

Роман-Даниїл КУЧЕР, Оксана СЕНІВ

Інститут геології і геохімії горючих копалин НАН України, Львів, Україна,
e-mail: igggk@mail.lviv.ua

**ІННОВАЦІЙНИЙ КОМПЛЕКС ВИВЧЕННЯ
СКЛАДНОПОБУДОВАНИХ ПОРІД-КОЛЕКТОРІВ ВУГЛЕВОДНІВ,
ОСНОВАНІЙ НА ПЕТРОФІЗИЧНИХ
ТА ГЕОХІМІЧНИХ ПАРАМЕТРАХ
(на прикладі Бориславсько-Покутської зони
Передкарпатського прогину)**

Розглянуто способи вивчення ємнісно-фільтраційних властивостей порід-колекторів покладів вуглеводнів та процеси трансформації і стан виснаженості керогену в межах Бориславсько-Покутської зони Передкарпатського прогину. За результатами аналізу фактичного і теоретичного матеріалу обґрунтовано оптимальний методичний комплекс досліджень найважливіших характеристик колекторів та процесів еволюції керогену для розглянутої зони. Проведено аналіз геолого-петрофізичних характеристик відкладів олігоцену Внутрішньої зони Передкарпатського прогину та сформовано масиви інформації. Встановлено, що порово-тріщинні і тріщинні колектори мають складну будову, а їхнє поширення та потужність контролюються двома чинниками різної природи: літолого-фаціальним і структурно-деформаційним. Виявлено, що моделі термодинамічного моделювання – максимізація ентропії та констант незалежних хімічних реакцій – надають достовірні результати розподілу елементів між компонентами складних гетерогенних та гомогенних геохімічних систем. Показано, що обраний спосіб розрахунку енергії Гіббса індивідуальних компонентів геохімічних систем має точність, достатню для використання в вищезазначених моделях.

Ключові слова: Бориславсько-Покутська зона, складнобудовані породи-колектори, петрофізичні та геохімічні параметри.

Вступ. Багаторічний досвід розроблення родовищ вуглеводнів у Бориславсько-Покутській зоні Передкарпатського прогину показав, що ємнісно-фільтраційні властивості колекторів різко змінюються як по вертикалі, так і латералі, що зумовлює нерівномірний розподіл вуглеводнів у покладах. Водночас відбуваються зміни структури розсіяної органічної речовини, насамперед по вертикалі. Очевидно, що без всебічного вивчення характеристик нафтоматеринських світ, передусім ємнісно-фільтраційних та геохімічних властивостей, проблематичним буде раціональне проведення пошуково-розвідувальних робіт з подальшим освоєнням родовищ та адекватна оцінка запасів вуглеводнів на розглянутій ділянці.

Щоб підвищити ефективність досліджень, застосовано інтегральний геофізично-геохімічний критерій, оскільки, з одного боку, ступінь катагенетичного перетворення розсіяної органічної речовини вказує на потенціал наповнення колекторів вуглеводневим флюїдом, з іншого – ємнісно-фільтраційні властивості гірських порід та ступінь катагенезу керогену змінюються як по вертикалі, так і латералі осадових басейнів під впливом седиментаційних, тектонічних, геохімічних, термобаричних та низки інших геологічних факторів. Для наукового обґрунтування прогнозу колекторських властивостей гірських порід та ймовірності їхнього наповнення вуглеводневим флюїдом важливе значення має розроблення фізико-геологічних моделей, що в певному наближенні описують формування ємнісно-фільтраційних властивостей та перетворення керогену за різних геотермобаричних умов та різного початкового складу розсіяної органічної речовини.

Проведений аналіз результатів досліджень петрофізичних властивостей порід-колекторів в умовах пластових температур і тисків показує, що сьогодні недостатньо вивчені ємнісно-фільтраційні і теплофізичні властивості в глибинних зонах осадових басейнів. Математико-статистичне (термодинамічне) моделювання процесів трансформації розсіяної органічної речовини з утворенням вуглеводневої частини нафтових та газових покладів як в Україні, так і за її межами досі перебуває в стані розробки з огляду на складність поставлених завдань. Складнонапружений стан гірських порід, який виникає в результаті дії геодинамічних напружень, і процеси катагенетичних змін зумовлюють розвиток вторинних порово-тріщинних і тріщинно-кавернозних колекторів. Виникнення тріщини спричинене деформацією і залежить від механічних властивостей гірських порід. Розвиток пасток, порово-тріщинних і тріщинно-кавернозних колекторів пов'язаний із зонами розушлінення порід, які тяжіють до тектонічних порушень і місць вторгнення в осадову товщу флюїдів з великих глибин (Куровець, Зубко та ін., 2023). Водночас два різноспрямовані процеси – теплова деградація і консолідація під впливом тиску – спричинюють зміни, які відбуваються зі структурою керогену під час його еволюції. Встановлено, що існує кореляція між пропорційним складом перших членів гомологічного ряду алканів, елементним складом керогену та ступенем його перетворення (Хоха, 2014).

Мета – дослідити ємнісно-фільтраційні властивості порід-колекторів, процеси трансформації та стан виснаженості керогену в межах Бориславсько-Покутської зони Передкарпатського прогину; обґрунтувати оптимальний методичний комплекс досліджень ємнісно-фільтраційних властивостей колекторів та процесів трансформації керогену розглянутої зони. Надалі цей комплекс моделей буде використаний для з'ясування впливу складнонапруженого стану на формування ємнісно-фільтраційних властивостей гірських порід, вивчення структури порового простору колекторів вуглеводнів та встановлення характеру взаємозв'язку між складом легкої вуглеводневої частини та ступенем виснаження керогену в нафтогазоматеринських товщах.

Методи. Вирішення поставленого завдання базується на комплексному петрофізичному вивченні гірських порід, геохімічному аналізі складу природних газів та газопроявів, літолого-петрографічних дослідженнях керна, дослідженнях ємнісно-фільтраційних, фізико-механічних і теплофізичних

параметрів зразків керна за атмосферних умов і умов складнонапруженого стану, а також на аналізі наявної геолого-геофізичної та геохімічної інформації. Для оптимального методичного комплексу (Кучер & Сенів, 2004) досліджень ємнісно-фільтраційних властивостей колекторів та процесів трансформації керогену обрано такі методи: петрофізичні, літолого-петрографічні, геохімічні, методи термодинамічного моделювання, а також сучасні математико-статистичні і графічні методи обробки і просторового аналізу даних та інтерпретації узагальнених і систематизованих літературних і фондових матеріалів, даних вивчення фактичного матеріалу і результатів аналізів (математико-статистичне моделювання, побудова картографічного матеріалу із залученням широкого спектра комп'ютерних програм). Ми застосували математичні методи обробки й аналізу інформації, фізичне і математико-статистичне (термодинамічне) моделювання. Сьогодні в Україні не виготовляють апаратури для лабораторних досліджень ємнісно-фільтраційних та фізико-механічних параметрів складнобудованих порід-колекторів, і це зумовило необхідність проєктування та виготовлення дослідних зразків апаратури для вирішення проблеми створення параметричної основи для кількісної інтерпретації даних ГДС при вивченні тріщинуватих та порово-тріщинуватих колекторів (Куровець, Грицик та ін., 2023). Створювали цей апаратурно-методичний комплекс, враховуючи досвід та розробки, отримані у відділі проблем нафтової геофізики Інституту геології і геохімії горючих копалин (ІГГК) НАН України під час лабораторних досліджень петрофізичних властивостей гранулярних порід-колекторів.

Очікувані результати. У результаті проведених досліджень буде обраний та обґрунтований оптимальний методичний комплекс досліджень ємнісно-фільтраційних властивостей колекторів та процесів трансформації керогену Бориславсько-Покутської зони Передкарпатського прогину. Застосування цього комплексу методів дозволить спрогнозувати ємнісно-фільтраційні властивості порід-колекторів вуглеводнів, визначити стан виснаженості керогену регіону і розробити петрофізичні моделі порід-колекторів з різним типом порового простору, які є основою для прогнозування колекторських властивостей гірських порід у пластових умовах, та скласти картосхеми перспективних ділянок вуглеводневої генерації в межах Бориславсько-Покутської зони Передкарпатського прогину Карпатської нафтогазоносною провінції, що дасть змогу ефективніше оцінювати перспективи та запаси вуглеводнів, раціональніше вести пошуково-розвідувальні роботи і освоєння родовищ.

Основна частина. На думку багатьох дослідників (Крупський та ін., 2014; Павлюк та ін., 2022), Бориславсько-Покутська зона Передкарпатського прогину має значні перспективи відкриття як нових покладів, так і родовищ вуглеводнів. Регіонально продуктивними є два комплекси: олігоценний – менілітова світа і еоцен-палеоценовий – вигодська, манявська, ямненська світи, їхні регіональні покриття – поляницька та бистрицька світи. Природні резервуари утворені пластами пісковиків та алевролітів, залеглими серед аргілітів; пласти колекторів з невитриманою потужністю, спостерігається виклинювання та фаціальне заміщення. Тому актуальним є дослідження факторів, які визначають формування колекторських властивостей порід

і їхню флюїдонасиченість, що дозволить оптимізувати як пошуково-розвідувальні роботи, так і методику розробки родовищ.

Петрофізичні властивості порід-колекторів у досліджуваному регіоні вивчали виробничі і наукові організації: ЦНДЛ ВАТ «Укрнафта», Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу, Стрийська та Івано-Франківська експедиції з геофізичних досліджень свердловин та ІГГК НАН України. У відділі проблем нафтової геофізики ІГГК НАН України було розроблено апаратурно-методичний комплекс дослідження петрофізичних властивостей гранулярних порід-колекторів за нормальних умов та умов, які моделюють пластові ($P_{пл}, T^{\circ}C$). У результаті було вивчено величини петрофізичних параметрів за нормальних і пластових ($P_{пл}, T^{\circ}C$) умов, характер їхніх змін з глибиною, вплив на їх значення геологічних чинників, побудовано типові геолого-петрофізичні розрізи для продуктивних літолого-стратиграфічних комплексів, а також петрофізичні моделі взаємозв'язків між ємнісно-фільтраційними і геофізичними параметрами (Куровець та ін., 2006, 2021).

Найпродуктивнішими і, очевидно, найперспективнішими в олігоценовому комплексі є відклади менілітової світи (табл. 1). У літологічному плані вони є неоднорідними, у їхньому складі наявні пісковики, сланцюваті аргіліти, сланці, прошарки кременів (роговики), а також горизонт вулканічних туфів. У верхньоменілітовій світі, потужність якої змінюється від 200 до 875 м, виявлені тріщинно-порові і порові колектори з пористістю 5,3–12,8 % і проникністю $0,5\text{--}28 \text{ мкм}^2 \cdot 10^{-3}$. Середньоменілітова світа завтовшки 120–200 м, тип колектора поровий, тріщинно-поровий з пористістю 6–12 % і проникністю $1\text{--}230 \text{ мкм}^2 \cdot 10^{-3}$. Нижньоменілітова світа – 160–300 м, тип колектора поровий, тріщинно-поровий з пористістю 5,8–26,4 % і проникністю $0,1\text{--}208 \text{ мкм}^2 \cdot 10^{-3}$.

На першому етапі досліджень була вивчена геолого-петрофізична інформація для родовищ Бориславського нафтопромислового району, які характеризуються як низкою неглибоких покладів (Міріам, Стрільбичі, Стара Сіль, Браво, Мражниця та ін.), так і більш глибокими родовищами (Бориславське, Пом'ярківське, Іваніківське, Орів-Уличнянське, Старосамбірське, Стинавське, Заводівське, Новосхідницьке), що дозволило оцінити петрофізичні властивості порід в інтервалі 200–5500 м.

Було сформовано масиви геолого-петрофізичної інформації, які містили такі параметри: глибина відбору, літологічна характеристика, об'ємна густина, відкрита пористість, нафтонасиченість, водонасиченість, карбонатність, абсолютна проникність. Виконано стандартний статистичний аналіз перерахованих параметрів для окремих свердловин, площ, літологічних відмінностей; побудовано гістограми розподілу, визначено мінімальні і максимальні значення, характер їхньої зміни з глибиною.

Зони колекторів з покращеними ємнісно-фільтраційними властивостями, їхнє поширення та потужність контролюються двома факторами різної природи: літолого-фаціальним та структурно-деформаційним (Куровець, Зубко та ін., 2023). На границях літофацій з різною піскуватістю формуються зони субвертикальної тріщинуватості внаслідок нерівномірного ущільнення пісків та глин; ці зони сприяють вертикальним перетокам флюїдів як у межах одновікової товщі відкладів, так і нижчезалеглих. Так формується складна тріщинувата система, утворена субвертикальними каналами на межі літофацій

Т а б л и ц я 1. Геолого-петрофізична характеристика відкладів олігоцену Внутрішньої зони Передкарпатського прогину (Куровець та ін., 2021)

Відділ	Світа	Літологічна характеристика	Потужність відкладів, м	Тип колектора	Пористість, %	Проникність, $\text{мкм}^2 \cdot 10^{-3}$
Олігоцен	Полянська	Основна частина світи представлена ясно- та жовтувато-сірими вапнистими аргілітами, які чергуються з проверстками пісковиків та алевролітів, товщиною від кількох сантиметрів до 5–6 м	400–800	Тріщинно-кавернозний, поровий	1,2–11,6	0–5
	Верхньоменлітгова	У підшві залягає товща, представлена ритмічним чергуванням проверстків аргілітів зі щільними алевролітами та пісковиками. Вище залягає туфітовий горизонт, представлений тонким чергуванням туфів, аргілітів, пісковиків та аревролітів	200–875	Тріщинно-поровий, поровий	5,3–12,8	0,5–28
	Середньоменлітгова	Представлена горизонтом зеленувато-сірих сланців, чорних пісковиків та піщано-сланцевим горизонтом	120–200	Поровий, тріщинно-поровий	6–12	1–230
	Нижньоменлітгова	В основі залягає шешорський горизонт, представлений брунатно-чорними, чорними і сірими аргілітами, сірими пісковиками і алевролітами та мергелями. Над шешорським горизонтом залягає нижньороговиковий горизонт, а вище від нього товща темно-сірих невапнистих аргілітів з проверстками, щільно зцементованими пісковиками й алевролітами. Подекуди товщина пісковиків збільшується і їх можна об'єднати в окремі горизонти – клівські пісковики та піщано-сланцевий	160–300	Поровий, тріщинно-поровий	5,8–26,4	0,1–208

та субгоризонтальними – на літологічних границях. У місцях контрастних перегинів пластів формується тріщинуватість тектонофізичної природи, яка охоплює значні потужності як колекторських, так і глинистих товщ, що зумовлює їхню флюїдодинамічну єдність. Зміни ємнісно-фільтраційних властивостей відкладів упродовж геологічного часу можуть відбуватися декілька разів, залежно від спрямованості та інтенсивності тектонічних рухів, які, з одного боку, сприяють формуванню пасток для флюїдів, а з іншого – їхньому заліковуванню. В умовах насувоутворення тектонічна складова поля напружень різко зростає, суттєво збільшується величина сумарного поля напружень, унаслідок чого в осадових породах інтенсивно розвиваються тектоногенні

пружні і пластичні деформації. У результаті перерахованих геолого-геодинамічних процесів у розрізі осадової товщі Внутрішньої зони Передкарпатського прогину сформувалися не тільки різні типи пасток вуглеводнів, а й складнобудовані тріщинні та порово-тріщинні колектори.

Для опису перетворень органічної речовини в діапазоні від осадової товщі до верхньої мантії Землі ми застосували методи термодинаміки. Моделі, створені на базі термодинаміки, є цілком адекватними при описі таких масштабних та тривалих геологічних процесів, як синтез викопних вуглеводнів.

Для спрощення розрахунків ми приймаємо, що склад системи регулюється температурою та тиском. Щодо роботи, то приймаємо, що виконується лише робота, спрямована проти дії зовнішнього тиску. Термодинамічна система, яку ми розглядаємо, є закритою, але не ізольованою, тобто можливий обмін енергією з навколишнім середовищем.

Ефективні методи (Blecic et al., 2016; Koukkari, 2014; Sanford & McBride, 1994) дозволяють розраховувати склад описаних вище систем, утворених будь-якою кількістю компонентів у чистому стані, розчинах та газоподібному стані. Є два основні підходи до розрахунку: «стехіометричний», що базується на незалежних хімічних реакціях, та «нестехіометричний», при якому до уваги беруть хімічні потенціали індивідуальних компонентів системи.

Застосування «стехіометричної» стратегії приводить до рішення у вигляді системи нелінійних рівнянь, яка кардинально змінюється при введенні нового компонента в систему (Хоха, 2014). Другий метод дещо простіший у систематизації, а введення нових компонентів є простою операцією (Koukkari, 2014). Для обох стратегій рішення шукають однаково – шляхом знаходження мінімуму енергії Гіббса або енергії Гельмгольца та максимізацією ентропії.

Усі перелічені вище методи потребують інформації про хімічний потенціал компонентів системи для температури, тиску, у яких відбувалося перетворення органічної речовини, та початкового складу цієї речовини. Щоб визначити цей потенціал, достатньо володіти інформацією про енергію Гіббса (за даних умов) утворення кожної зі сполук, що складають систему (Хоха, 2019; Koukkari, 2014).

Енергію Гіббса утворення індивідуальної речовини за стандартного тиску при заданій температурі T , позначену як $\Delta G_f^\circ(T)$, ми обирали з результатів квантово-механічних розрахунків (Глушко, 1972; Stull et al., 1969). Розрахунок $\Delta G_f^\circ(T)$ проводили після обчислення значень ентальпії $\Delta H_f^\circ(T)$ та ентропії $\Delta S_f^\circ(T)$ утворення:

$$\begin{aligned} \Delta H_f^\circ(T) &= \Delta H_f^\circ(298) + (H_T^\circ - H_{298}^\circ)(\text{сполука}) - \sum (H_T^\circ - H_{298}^\circ)(\text{елементи}); \\ \Delta S_f^\circ(T) &= S_T^\circ(\text{сполука}) - \sum S_T^\circ(\text{елементи}); \\ \Delta G_f^\circ(T) &= \Delta H_f^\circ(T) - T\Delta S_f^\circ(T). \end{aligned} \quad (1)$$

Зміни ентальпії та ентропії вираховувалися з рівняння теплоємності (Stull et al., 1969) у традиційний спосіб. За стандартного тиску в межах температур, які реалізуються у всіх теплових потоках, що розглядалися, залежність енергії Гіббса утворення компонентів геохімічних систем описувалася рівнянням прямої $\Delta G_f^\circ(T) = aT + b$, (кДж/моль), коефіцієнти якого наведені в табл. 2.

Т а б л и ц я 2. Коефіцієнти для розрахунку стандартної енергії Гіббса

Речовина	<i>a</i>	<i>b</i>	Речовина	<i>a</i>	<i>b</i>
CO ₂	-0,00293	-393,572	C ₃ H ₈	0,30543	-116,512
H ₂ O	0,04728	-242,689	<i>n</i> -C ₄ H ₁₀	0,40836	-141,214
H ₂ S	-0,03473	-22,835	<i>i</i> -C ₄ H ₁₀	0,42342	-149,386
CH ₄	0,08870	-77,354	<i>n</i> -C ₅ H ₁₂	0,51338	-164,046
C ₂ H ₆	0,20251	-94,805	<i>i</i> -C ₅ H ₁₂	0,51840	-172,001

Розрахунок енергії Гіббса утворення індивідуальних речовин, перелічених у табл. 2, $\Delta G_f^P(T)$ за температур та тисків земної кори здійснювали за формулою:

$$\Delta G_f^P(T) = \Delta G_f^\circ(T) + \left[(G_T^P - G_T^\circ)_{\text{сполуки}} - \sum (G_T^P - G_T^\circ)_{\text{елемента}} \right], \quad (2)$$

у якому $\Delta G_f^\circ(T)$ розраховували за даними табл. 2, а значення енергій Гіббса G_T^P та G_T° визначали із використанням програмного комплексу CoolProp (Bell et al., 2014).

Для обчислення енергії Гіббса в умовах астеносфери ми використали рівняння стану з роботи (Хоха, 2014):

$$P_R = \frac{T_R}{\alpha_{R1} \cdot \beta} - F_{R1} \cdot \gamma, \quad (3)$$

де кожен з коефіцієнтів має свій фізичний зміст, детально описаний у (Хоха, 2014).

Алгоритм розрахунків складу системи кероген-індивідуальні сполуки. Традиційно будову керогену описують модельними структурами, які виводяться з урахуванням інформації про їхній елементний склад, молекулярну вагу та відомостей про функціональні групи. Ця інформація збирається експериментально, методами ІЧ-спектроскопії, рентгеноструктурним аналізом, методами ЯМР тощо. У цій роботі ми моделюємо природні полімери як набір взаємопоєднаних адитивних складових. Серед адитивно-групових методів для визначення термодинамічних функцій обрано класичний і перевірений метод ван Кревелена (van Krevelen & Chermín, 1951), який широко застосовується в геохімії з 50-х років минулого століття.

Спосіб застосування формалізму Джейнса в термодинаміці був запропонований у роботі (Tribus, 1961). Завдання пошуку найменш суперечливого розподілу ймовірностей p_i зводиться до максимізації невідомої функції S , яка задовольняє рівняння зв'язку (4):

$$\sum_i p_i = 1, \sum_i p_i g_i(X_i) = \{g_r\}; r = 1, 2, \dots, \quad (4)$$

де $\{g_r\}$ – математичне очікування; для поставленого завдання:

$$\{g_r\} = N_r^{el}; r = C, H, O, N, S,$$

де N_r^{el} – кількість елемента r в 1 молі компонентів, з яких складена система.

Найменш помилковим способом визначення ймовірностей є такий, що максимізує функцію S (ентропію). Цільова функція S задається рівнянням:

$$S = -K \sum_i p_i \cdot \ln(p_i), \quad (5)$$

де K – постійна; для обраної системи цільова функція:

$$S = -R \left[\sum_{i=1}^{44} n_i^{add} \cdot \ln(n_i^{add}) + \sum_{i=1}^m n_i^{gas} \cdot \ln(n_i^{gas}) \right], \quad (6)$$

де індекс *add* відповідає 44 адитивним складовим, з яких складається природний полімер за (van Krevelen & Chermín, 1951); *m* – кількість газів у системі. Прирівнювання нулю варіації функції (6) є залежністю для визначення мольної частки компонента системи (як адитивної складової, так і газу), вираженої через потенціал Планка:

$$n_i = e^{-\left(\lambda_0 + \lambda_C \cdot N_i^C + \lambda_H \cdot N_i^H + \lambda_O \cdot N_i^O + \lambda_N \cdot N_i^N + \lambda_S \cdot N_i^S\right)},$$

$$\lambda = \mu / RT, \quad (7)$$

де $N^C, N^H \dots$ – кількість елемента в компоненті. Для елементів λ – невизначений множник Лагранжа, фізичний зміст якого є безрозмірний потенціал Планка, μ – потенціал Гіббса (Дж/моль) компонента; а λ_0 – нульовий множник Лагранжа.

Для розрахунків в умовах екстремальних тисків та температур з огляду на простоту системи ми використовували метод констант рівноваги незалежних реакцій. Припущення, яке треба зробити для подальших розрахунків, – утворення речовинами системи ідеального розчину (Чекалюк, 1971).

Візьмемо за основу склад природного газу, який переважно містить гомологи метану (до C_5 включно), а також азот, двооксид вуглецю, сірководень і гелій. Вирази для кількості молів елементів системи:

$$N_{H_2} = \bar{N} \left(\sum_{i=1}^5 (i+1) v_{C_i H_{2i+2}} + v_{H_2 S} \right); \quad N_{S_2} = 0,5 \bar{N} v_{H_2 S}; \quad N_{He} = \bar{N} v_{He};$$

$$N_{O_2} = \bar{N} v_{CO_2}; \quad N_{N_2} = \bar{N} v_{N_2}, \quad (8)$$

де \bar{N} – загальна кількість молів у системі, N_i – кількість молів *i*-го елемента, v_i – мольна частка *i*-го компонента. Закон збереження маси дає умову нормування мольних часток.

Підсумовуючи, розрахунок термобаричних умов утворення природних газів зводиться до вирішення алгебраїчного рівняння п'ятого ступеня відносно мольної частки водню, яке отримано після перетворень і має такий вигляд:

$$\left[\frac{N_{CO_2} + N_{N_2} + N_{He} + N_{H_2 S}}{N_{H_2} - N_{H_2 S}} \right] \cdot \sum_{i=1}^5 k_i (i+1) v_{C_i H_{2i+2}} + \sum_{i=1}^5 k_i v_{C_i H_{2i+2}} - 1 = 0. \quad (9)$$

Для проведення розрахунку за формулою (9) необхідно обчислити активності індивідуальних компонентів системи за обраних тиску і температури. Активність характеризує ступінь відхилення реальної системи від законів, що керують ідеальним газом, і позначається a_T^P (функція тиску і температури).

Точне значення самої активності можна одержати, якщо відоме значення енергії Гіббса за обраних тиску і температури:

$$a_T^P = a_T^0 \cdot \exp\left(\frac{G_T^P - G_T^0}{RT}\right). \quad (10)$$

Після диференціювання рівняння (10) за тиском при постійній температурі, розділення змінних та інтегрування результату в межах від стандартного тиску до обраного отримуємо такий вираз:

$$RT \cdot \ln \frac{a_T^P}{a_T^0} = \int_{P_0}^P V dP. \quad \ln a_T^P = \frac{1}{RT} \int_{P_0}^P V dP. \quad (11)$$

Після рутинних математичних перетворень отримуємо вираз для обчислення значень активності індивідуальних речовин за умови наявності рівняння стану:

$$\ln a_T^P = \frac{z_c}{T_R} \int_{P_{0R}}^{P_R} V_R dP_R = \frac{z_c}{T_R} \left[V_R P_R - V_{0R} P_{0R} - \int_{V_{0R}}^{V_R} P_R dV_R \right]. \quad (12)$$

Інтеграл у правій частині формули (12) на практиці вираховується з рівняння стану. Для цього ми застосували рівняння стану (3).

Усі виведені вище рівняння були перевірені на реальних речовинах і системах, для яких відомі значення термодинамічних функцій. Перевірка засвідчила достатню надійність цих рівнянь для тих меж тисків і температур, у яких планується їх застосувати. Наприклад, розрахунок активності за рівнянням (12) перевірявся порівнянням з даними Е. Чекалюка (1971), а склад модельних систем порівнювався з результатами, отриманими при застосуванні програмних комплексів типу CHEMCAD (моделювання в т. зв. реакторі Гіббса).

Висновки:

1. Дослідження особливостей формування ємнісно-фільтраційних властивостей порід-колекторів у відкладах Бориславсько-Покутської зони Передкарпатського прогину показали наявність складнобудованих порово-тріщинних і тріщинних колекторів, а їхнє поширення та потужність контролюються двома факторами різної природи: літолого-фаціальним і структурно-деформаційним.

2. За результатами попередніх тестувань виявлено, що обрані моделі термодинамічного моделювання – максимізацією ентропії та констант незалежних хімічних реакцій – надають достовірні результати розподілу елементів між компонентами складних гетерогенних та гомогенних геохімічних систем.

3. Встановлено, що обраний спосіб розрахунку енергії Гіббса індивідуальних компонентів геохімічних систем має точність, достатню для використання в моделях.

4. Результати досліджень дозволили узагальнити наявні фактичні дані, що склали основу для встановлення геофізичних і геохімічних особливостей та інших передумов формування покладів вуглеводнів у межах Бориславсько-Покутської зони Передкарпатського прогину з метою визначення ємнісно-фільтраційних параметрів порід-колекторів в умовах складнонапруженого стану та термодинамічного моделювання процесу нафтогазоутворення.

Глушко, В. П. (1972). *Термодинамические свойства индивидуальных веществ*. Москва: Наука.

Крупський, Ю. З., Куровець, І. М., Сеньковський, Ю. М., Михайлов, В. А., Чепіль, П. М., Дригант, Д. М., Шлапінський, В. Є., Колтун, Ю. В., Чепіль, В. П., Куровець, С. С., & Бодлак, В. П. (2014). *Нетрадиційні джерела вуглеводнів України: Кн. 2. Західний нафтогазоносний регіон*. Київ: Ніка-Центр.

Куровець, І., Грицик, І., Зубко, О., Приходько, О., & Кучер, Р.-Д. (2023). Апаратурно-методичний комплекс досліджень петрофізичних властивостей тріщинуватих

- порід-колекторів вуглеводнів. *Геологія і геохімія горючих копалин*, 3–4(191–192), 37–44. <https://doi.org/10.15407/ggcm2023.191-192.037>
- Куровець, І., Грицик, І., Приходько, О., Чепусенко, П., Кучер, З., Михальчук, С., Мельничук, С., Лисак, Ю., & Петелько, Л. (2021). Петрофізичні моделі відкладів мєнілітової світи олігоценового флішу Карпат і Передкарпатського прогину. *Геологія і геохімія горючих копалин*, 3–4(185–186), 33–43. <https://doi.org/10.15407/ggcm2021.03-04.033>
- Куровець, І., Зубко, О., Грицик, І., Приходько, О., & Кучер, Р.-Д. (2023). Особливості формування ємнісно-фільтраційних властивостей порід-колекторів Внутрішньої зони Передкарпатського прогину. У *Геофізика і геодинаміка: прогнозування та моніторинг геологічного середовища: збірник матеріалів XI Міжнародної наукової конференції* (Львів, 10–12 жовтня 2023 р.) (с. 109–112). Львів.
- Куровець, І. М., Притулка, Г. Й., Шеремета, О. В., Зубко, О. С., Осадчий, В. Г., Грицик, І. І., Приходько, О. А., Кос'яненко, Г. П., Чепусенко, П. С., Шира, А. І., Кучер, З. І., & Олійник, К. А. (2006). Петрофізичні моделі складнобудованих колекторів вуглеводнів. *Геологія і геохімія горючих копалин*, 3–4, 119–139.
- Кучер, Р.-Д. А., & Сенів, О. Р. (2024). Обґрунтування оптимального методичного комплексу досліджень ємнісно-фільтраційних властивостей колекторів та процесів трансформації керогену Бориславсько-Покутської зони Передкарпатського прогину. У *Сучасні проблеми наук про Землю: матеріали XIII Всеукраїнської конференції-школи* (Київ, 10–12 квітня 2024 р.) (с. 22–24). Київ.
- Павлюк, М., Наумко, І., Лазарук, Я., Хоха, Ю., Крупський, Ю., Савчак, О., Різун, Б., Медведєв, А., Шлапінський, В., Колодій, І., Любчак, О., Яковенко, М., Тернавський, М., Гривняк, Г., Тріска, Н., Сенів, О., & Гузарська, Л. (2022). *Резерв нафтогазовидобутку Західного регіону України* (Електрон. вид.). Львів. <http://iggcm.org.ua/wp-content/uploads/2015/10/РЕЗЕРВ-НАФТОГАЗОВИДОБУТКУ-ЗАХІДНОГО-РЕГІОНУ-УКРАЇНИ.pdf>
- Хоха, Ю. В. (2014). *Термодинаміка глибинних вуглеводнів у прогнозуванні регіональної нафтогазоносності*. Київ: Наукова думка.
- Хоха, Ю. В., Любчак, О. В., & Яковенко, М. Б. (2019). Енергія Гіббса утворення компонентів природного газу в осадових товщах. *Геологія і геохімія горючих копалин*, 2(179), 37–46. <https://doi.org/10.15407/ggcm2019.02.037>
- Чекалюк, Э. Б. (1971). *Термодинамические основы теории минерального происхождения нефти*. Киев: Наукова думка.
- Bell, I. H., Wronski, J., Quoilin, S., & Lemort, V. (2014). Pure and Pseudo-pure Fluid Thermophysical Property Evaluation and the Open-Source Thermophysical Property Library CoolProp. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(6), 2498–2508. <https://doi.org/10.1021/ie4033999>
- Blecic, J., Harrington, J., & Bowman, M. O. (2016). TEA: A code calculating thermochemical equilibrium abundances. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 225(1). <https://doi.org/10.3847/0067-0049/225/1/4>
- Koukkari, P. (2014). *Introduction to constrained Gibbs energy methods in process and materials research*. VTT Technical Research Centre of Finland. VTT Technology No. 160. <https://publications.vtt.fi/pdf/technology/2014/T160.pdf>
- van Krevelen, D. W., & Chermis, H. A. G. (1951). Estimation of the free enthalpy (Gibbs free energy) of formation of organic compounds from group contributions. *Chemical Engineering Science*, 1(2), 66–80. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(51\)85002-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(51)85002-4)
- Sanford, G., & McBride, B. J. (1994). *Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications*. NASA reference publication, 1311.
- Stull, D. R., Westrum Jr., E. F., & Sinke, G. C. (1969). *The Chemical Thermodynamics of Organic Compounds*. New York: J. Wiley and Sons, Inc.

Tribus, M. (1961). *Thermostatistics and thermodynamics: an introduction to energy, information and states of matter, with engineering applications*. Princeton: D. Van Nostrand Company Inc.

Стаття надійшла:
28.05.2024 р.

Roman-Danyil KUCHER, Oksana SENIV

Institute of Geology and Geochemistry of Combustible Minerals
of National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, Ukraine,
e-mail: igggk@mail.lviv.ua

**INNOVATIVE STUDY COMPLEX
OF COMPLEXLY STRUCTURED HYDROCARBON RESERVOIR ROCKS,
BASED ON PETROPHYSICAL AND GEOCHEMICAL PARAMETERS
(on the example of the Boryslav-Pokuttia zone of the Pre-Carpathian depression)**

The article examines methods of studying the capacity-filtration properties of reservoir rocks of hydrocarbon deposits and transformation processes and the state of kerogen depletion within the Boryslav-Pokuttia zone of the Pre-Carpathian depression.

The complex stressed state of rocks, which arises because of the action of geodynamic stresses, and the processes of catagenetic changes cause the development of secondary pore-crack and crack-cavernous reservoirs. Crack formation is caused by deformation and depends on the mechanical properties of rocks. The development of traps, pore-crack and crack-cavernous reservoirs is associated with rock loosening zones, which tend to tectonic disturbances and to places of intrusion of fluids from great depths into the sedimentary layer. At the same time, two multidirectional processes – thermal degradation and consolidation under the influence of pressure – cause changes that occur in the structure of kerogen during its evolution.

Based on the results of the analysis of the actual and theoretical material, the optimal methodical set of studies of the most important characteristics of the reservoirs and the processes of kerogen evolution for the considered zone is substantiated. An analysis of the geological and petrophysical characteristics of the Oligocene deposits of the Inner Zone of the Pre-Carpathian Trough was carried out and database were formed.

It has been established that pore-crack and crack reservoirs have a complex structure, and their distribution and capacity are controlled by two factors of different nature – lithological-facies and structural-deformation. It was found that thermodynamic modelling models – maximization of entropy and constants of independent chemical reactions – provide reliable results of the distribution of elements between the components of complex heterogeneous and homogeneous geochemical systems. It is shown that the chosen method of calculating the Gibbs energy of individual components of geochemical systems has sufficient accuracy for use in the above models.

Keywords: Boryslav-Pokuttia zone, complicated reservoir rocks, petrophysical and geochemical parameters.