

## **О критериях подобия и системах моделирования образования и эволюции нефти и газа**

**Савина Ю.А.**

*Филиал ВолгоградНИПИморнефть, г. Волгоград, Россия*

**Степанов А.Н.**

*Северо-Кавказское отделение МАМР*

*В работе обсуждается применение методов теории подобия и согласования экспериментальных данных в неразрывной связи при моделировании нефтегазообразования. При этом в моделировании используются полные системы «нефть-газ-порода-пластовые воды-органическое вещество» по детальности сопоставимые с природными. Показано, что только при использовании метода минимизации возможен обсчет таких полных систем (многокомпонентных и многоагрегатных) и формальное согласование кинетики и массопереноса в рамках термодинамического подхода.*

Природные нефтегазоносные резервуары (ПНР) представляют собой пустотные (поровые, трещино-поровые, кавернозные и т.п.) многофазные гетерогенные системы с бесконечным количеством поверхностных сочетаний. Существенное воздействие на распределение в их емкостном пространстве воды, нефти и газа оказывают разнообразные капиллярные процессы [1], которые во многом определяются геометрией пустотного пространства, физико-химической механикой взаимодействия флюидов с вмещающими отложениями, адгезией, сорбцией и электрокинетическими явлениями.

При моделировании сложных иерархических (кооперативных) процессов происходящих в полных мульти- и мегасистемах, какими являются ПНР в нефтегазоносных бассейнах (НГБ), как правило, не удастся полностью реализовать математический формализм моделей пласта (резервуара) и проведение экспериментов, обеспечивающих полное подобие всех существенных для данного явления процессов. В этом случае все большее применение находят методы современного термодинамического моделирования [2,3].

Проблемы изучения генерации и массопереноса в зоне литогенеза в ПНР в настоящее время приобрели особую актуальность, как в теоретическом, так и в прикладном аспектах, в особенности, в связи с оценкой устойчивости скоплений нефти и газа в условиях сверхглубин.

При исследовании различных процессов, происходящих в сложных эволюционирующих полидисперсных системах (массо-

перенос, генерация нефти и газа, фазовые и химические превращения в пористых средах), учет влияния пористой среды производится с использованием степени метаморфизма (литогенеза), пористости, удельной поверхности, размеров макрочастиц и т.п. При моделировании фильтрации нефти и газа только соотношение капиллярных и гидродинамических сил описывается целым набором параметров характеризующих геометрические особенности пористой среды [4]. Для капиллярных систем в пористых средах установлена эмпирическая связь между средним радиусом пор, проницаемостью, пористостью, извилистостью и удельной поверхностью [5].

Вместе с тем процессы, происходящие в природных системах весьма специфичны и в разной степени далеки от экспериментов и эмпирических обобщений, о чем отмечалось, например, в классических трудах А.Ф. Добрянского (1948 – 1962).

Поэтому в условиях развития компьютерного моделирования появились специальные методы расчетов (именуемые нами системами согласования, подверсткой), призванные доводить эксперимент и эмпирику к природе, называемые иногда неудачно «симуляторами». В этом плане использование ПК-Селектор в результате опыта многолетних исследований по моделированию ПНР в полных системах «нефть-газ-породы-вода-органическое вещество» (с 1988 г.) позволило получить надежные данные, максимально приближенные к природной обстановке [6,7].

Далее следует отметить, что в настоящее время относительно наиболее разработаны и используются теории феноменологического характера, в основе которых лежат опытные данные экспериментов и эмпирически установленные закономерности.

При этом весьма плодотворным оказался подход использующий аналогии (подобия) между гидродинамикой и электродинамикой, уравнениями фильтрации и теплопроводности, геометрией и электронным строением органических молекул, геометрией пустотного пространства резервуаров, его уплотнением и литогенезом (эпигенезом).

Так, использование базовых постулатов теоретической органической химии (термодинамического принципа линейности свободных энергий) позволило оценить количественно энергетические вклады температуры и давления в генерацию нефти и газа в изотермо-изобарическом режиме [8]. Плодотворность подобного подхода использования аддитивных многопараметровых зависимостей была

продемонстрирована при описании самых разнообразных процессов происходящих в органических и неорганических соединениях (растворение, адсорбция, экстракция и др.) [9,10 и др.].

Понятие теории подобия распространяется не только на равновесие (термодинамические свойства вещества), но и на его кинетические характеристики (вязкость, теплопроводность, подвижность, коэффициенты диффузии).

В настоящее время известно около 1000 различных критериальных комплексов и критериев подобия описывающих самые разнообразные процессы: тепломассоперенос, механику, диффузию, фазовые переходы, капиллярные и поверхностные явления, химические реакции и т. д. [11] Однако, эти критерии используются еще весьма редко, что приводит к значительным погрешностям и искажению результатов моделирования НГБ.

Так, в особых случаях решения конкретных промышленных задач фильтрации в пористой среде с использованием хорошо известной теории Баклея-Леверетта (1942) при разработке продуктивных отложений принимается концепция отсутствия влияния капиллярных явлений. Напротив, неучет капиллярных эффектов, имеющих огромное значение при формировании ПУВС в пористой среде сводит на нет расчетные схемы формирования их залежей.

Теория (модель) Баклея-Леверетта в своей основе и при условиях её выполнения имеет ряд существенных ограничений, что требует их неукоснительного выполнения на практике. В одной из последних крупных работ, посвященных пересмотру концепции Баклея-Леверетта В. Роуз [12] детально рассматривает множество ограничений экспериментального и теоретического характера. В особенности это касается описания природы транспортных процессов в пористой среде, где автор сам отмечает большие проблемы и видит возможность их решения с использованием соотношения взаимностей Л. Онзагера.

Напротив, в работах А.В. Лыкова и Ю.Я. Михайлова, 1963 впервые было дано обобщение принципа И.Р. Пригожина о скорости изменения энтропии в процессах переноса. В результате была получена новая система линейных уравнений переноса, отличающаяся от системы Л. Онзагера тем, что потоки зависят не только от термодинамических движущих сил, но также от скорости их изменения и от производных потоков по времени. Подобная схема давно обсуждается и применяется в геохимических и петрологических приложениях.

В частности, в методе минимизации потенциалов Гиббса и Гельмгольца реализуется конструктивный подход – соединение и согласование методов равновесной термодинамики с кинетикой и динамикой физико-химических процессов.

Так, в последнее десятилетие среди новых направлений изучения НГБ (не рассматривая методов инструментальной базы) особенно остро выделилась проблема решения задач детерминированного согласования всей имеющейся информации о пространственно эволюционирующих мегасистемах НГБ «пластовые воды – вмещающие отложения – углеводородные флюиды – органическое вещество».

В методологическом плане изучение физико-химической эволюции ПНР, а с ними таких соединений углерода как нефть, газ, битум, уголь и сланцы традиционно основывалось на простых концептуальных термодинамических, кинетических и транспортных моделях в рамках отдельных или систем стехиометрических реакций преимущественно в изотермо-изобарических условиях, что нельзя признать удачным, а также не полной системы НГБ, характеризующегося многочисленным набором разнородных параметров, режимов эволюции, имеющих свои особенности в четырехмерных координатах (пространство и время).

Важнейшей особенностью определяющей трудности исследования таких систем является их многофазность, гетерогенность и многоагрегатность, а также то, что многие из протекающих в них процессов существенно необратимы.

Известные кинетические, транспортные, балансовые и другие модели генерации и миграции УВ были построены вне явной зависимости от литологического типа вмещающих отложений, объема их пустотного пространства, его геометрии и состава поровых вод. Это является серьезным ограничением рассматриваемых методов, так как факт взаимодействия минеральной, органической и водной составляющих как в осадочном, так и в других процессах литогенеза установлен экспериментальными исследованиями и эмпирическими обобщениями, подтвержденными термодинамическими расчетами.

Принципиальное решение проблемы физико-химического моделирования сложных химических равновесий в гетерогенных мультисистемах с одновременным участием в исходных условиях задачи и ее равновесном решении водного раствора электролита с растворенными в нем УВ, конденсированных фаз (однокомпонентных и

растворов), включая УВ, газовой смеси, расплава, ионизированной плазмы и других фаз различного стабильного и метастабильного фазового состава было получено путем последовательного развития единого подхода – применения структур аппарата математического программирования к гиббсовской теории гетерогенного равновесия, дополненной положениями Д.С. Коржинского об открытых системах [2]. Оказалось, что теория гетерогенного равновесия Дж. Гиббса с исчерпывающей полнотой и конструктивностью как бы генетически закодирована в дифференциальной формулировке центральной теоремы выпуклого программирования – теоремы Куна-Таккера. Такая запись условий равновесия обладает максимальной информативной емкостью и выразительностью и являет собой яркий пример неразрывной связи между возможностями детального описания структур феноменологической термодинамики структурами используемого математического аппарата. В таблице на основе сравнительного анализа методов моделирования по реакциям (константы равновесия) и минимизации термодинамических потенциалов показаны преимущества метода минимизации.

Таблица 1

Сравнение методов расчета кинетических, термодинамических и флюидодинамических (массоперенос) процессов по константам равновесия и минимизацией термодинамических потенциалов

Основные требования, предъявляемые к количественным методам расчета природных процессов в нефтяной геологии, геохимии, литологии, петрофизике и флюидодинамике	Выполнение требований	
	Метод констант равновесия	Минимизация
1. Полнота, детальность и точность математического представления физико-химических моделей в многокомпонентных, многофазовых и многоагрегатных системах, в которых число потенциально возможных в равновесии фаз может значительно превышать число независимых компонентов	Неполное	Полное
2. Возможность расчета химических потенциалов независимых компонентов, не являющихся одновременно зависимыми компонентами системы	Не выполняются	Выполняются
3. Наложение одно-, двухсторонних ограничений на часть или все искомые мольные количества зависимых компонентов; введение дополнительных критериальных функций, расчеты неполных,	Частичное	Полное

промежуточных, частичных, условных и метастабильных равновесий		
4. Постановка и решение широкого класса обратных физико-химических задач	Частичное	Полное
5. Расчеты на перераспределение вещества в химически взаимодействующей совокупности открытых по отношению друг к другу систем – модели стабильного состояния мегасистемы	Не производятся	Выполняются
6. Изучение физико-химической эволюции в совокупности взаимодействующих систем, связанных между собой и с окружающей средой прямыми и обратными потоками вещества и энергии – модели физико-химических магистралей в динамических мегасистемах	Выполняются, но только со значительной идеализацией, сводящей физико-химические процессы до уровня чисто физических	Единственный возможный подход, обеспечивающий полное сохранение физико-химического содержания эволюционных процессов
7. Постановка и решение с учетом неопределенности входных термодинамических и аналитических данных	Частичное приложение к узкоспециализированным задачам	Выполняется
8. Обнаружение скрытой несогласованности входной термодинамической информации	Не обнаруживает	Обнаруживает
9. Наличие надежного и безотказного алгоритма расчета химических равновесий в многокомпонентных, многофазных и многоагрегатных мультисистемах с различным типом равновесия по независимым параметрам состояния и с учетом введения дополнительных ограничений на искомые мольные количества зависимых компонентов, а также обеспечивающего решение задач с сильным отклонением от идеальности и возможностью расслоений твердых и жидких растворов, включая силикатные расплавы	Такого алгоритма нет	Этим требованиям соответствует алгоритм метода внутренних точек в модификации И.И. Дикина

10. Программные средства с достаточным уровнем универсальности	Имеются только специализированные программы под отдельные классы задач	Выполняется с помощью программного комплекса Селектор
--	--	---

Таким образом, на основе метода минимизации в корне была пересмотрена методология количественных оценок генерации и устойчивости углеводородных систем в недрах НГБ [13]. При этом впервые в практике расчетов было учтено влияние вмещающих отложений, термобарических условий, состава пластовых вод и др., для полной системы ПНР.

Несмотря на то, что в настоящее время существует несколько в корне противоречивых между собой концепций нефтегазообразования, имеется определенное строгое детерминированное множество критериев и ограничений, позволяющих эмпирически проследить эволюцию конкретного природного резервуара и ПУВС в нем. Как показывают результаты наших расчетов и обобщений, литогенетический и термодинамический методы можно выделить в качестве всеобъемлющих или универсальных (управляющих) на настоящем уровне понятийной базы исследований НГБ, имеющейся исходной базы моделирования.

Новые термодинамические принципы моделирования природных резервуаров были предложены сравнительно недавно, и уже получено значительное практическое внедрение их в различные отрасли народного хозяйства в России и за рубежом, в том числе и в нефтяную отрасль [6,13,14].

#### Список литературы

1. Большаков Ю.Я. Теория капиллярности нефтегазонакопления. Новосибирск: Наука, 1995. -184 с.
2. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. Новосибирск, Наука, 1981. – 246 с.
3. Динамика мегасистем в геохимии: Формирование базовых моделей процессов и алгоритмы имитации / К.В. Чудненко, И.К. Карпов, С.И. Мазухина и др. – Геология и геофизика, 1999, № 1, с. 45-61.

4. Хавкин А.Я. Физические аспекты многофазной фильтрации в пористой среде. ОИ, сер. «Геология, геофизика и разработка нефтяных месторождений» М.: ВНИИОЭНГ, 1991. – 60 с.

5. Аксельруд Г.А., Альтшулер М.А. Введение в капиллярно-химическую технологию. М.: Химия, 1983. – 264 с.

6. Моделирование физико-химических превращений в мегасистеме вода-углеводороды-порода минимизацией шести термодинамических потенциалов / И.К. Карпов, А.Н. Степанов, К.В. Чудненко, В.А. Бычинский // Геохимическое моделирование и материнские породы нефтегазонасыщенных бассейнов. СПб., ВНИГРИ, 1998, с. 48-61.

7. Термодинамический критерий метастабильного состояния углеводородов в земной коре и верхней мантии / И.К. Карпов, В.С. Зубков, А.Н. Степанов и др. – Геология и геофизика, 1998, т. 39, № 11, с. 1518-1528.

8. Степанов А.Н. Геохимические и термодинамические критерии прогноза фазово-генетических типов углеводородных скоплений на больших глубинах (на примере западной части Терско-Каспийского прогиба): дис/ /// канд. геол.-минерал. наук: 04.00.02 / ВНИГРИ. Л., 1984. – 241 с.

9. Жданов Ю.А., Минкин В.И. Корреляционный анализ в органической химии. Ростов-на-Дону: Изд-во Ростовского университета, 1966. – 471 с.

10. Пальм В.А. Основы количественной теории органических реакций. Л., Химия, 1977. – 360 с.

11. Колодежнов В.Н. Безразмерные комплексы и критерии подобия в гидроаэромеханике. Справочник. – Воронеж, Госпедуниверситет, 2011-580с.

12. Rose W., Rose D.M. «Revisiting» the enduring Buckley – leveret ideas. Jour. of Petrol. Sci. and Eng., 2004, vol. 45, p. 263-290.

13. Степанов А.Н. Прикладные аспекты термодинамики гетерогенных систем // Тр. ООО «ЛУКОЙЛ-ВолгоградНИПИморнефть». Волгоград, 2004, вып. 62: Вопросы геологии Прикаспия и шельфа Каспийского моря, с. 192-204.

## **О природе окраски ниже-среднеюрских сланцев Центрального Кавказа**

*Сазонов И.Г., Астапова Д.А., Сазонова М.А., Курбанов З.М.  
Северо-Кавказский федеральный университет, г. Ставрополь*

*В работе рассмотрены факторы, обуславливающие черную окраску ниже-среднеюрских глинистых сланцев и филлитов на Кавказе*

На Кавказе, в его центральной части, широко распространены черные филлитоподобные породы, возраст которых оценивается