

120.

75-2
34

化学动力学在盆地模拟 生烃评价中的应用

李术元 著

石油大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

化学动力学在盆地模拟生烃评价中的应用 / 李术元
著, 东营: 石油大学出版社, 2000. 11
ISBN 7-5636-1409-5

I. 化... II. 李... III. 化学动力学-应用-烃-储量
-计算 IV. 06-04

化学动力学在盆地模拟生烃评价中的应用

李术元著

出版者: 石油大学出版社(山东东营, 邮编 257061)

网 址: <http://suncetr.hdpu.edu.cn/~upcpress>

电子信箱: upcpress@suncetr.hdpu.edu.cn

印刷者: 石油大学印刷厂

发 行 者: 石油大学出版社(电话 0546-8392563)

开 本: 850×1168 1/32 印张: 5.5 字数: 75 千字

版 次: 2000 年 5 月第 1 版第 1 次印刷

印 数: 1—700 册

定 价: 9.00 元

序

烃源岩的生烃量是油气资源评价的依据,也是石油勘探开发的基础。长期以来,石油地质和勘探工作者应用烃源岩干酪根镜质体反射率(R_o)来估计其成熟度——生烃的程度,显然这样判断油气的生成是经验性的,很难作出较准确的定量分析。70年代初,前苏联学者罗泊金提出了时间-温度参数(TTI)的计算方法:根据化学动力学中的凡特霍夫公式,即温度每增加 10°C ,化学反应速率增加 1 倍,结合有关地质参数中岩层沉降的时间、深度,计算出不同埋深的 TTI 数值(TTI 的单位是当量百万年),再根据 TTI 值的大小,划分出生油、生气的门限值和生烃程度。但这种方法不能计算出不同埋深的干酪根的具体生烃率,而且由于烃源岩干酪根的降解生烃的特征因其类型、地区地质状况的不同而各异,造成地层温度每增加 10°C ,降解生烃速率的增加不尽相同,不一定是增加 1 倍。60 年代末,法国

蒂索等提出了化学动力学方法,应用平行连串反应模型,通过现场和实验室试验,定量计算出不同埋深烃源岩的生烃率和两个油田的生烃量。嗣后国内外都有地质和化学工作者开展应用化学动力学计算生烃量的研究,大多应用总包一级或参照蒂索的平行反应模型。石油大学应用化学研究所自 80 年代初开始,在中国石油天然气总公司科技局的支持下,与有关研究单位和油田合作,应用化学动力学计算烃源岩生烃率和生烃量,先后采用了 8 种动力学模型,考察了不同模型对不同类型干酪根的适用性。系统的研究表明,串联一级反应模型,即化学动力学参数随生烃率变化而变化的模型适用于不同类型干酪根、不同地质状况的油田的生烃率和生烃量计算,其计算方法简便准确,计算结果得到实际情况的验证,并已经把模型计算编制成软件,应用于 5 个油田 7 个凹(洼)陷的计算,获得了较满意的结果。

本书由石油大学应用化学研究所教授李术元博士编写,将本研究所十多年的研究成果按照出版要求,深入浅出加以撰写,奉献给广

大读者,特别是石油系统生产、科技、管理人员
和有关高校师生,衷心希望用化学动力学来计
算和评价生烃量的方法能在世纪之交得到地
质勘探工作者更为广泛的推广和应用。

钱家麟 石油大学
2000年9月

前 言

在地质条件下,经过几千万年甚至上亿年的时间,烃源岩受地温及漫长岁月的影响,其干酪根发生热降解反应生成了油气。这一过程犹如化学反应中,一种物质在一定的温度、时间作用下转变为另外一种(或几种)物质的过程。因此,同炼油化工过程中遇到的许多化学反应一样,油气的生成过程也可用化学动力学理论进行定量地描述。

化学动力学研究化学反应进行的速度,考察各种因素(如浓度、压力、温度、时间、催化剂等)对反应速度的影响。此外,化学动力学还研究化学反应实际进行时经历了哪些反应步骤,即所谓的反应机理。所以,化学动力学是研究化学反应的速度和反应机理的基础科学。

化学动力学理论早期用于研究煤和油页岩的干馏炼油过程,并取得了丰硕的成果。之后,移植用于研究烃源岩干酪根的热解生烃,指导油气勘探开发过程中探井和生产井的井位布置和井深选定,以及评价含油气盆地的资源,取得了较大的成

功。

油气资源一般指贮存于地壳中的气态、液态和固态烃类,包括已发现的和尚未发现的,具有经济价值的地下油气的可能蕴藏量。油气资源评价成果是制订国家能源政策和油气发展规划的重要依据,因此,资源评价是油气勘探开发工作中的重要程序之一。每个新区的勘探首先要进行资源量预测,并在进行地质风险和经济效益综合评价后才决定是否钻探。

我国的油气资源评价工作始于 40 年代,建国后曾进行了全国范围内的油气资源评价和远景预测。70 年代以来,由于有机地球化学的发展,以及计算机技术的广泛应用,资源评价工作逐渐由定性向定量发展。目前常采用的资源评价方法,归纳起来可分为 4 大类:数字化积分法(沥青 A 法)、热压模拟法、盆地类比法和化学动力学法。这些方法各具特色,都有各自的优缺点,在生产实际中广泛应用,并得到了不断的完善和发展。其中,化学动力学方法,是建立在干酪根的组成结构、热降解生烃机理和化学反应动力学理论上,不存在人为的参数,因而从理论上讲,基于化

学动力学方法计算的资源量无疑更科学、更准确、更符合实际情况。因此,从长远的观点来看,化学动力学方法有逐渐代替其他资源评价方法的趋势。

国内在干酪根生烃动力学及其在资源评价中的应用方面的研究工作大多停留在探讨生烃机理、建立动力学模型和求取动力学参数阶段,应用于盆地模拟生烃量计算的工作报道较少。而国外在这方面已经做了大量的研究工作,并取得了良好的效果。因此,在盆地资源评价方面,化学动力学方法的应用潜力很大,应用前景广阔。

化学动力学方法应用于盆地模拟生烃评价的研究属于前沿交叉学科的内容,横跨地质和化学两大学科。为了进一步推广该领域内的研究成果,开拓化学动力学方法在盆地模拟生烃评价中的应用前景,完善和发展资源评价理论,我们编写了“化学动力学在盆地模拟生烃评价中的应用”一书。本书从化学的角度,介绍了化学动力学的基本概念和基本理论,简述了研究干酪根热解生烃动力学常用的热模拟实验方法,总结了国内外已经建立起的各种生烃动力学模型。最后,阐述了

化学动力学应用于盆地模拟生烃评价的基本原理,介绍了化学动力学在我国不同地区生烃量计算中的研究及其应用成果。本书试图以通俗的文字,由浅入深地介绍化学动力学的基本知识、实验测定方法及化学动力学在生烃量计算中的基本应用,使石油系统从事科研、生产及管理部门的技术人员,基本了解化学动力学的基本原理、研究方法、动力学模型建立方法和实际应用,并希望有关科技人员能采用化学动力学,推广应用于油气田的勘探开发和资源评价中去。

本书承蒙石油大学的钱家麟教授审阅全稿,石油勘探开发科学研究所的苏艾国高工审阅了全稿的地质部分,并提出许多宝贵意见,特别是苏艾国高工在本书中所述的吐哈盆地生烃评价研究中,曾参与了大量的不可缺的合作,编者表示衷心的感谢。由于编者水平有限,编写时间仓促,缺点和错误在所难免,诚挚地希望读者批评指正。

编者 李术元

2000年7月于石油大学(北京)

目 录

第一章 绪论	1
第一节 资源评价的重要性	1
第二节 生烃量计算方法的评估与分析	2
第三节 化学动力学研究现状	8
第二章 化学动力学基础	12
第一节 化学反应动力学	12
第二节 吸附过程动力学	41
第三节 催化过程动力学	53
第三章 烃源岩生烃模拟实验方法	71
第一节 概述	71
第二节 开放体系模拟实验	74
第三节 封闭体系模拟实验	81
第四章 化学动力学模型	87
第一节 总包反应模型	88
第二节 连串一级反应模型	94
第三节 平行反应模型	99
第四节 串联反应模型	106
第五节 各种模型的比较和适用性	109
第五章 化学动力学在烃源岩生烃评价中的应用	115

第一节	生烃量计算步骤	115
第二节	生烃量计算原理	116
第三节	在吐哈盆地生烃评价中的应用	122
第四节	在其他地区生烃评价中的应用	143
结束语		154
参考文献		155

第一章 绪 论

第一节 资源评价的重要性

众所周知,石油和天然气是我国能源的重要组成部分,在我国能源结构中占有极其重要的地位。近几十年来,我国石油工业迅速发展,从1978年年产量超过一亿吨进入世界产油大国以来,产量仍逐年稳定增长,对国民经济的发展起到了重要的作用,在建设中国特色的社会主义事业中做出了重大贡献。

石油是一种不可再生的能源,究竟有哪些因素影响油气资源的分布?应该怎样寻找油气藏?我国油气开发前景如何?这是地质工作者面临的几个主要问题。要回答这些问题,首先就要进行油气资源评价。可见,资源评价是石油部门一项十分重要的基础工作,是国家制定能源发展战略的主要依据。因此,地球科学家们都十分重视此项工作,将注意力越来越多地集中在油气资源的

评价方法及其可靠性与精确性上。

一般来说,油气资源评价以类比方法和石油生成等各种模型的研究为基础。随着现代实验模拟技术水平的提高,以及计算机技术的广泛应用,资源评价研究越来越定量化,人们越来越倾向于用各种实用模型进行资源评价。因此,有必要对有关的方法和模型进行比较,以便选择合适的方法或模型,对某一地区的油气资源进行较为精确的定量评价。由于生烃量计算是油气资源评价中的重要内容,其计算结果将影响总的资源评价的准确性,因此,我们将主要从油气盆地生烃量计算等方面进行讨论。

第二节 生烃量计算方法的评估与分析

一、数字化积分法

利用数字化积分法测算一个含油气盆地的生烃量,是近年来生油层定量评价研究中广泛采用的重要方法之一。数字化积分法实际上是氯仿沥青“A”法的改进,该方法是以生油岩中氯仿沥青

“A”的含量为基础,编制出氯仿沥青“A”等值图,同时结合有效生油岩体积等厚图,在考虑油气运移的条件下,经过一系列特定数学模型的计算,得出生油岩中残余的沥青量,再乘以不同的转化系数来间接地估算出总生烃量的一种方法。该方法的不足之处在于,这些转化系数往往不是通过科学的方法求得,而是人为地靠经验得出,或套用其他盆地的系数获得。随着实验及分析技术的发展,人们对该方法进行了不断的修正,主要是使转化系数的求取依赖于模拟实验数据,或建立在一定的理论基础之上,从而使其更科学。

二、热压模拟法

热压模拟法是近几年经常使用的方法之一。该方法从动态分析的观点出发,认为不同演化阶段的烃源岩具有不同的生烃速率,甚至相同演化阶段的烃源岩因类型不同其生烃速率也有较大的差别。所以,为了准确地计算出烃源岩在整个地质历史时期的生烃量,必须准确划分各演化阶段烃源岩地质体,并选择相应岩类在相应演化阶段的生烃速率。当类型、演化阶段、有机质丰度恢复

及气、液态烃产率等主要参数确定后,再用体积法算出不同演化阶段烃源岩的气、液态烃产率,其累积值即为该盆地油气生成总量。该方法的优点在于可以将油气生成量分开计算,同时为了模拟地下烃源岩的生烃过程,可以选择不同的模拟实验方案和改进模型计算方法,使有机碳恢复系数的确定越来越多地建立在热模拟实验的基础上。

三、盆地类比法

盆地类比法是一种比较传统的经验方法,一般在那些可勘探程度很低,资料严重缺乏的地区,地质工作者只能根据盆地的类型并凭以往的经验,对生烃量进行粗略的估算。由于该方法估算的生烃量误差范围大,除非迫不得已,一般在实际工作中很少采用。

四、化学动力学方法

化学动力学方法主要基于干酪根的晚期热降解生烃理论,即油气的生烃母质是干酪根,干酪根在热力学和动力学作用下发生一系列的热降解反应生成油气。化学动力学方法的基本思路是:对

未熟或低熟烃源岩样品进行热模拟实验,应用合适的化学动力学模型处理实验数据,求得化学动力学参数(活化能 E 、频率因子 A 、反应级数 n)。可以认为实验室内人工模拟(即高温短时间)条件下得到的这些动力学参数,与地下自然演化(即低温长时间)条件下的动力学参数相同,故可应用这些参数值,结合地温梯度、沉降速度等地质参数,算出某地区在各个地质时期的生烃率和生烃量。

前苏联学者罗泊金提出的时间—温度指数的概念,即 TTI 法,属于近似的化学动力学方法。该方法基于凡特霍夫关于温度每增加 10°C ,反应速度增加 1 倍的经验方程,结合有关的地质参数计算出 TTI 值,并进一步应用于生烃量计算。法国蒂索假设干酪根的热降解生烃过程由 6 个平行一级反应组成,建立了较为复杂的反应动力学模型,并将模型应用于生烃量计算。石油大学将串联一级反应模型(也称 Friedman 法)应用于国内某些盆地的生烃量计算,也获得了较大的成功。

五、各种方法的比较

上述几种生烃量计算方法各有优缺点,但究

竟哪种方法能较准确地反映油气的生成量呢？这是一个不容易回答的问题，原因有三个：首先，由于地质样品的非均质性，对某一烃源系来说，所选择的样品很难真正具有代表性；其次，样品分析资料的可靠性及所使用的模拟实验方法的合理性，都会带来较大的偏差；最后一点是，地质参数的选取人为性较大。因此，对一个盆地的生烃评价常常是多种方法齐头并举，到目前还没有一个统一的标准可以确定哪一种方法更有效或更可靠。

通过近些年的工作，我们认为，对某种生烃计算方法进行评估，并非不可能，但必须限定地质因素，找出主要矛盾，使各种地质参数的选取尽可能科学化，使计算方法或实验模型尽可能符合地质模型。目前有机质热解成烃理论指导着油气的勘探工作，并且油气的生成是一个动态的连续过程。从正演的角度反映不同地质时期的油气生成量，数字化积分法已经显得无能为力，相比而言，热压模拟法和化学动力学方法可以定量研究这样的生烃过程。考虑到热压模拟法的不经济性和实验过程中的复杂性，本书选择了化学动力学生烃量计算方法进行研究与讨论。由于化学动力学方法基