Геология нефти и газа

УДК 553.982
https://doi.org/10.26516/2541-9641.2022.1.20

Компьютерное моделирование физико-химических процессов образования нефти

В.П. Исаев, Я.Б. Тетиали

[1] *Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия*

Аннотация. Моделировалась многокомпонентная гетерогенная система. В качестве углеродсодержащего компонента в мультисистему был введён средний состав сапропелевого органического вещества мезозойских отложений Западно-Сибирской НГП (по И.И. Нестерову). Твердые фазы мультисистемы представлены минералами песчаников, глинистых пород и известняков.

Ключевые слова: многокомпонентная гетерогенная система, Западно-Сибирская НГП, литология, моделирование процессов нефтегазообразования.

Computer modeling of physicochemical processes of oil formation

V.P. Isaev, Y.B. Tetiali

[1] *Irkutsk State University, Irkutsk, Russia*

Abstract. A multicomponent heterogeneous system was modeled. As a carbon-containing component, the average composition of sapropel organic matter of the Mesozoic deposits of the West Siberian NGP (according to I.I. Nesterov) was introduced into the multisystem. Solid phases of the multisystem are represented by minerals of sandstones, clay rocks, and limestones.

Keywords: multycomponent heterogeneous system, West Siberian NGP, lithology, modelling of oil and gas formation processes.

Для формирования теоретических моделей процесса образования нефти и газа применялось физико-химическое моделирование на ПК. Использовался программный комплекс «Селектор-С» (авторы И.К. Карпов и др., 1995), разработанный в институте геохимии им. А.П. Виноградова. Моделирование проведено В.П. Исаевым при консультациях И.К. Карпова. Моделирование было проведено в 80-х годах прошлого столетия, но до сих пор не опубликовано.

Моделировалась многокомпонентная гетерогенная система. В качестве углеродсодержащего компонента в мультисистему был введён средний состав сапропелевого органического вещества мезозойских отложений Западно-Сибирской НГП (по И.И. Нестерову). Твердые фазы мультисистемы представлены минералами песчаников, глинистых пород и известняков.

Моделирование процессов нефтегазообразования в условиях «открытых» мультисистем с участием осадочных пород различной литологии показало принципиальное сходство образующихся газов (метан, вода (г) и азот). Очень велико содержание остаточного твердого (аморфного) углерода. Характерна низкая концентрация гомологов метана. При моделировании «закрытых» мультисистем во всех породах увеличивается содержание гомологов метана и появляется незначительное количество жидких углеводородов (УВ). В любом случае литология осадочных пород не имеет существенного значения для процессов нефтегазообразования, поэтому

дальнейшее моделирование проводилось только для глинистых пород.

В открытых мультисистемах рост давления от 1 до 1000 бар не влияет на содержание C, CH_4, H_2O (г) и N_2, но снижает концентрацию H_2, CO_2, CO и повышает количество всех гомологов метана, аммиака и сероводорода. Содержание гомологов метана особенно интенсивно возрастает в интервале 1–50 бар, пентаны появляются только при P = 200 – 300 бар. В целом, содержание гомологов метана остаётся низким.

Повышение температуры в интервале 273–473 К не влияет на содержание CH_4, N_2, но приводит к более заметному росту концентрации всех газообразных гомологов метана, аммиака, водорода, сероводорода, оксида и диоксида углерода, непредельных УВ.

Моделирование процессов нефтегазообразования в изохорно-изотермических условиях «закрытой» мультисистемы показывает, что при любых давлениях (от 50 до 1000 бар) главными компонентами образующейся газовой фазы являются метан, вода, аммиак, азот и все гомологи метана (при T = 323 К). Суммарное содержание гомологов метана в «закрытой» системе на несколько порядков выше, чем в «открытой» мультисистеме. При низком внешнем давлении (50–200 бар) жидкая фаза не образуется. С ростом давления от 50 до 200 бар содержание CH_4 уменьшается, а его гомологов увеличивается. При умеренном внешнем давлении (300–400 бар) в изучаемой мультисистеме появляются жидкие УВ. При высоком внешнем давлении (1000 бар) состав образующихся газов становится существенно метановым, с высоким содержанием паров воды и с примесью аммиака и азота. Гомологов метана очень мало. Других жидких компонентов (кроме воды) нет.

Анализ влияния барического фактора на процессы нефтегазообразования приводит к выводу о существовании фазовой зональности по давлению. Так, при T = 323 К в интервале P от 1 до ~125 бар должна существовать зона сухих углеводородных газов (УВГ), от ~125 до ~225 бар – зона жирных УВГ, от ~225 до ~300 бар – газонефтяная зона, от ~300 до ~375 бар и выше – газоконденсатная. В области P = 1000 бар фиксируется зона метановых газов.

Сопоставление «открытых» и «закрытых» мультисистем при прочих равных условиях показало, что состав флюидов имеет принципиальные отличия. В «закрытых» мультисистемах H_2O (ж) преобладает над H_2O (г), в них меньше N_2, CH_4 и твёрдого C, но значительно больше гомологов метана. Главной особенностью «закрытых» мультисистем является наличие жидких УВ.

Моделирование процессов нефтегазообразования в изохорно-изотермических условиях закрытых систем показало, что ***изменение объема закрытой мультисистемы управляет концентрацией образующихся веществ***. В системе возникают особые условия – термодинамические барьеры, на которых происходит резкое изменение свойств мультисистемы. Уменьшение объема закрытых мультисистем при постоянном давлении обусловливает увеличение содержания жидких компонентов. Отсюда ***вывод: жидкие УВ образуются, в основном, в изолированных микропорах.*** Увеличение объёма «закрытой» мультисистемы приводит к бурному росту метана и снижению доли его гомологов (рис. 1). Газ становится «сухим».

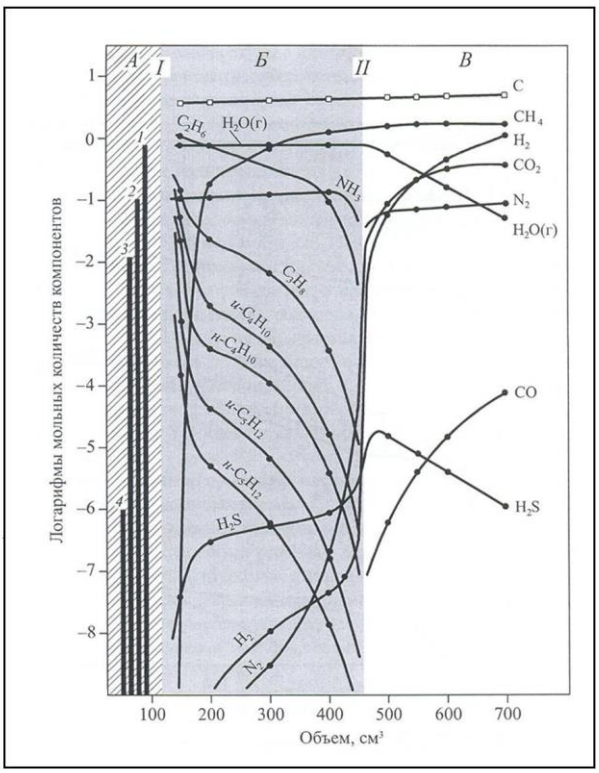

Рис. 1. Термодинамически равновесный состав газов, образующихся из сапропелевого РОВ глинистых пород в условиях закрытой гетерогенной мультисистемы с переменным объёмом при P = 100 бар, T = 323.15 °C.

Условные обозначения: кружками показан газ, квадратиками – твёрдый углерод. А – зона устойчивого существования жидких УВ; Б – зона устойчивого существования тяжёлых УВ; В – зона устойчивого существования метана и неуглеводородных газов. Области существования

компонентов жидких фаз: 1 – циклогексан, 2 – вода, 3 – гидразин, 4 – нонан; I, II – термодинамические барьеры.

Fig. 1. Thermodynamically equilibrium composition of gases formed from sapropelic ROV of clay rocks in conditions of a closed heterogeneous multisystem with variable volume at P = 100 bar, T = 323.15 °C.

Symbols: circles show gas, squares – solid carbon. A – a zone of stable existence of liquid hydrocarbons; Б – a zone of stable existence of heavy hydrocarbons; B – a zone of stable existence of methane and non-hydrocarbon gases. Areas of existence of components of liquid phases: 1 – cyclohexane, 2 – water, 3 – hydrazine, 4 – nonan; I, II – thermodynamic barriers.

Моделирование в изохорических условиях мультисистемы «РОВ – глинистые породы» (T = 323.15 К) показало, что при объемах 10–450 см^3 и давлениях от 50 до 1000 бар главными компонентами газовой фазы являются CH_4, H_2O, NH_3, N_2. Содержание гомологов метана значительно выше, чем в открытой мультисистеме.

Это показывает, что выявленные в результате моделирования закономерности изменения состава флюидов, образующихся из РОВ, согласуются с хорошо известной вертикальной зональностью нефтегазообразования, а эмпирически установленная главная зона нефтеобразования теоретически подтверждается термодинамическими расчетами.

Таким образом, жидкие углеводороды могут образоваться только в «закрытых» системах в узком интервале P от ~225 бар до ~450 бар.

Идеальных закрытых систем в природе нет. Из всех горных пород более всего отвечают условиям «закрытых» систем, главным образом, глинистые породы. Изолированные поровые пространства этих пород удовлетворяют понятию «закрытых» систем только до тех пор, пока процессы газообразования не приведут к появлению больших объёмов газов. Это вызывает рост внутрипорового давления, что в свою очередь способствует образованию новых порций углеводородов. Возникает как бы цепной процесс, который прерывается только тогда, когда внутрипоровое давление превысит прочность стенок пор и произойдет «гидравлический» разрыв минеральной матрицы с образованием трещин. В результате происходит выброс значительной части образовавшихся газов и жидкостей в окружающую среду. После уравнивания давлений трещины замыкаются и процесс снова продолжается как в «закрытой» системе.

Следовательно, ***первичная миграция (или эмиграция) флюидов из материнских пород имеет активный характер*** и происходит пульсационно по мере накопления в изолированных поровых пространствах новых порций флюидов. Такой процесс неизбежен, поскольку объём образующихся флюидов (прежде всего газов) в тысячи раз больше, чем объём исходного органического вещества. Периодичность пульсационной эмиграции зависит от глубины залегания материнских пород: при малых значениях P и T она реже, при больших – чаще.

Моделирование температурного фактора (при P = 300 бар, через 25 °C) показало, что максимальное количество тяжелых углеводородных газов образуется при температурах 50, 75 и 100 °C. Жидкие углеводороды зафиксированы при 50 °C.

При всех благоприятных P, T – условиях количество образующихся жидких углеводородов всё же не достигает природных соотношений между газом и нефтью. Так, при P = 300 бар и T = 323 К соотношение между газообразной и жидкой фазами углеводородов составило лишь 100 : 2 $*$ 10^{-5}. Наиболее вероятным стимулятором, повышающим выход жидких углеводородов из органического вещества в процессе катагенеза, может быть водород. Его привнос в моделируемую мультисистему повысил долю образующихся жидких углеводородов и указанное выше соотношение достигло при 7 молях водорода 99.83 : 0.17. При 8 молях водорода концентрация жидких углеводородов продолжала резко возрастать, а при 9 и 10 молях – стабилизировалась (рис. 2).

Таким образом, результаты физико-химического моделирования на компьютере процессов образования нефти и газа позволяют наметить ***благоприятные условия для образования нефти: наличие осадочных пород, обладающих изолированным мелкопоровым пространством, пластовое давление в интервале от ~ 20–25 МПа до ~42.5–47.5 МПа, пластовая температура ~25–75 °C,***

наличие рассеянного органического вещества и поступление водорода в нефтематеринские породы.

Последнее условие является самым главным, так как в природных условиях после протекания процесса нефтегазообразования в породах почти всегда остаётся остаточный углерод в виде керогена. Водорода в исходном органическом веществе (5–6 %) всегда не хватает, поэтому полной реализации природного синтеза газообразных и жидких углеводородов не происходит. Не говоря об источниках водорода (а их предполагается несколько), отметим лишь главный вывод: рассеянные углеводороды образуются в результате гидрирования органического вещества свободным водородом.

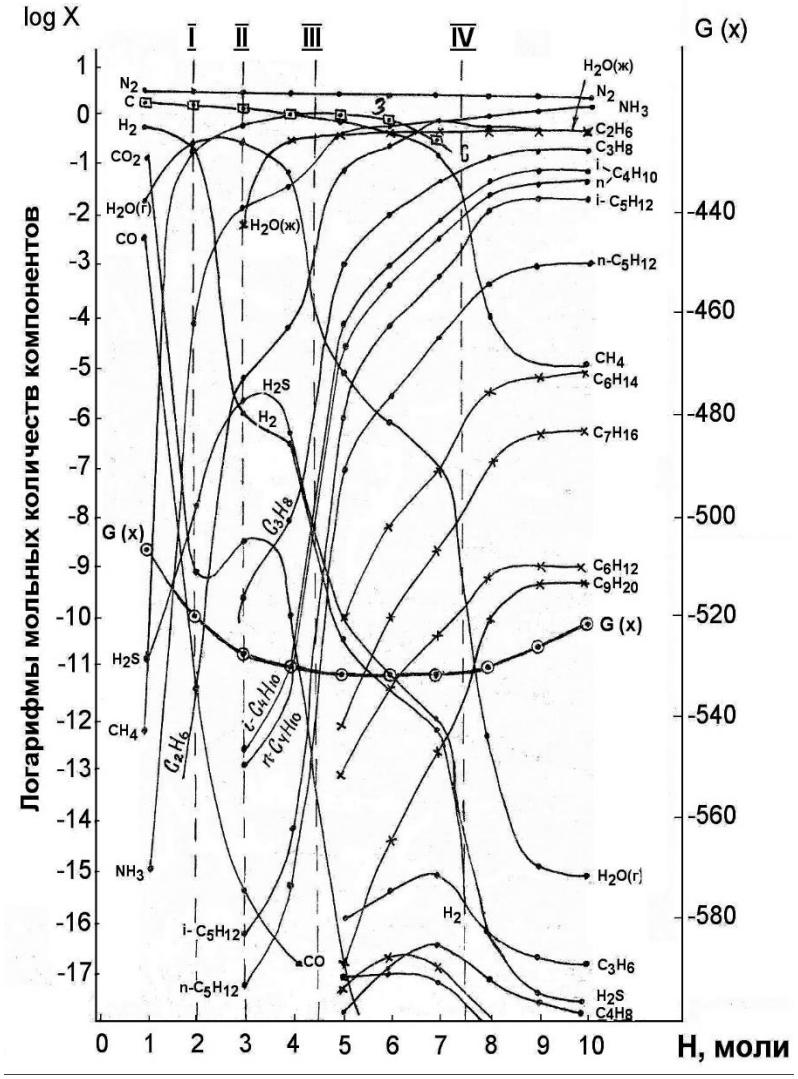

Рис. 2. Влияние концентрации водорода на равновесный состав газов в «закрытой» гетерогенной мультисистеме в изобарно-изохорических условиях P=300 бар, T=50 °C, V=400 см³, исходный газ – газ закрытых пор, вмещающая порода – глинистая, первоначальное содержание водорода в системе 0.56 моля); на диаграмме показано: точками – газ, крестиками – жидкость, квадратиками – твёрдый углерод, кружочками – функция G(x), I–IV – термодинамические барьеры.

Fig. 2. Influence of hydrogen concentration on the equilibrium composition of gases in a "closed" heterogeneous multisystem under isobaric-isochoric conditions: P = 300 bar, T = 50 °C, V = 400 cm³, the initial gas of closed pores, the host rock – clay, the initial hydrogen content in the system is 0.56 moles); the diagram shows: dots – gas, crosses – liquid, squares – solid carbon, circles – function G(x), I–IV – thermodynamic barriers.

Неслучайно поэтому крупные месторождения нефти и максимальная плотность запасов приурочены к зонам разломов и их пересечениям, к погребенным рифтам, к геосинклинальным и межгорным осадочным бассейнам, где велика вероятность поступления водорода в осадочный чехол.

Геохимия водорода изучена пока недостаточно. Однако некоторые учёные уделяли водороду очень пристальное внимание: Л.М. Зорькин, М.Г. Гуревич, С.П. Левшунова, Ф.А. Алексеев, Г.И. Войтов, В.С. Лебедев, А.П. Виноградов, Ю.И. Пиковский, В.А. Соколов, В.П. Исаев, В.И. Молчанов, Ф.А. Летников и В.Н. Ларин.

Оригинальные исследования по геохимии водорода проведены В.И. Молчановым в 70-80-х годах прошлого столетия. На основании большого количества лабораторных экспериментов им показано, что природное диспергирование минералов приводит к образованию диспергитов: гипергенных, тектогенных и вулканогенных, обладающих высоким уровнем свободной энергии и характеризующихся, следовательно, высокой химической активностью. Это стимулирует широкое развитие в стратисфере процессов генерации H_2 в результате взаимодействия воды с активированным минеральным веществом, содержащим закисное железо и сульфидную серу. В. И. Молчанов подсчитал, что в течение всего фанерозоя в результате этих процессов выделилось $1949.2*10^{12}$т H, на что израсходовано $17636.6*10^{12}$т H_2O, что составляет от массы гидросферы всего 1 %. Если встать на эту точку зрения, то необходимо признать присутствие в стратисфере значительных количеств H_2 и его важную геохимическую роль в процессах нефтегазообразования.

Интересные исследования по эволюции флюидного режима Земли в процессе её геологического развития публикуются Ф.А. Летниковым в 80-х годах. На основании большого количества хроматографических анализов газов из микровключений в различных породах и минералах, с привлечением аппарата физико-химического моделирования на ПК, Ф.А. Летниковым развиваются представления о качественной стадийности режима дегазации Земли. На самых ранних этапах развития Земли эндогенные флюиды, поступающие из недр к её поверхности, были в значительной степени восстановлены и весьма богаты углеродом (С-системы). Углерод выносился из недр в виде CO_2, CO, C, CH_4, что привело к его накоплению в экзосфере и способствовало появлению жизни. Этот ранний период дегазации Земли Ф.А. Летников назвал углеродно-водородным. Водород преобладал над углеродом в 4-5 раз и расходовался, как пишет Ф.А. Летников, на образование воды. Поскольку в то время преобладали восстановительные геохимические фации, то мы можем предположить масштабный синтез углеродистых веществ и углеводородов. Может быть, именно по этой причине в дофанерозойских отложениях Сибирской платформы сформировались значительные запасы нефти и газа, сохранившиеся до сих пор. Процесс нарастающего усиления «водородного дыхания» Земли прослеживается, по мнению Ф.А. Летникова, до кайнозоя.

В свете рассматриваемой проблемы безусловный интерес представляет геохимическая модель Земли, разработанная В.Н. Лариным (1980, 1981). По его представлениям ядро Земли состоит не из карбидов, а из гидридов металлов, которые во внешней оболочке ядра сложены твёрдыми растворами водорода в металлах. Гидриды металлов обладают рядом особых свойств. В одном объёме металла может быть растворено насколько сотен объёмов водорода. Гидрид-ион (H^-) обладает исключительно высокой сжимаемостью, обусловленной отсутствием электронных оболочек, имеющихся у всех других ионов. Такая модель изначально гидридной Земли логично допускает возможность её расширения, что обусловлено разложением гидридов под действием радиогенного тепла с выделением огромных количеств H_2, что приводит к снижению плотности вещества и, следовательно, к увеличению его объёма. В свете этой гипотезы ***Земля обладает практически неисчерпаемыми запасами H_2, а в составе эмигрирующих из недр флюидов он занимает едва ли не главенствующую роль.***

Следовательно, в процессах природного синтеза углеводородов нефти и газа

участвуют два агента: углерод и водород. Источником углерода являются осадочные породы, а водород частично принадлежит РОВ, но, в основном, поступает в осадочный чехол из мантии Земли.

Литература

Исаев В.П. Эволюция газовых систем нефтегазоносных бассейнов по результатам физико-химического моделирования // Моделирование геохимического поля нефтегазовых месторождений.– М.: ВНИИЯГГ, 1986.– С. 60–65.

Исаев В.П. Термодинамические аспекты геохимии природных газов.– Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1991.– 304 с.

Исаев В.П., Карпов И.К. О принципиальной зависимости компонентного состава газовых систем нефтегазоносных бассейнов от термодинамических факторов равновесия // Докл. АН СССР.– 1986.– Т. 285.– № 5.– С. 1209–1213.

Карпов И.К. и др. Минимизация свободной энергии при расчёте гетерогенных равновесий // Геология и геофизика.– 1995.– Т. 36, № 4.– С. 3–21.

Ларин В.Н. Гипотеза изначально гидридной Земли.– М.: Недра, 1980.– 216 с.

Летников Ф.А. Эволюция флюидного режима эндогенных процессов в геологической истории Земли // Докл. АН СССР.– 1982.– 262, № 6.– С. 1438–1439.

Молчанов В.И. Генерация водорода в литогенезе.– Новосибирск: Наука, 1981.– 144 с.

Исаев Виктор Петрович,
доктор геол.-минерал. наук, профессор,
664003 Иркутск, ул. Ленина, д. 3,
Иркутский государственный университет, геологический факультет,
email: isaevvp@yandex.ru.

Тетиали Ясинт Бернард,
г. Абиджан, Кот д' Ивуар,
аспирант каф. Геологии нефти и газа ИГУ,
664003 Иркутск, ул. Ленина, д. 3,
Иркутский государственный университет, геологический факультет,
тел. 89642163623,
email: tetialyyacinthe@gmail.com.

Isaev Viktor Petrovich,
Doctor of Geol.-Mineral. Ph.D., Professor,
664003 Irkutsk, Lenin str., 3,
Irkutsk State University, Faculty of Geology,
email: isaevvp@yandex.ru.

Tetiali Yacinth Bernard,
Abidjan, Ivory Coast,
PhD student caf. Geology of Oil and Gas ISU,
664003 Irkutsk, Lenin str., 3,
Irkutsk State University, Faculty of Geology,
tel. 89642163623,
email: tetialyyacinthe@gmail.com.