

# 模拟干酪根演化史的简易 方法——演化指数法

杨文宽

(地质矿产部石油地质综合大队)

利用一个建立在化学动力学理论基础之上的数学模型来模拟干酪根的自然热降解过程,这是有机地球化学和油气资源量预测技术的一项重要进展。利用数学模拟方法,人们根据少量基础资料(干酪根类型、温度史等)就能够定量地估计干酪根在各个地史时期的演化水平,从而有可能相当准确地回答其他研究方法(样品分析、人工热降解实验等)难于回答的某些重要问题。例如圈闭形成过程与油气生成过程是否配合良好,某些目前尚未钻探的地区或层位有无钻探价值,如此等等。因此,数学模拟是一种既经济又快速的研究方法,它有助于避免勘探工作的盲目性,带来显著的经济效益。提高数学模拟准确度的关键是选取合适的动力学参数,而普及这一方法的关键是简化计算过程。本文提出的演化指数法,是解决这两个关键问题的尝试。所用动力学参数仅适用于腐泥型和腐泥腐殖混合型干酪根,不适用于腐殖型干酪根。

## 一、方法简介

利用演化指数法来模拟干酪根的自然热降解历程,可按下列步骤进行。

### 1. 恢复岩块的埋藏史

恢复埋藏史是恢复温度史的准备步骤,只要求确定所考虑的含干酪根岩块在每一个时间段的始点和终点的埋藏深度。时间段一般可按世或纪来划分。由于本文在选取动力学参数时已经考虑了压实作用对地层厚度的影响,恢复埋藏史时不必再考虑。干酪根进入成熟状态之前的埋藏史,允许有较大的误差。晚古生代以来各地质时代始点的距今时间,以百万年计,泥盆纪为395,石炭纪为345,二叠纪为280,三叠纪为225,侏罗纪为192.5,早白垩世为136,晚白垩世为100,古新世为65,始新世为53.5,渐新世为37.5,中新世为26<sup>[1]</sup>。

### 2. 恢复岩块的温度史

根据基准点温度、地温梯度、起始埋藏深度和最终埋藏深度,算出每一个时间段的起始温度、终点温度和平均变温速率,即可满足数学模拟的要求。最好选取地下深处某一个或某几个有准确温度数据的点作为计算地温的基准点(控制点)。若无法在地下选

取基准点而只能以地表(实指恒温带)作为基准点,那就必须考虑古生物资料,我国主要含油气盆地的古地表温度普遍高于现今。经验表明,如果假设生油凹陷中央部位的地温梯度可以在一段相当长的地史时期内不发生变化,数学模拟结果的准确度仍然很高,仅仅那些有强烈岩浆活动的地区例外。

### 3. 计算演化指数和剩碳率

如果以 $n_i$ 、 $\Omega_{i-1}$ 、 $\Omega_i$ 、 $S_i$ 分别表示第 $i$ 个时间段的平均变温速率、起点温度指数、终点温度指数和演化指数,以 $\alpha_i$ 表示第 $i$ 个时间段终点的干酪根有潜力碳剩碳率,那么下列关系式成立(推导详下文):

$$S_i = (\Omega_i - \Omega_{i-1}) + n_i \quad (1)$$

$$\ln \alpha_i = -(S_i + S_2 + \dots + S_1) \quad (2)$$

式中 $n$ 值对逐渐升温的时间段来说为正数,对逐渐降温的时间段来说为负数。 $\Omega$ 、 $S$ 和 $\alpha$ 值恒为正数。 $\Omega$ 值可以从表1查出,故 $S$ 值和 $\alpha$ 值极易算出。如果第 $i$ 个时间段的起始温度 $T_{i-1}$ 和终点温度 $T_i$ 相同,可以把这个由于 $n_i$ 等于零而无法直接应用式(1)的时间段变换为温度从 $T_i - 1^\circ\text{C}$ 上升到 $T_i + 1^\circ\text{C}$ 的时间段,再进行 $S$ 值的计算(作此变换不致引起明显误差)。

以饶阳凹陷宁3井渐新统底部生油岩(图1)为例。第1个时间段(渐新世)的起始温度为 $T_0 = 17^\circ\text{C}$ ,查表1得知相应的温度指数 $\Omega_0$ 为0.0001,终点温度为 $T_1 = 113^\circ\text{C}$ ,相应的温度指数为 $\Omega_1 = 0.1696$ 。而第1个时间段的变温速率为 $n_1 = (113 - 17) \div 11.5 = 8.35^\circ\text{C}/\text{百万年}$ 。于是,根据式(1)和(2),该层位干酪根在第1个时间段的演化指数为 $S_1 = 0.020$ ,而第1个时间段终点(即渐新世末期)的有潜力碳剩碳率为 $\alpha_1 = 0.98$ 。对第2个时间段(晚第三纪和第四纪)而言,起始温度为 $T_1 = 113^\circ\text{C}$ ,终点温度为 $T_2 = 177^\circ\text{C}$ ,变温速率为 $n_2 = 2.46^\circ\text{C}/\text{百万年}$ ,于是 $S_2 = 1.599$ , $\alpha_2 = 0.20$ 。其他各层位的 $\alpha$ 值随时间而变化的历程也可用同样方法求出。在计算出几个带控制性的层位的 $\alpha_2$ 值之后,宁3井现今的干酪根有潜力碳剩碳率随深度而变化的一幅清晰图象就得到了(图2)。

### 4. 解释和检验

$\alpha$ 值的大小反映干酪根所含有潜力碳的释放程度。实际资料表明,当 $\alpha$ 值已下降到0.94(即有潜力碳已释放6%)时,镜质体反射率 $R^0$ 约为0.5%。因此,可将 $\alpha = 0.94$ 作为腐泥型和腐泥腐殖混合型干酪根生油门限的指标。

但是, $\alpha$ 值并不直接反映已从干酪根中释放出去的可溶有机质的进一步演化情况,更不直接反映油气初次运移情况<sup>[2]</sup>。因此, $\alpha$ 值同生油高峰、生油主带底界(油相下界)之间,并不存在精确的对应关系<sup>[2]</sup>,而只存在统计上的相关关系(图3)。在一般情况下,当 $\alpha$ 值下降到0.55左右时, $R^0$ 为 $1.0 \pm 0.1\%$ ,残留在源岩中的氯仿抽提物同源岩总有机碳的重量比(即A/C值)也达到峰值,因此 $\alpha = 0.55$ 可以看作是生油高峰的指标。当 $\alpha$ 下降到0.20左右时, $R^0$ 约为1.2—1.3%,在一般情况下,生油岩被认为已达到生油主带底界。当 $\alpha$ 下降到0.06时, $R^0$ 高达1.8—2.0%,干酪根的生油气潜力已经基本上消耗完了,源岩中的液态烃也大部分转化成了甲烷等气态烃。

如果数学模拟结果与实际情况明显不符,原因通常在于温度史恢复得不正确,此时应该适当调整地温梯度等参数。

腐泥型和混合型干酪根温度指数 ( $\Omega$ ) 值

表 1

$^{\circ}\text{C}$	$\Omega$										
$\leq 8$	0	53	29	84	0.0280	115	0.1902	146	0.9849	177	4.1029
9—19	1	54	31	85	0.0299	116	0.2014	147	1.0345	178	4.2828
20—24	2	55	34	86	0.0320	117	0.2131	148	1.0864	179	4.4698
25	3	56	37	87	0.0341	118	0.2255	149	1.1407	180	4.6641
26	3	57	40	88	0.0365	119	0.2385	150	1.1974	181	4.8659
27	3	58	43	89	0.0389	120	0.2522	151	1.2566	182	5.0756
28	3	59	46	90	0.0415	121	0.2666	152	1.3185	183	5.2934
29	4	60	50	91	0.0443	122	0.2818	153	1.3831	184	5.5196
30	4	61	54	92	0.0473	123	0.2977	154	1.4506	185	5.7544
31	4	62	58	93	0.0504	124	0.3145	155	1.5210	186	5.9982
32	5	63	63	94	0.0537	125	0.3321	156	1.5946	187	6.2512
33	5	64	68	95	0.0572	126	0.3506	157	1.6713	188	6.5138
34	6	65	73	96	0.0609	127	0.3701	158	1.7514	189	6.7863
35	6	66	79	97	0.0649	128	0.3905	159	1.8349	190	7.0690
36	7	67	85	98	0.0691	129	0.4120	160	1.9220	191	7.3622
37	8	68	91	99	0.0735	130	0.4345	161	2.0128	192	7.6663
38	8	69	98	100	0.0782	131	0.4581	162	2.1075	193	7.9816
39	9	70	106	101	0.0831	132	0.4829	163	2.2062	194	8.3086
40	10	71	113	102	0.0884	133	0.5089	164	2.3091	195	8.6475
41	11	72	122	103	0.0939	134	0.5362	165	2.4163	196	8.9988
42	12	73	131	104	0.0997	135	0.5648	166	2.5280	197	9.3629
43	13	74	140	105	0.1059	136	0.5948	167	2.6443	198	9.7401
44	14	75	151	106	0.1125	137	0.6262	168	2.7654	199	10.131
45	15	76	162	107	0.1194	138	0.6592	169	2.8915	200	10.536
46	16	77	173	108	0.1267	139	0.6937	170	3.0228	201	10.955
47	18	78	186	109	0.1344	140	0.7298	171	3.1594	202	11.389
48	19	79	199	110	0.1425	141	0.7676	172	3.3016	203	11.839
49	21	80	213	111	0.1511	142	0.8072	173	3.4495	204	12.304
50	23	81	228	112	0.1601	143	0.8487	174	3.6034	205	12.786
51	25	82	244	113	0.1696	144	0.8921	175	3.7635	206	13.284
52	27	83	262	114	0.1797	145	0.9374	176	3.9299	207	13.800

注：表列9—83 $^{\circ}\text{C}$ 的 $\Omega$ 值需乘以0.0001

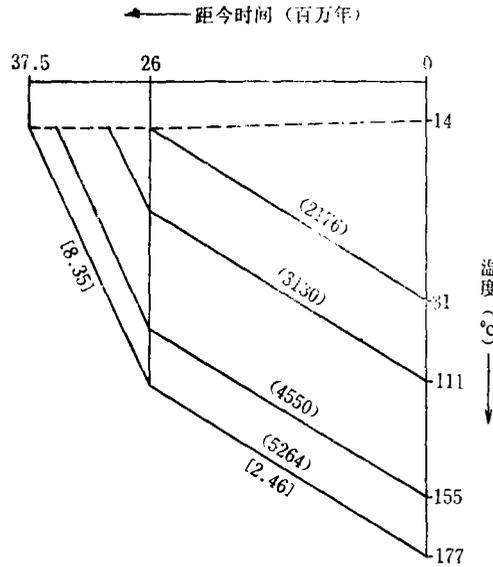


图1 宁3井各层位温度史示意图

小括号内数字为现今埋藏深度(米)

方括号内数字为平均变温速率(°C/百万年)

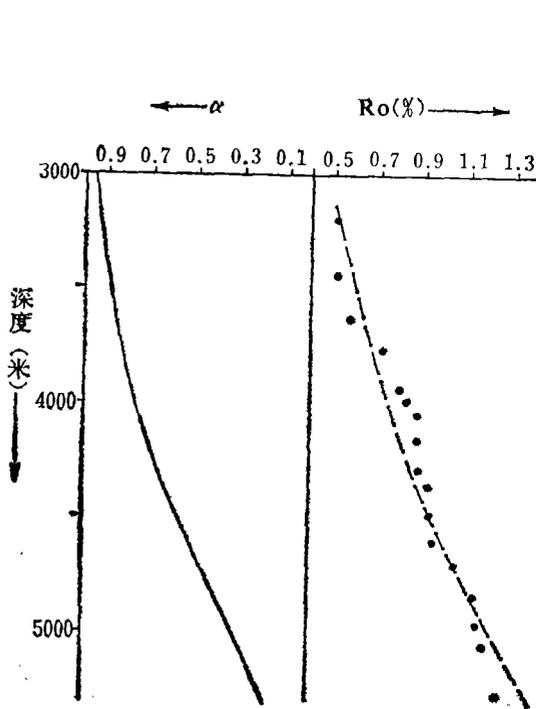


图2 宁3井现今 $\alpha$ 值和 $R_o$ 值同深度的关系图

(镜质体反射率实测值据华北油田生油研究室, 1983)

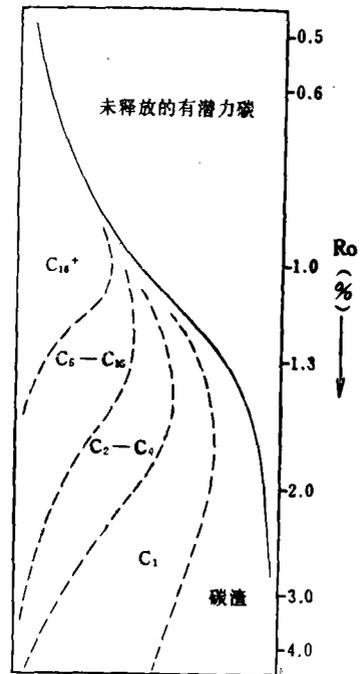


图3 有潜力碳分配情况与镜质体反射率的关系示意图

## 二、理 论 依 据

干酪根中的碳原子只有一部分能够转移到液态（广义的液态）沥青和气态烃之中，这部分碳原子叫做有潜力碳（有效碳）。有潜力碳在“原始干酪根碳”（有潜力碳与无潜力碳的总和）中所占的分率，随干酪根类型而异<sup>[2, 3]</sup>。经验表明，有潜力碳的释放过程服从一级反应定律：

$$-\frac{dB}{dt} = KB = Bae^{-E/RT} \quad (3)$$

式中诸量的意义见文献2。在温度T随时间t而不断变化的条件下，式(3)的近似解如下<sup>[2]</sup>：

$$\ln \alpha_p = \ln \frac{B_p}{B_0} = - \sum_{i=1}^p \int_{t_{i-1}}^{t_i} K_i dt = - \sum_{i=1}^p S_i, \quad (4)$$

$$S_i = \frac{1}{n_i} \left\{ - \frac{aR\lambda_i T_i^2}{2(E-\theta_i RT_i)} e^{-E/RT_i} + \frac{aR\lambda_{i-1} T_{i-1}^2}{2(E-\theta_{i-1} RT_{i-1})} e^{-E/RT_{i-1}} \right\} \quad (5)$$

若以 $\Omega_i$ 和 $\Omega_{i-1}$ 分别表示式(5)花括号内的第1项和第2项，那么式(5)就可写成式(1)的形式。

为了求出对应于不同温度的 $\Omega$ 值，需要事先确定表观活化能E和表观频率因数a的值。作者曾经把根据干酪根人工热解实验成果计算出来的E、a值用于干酪根自然热降解过程的数学模拟，所得结果有很大误差。原因可能在于，热解实验的温度、压力、时间、催化剂等条件都和自然热降解不同，产物也有差异（例如人工热解干酪根可获得相当多的烯烃，而自然热降解产物中罕见烯烃）。本文所用E值（15600卡/摩）和a值（ $6.7 \times 10^8$ /百万年）是直接根据我国含油气盆地自然剖面的实测地质化资料求得的。方法是：首先用文献4所提供的简化温度史的方法估定E和a的数值范围，然后在对我国主要含油气盆地的20个模拟对象（钻井剖面，或层位）进行反复试算的过程中不断调整E、a值，直至所有各个模拟对象的数学模拟结果都与实测地质化资料不相矛盾为止。

式(5)中的气体常数R取1.9865卡/摩·升。为简化表述而采用的符号 $\lambda$ 和 $\theta$ ，含义如下<sup>[2]</sup>：

$$\lambda = \theta / (1 - e^{-\theta})$$

$$\theta(1 + 2x - \theta x - \theta x^2) = 2(e^{-\theta} - 1)(1 - \theta x)^2$$

式中，

$$x = RT/E$$

## 三、模 拟 实 例

作者对我国沉积盆地的大量模拟对象进行了数学模拟。模拟对象可归纳为两类，一类是穿越不同时代地层的铅直剖面（例如钻井剖面），一类是作为横向延展实体的生油层或潜在生油层。下文列举的几个实例，一般涉及到了整个生油主带。本节中 $\alpha$ 值均指

现今 $\alpha$ 值。

### 1. 绕阳凹陷宁3井

宁3井是冀中拗陷饶阳凹陷中央部位最有代表性的超深井。上第三系加第四系2176米,渐新统(东营组及沙河街组一、二、三段)3087.5米,始新统因被断缺而揭露不全,5427米深度见震旦系。平均地温梯度为 $3.1^{\circ}\text{C}/\text{百米}$ 。现今恒温带温度为 $14^{\circ}\text{C}$ ,早第三纪恒温带温度据孢粉资料可估计为 $17^{\circ}\text{C}$ 。数学模拟结果:生油门限约为3100米( $\alpha = 0.94$ ,  $111^{\circ}\text{C}$ , 东营组),生油高峰约为4550米( $\alpha = 0.55$ , 沙三段),生油主带底界约为5260米( $\alpha = 0.20$ , 沙三段底)。据梁狄刚、王雪平等研究,该井3200米深处,  $R^0 = 0.51\%$ ,  $\text{OEP} = 1.03$ , 氯仿抽提物中饱和烃占48.23%; 4595米深处,  $R^0 = 0.96\%$ ; 5250米深处,  $R^0 = 1.24\%$ , 烃碳比下降到5%左右; 而5420米深处,  $R^0$ 达1.62% (参见图2)。因此,梁狄刚等定“成熟门限深度”为3100米,“成油带”下界为5300米。显然,数学模拟结果与实际资料不相矛盾,与梁狄刚等的分析结论也基本吻合。

### 2. 潜江凹陷广深1井和王深2井

广深1井位于江汉盆地潜江凹陷沉降中心附近,钻遇上第三系加第四系759.5米、渐新统(荆河镇组)894.5米、始新统上部(潜江组)3415.0米(未穿),终孔深度5069.0米。潜江组底部钾氩法年龄约46.5百万年(据邻井玄武岩测定,引自胡炳焯等论文)。广华寺地区2000米深处现今温度约为 $85^{\circ}\text{C}$ , 2000米以深平均地温梯度约为 $2.6^{\circ}\text{C}/\text{百米}$  [5, 6]。若假定地下温度格局自始新世以来没有变化,且早第三纪地表温度可取为 $19^{\circ}\text{C}$ , 那么现今 $\alpha$ 值, 2440米(潜二段,  $96^{\circ}\text{C}$ )为0.94, 3970米(潜四段,  $136^{\circ}\text{C}$ )为0.55, 4770米(潜四段,  $157^{\circ}\text{C}$ )为0.20, 5270米(始新统下部, 荆沙组,  $170^{\circ}\text{C}$ )为0.06。

王深2井终孔深度5159米,渐新统底界707.5米,潜四段底界4264米。由此算得2240米(潜四段,  $91^{\circ}\text{C}$ )现今 $\alpha$ 值为0.94, 3750米为0.55, 4540米为0.20, 5040米(荆沙组,  $164^{\circ}\text{C}$ )为0.06。

潜江凹陷各井潜江组的烃碳比, 2200米以浅一般小于2%, 平均在3800米左右达到峰值(原图11和17-5), 4600米左右又下降到10%以下 [5, 6]。因此,江继纲认为,就潜江凹陷整体而言,生油门限为2200米,生油带下界为4600米 [5]。显然,数学模拟结果与实际地化资料不相矛盾。

### 3. 泌阳凹陷中部

南襄盆地泌阳凹陷中央部位,构造简单,上第三系加第四系厚约200米,渐新统(廖庄组和核桃园组)厚约3700米 [7]。现今地表温度约 $16^{\circ}\text{C}$ 。估计早第三纪地表温度与现今相近(据孢粉资料) [1]。地温梯度约为 $3.7^{\circ}\text{C}/\text{百米}$  [1, 7]。据此计算现今 $\alpha$ 值, 2020米( $91^{\circ}\text{C}$ )为0.94, 3150米为0.55, 3720米( $154^{\circ}\text{C}$ )为0.20。

据贾凤英资料,泌11<sup>2</sup>井1742米(核三段)OEP值为1.50, 1849米为1.46, 而双4-10井2372米左右下降到1.05 [1]。王启军等(1980)认为泌阳凹陷生油门限深度为1900—2000米。数学模拟得出的生油门限深度值(2020米)显然与地化资料不相矛盾。但因缺乏准确的深层地化资料,生油高峰和生油主带底界深度暂时无法检验。

### 4. 松辽盆地青山口组

松辽盆地现今地表温度约为 $5^{\circ}\text{C}$ 。白垩系富含叶肢介,推测白垩纪古地表温度不低于 $13^{\circ}\text{C}$ 。现今地温场比较复杂,例如同深1井3098米温度高达 $137.3^{\circ}\text{C}$ ,而肇12井、杏4井和松基6井相近深度的温度却只有 $113-116^{\circ}\text{C}$ 。若现今平均地温梯度取 $4.2^{\circ}\text{C}/\text{百米}$ ,并假定白垩纪地表温度和地温梯度分别为 $15^{\circ}\text{C}$ 和 $4.8^{\circ}\text{C}/\text{百米}$ 。那么,在新生界厚200米、上白垩统厚500米的地区,下白垩统青山口组(年龄取130百万年)现今的 $\alpha$ 值,1400米为0.94,2211米为0.55,2620米为0.20,2860米为0.06。而在新生界为40米、上白垩统为300米的地区,青山口组现今的 $\alpha$ 值,1240米为0.94,2050米为0.55,2450米为0.20,3690米为0.06。这些数字适用于未被断层破坏的剖面。

李永康等认为松辽盆地青山口组二、三段生油门限深度平均为1330米,相应的 $R^0$ 为0.5%;“油气分布的下限”为2850米,相应的 $R^0$ 为2.0%<sup>[8]</sup>。应该承认,数学模拟结果相当准确地反映了实际情况的轮廓。由于松辽盆地面积很大,地温场复杂,青山口组的埋藏史也随地而异,所以更详细的模拟结果需要根据更具体的基础资料才能得出。

#### 5. 塔里木盆地沙参1井

地质矿产部西北石油地质局最近在沙雅隆起沙参2井5387米以下深处(古生界白云岩)钻获高产油流,这是塔里木盆地油气普查勘探工作的一项重要成果。这里试以揭露地层较多的邻井——沙参1井的基础数据为依据,从数学模拟的角度来说明高产油藏能够埋藏如此之深的原因。

沙参1井钻遇新生界上部3916米(底层年龄约28百万年),中生界775米,二叠系816米,终孔于石炭系。三叠侏罗系被认为是本区主要生油层,古生界也受到重视。若现今地表温度取 $11^{\circ}\text{C}$ ,前中新世地表温度取 $16-20^{\circ}\text{C}$ ,地温梯度取 $2.83^{\circ}\text{C}/\text{百米}$ (邻井实测值),并且假定构造变动和剥蚀作用对埋藏深度未产生明显影响,那么,对本井三叠系底部生油岩来说,中新世以前尚未成熟,现今埋深虽达将近4700米, $\alpha$ 值仍在0.78左右,演化程度并不高。对二叠系底部生油岩来说,也直到中新世初期才成熟,现今 $\alpha$ 值约为0.47,刚刚跨过生油高峰。可以推知,本井石炭系生油岩的生油气潜力现在尚未枯竭,比石炭系更老的一些生油层也仍然保留了一定的生油气潜力。因此,在沙雅隆起一带,不仅5400米左右可以钻遇高产油藏,甚至在6500米以下深处钻获工业油流的可能性也是存在的。

## 四、结 论

演化指数法是恢复干酪根自然演化历程并预测生油主带顶底界面深度和生油高峰深度的一种数学模拟方法。这一方法以化学动力学有关知识作为基本理论依据,所需基础信息较少,运算过程十分简单,大量实例已证明所得结论与实测地化数据不相矛盾。

致谢:梁狄刚、黄第藩、李晋超、江继纲、王雪平、费富安等同志热情地为本文提供了重要的基础数据,作者向他们表示诚挚的感谢。

(收稿日期:1984年11月12日)

## 参 考 文 献

- [1] C.W. 艾伦, 1973, 物理量和天体物理量, 第3版, 杨建译, 上海人民出版社, 1976年。  
 [2] 杨文宽, 一级反应方程的近似解及其在油气定量预测中的应用, 石油与天然气地质, 第3卷第2期, 1982年。  
 [3] 杨文宽, 干酪根的沥青降解潜力, 石油与天然气地质, 第5卷第2期, 1984年。  
 [4] 杨文宽, 油气定量预测方法的探讨, 石油与天然气地质, 第2卷第2期, 1981年。  
 [5] 石油工业部石油勘探开发科学研究院地质研究所(主编), 中国陆相油气生成, 石油工业出版社, 1982年。  
 [6] 江继纲等, 江汉盆地潜江期盐湖沉积石油的形成与演化, 石油与天然气地质, 第3卷第1期, 1982年。  
 [7] 朱永安等, 河南泌阳凹陷的石油地质特征, 石油学报, 第2卷第2期, 1981年。  
 [8] 李永康等, 松辽盆地陆相生油特征, 石油学报, 第2卷第1期, 1981年。

## EVOLUTION INDEX—— A SIMPLE AND EASY METHOD FOR SIMULATING THE EVOLUTION HISTORY OF KEROGEN

Yang Wenkuan

( Research Party of Petroleum Geology,  
Ministry of Geology and Mineral Resources )

### Abstract

This paper proposes a mathematical model for the simulation of natural thermal degradation of kerogen. Kinetic parameters are determined on the basis of geochemical data of Chinese sedimentary basins. The apparent activation energy  $E$  is taken as 15600 cal/mol, and the apparent frequency factor  $A$  is taken as  $6.7 \times 10^6 / \text{m.y.}$ . When the temperature history of source rocks is established the values of temperature index  $\Omega$  would be achieved from Table 1. The evolution index  $S$  and the residual ratio  $\alpha$  of potential carbon in kerogen could be obtained by the following equations:

$$S_i = (\Omega_i - \Omega_{i-1}) \div n_i,$$

$$1_n \alpha_i = - (S_1 + S_2 + \dots + S_i).$$

where  $n$  ( $^{\circ}\text{C}/\text{m.y.}$ ) is the ratio of temperatures, and  $i$  is the serial number of time intervals. The  $\alpha$  value corresponding to the upper limit of principal zone of oil formation is 0.94 and  $\alpha = 0.55$  may be used as indicator of the peak of oil generation. As  $\alpha = 0.06$ , the vitrinite reflectance would be about 2.0%.

A lot of Chinese source beds have been simulated, and the results conform to the reality of natural geological sections.