

Zastosowanie modeli numerycznych do rekonstrukcji paleotemperatur i procesów generowania węglowodorów

Dariusz Botor*, Paweł Kosakowski**

Zastosowanie modeli numerycznych do rekonstrukcji procesów generowania węglowodorów pozwala na integrację danych geologicznych, geochemicznych i geofizycznych. Ma to na celu przede wszystkim jak najbardziej wiarygodne odtwarzanie przebiegu procesów generowania węglowodorów, aby możliwie precyzyjnie ocenić potencjał naftowy skał macierzystych danego basenu sedimentacyjnego. Modelowania te obejmują modelowanie subsydenacji, pograżania i kompaktacji osadów, przepływu energii cieplnej i ewolucji termicznej oraz generowania węglowodorów. Pozwalają one obliczyć stopień i czas dojrzewania (przeobrażenia) materii organicznej, a w efekcie końcowym ilość i skład wygenerowanych węglowodorów oraz określić czas kiedy miało to miejsce.

Słowa kluczowe: numeryczne modelowania basenów sedimentacyjnych, modelowanie dojrzałości materii organicznej, geochemia organiczna, skały macierzyste, kerogen, kompaktacja, strumień ciepły, historia termiczna, przewodność cieplna, kinetyka reakcji chemicznych, generowanie węglowodorów

Dariusz Botor & Paweł Kosakowski — **Application of numerical maturity modelling to reconstruction of paleotemperature and petroleum generation.** *Prz. Geol.*, 48: 154–161.

Summary. Integrated numerical modelling of petroleum generation allows to reconstruct reliable hydrocarbons generation processes. Consequently, it allows to estimate petroleum potential of source rocks in the sedimentary basins. These modelling consist of modelling of subsidence, burial and compaction of sediments, energy transport, thermal history and hydrocarbons generation.

Key words: basin modelling, maturity modelling, organic geochemistry, source rocks, kerogen, compaction, heat flow, thermal conductivity, thermal history, kinetics of chemical reactions, petroleum generation

Zastosowanie modeli numerycznych do rekonstrukcji procesów generowania węglowodorów pozwala na zintegrowane rozwiązywanie problemu z wykorzystaniem danych zarówno geologicznych, jak i geochemicznych oraz geofizycznych (Welte i in., 1997). Ma to na celu jak najbardziej wiarygodne odtwarzanie przebiegu procesów generowania i ekspulsji węglowodorów. Numeryczna symulacja procesów generowania i ekspulsji węglowodorów jest elementem modeli basenowych (*basin modelling*). Podstawowym elementem modelowania procesów generowania węglowodorów są modelowania paleotermiczne i określenie paleotemperatur często określane mianem — modelowania dojrzałości termicznej (*maturity modelling*, *maturity modelling*) (Hermanrud, 1993; Waples, 1994; Welte i in., 1997) (ryc. 1, 2).

Modelowania dojrzałości termicznej materii organicznej są przeprowadzane przede wszystkim w wersji jednowymiarowej (1-D, w skali profilu wiertniczego), ze względu na szybkość obliczeń i dostępność danych kalibrujących model. Pozwalają one na rekonstrukcję ewolucji geologicznej i termicznej basenu sedimentacyjnego oraz na kinetyczne modelowanie procesów generowania i ekspulsji węglowodorów. Mogą być również przeprowadzane w wersji dwuwymiarowej (2-D, w skali przekroju geologicznego) umożliwiając dodatkowo modelowanie procesów migracji węglowodorów.

Metody rekonstrukcji historii termicznej

Wyjaśnienie ewolucji termicznej (ryc. 2), jakiej podlegały skały macierzyste generujące węglowodory, jest nie-

zbędnym elementem analizy systemu naftowego (Welte i in., 1997). Termicznie wywołane zmiany zachodzące w materii organicznej w trakcie jej szeroko rozumianej diagenety dają istotne informacje dotyczące ewolucji termicznej w skorupie ziemskiej. Dlatego modelowanie dojrzałości termicznej substancji organicznej ma znaczenie dla analizy basenów sedimentacyjnych, a szczególnie dla ich postdepozycyjnej historii.

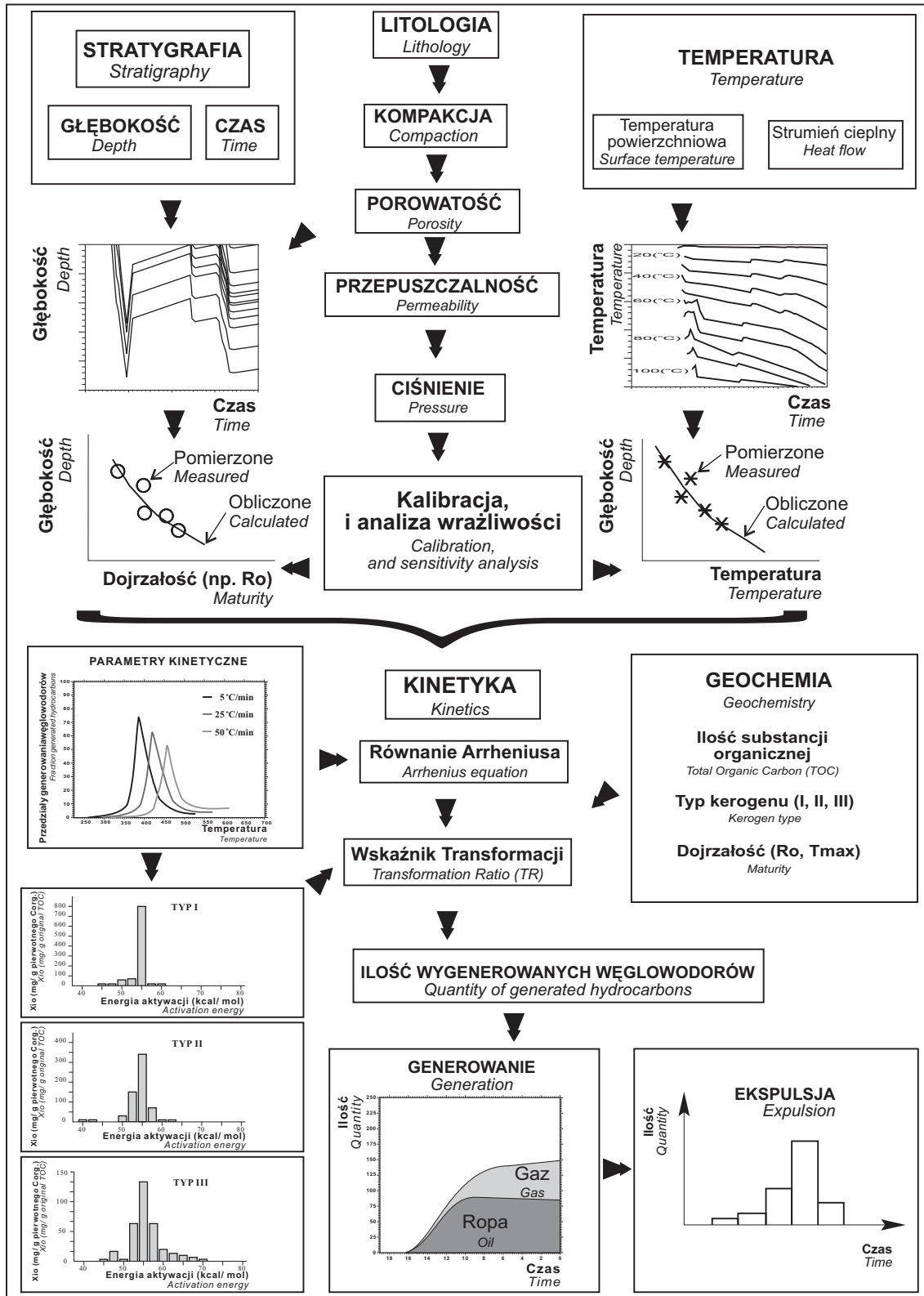
Najważniejszymi czynnikami wpływającymi na generowanie węglowodorów są czas geologiczny i temperatura (np. McNab i in., 1952; Philipi, 1965; Luis & Tissot, 1967; Lopatin, 1971; Dow, 1977). Ich znaczenie w ewolucji materii organicznej zostało po raz pierwszy wykazane w badaniach nad uwęglaniem węgla (Karweil, 1955; Jüntgen & Van Heek, 1968). Kinetyczne modelowania oparte na równaniu Arrheniusa zostały zainicjowane przez Tissot & Espitalie (1975). Metody te były następnie modyfikowane i rozwijane przez wielu autorów, takich jak na przykład: Quigley i in. (1987); Burnham i in. (1987), Ungerer i in. (1988, 1990), Pepper & Corvi (1995), Welte i in. (1997). Obecnie jest dostępna znaczna liczba pakietów oprogramowania służącego do modeli procesów generowania i ekspulsji węglowodorów. Spośród najbardziej znanych należy wymienić programy GENEX[®] (prod. BEICIP-FRANLAB, Francja), BASINMOD[®] (prod. Platte River Associates, Inc., USA) i PETROMOD[®] (prod. IES GmbH, Niemcy).

Istnieje wiele metod pozwalających na ocenę warunków termicznych w przeszłości geologicznej, z których najważniejsze przedstawiono poniżej (Yalcin i in., 1997):

1 — metody oparte na wskaźnikach dojrzałości materii organicznej (zob. Hunt, 1996), takie jak na przykład refleksyjność wityrynytu (Ro), stopień uwęglania, temperatura Tmax z pirolizy Rock-Eval, wskaźniki biomarkerowe oraz wskaźniki TAI i CAI (np. Espitalie i in., 1986; Sweney & Burnham, 1990; Rullkötter & Marzi, 1988),

*Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska, Akademia Górniczo-Hutnicza, al. Mickiewicza, 30, 30-059 Kraków; e-mail botor@uci.agh.edu.pl

**Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska, Akademia Górniczo-Hutnicza, al. Mickiewicza, 30, 30-059 Kraków; e-mail kosak@uci.agh.edu.pl

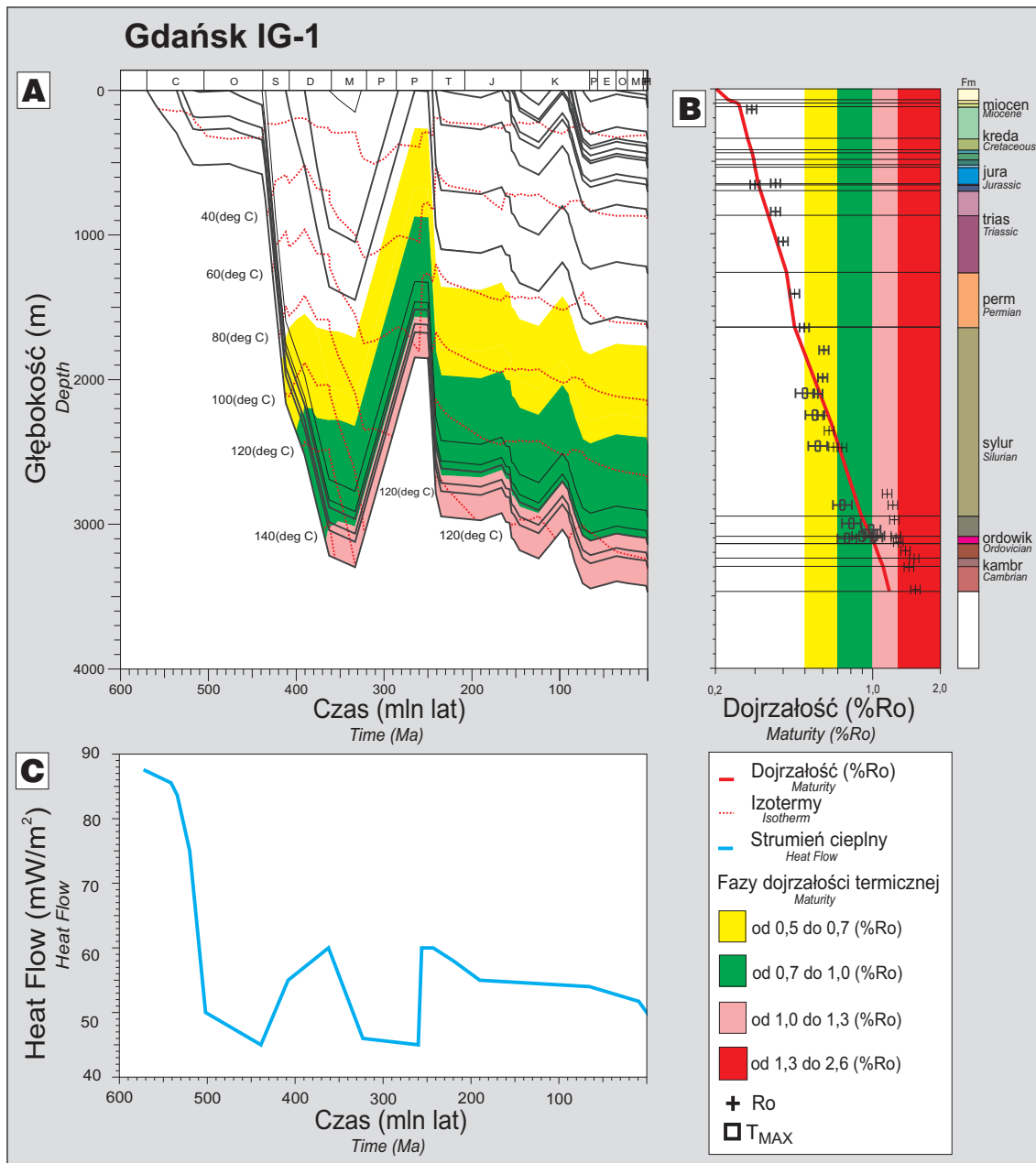


Ryc. 1. Zestawienie najważniejszych elementów, które są uwzględniane podczas modelowań numerycznych procesów generowania węglowodorów i ich wzajemnych zależności

Fig. 1. The key elements in numerical modelling of petroleum generation

2 — metody oparte na mineralogicznych zmianach spowodowanych digenezą np. transformacje minerałów ilastych (np. Pytte & Reynolds, 1989; Środoń, 1996a),

3 — metody oparte na badaniach inkluzji ciekłych, np. temperatura homogenizacji (np. Burrus, 1989; Leischner i in., 1993; Jarmołowicz-Szulc, 1996),



Ryc. 2. Wyniki modelowań numerycznych ewolucji termicznej dla profilu Gdańsk IG-1, A — krzywe pograżania i ewolucja temperatury oraz zakresy dojrzałości termicznej kerogenu, B — kalibracja modelu z wykorzystaniem refleksyjności witrinitu i temperatury T_{max}, C — ewolucja strumienia ciepłego

Fig. 2. The results of numerical modelling of thermal history for Gdańsk IG-1 well, A — burial and thermal history, and maturity, B — calibration of the model using vitrinite reflectance and T_{max} temperature, C — heat flow evolution

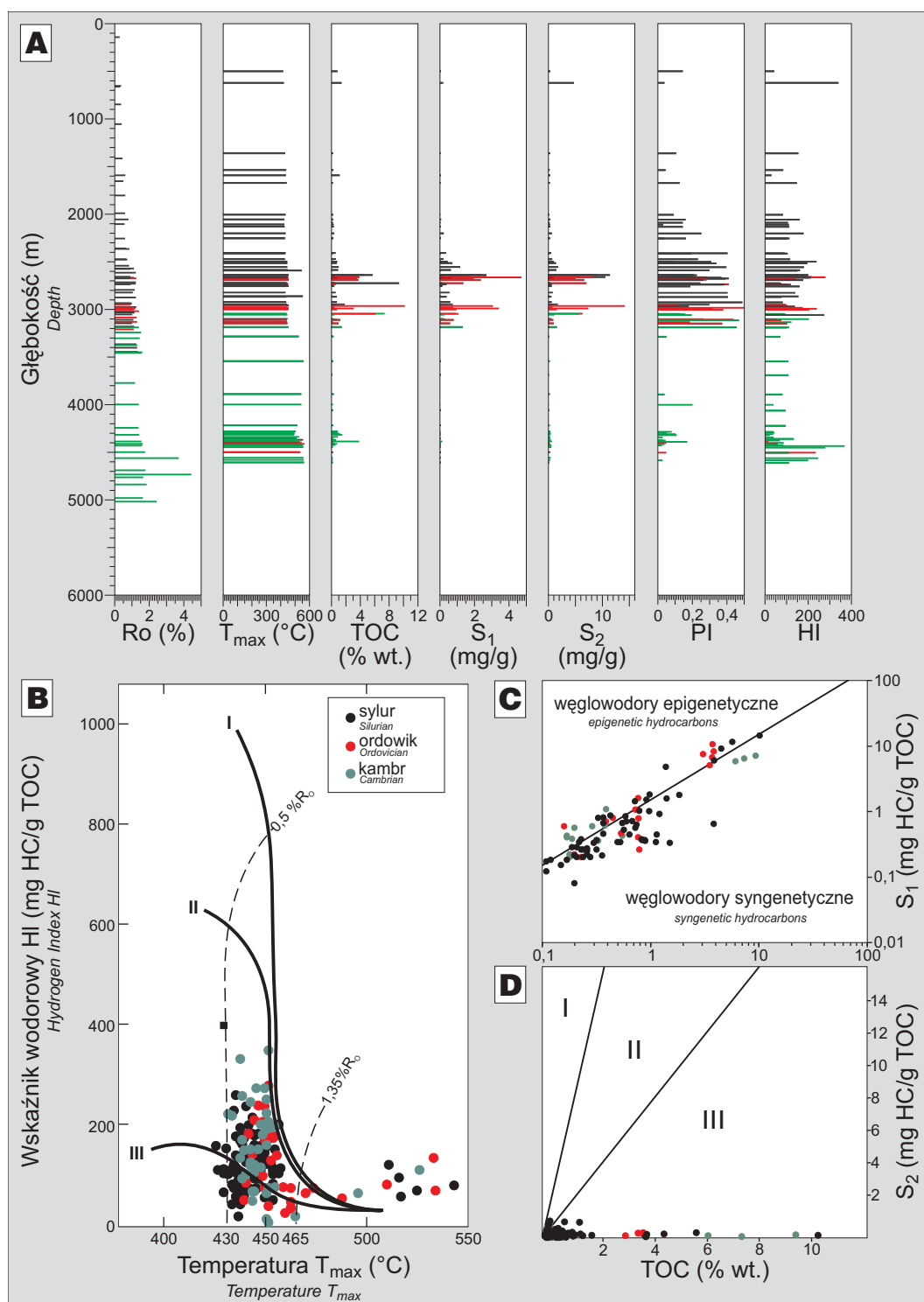
4 — metody oparte o analizę śladów rozszczepienia jąder uranu w apatycie lub cyrkonie (np. Green i in., 1989; Andriessen, 1995),

5 — kombinacja metod radiometrycznych (np. K-Ar, Ar-Ar, Rb-Sr, U-Pb) może być także zastosowana do określenia historii termicznej (np. Buntebarth & Stegna, 1986; Środoń, 1996b).

Ze względu na różne ograniczenia poszczególnych metod, należy je stosować kompleksowo co pozwala na wyjaśnienie historii termicznej w sposób komplementarny (Yalcin i in., 1997; Poelchau i in., 1997).

Optimalizacja i kalibracja modeli numerycznych

Proces optymalizacji modelu zaczyna się od porównania współczesnych temperatur wglębnych pomierzonych w otworach wiertniczych z wartościami obliczonymi przez program (ryc. 1). Pomierzone temperatury w otworach wiertniczych powinny być, w większości przypadków, skorygowane odpowiednimi metodami z uwagi na wpływ braku stanu równowagi termicznej w otworze wiertniczym, który jest spowodowany głównie przez cyrkulację płuczki (np. Waples, 1994; Plewa, 1994). Po skorygowaniu danych, dotyczących współczesnych temperatur w otwo-

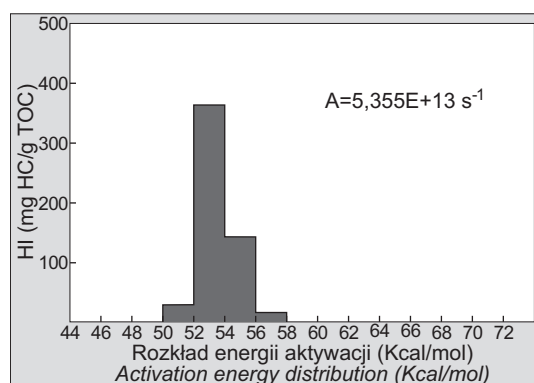


Ryc. 3. A —wyniki analiz Rock-Eval i pomiarów refleksyjności witytrinitu zestawione w profilach głębokościowych dla otworów wiertniczych syneklizy perybałtyckiej, B — diagram wskaźnika wodorowego HI i temperatury T_{max} pozwalający na określenie typu kerogenu i jego dojrzałości termicznej, C — diagram zależności S_1 i TOC pozwalający na odróżnienie węglowodorów epigenetycznych (napływowych) od syngenetycznych (*in situ*), D — wykres S_2 i TOC również pozwalający na określenie typu kerogenu

Fig. 3. A — results of Rock-Eval and vitrinite reflectance analyses for wells from the Baltic Syncline, B — hydrogen index HI versus T_{max} temperature plot, which allows to assess kerogen type and its maturity, C — S_1 versus TOC plot, which allows to distinguish epigenetic from syngenetic hydrocarbons, D — S_2 versus TOC plot, which also allows to evaluate kerogen type

rze wiertniczym, modeluje się ewolucję termiczną wykorzystując pomiary przewodności cieplnych i szacowaną współczesną wartość strumienia ciepłego. Strumień ciepły i przewodności cieplne są optymalizowane równocześnie aż do uzyskania prawidłowych wartości współczesnych temperatur (Yalcin i in., 1997; Waples i in., 1992a).

Kolejnym elementem modelowań jest odtworzenie historii strumienia ciepłego (ryc. 2C), która musi być spójna z modelem ewolucji geologicznej danego basenu oraz danymi pochodzącymi z analizy wskaźników stopnia dojrzałości termicznej materii organicznej. Ewolucja strumienia ciepłego jest optymalizowana poprzez zmiany



Ryc. 4. Przykład rozkładu energii aktywacji dla warstw menilitowych w Karpatach fliszowych

Fig. 4. Example of distribution of activation energy for Menilite beds in Flysch Carpathians

wartości strumienia ciepłego w skali czasowej, tak aby uzyskać możliwie, jak największą zgodność pomierzonych wartości termicznych wskaźników dojrzałości materii organicznej z wartościami obliczonymi przez model (Waples i in., 1992a; Yalcin i in., 1997) (ryc. 2B).

Ilość i wielkość zmian paleostrumienia ciepłego jest uwarunkowana geodynamiczną ewolucją basenu sedymentacyjnego. Zalecane jest tutaj zastosowanie wielu różnych wskaźników termicznych, ponieważ każdy z nich daje odmienną perspektywę historii termicznej oraz zakres stosowania każdego wskaźnika zmienia się w różnych przypadkach (np. Yalcin i in., 1997).

Podczas procedury optymalizacji strumienia ciepłego i przewodności cieplnej należy również określić wielkość i czas erozji (jeśli ma ona miejsce) identyfikowany niezgodnością stratygraficzną. Gdy dysponujemy wartościami wskaźnika dojrzałości termicznej w profilu głębokościowym modelowanie wskaźników termicznej dojrzałości materii organicznej pozwala określić wielkość erozji dla poszczególnych niezgodności (Waples i in., 1992a; Cornford, 1996; Yalcin i in., 1997).

Przeważnie w jednowymiarowych modelowaniach zakłada się, że cały transfer ciepła zachodzi poprzez pionową kondukcję. Dlatego gdy transfer ciepła zachodzi poprzez konwekcję lub poprzez kondukcję poziomą, lub też jest dodatkowo komplikowany przepływem płynów obraz taki jest zaburzony. Ocena wpływu tego typu procesów jest szczególnie istotna w przypadku dwuwymiarowych modeli (2-D) (Waples, 1994; Ungerer i in., 1990).

Parametry petrofizyczne w modelowaniach numerycznych są przyjmowane wprost z wartości „bibliotecznych” programu komputerowego lub uśredniane dla mieszanych typów litologicznych (przy użyciu średnich harmonicznych, geometrycznych, lub arytmetycznych) albo też wprowadza się dane pomiarowe (Waples, 1994; Cornford, 1996).

Jednym z najważniejszych parametrów petrofizycznych w modelowaniach dojrzałości termicznej jest przewodność cieplna. Jednakże obliczone wartości przewodności cieplnej mogą być obciążone błędami wynikającymi z: 1 — mało precyzyjnego określania litologii, 2 — odchylenia składu litologicznego i własności petrofizycznych od standardowych wartości podawanych przez dany program, 3 — występowania stref ciśnień anomalnych, 4 — anizotropii ośrodka, i 5 — błędów w procedurach

uśredniania wartości, związanych z naturalną zmiennością ośrodka skalnego (Blakwell & Steele, 1989).

Z powodu trudności w precyzyjnym określeniu przewodności cieplnych z dostępnych danych, powinny być one raczej sprawdzane i korygowane pomiarami temperatury w trakcie optymalizowania strumienia ciepłego (Waples, 1994). Szczególnie warto są podkreślenia wysokie wartości przewodności cieplnych w piaskowcach kwarcowych, solach i anhydrycie oraz niskie przewodności cieplne w ilowcach, węglach i płynach porowych. Przewodności cieplnej skał osadowych spadają ze wzrostem temperatury (Blackwell & Steele, 1989), a wzrastają ze spadkiem porowatości, ponieważ płyny porowe o niskich wartościach przewodności cieplnej są usuwane (Yalcin i in., 1997; Waples, 1994).

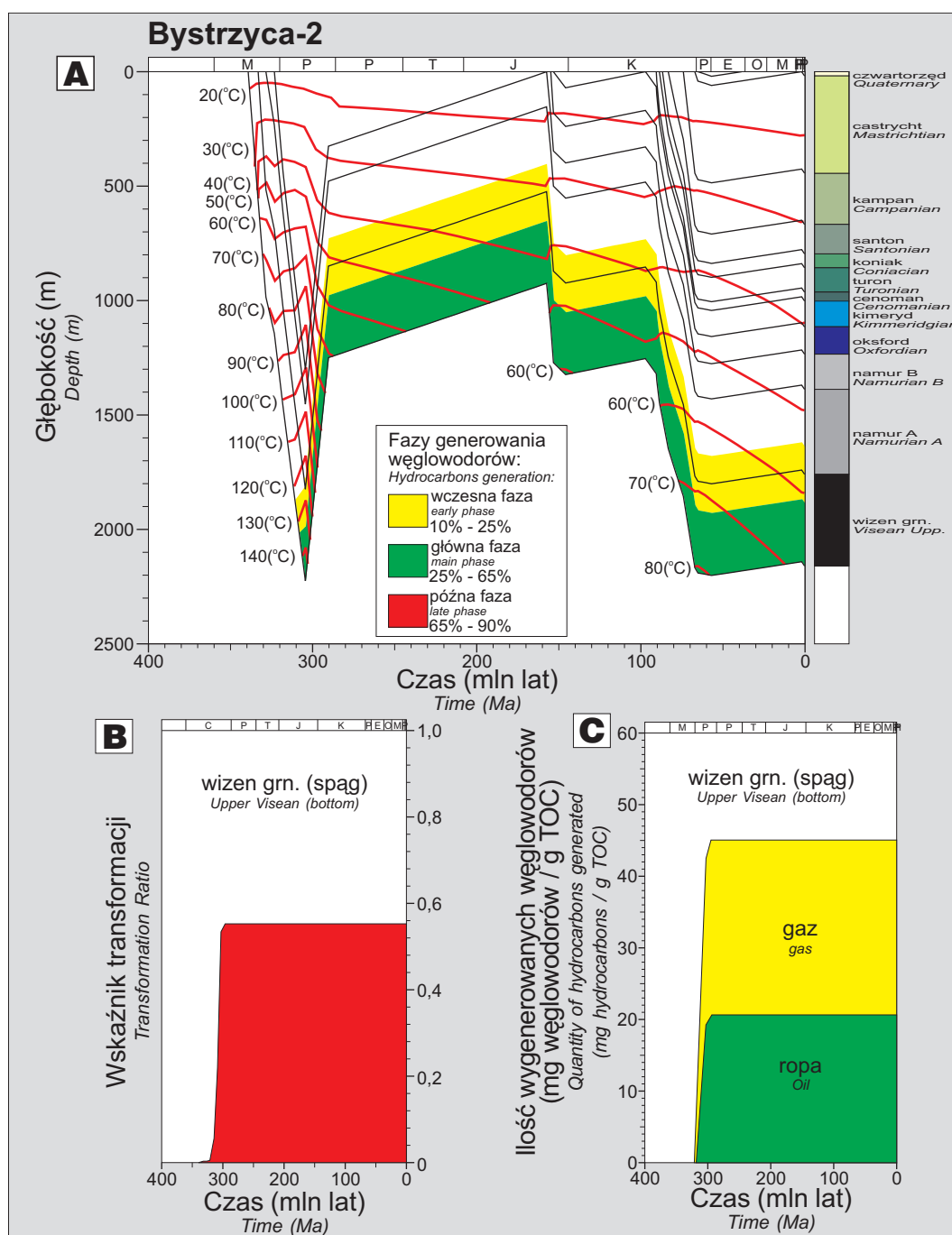
Modelowanie termicznej dojrzałości materii organicznej wymaga określenia paleotemperatury na poszczególnych głębokościach (ryc. 2). Ponieważ zasadnicze przeobrażenie materii organicznej zachodzi w strefie wyższych paleotemperatur, zwykle ponad 60–70°C (Hermanrud, 1993; Hunt, 1996). Zrekonstruowane modele paleotermiczne są podstawą do prawidłowego obliczania ilości wygenerowanych węglowodorów, poprzez zastosowanie odpowiednich modeli kinetycznych (np. Tissot & Espitalie, 1975; Ungerer i in., 1988; Burnham i in., 1987) (ryc. 1, 2).

Generowanie węglowodorów

W celu przeprowadzenia modelowania procesów generowania węglowodorów oprócz określenia paleotemperatur i ich czasu występowania trzeba również dysponować danymi z zakresu geochemii skał macierzystych (ryc. 3). Często są stosowane profile głębokościowe parametrów z analizy pirolitycznej Rock-Eval (głównie powstałych podczas krakingu kerogenu: TOC — całkowita zawartość węgla organicznego, S1 — ilość wolnych węglowodorów, S2 — ilość węglowodorów uwolnionych w trakcie pirolizy, PI — wskaźnik produktywności generowania i HI — wskaźnik wodorowy) (zob. Espitalie i in., 1986) i oznaczeń refleksyjności wityryny (Ro). Przykładowe zestawienie takich parametrów dla utworów starszego paleozoiku syneklizy perybałtyckiej przedstawiono na ryc. 3A. Z kolei diagramy HI i temperatury T_{max} (rys. 3B) i S₂ do TOC (ryc. 3D) charakteryzują typ kerogenu. Natomiast wykres S₁ i TOC pozwala na ocenę czy węglowodory są syngenetyczne (ryc. 3C). Powyższe wykresy umożliwiają ocenę ilości materii organicznej oraz dojrzałości termicznej i typu kerogenu zawartego w danych skałach macierzystych (zob. Hunt, 1996).

Każdy typ kerogenu charakteryzuje się co najmniej kilkoma rodzajami wiązań chemicznych różniących się wartościami energii aktywacji rzędu kilku kilokalorii na mol. Generowanie węglowodorów z kerogenu jest procesem, który jest zależny od licznych równoległych i/lub następujących po sobie reakcji chemicznych. Energia rozrywania określonego typu wiązania chemicznego zmienia się w zależności m.in. od sąsiadujących grup funkcyjnych lub długości łańcucha węglowego. Dlatego też „podatność” z jaką dany kerogen może generować węglowodory zależy od typu, ilości i konfiguracji wiązań chemicznych w strukturze kerogenu (Burnham i in., 1987; Hunt, 1996).

Dynamika generowania węglowodorów z danego kerogenu może być opisana przy pomocy diagramów rozkładu



Ryc. 5. Wyniki modelowań numerycznych procesów generowania węglowodorów dla profilu Bystrzyca-2, A — krzywe pograżania i fazy generowania węglowodorów „okna ropnego”, B — wskaźnik transformacji termicznej kerogenu TR obliczony dla spągu wizenu górnego, C — ilość wygenerowanych węglowodorów

Fig. 5. The results of numerical modelling of petroleum generation for Bystrzyca-2 well, A — burial history and hydrocarbons windows, B — transformation ratio TR calculated for bottom of the Upper Viséan, C — quantity of hydrocarbons generated

energii aktywacji (ryc. 4). Większa różnorodność typów wiązań, w kerogenach typu II i III implikuje szerszy zakres dystrybucji energii aktywacji niż w I typie (Burnham i in., 1987; Ungerer i in., 1988; Hunt, 1996). Błędy w identyfikacji typów kerogenu lub ich wzajemnych proporcji, w przypadkach niejednorodnych genetycznie skał macierzystych mogą prowadzić do znacznych różnic w wynikach modelowań (Waples i in., 1992b; Pepper & Corvi, 1995; Hunt, 1996).

Pełniejszy przegląd dostępnych programów, procedur i modeli kinetycznych jest przedstawiony w pracy Herman-

ruda (1993). Niemniej jednak, najpowszechniej stosowane są modele opracowane przez Institut Français du Pétrole (IFP, Francja) i Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL, USA). Opisują one przemiany kinetyczne trzech podstawowych typów kerogenu.

Współczesne modele kinetyczne generowania węglowodorów są oparte na dwóch podstawowych zasadach: kinetyce reakcji chemicznej pierwszego rzędu i równaniu Arrheniusa (Hunt, 1996). Degradacja kerogenu może być modelowana jako reakcja chemiczna pierwszego rzędu, tzn. taka w której szybkość degradacji (dc/dt) jest propor-

cyjona do zawartości kerogenu (c) w danym czasie: $dc/dt = -kc$. Zakłada się, że stała szybkość reakcji k jest kontrolowana przez równanie Arrheniusa: $k = A \exp^{(-E/RT)}$, gdzie A — jest współczynnikiem częstości reakcji, E — jest energią aktywacji, R — jest stałą gazową i T — temperaturą (Hunt, 1996). Choć większość modeli generowania węglowodorów stosuje powyższe podstawowe założenia to przegląd prac ujawnia wiele istotnych różnic w stosowanych metodach prowadząc do różnych schematów generowania węglowodorów (Pepper & Corvi, 1995).

Ponadto istnieją dwa alternatywne typy modeli kinetycznych oprócz IFP i LLNL, które pozwalają na odtworzenie przebiegu procesów generowania węglowodorów przy użyciu dyskretnego rozkładu energii aktywacji. Quigley i in. (1987) oraz Burnham i in. (1987) zaproponowali, aby przyjąć gaussowski rozkład energii aktywacji dla generowania węglowodorów i wyrazić ten zakres w postaci tylko trzech parametrów: średniej energii aktywacji, średniego współczynnika częstości i odchylenia standardowego dla rozkładu energii aktywacji. Quigley i in. (1988) przyjmują, że każda skała macierzysta zawiera dwa typy kerogenu: „labilny” — podlegający rozpadowi na węglowodory i „oporny” — właściwie nie podlegający rozpadowi na węglowodory. Każdy z nich ze swoim własnym zestawem parametrów kinetycznych. Metoda ta nie znalazła jednak szerszego zastosowania w programach komputerowych, które są komercyjnie dostępne.

Druga metoda wydaje się być bardziej obiecująca dla szerszego zastosowania — zwana jest kinetyką kompozycyjną, ponieważ wydziela ona produkty generowania węglowodorów na kilka grup, zamiast tylko na ropę i gaz (Ungerer i in., 1988). Metoda ta zakłada tworzenie czterech frakcji (C1, C2-C5, C6-C14 i C15+). Dalsze badanie mogą wydzielić nawet bardziej szczegółowo poszczególne frakcje węglowodorowe. Celem takiego uszczegółowienia jest bardziej precyzyjny opis zachowania się faz węglowodorowych w procesach generowania, ekspulsji i migracji.

Ponadto dotychczas mniej uwagi poświęcano kinetyce generowania gazu bezpośrednio z kerogenu. Większość modeli albo ignorowała generowanie gazu albo traktowała go jako proces zachodzący po wygenerowaniu ropy (przy założeniu analogicznej kinetyki procesu). Całkowita ilość wygenerowanych węglowodorów jest potem dzielona na ropę i gaz według określonego stosunku dla każdego typu kerogenu (np. Burnham i in., 1991). Zastosowanie kompozycyjnych modeli kinetycznych powinno znacznie poprawić precyzję odtwarzania procesów generowania gazu (Ungerer i in., 1988; Waples, 1994).

Modelowanie procesów generowania pozwalają, z pewnym prawdopodobieństwem, na określenie ilości i składu wygenerowanych węglowodorów oraz czasu generowania.

Znajomość czasu generowania jest ważna z dwóch przyczyn. Po pierwsze, drogi migracji zmieniają się z czasem z powodu procesów diagenetycznych, takich jak kompaktacja i cementacja oraz rozszczelinowania i procesów tektonicznych. Aby rozważyć, gdzie węglowodory migrowały ze skały macierzystej musimy wiedzieć kiedy ten proces mógł mieć miejsce. Po drugie, późny proces generowania zmniejsza możliwość destrukcji węglowodorów wskutek biodegradacji, wtórnego krakingu czy innych procesów niszczących akumulacje węglowodorów.

Dla wielu znanych kerogenów opublikowano ich parametry kinetyczne. Jednakże, znacząco różne zestawy parametrów kinetycznych wyznaczono dla próbek

pochodzących z tej samej skały macierzystej, ale badanych w różnych laboratoriach (Hermanrud, 1993). A zatem, wobec dużej niejednorodności materii organicznej, pozostaje nadal otwartą kwestią reprezentatywność tak wyznaczonych parametrów kinetycznych.

Węglowodory są generowane z materii organicznej wskutek wielu reakcji chemicznych, które charakteryzują się wykładniczą zależnością od temperatury. Przy przeciętnym wzroście temperatury w czasie geologicznym rzędu 1–10°C na mln lat, główna faza generowania węglowodorów ciekłych (*oil window*) występuje mniej więcej pomiędzy 60 a 160°C (np. Quigley i in., 1987; Cornford, 1996). Dla osiągnięcia takich temperatur skała macierzysta musi być pogrążona poprzez skały nadkładu zdeponowane po jej sedimentacji. Dlatego intensywność, czas i głębokość generowania węglowodorów w skale macierzystej zależy od szybkości sedimentacji i paleogradientu geotermicznego modelowanego profilu.

Przykład wyników końcowych modelowania procesów generowania węglowodorów przedstawiono dla otworu wiertniczego Bystrzyca-2 (ryc. 5). Na niniejszej rycinie widać, że utwory wizenu górnego i namuru A weszły w okno ropne w późnym karbonie po przekroczeniu temperatury 120°C i osiągnęły główną fazę generowania (ryc. 5A). Stopień przeobrażenia kerogenu w węglowodory jest odzwierciedlony przez wskaźnik transformacji TR, który w tym wypadku przekroczył wartość 50% (ryc. 5B). W rezultacie czego obliczono ile węglowodorów uległo wygenerowaniu oraz kiedy nastąpił ten proces (ryc. 5C).

Wiarygodność rezultatów modelowań numerycznych zależy od jakości danych wprowadzanych do programu komputerowego, a więc przede wszystkim od wyjaśnienia historii termicznej oraz rozpoznania geochemicznego, czyli na ile prawidłowo określono typ kerogenu, jego parametry kinetyczne i całkowitą, pierwotną zawartość węgla organicznego (TOC) (Hunt, 1996; Waples, 1994).

Generowaniu węglowodorów w skałach macierzystych towarzyszy często proces ekspulsji węglowodorów. Najważniejszą jej formą występującą podczas głównego etapu generowania jest ruch oddzielnych faz węglowodorów w przestrzeni porowej, zależny od gradientów ciśnień. Wzrost objętości materii organicznej w trakcie dojrzewania kerogenu i generowania węglowodorów jest odzwierciedlony przez jej zmiany strukturalne (Mann i in., 1997). Skład substancji organicznej ma istotne znaczenie podczas generowania i ekspulsji węglowodorów, ponieważ kontroluje on zarówno stopień ekspansji objętościowej, jak i fizyczne zachowanie się faz węglowodorowych. Podsumowując proces ekspulsji węglowodorów jest głównie zdeterminowany przez pierwotną zawartość materii organicznej i typ kerogenu, historię termiczną podczas pogrążania oraz nasycenie przestrzeni porowej oraz stopień mikrorozszczelinowania skał macierzystych (Pepper & Corvi, 1995; Mann i in., 1997).

Szersze omówienie procesów ekspulsji zostanie przedstawione w artykule Kuśmierk, J., Kosakowski P., Maćkowski T., Botor D.: „Skalowanie efektywności ekspulsji węglowodorów — problemy kalibrowania modeli jedno- i dwuwymiarowych”.

Podsumowanie

Zastosowanie modelowań numerycznych do rekonstrukcji procesów generowania węglowodorów ma na celu, jak najbardziej wiarygodne odtworzenie przebiegu tych pro-

cesów. Obejmują one modelowanie subsydencji, pograżania i kompaktacji osadów, przepływu energii cieplnej i ewolucji termicznej oraz generowania i ekspulsji węglowodorów. Metody modelowań numerycznych pozwalają obliczyć stopień i czas dojrzenia (przeobrażenia) materii organicznej, a w efekcie końcowym ilość i skład wygenerowanych węglowodorów oraz określić czas kiedy miało to miejsce. Ma to bardzo istotne znaczenia dla prospekcji naftowej.

Powyższa praca została wykonana w Zakładzie Surowców Energetycznych Wydziału Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH w ramach badań własnych AGH nr 10.10.140.335 i 10.10.140.360. Autorzy składają serdeczne podziękowania prof. dr hab. inż. Janowi Kuśmierkowi (AGH), prof. dr hab. inż. Maciejowi Kotarbie (AGH), mgr inż. Pawłowi Poprawie (PIG Warszawa) i mgr inż. Tomaszowi Maćkowskemu (AGH) za konstruktywny krytycyzm wobec omawianych zagadnień.

Literatura

- ANDRIESEN P.A.M. 1995 — Fission-track analysis: principles, methodology and implications for tectono-thermal histories of sedimentary basins, orogenic belts and continental margins. *Geologie en Mijnbouw*, 74: 1–12.
- BLACKWELL D.D. & STEELE J.L. 1989 — Thermal conductivity of sedimentary rocks: measurement and significance, [W:] N.D. Naeser & T.H. McCulloh (red.), *Thermal history of sedimentary basins — methods and case histories*. New York, Springer: 13–36.
- BOTOR D. 1999 — Procesy generowania i ekspulsji węglowodorów w utworach karbonu rowu lubelskiego. Biblioteka Główna AGH.
- BUNTEBARTH G. & STEGNA L. 1986 — Paleogeothermics — evaluation of geothermal conditions in the geological past. *Lecture in Earth Sciences*, 5: 234.
- BURNHAM A.K., BRAUN R.L. & SAMOUN A.M. 1987 — Comparison of methods for measuring kerogen pyrolysis rates and fitting kinetic parameters. *Energy Fuels*, 1: 452–458.
- BURNHAM A.K. & SWEENEY J.J. 1989 — A chemical kinetic model of vitrinite maturation and reflectance. *Geochim., Cosmoch. Acta*, 53: 2649–2657.
- BURRUS R.C. 1989 — Paleotemperatures from fluid inclusions: advances in theory and technique. [W:] N.D. Naeser, T.H. & McCulloh (red.), *Thermal history of sedimentary basins — methods and case histories*. New York, Springer: 119–132.
- CORNFORD C. 1996 — Geochemistry and Maturity Modelling. Special volume from BasinMod Course, February, 1996, IGI Ltd. Hallsanery, Devon, U.K.
- DOW W.G. 1977 — Kerogen studies and geological interpretations. *J. Geochem. Explorat.*, 7: 79–99.
- ENGLAND W.A. 1994 — Secondary migration and accumulation of hydrocarbons, [W:] L.B. Magoon & W.G. Dow (red.), *The Petroleum System — from source to trap*. AAPG Memoir, 60: 211–219.
- ESPITALIE J. DEROO G. & MARQUIS F. 1986 — La pyrolyse Rock-Eval et ses applications. *Rev. IFP*, 41: 73–89.
- GREEN P.F., GLEADOW A.J.W., DUDDY I.R. & LOVERING J.F. 1989 — Apatite fission-track analysis as a paleotemperature indicator for hydrocarbon exploration, [W:] Naeser N.D. & McCulloh T.H. (red.), *Thermal history of sedimentary basins — methods and case histories*. Springer: 181–195.
- HERMANRUD C. 1993 — Basin modelling techniques — an overview, [W:] A.G. Dore i in. (red.), *Basin Modelling: Advances and Application*. Elsevier, Amsterdam: 1–34.
- HUNT J.M. 1996 — Petroleum geochemistry and geology. 2nd ed., Freeman, Co, San Fransisco, USA: 743.
- JARMOŁOWICZ-SZULC K. 1996 — Possibilities of the application of fluid inclusion studies in research on diagenesis of the reservoir rocks. [W:] The 2nd Conference on Geochemical and Petrophysical Investigations in Oil and Gas Exploration. Janowice, 10.04.1996: 103–109.
- JESSOP A.M. 1990 — Thermal Geophysics. Elsevier, Amsterdam.
- JÜNTGEN H. & VAN HECK K.H. 1968 — Gas release from coal as a function of the rate of heating. *Fuel*, 47: 1093–1117.
- KARWEIL J. 1955 — Die metamorphose der Kohlen vom Standpunkt der physikalischen Chemie. *Z. Deutsch. Geol. Gemein.*, 107: 132–139.
- LEISCHNER K., WELTE D.H. & LITTKER R. 1993 — Organic maturity parameters and fluid inclusions as calibration tools in basin modelling, [W:] A.G. Dore i in. (red.), *Basin Modelling: Advances and Application*. Elsevier, Amsterdam: 161–172.
- LOPATIN N.V. 1971 — Temperature and geologic time as factors in coalification. *Akad. Nauk Izvjestija, Ser. Geol.*, 3: 95–196.
- MAGARA K. 1978 — Compaction and fluid migration. Elsevier, Amsterdam.
- MANN U., HANTSCHER T., SCHAEFER R.G., KROSS B., LEYTHAEUSER D., LITTKER R. & SACHSENHOFER R.F. 1997 — Petroleum migration: mechanisms, pathways, efficiencies and numerical simulation, [W:] Welte D.H., Horsfield B. & Baker D.R. (red.), *Petroleum and Basin Evolution*. Springer: 403–520.
- McNAB J.G., SMITH P.V. & BETTS R.L. 1952 — The evolution of petroleum. *Ind. Engin. Chem.*, 44: 2556–2563.
- PEPPER A. & CORVI P.J. 1995 — Simple kinetic models of petroleum formation. Part I: oil and gas generation from kerogen. *Mar. Petrol. Geol.*, 12: 291–319.
- PHILIPPI G.T. 1965 — On the depth, time and mechanism of petroleum generation. *Geochim., Cosmoch., Acta*, 29: 1021–1049.
- PLEWA S. 1994 — Rozkład parametrów geotermalnych na obszarze Polski. Wyd. CPPGSMiE PAN.
- POELCHAU H., BAKER D.R., HANTSCHER T.H., HORSFIELD B. & WYGRALA B. 1997 — Basin simulation and the design of the conceptual basin model, [W:] Welte D.H., Horsfield B. & Baker D.R. (red.), *Petroleum and Basin Evolution*. Springer: 3–70.
- PYTTE A.M. & REYNOLDS R.C. 1989 — The thermal transformation of smectite to illite, [W:] Naeser N.D. & McCulloh T.H. (red.), *Thermal history of sedimentary basins — methods and case histories*. Springer: 133–140.
- QUIGLEY T.M., MACKENZIE A. & GRAY J.R. 1987 — Kinetic theory of petroleum generation, [W:] Durand B. (red.), *Migration of hydrocarbons in sedimentary basins*. Technip, Paris: 315–345.
- RULLKÖTTER J. & MARZI R. 1988 — Natural and artificial maturation of biological markers in a Toarcian shale from northern Germany, [W:] Matavelli A. & Novelli W. (red.), *Advances in Organic Geochemistry*, 13: 639–645.
- SWEENEY J.J. & BURNHAM A.K. 1990 — Evaluation of a simple model of vitrinite reflectance based on chemical kinetics. *AAPG Bull.*, 74: 1559–1570.
- ŚRODOŃ J. 1996a — Minerale ilaste w procesach diagenety. *Prz. Geol.*, 44: 604–607.
- ŚRODOŃ J. 1996b — K–Ar dating of diagenetic events, [W:] The 2nd Conference on Geochemical and Petrophysical Investigations in oil and gas exploration. Janowice, 10.04.1996: 298–299.
- TISSOT B.P. & ESPITALIE J. 1975 — L'evolution thermique de la matiere organique des sediments: applications d'une simulation mathematique. *Rev. IFP*, 30: 743–777.
- UNGERER P., BEHAR F., VILLALBA M., HEUM O.R. & AUDIBERT A. 1988 — Kinetic modelling of oil generation and cracking. *Organic Geochem.*, 13: 857–868.
- UNGERER P., BURRUS J., DOLIGEZ B., CHENET P. & BESSIS F. 1990 — Basin evaluation by integrated modelling of heat transfer, fluid flow, hydrocarbon generation and migration. *AAPG Bull.*, 74: 309–335.
- WAPLES D. 1994 — Maturity modelling: thermal indicators, hydrocarbon generation and oil cracking, [W:] L.B. Magoon, & W.G. Dow (red.), *The Petroleum System — from source to trap*. AAPG Memoir, 60: 285–306.
- WAPLES D., KAMATA H. & SUIZU M. 1992a — The art of maturity modelling, part 1: finding of satisfactory model. *AAPG Bull.*, 76: 31–46.
- WAPLES D., KAMATA H. & SUIZU M. 1992b — The art of maturity modelling, part 2: alternative models and sensitivity analysis. *AAPG Bull.*, 76: 47–66.
- WELTE D.H. 1987 — Migration of hydrocarbons: facts and theory, [W:] Doligez B. (red.), *Migration of hydrocarbons in sedimentary basins*. Technip: 393–413.
- WELTE D.H., HORSFIELD B. & BAKER D.R. (red.) 1997 — Petroleum and Basin Evolution. Springer: 535.
- YALCIN M.N., LITTKER R. & SACHSENHOFER R.F. 1997 — Thermal history of sedimentary basins, [W:] Welte D.H., Horsfield B. & Baker D.R. (red.), *Petroleum and Basin Evolution*. Springer: 71–168.