению отражательной способности витринита соответствует степень трансформации органического вещества баженовской свиты равная 18–26 %, рассчитанная по композиционным моделям № 1 и № 2.

Для прослеживания корреляции с более высокими степенями трансформации совместно использованы диаграмма $HI - T_{max}$ (см. рисунок 6) и зависимость отражательной способности витринита от параметра T_{max} [Самойленко, 2011]. Отражательной способности витринита равной 0,85 % соответствует T_{max} равный 445 °С. Ему, согласно диаграмме $HI - T_{max}$, соответствует значение водородного индекса (HI) равное ~325 мг УВ/г $C_{орг}$. Если считать начальное значение HI для органического вещества баженовской свиты равно ~670 мг УВ/г $C_{орг}$, то можно рассчитать степень трансформации ОВ, которая равна ~71 %. Авторские композиционные кинетические модели на рисунке 10 показывают при $R_{vt} = 0,85$ % степень трансформации от 60 до 70 %.

В девятой главе обсуждаются результаты **моделирования генерации углеводородов в ходе пиролиза и рассчитывается двухкомпонентная кинетическая модель.**

Здесь анализируются данные хроматографических, хромато-масс-спектрометрических и изотопных масс-спектрометрических исследований продуктов лабораторного пиролиза баженовской свиты Арчинской, Комсомольской и Южно-Сургутской площадей в контексте вопроса: «В какой степени лабораторные эксперименты позволяют повторить природные процессы?»

В процессе обсуждения результатов **хромато-масс-спектрометрических исследований** сопоставляется изменение молекулярных параметров (МР1-1, K_i , 4МДБТ/1МДБТ) в экстрактах из

пород после проведения экспериментов и экстрактах баженовской свиты из скважин с различным уровнем катагенеза (МК₁¹-МК₂, $T_{\max} = 430-455$ °С, $R^{\circ}_{vt} = 0,50-1,15$ %).

Результаты **изотопного исследования** газов (СО, СО₂, СН₄, С₂Н₆ и др.), полученных в ходе экспериментов, сравниваются с изотопным составом газа из баженовской свиты Западно-Квензерской площади. Отмечаются сходства и различия.

Особый интерес вызывает сопоставление (Рисунок 11) [Гончаров и др., 2012] изотопного состава углеводородных компонентов газов, полученных в ходе экспериментов, и газов, ассоциированных с нефтями различных типов (баженовский, тогурский и палеозойский).

Результаты определения компонентного состава (**хроматография**) позволяют констатировать, что газ, полученный в ходе проведения экспериментов, отличается от газа, генерируемого породой в процессе естественной термической эволюции. В первую очередь отличие состоит в наличии непредельных углеводородов. Это связано с тем, что в ходе жесткого термического крекинга органического вещества его структура не успевает перестраиваться, не происходит перераспределения водорода, и как результат образуются ненасыщенные углеводороды.

Концентрации некоторых неуглеводородных газовых компонентов, полученных в ходе лабораторного эксперимента, оказались гораздо выше, чем в природном газе [Tomic et al., 1995; Weijiao et al., 2020]. С одной стороны, связано это может быть с их реакционной способностью. Сероводород (Н₂С) в процессе вторичной миграции растворяется в воде и взаимодействует с породой, образуя сульфиды. Углекислый газ также растворяется в воде и образует карбонаты. С другой стороны, это может быть следствием жесткого термического крекинга, и в процессе естественной термической эволюции они не образуются в таком количестве.

Итогом сопоставления результатов анализа газов, полученных в ходе экспериментов, и природного газа Западно-Квензерской площади стал расчет величины газосодержания от степени трансформации органического вещества баженовской свиты (Рисунок 12). Расчет выполнен для модельного газа. Углеводородная часть модельного газа является углеводородной частью газов, полученных в ходе экспериментов. Неуглеводородная часть модельного газа постоянна и по аналогии с газом Западно-Квензерской площади в ней отсутствует сероводород, содержание азота равно 0,121 %, а СО₂ – 2,330 %.

Кроме этого выполненные исследования позволили построить зависимость выхода газа состава С₁–С₅ от степени трансформации

органического вещества баженовской свиты. На ее основе выполнен расчет двухкомпонентной кинетической модели (Рисунок 13).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием современных методов анализа (пиролиз Rock-Eval, хромато-масс-спектрометрия, изотопная масс-спектрометрия, хроматография) и экспериментальной установки выполнены исследования баженовской свиты юга Западной Сибири. В результатах лабораторных экспериментов по термическому моделированию генерации углеводородов незрелой баженовской свитой и природных образцах пород этой свиты на разных стадиях катагенеза есть как сходства, так и отличия.

К сходству можно отнести близкие значения изотопного состава органического углерода газообразных продуктов (C_1-C_5) и природного газа баженовского типа (см. рисунок 11), а также направление тренда изменения молекулярных (MPI-1, Ki, 4МДБТ/1МДБТ) и пиролитических параметров (T_{max} , HI). Также важно отметить близкие значения газосодержания, рассчитанного на основе лабораторных экспериментов (30–82 м³/т), с содержанием газа в баженовской нефти из природных залежей (40–90 м³/т).

Важным отличием является несоответствие значений пиролитических (T_{max} , HI) и молекулярных параметров (MPI-1, Ki, 4МДБТ/1МДБТ) пород и их экстрактов, полученных в ходе экспериментов, и из скважин при близком уровне термической зрелости. Это отличие обусловлено тем, что в процессе лабораторного пиролиза не происходят процессы поликонденсации органического вещества, а протекает преимущественно деструкция. Из-за неё кинетические модели, построенные по результатам лабораторных экспериментов с незрелыми образцами материнских пород, описывают именно лабораторный эксперимент, а не природный процесс. Поэтому для учета природного процесса автором диссертации предложен алгоритм кинетических исследований, который предусматривает изучение материнской породы на разных этапах катагенеза.

Сопоставление реализации генерационного потенциала органическим веществом баженовской свиты по разным кинетическим моделям показывает преимущество кинетических параметров, рассчитанных для материнской породы на разных этапах катагенеза.

Эксперименты по моделированию генерации углеводородов в ходе лабораторного пиролиза позволили установить зависимость генерации газообразных углеводородов (C_1-C_5) с ростом степени трансформации и выполнить расчет двухкомпонентной кинетической модели.

В рамках исследований также проведена работа по определению внутрилабораторных погрешностей Rock-Eval пиролиза. Ее итогом стало получение свидетельства об аттестации методики измерений № 08-47/363.01.00143-2013.2016 «Методика (метод) измерений пиролитических параметров проб осадочных пород методом пиролиза с применением пиролизатора Rock-Eval 6 Turbo (цикл BulkRock)».

Полученные результаты и описанный в работе алгоритм кинетических исследований могут быть использованы в бассейновом моделировании, при прогнозе перспектив нефтегазоносности и поисках месторождений. **В качестве дальнейшего направления исследований** важно выделить изучение, выявление сходств и отличий кинетических характеристик возрастных аналогов баженовской свиты (яновстанской, тутлеймской, гольчихинской свит) и материнских пород со схожим типом керогена – доманиковые отложения.

СПИСОК ОСНОВНЫХ РАБОТ ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Методика

Свидетельство об аттестации методики измерений № 08-47/363.01.00143-2013.2016 «Методика (метод) измерений пиролитических параметров проб осадочных пород методом пиролиза с применением пиролизатора Rock-Eval 6 Turbo (цикл BulkRock)».

В изданиях, входящих в перечень ВАК:

1. Гончаров И.В. Типы и катагенез органического вещества баженовской свиты и ее возрастных аналогов / И.В. Гончаров, В.В. Самойленко, Н.В. Обласов, С.В. Фадеева, М.А. Веклич, Р.С. Кашапов, П.В. Трушков, Е.С. Бахтина // Нефтяное хозяйство. – 2016. – № 10. – С. 20-25.

2. Кашапов Р.С. Определение кинетических параметров пиролитической деструкции органического вещества нефтегазоматеринских пород / Р.С. Кашапов, Н.В. Обласов, И.В. Гончаров, В.В. Самойленко, А.А. Гринько, П.В. Трушков, С.В. Фадеева // Нефтегазовая геология. Теория и практика. – 2019. – Т. 14, № 1. – Режим доступа: http://www.ngtp.ru/rub/2019/6_2019.html.

3. Кашапов Р.С. Новый подход к кинетическим исследованиям органического вещества баженовской свиты / Р.С. Кашапов, И.В. Гончаров, Н.В. Обласов, В.В. Самойленко, П.В. Трушков, С.В. Фадеева // Геология нефти и газа. – 2020. - № 3. – С. 0-0. DOI: 10.31087/0016-7894-2020-3-0-0.

4. Гончаров И.В. Природа углеводородных флюидов месторождений севера Западной Сибири (геохимический аспект) / Гончаров И.В., Веклич

М.А., Обласов Н.В., Самойленко В.В., Фадеева С.В., Кашапов Р.С., Жердева А.В., Смирнова Н.А. // Геохимия. – 2023. – Т. 68, № 2. – С. 115-138. DOI: 10.31857/S0016752523020048.

В других изданиях:

1. Гончаров И.В. К вопросу о погрешностях метода Rock-Eval / И.В. Гончаров, Р.С. Кашапов, В.В. Самойленко, Н.В. Обласов, П.В. Трушков // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2015. – № 10. – С. 866-873.

2. Кашапов Р.С., Гончаров И.В. Характеристика органического вещества баженовской свиты Юганской мегавпадины по пиролитическим данным // Труды XVIII Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых учёных. – Томск. Изд-во ТПУ, 2014. – С. 291-293.

3. Кашапов Р.С., Гончаров И.В. Особенности построения кинетической модели процесса пиролитической деструкции органического вещества в программном комплексе Optkin // Труды XIX Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых учёных. – Томск. Изд-во ТПУ, 2015. – С. 242 - 244.

4. Kashapov R.S., Goncharov I.V. ACCURACY OF THE ROCK-EVAL METHOD ISO 5725-1-5725-6 // 21th International Symposium on Analytical and Applied Pyrolysis: Conference Guide and Abstracts. – Nancy, 2016. – P. 317-317.

5. Кашапов Р.С., Гончаров И.В., Самойленко В.В., Веклич М.А., Коновалова Е.Н., Фадеева С.В., Жердева А.М. Газообразование породами баженовской свиты // X Международная конференция «Химия нефти и газа»: сборник тезисов. – Томск, 2018. – С. 688-688.

6. Kashapov R.S., Goncharov I.V., Samoilenko V.V., Oblasov N.V., Veklich M.A., Konvalova E. N., Fadeeva S.V., Zherdeva A.M. EXPERIMENTAL MODELING OF THE BAZHENOV FORMATION GAS GENERATION // 29th International Meeting on Organic Geochemistry: Book of Abstracts. – Gothenburg, 2019.

7. Kashapov R.S., Goncharov I.V., Samoilenko V.V., Oblasov N.V. OBTAINING THE KINETIC SPECTRUM OF ORGANIC MATTER AT DIFFERENT STAGES OF NATURAL THERMAL EVOLUTION // 30th International Meeting on Organic Geochemistry: Book of Abstracts. – Montpellier, 2021.

8. Р. С. Кашапов, И. В. Гончаров, Н. В. Обласов, В. В. Самойленко Кинетические исследования органического вещества баженовской свиты // Успехи органической геохимии: Материалы 2-й Всеросс. науч. конф. с участием иностр. ученых, посв. 120-летию со дня рожд. чл.-корр. АН СССР

Н. Б. Вассоевича и 95-летию со дня рожд. засл. геолога РСФСР, проф. С. Г. Неручева. – Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2022. – С. 105-107.

Технический редактор Т.С. Курганова

Подписано в печать 18.06.2024

Формат 60x84/16. Бумага офсет №1. Гарнитура Таймс

Печ.л. 0,9. Тираж. 106. Зак. № 228

ИНГГ СО РАН, 630090, Новосибирск, просп. Акад. Коптюга, 3

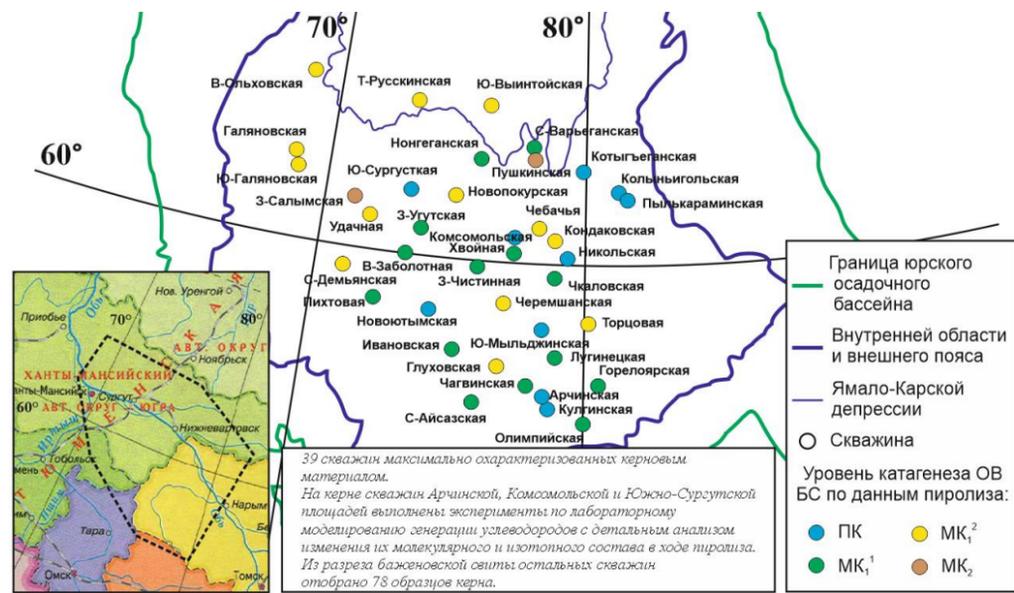


Рисунок 1 – Район исследований

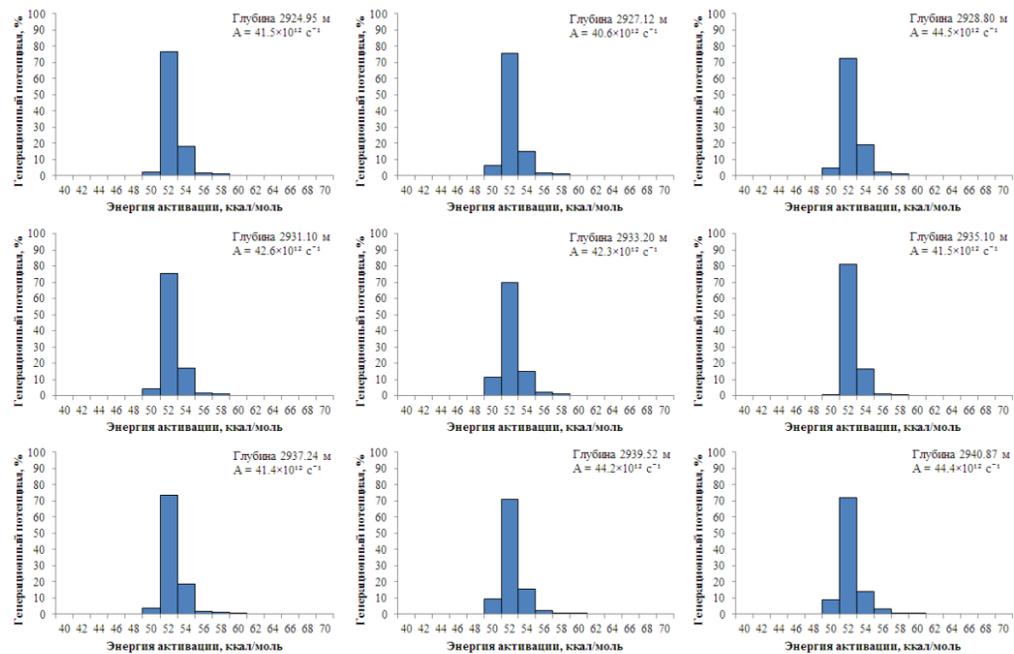


Рисунок 2 – Результаты кинетического исследования образцов баженовской свиты скважины Западно-Угутской площади при заданном диапазоне изменения константы Аррениуса от 30×10^{12} до $50 \times 10^{12} \text{ c}^{-1}$

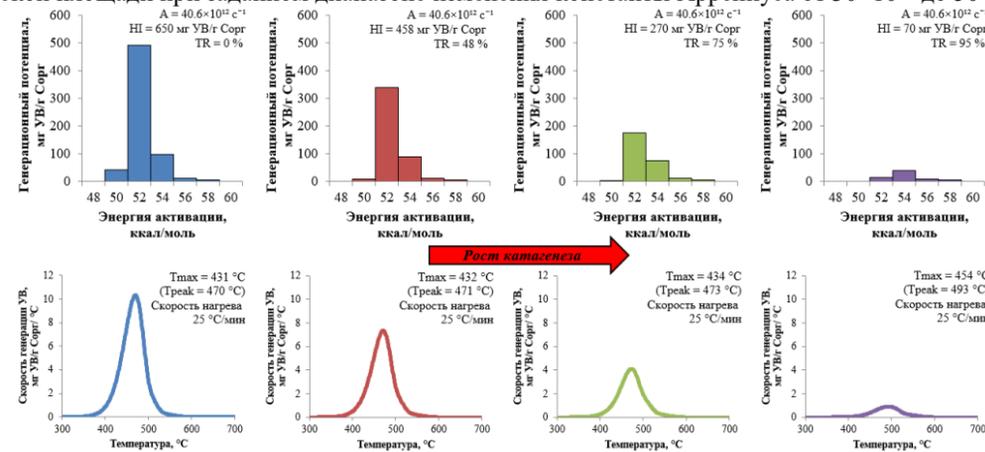


Рисунок 3 – Общепринятая модель термической эволюции керогена [Tissot et al., 1987]

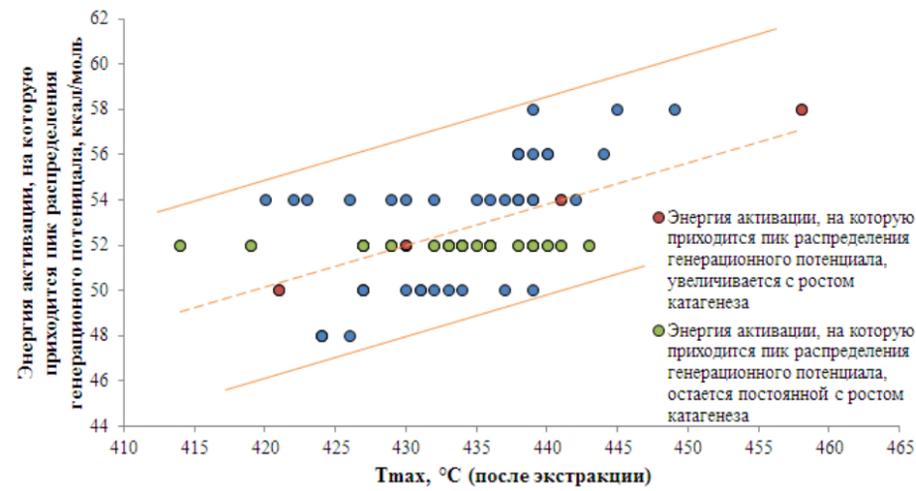


Рисунок 4 – Зависимость между энергией активации и параметром T_{max} для образцов баженовской свиты различной термической зрелости

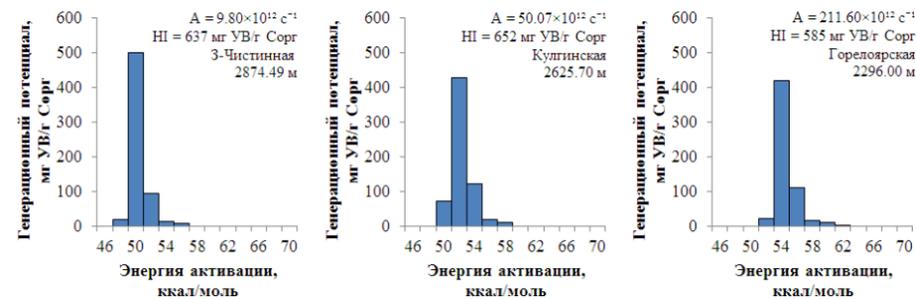


Рисунок 5 – Кинетические модели органического вещества баженовской свиты

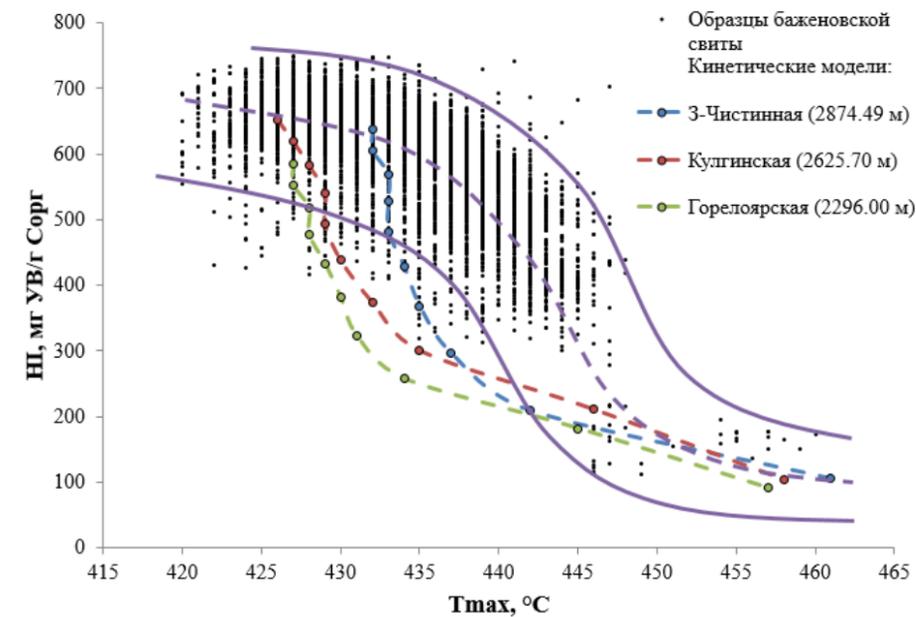


Рисунок 6 – Сопоставление реализации генерационного потенциала органического вещества баженовской свиты в ходе естественной термической эволюции с его реализацией по кинетическим моделям

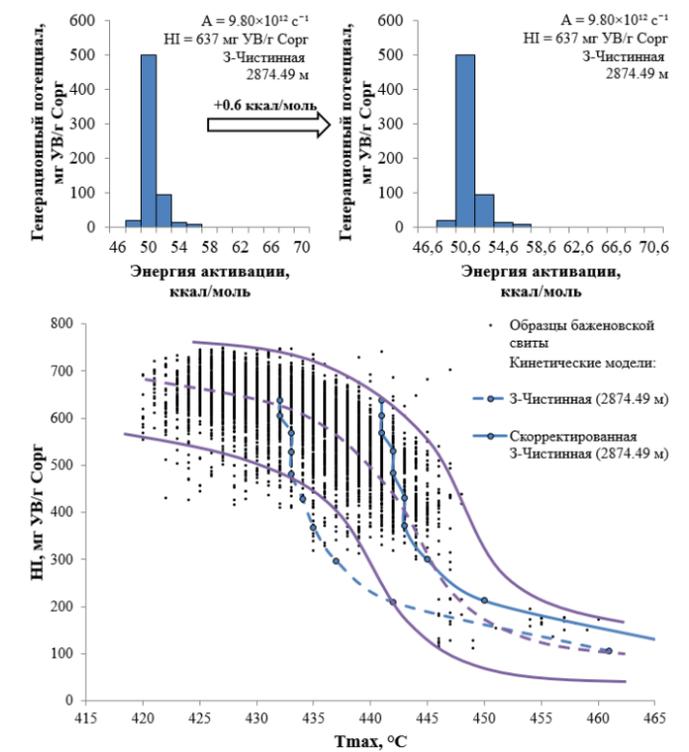


Рисунок 7 – Сопоставление реализации генерационного потенциала исходной и скорректированной кинетических моделей органического вещества баженовской свиты Западно-Чистинной площади

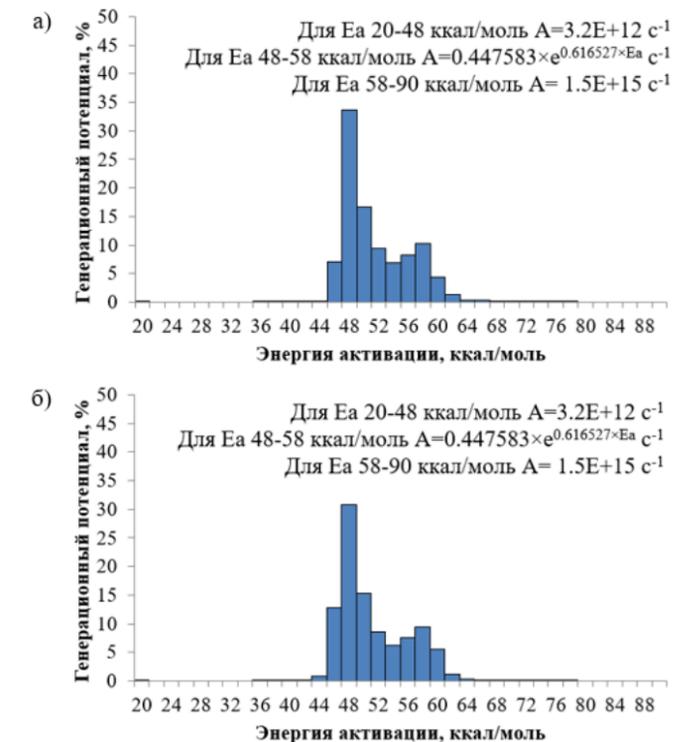


Рисунок 8 – Композиционная кинетическая модель №1 (а) и №2 (б)

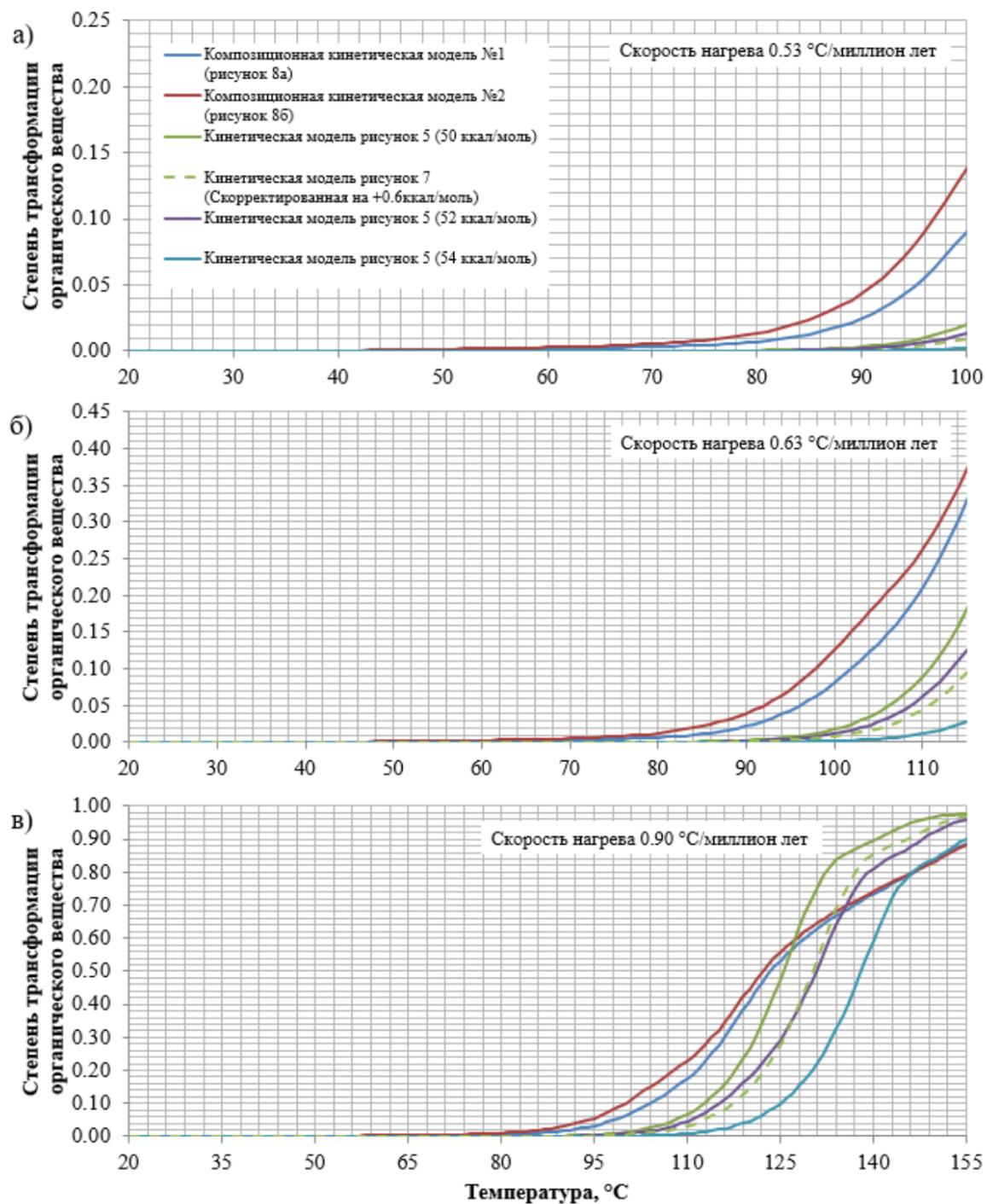


Рисунок 9 – Реализация генерационного потенциала в соответствии с различными кинетическими моделями (с учетом максимальных значений палеотемператур):

- а) скорость нагрева 0.53°C/миллион лет, максимальное значение палеотемпературы 100°C;
- б) скорость нагрева 0.63°C/миллион лет, максимальное значение палеотемпературы 115°C;
- в) скорость нагрева 0.90°C/миллион лет, максимальное значение палеотемпературы 155°C;

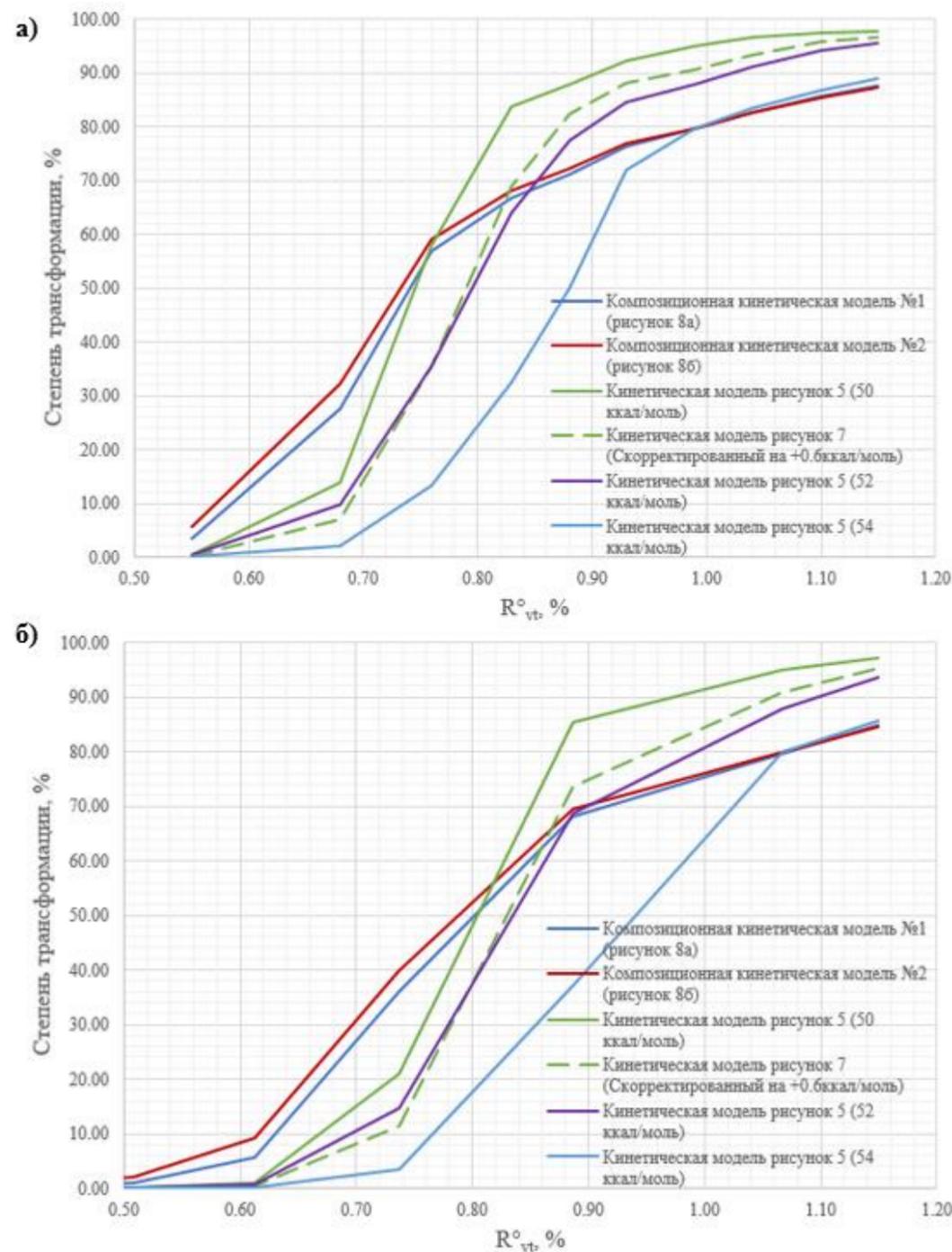


Рисунок 10 – Зависимость степени трансформации ОВ БС от отражательной способности витринита для различных кинетических моделей: а) на основе кинетических параметров созревания витринита [Tissot et al., 1987]; б) на основе кинетических параметров созревания витринита [Sweeney, Burnham, 1990]

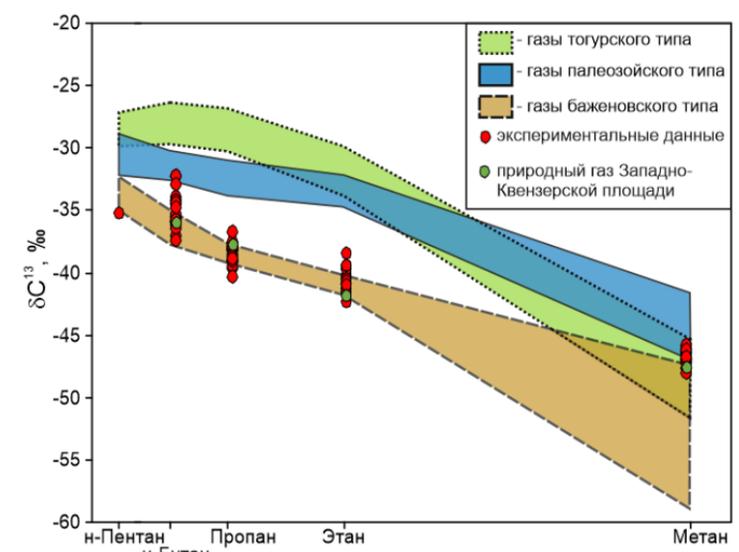


Рисунок 11 – Изотопный состав углеводородных газов

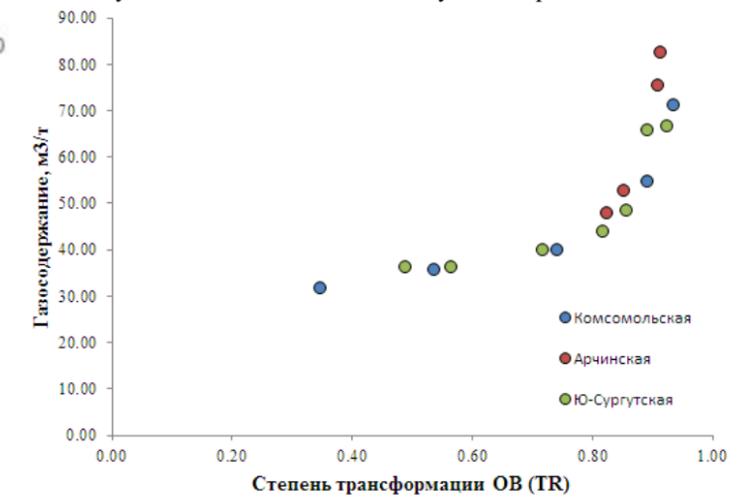


Рисунок 12 – Зависимость величины газосодержания от степени трансформации органического вещества базеновской свиты (модельный газ) по результатам термических экспериментов

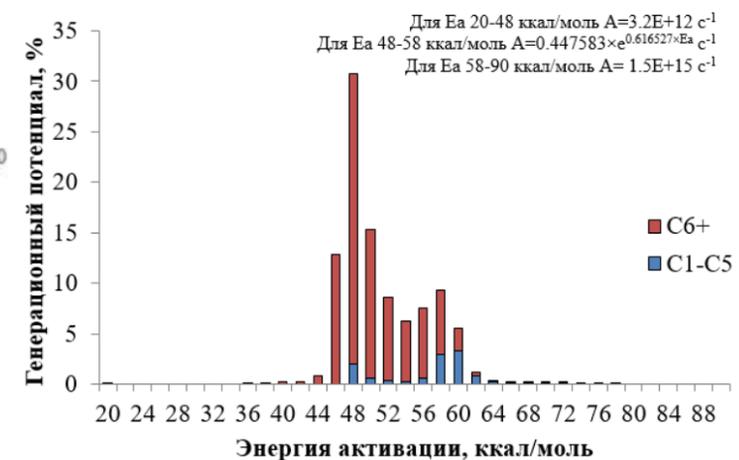


Рисунок 13 – Двухкомпонентная кинетическая модель для органического вещества базеновской свиты (на основе композиционной кинетической модели №2 с рисунка 8, б)