

古生物有机质演化热动力学定量计算刍议

张学梅^{1*}, 魏亚玲², 王立岩³, 吴斌⁴, 马青华¹, 李东^{1#}

¹西安思源学院能源及化工大数据应用教学研究中心, 陕西 西安

²宁夏叁方煤质检测科技有限公司, 宁夏 银川

³福建省121地质大队, 福建 龙岩

⁴新疆煤田地质局, 新疆 乌鲁木齐

收稿日期: 2023年11月1日; 录用日期: 2024年1月8日; 发布日期: 2024年1月15日

摘要

以煤变质热动力学方程为蓝本, 修正建立了有机质演化热动力学方程。该方程以无争议的镜质体反射率和岩层绝对年龄为自变量, 求解古地温。并以一口包含中生界和古近系之间的不整合面探井实测数据进行验证。实测数据中的最高古地温被定为参考温度。结果表明: 对于古近系构造层15个测点, 得到的计算温度与参考温度的平均相对误差为0.71%; 对于古生界构造层14个测点, 得到的计算温度与参考温度的平均相对误差为0.31%。计算结果与实测数据分别用镜质体反射率-时间-古地温三维曲面和立体点来表示。

关键词

热动力学, 古地温, 镜质体反射率, 时间

A Preliminary Discussion on Quantitative Calculation of the Thermal Dynamics of Organic Matter Evolution in Paleontology

Xuemei Zhang^{1*}, Yaling Wei², Liyan Wang³, Bing Wu⁴, Qinghua Ma¹, Dong Li^{1#}

¹Energy and Chemical Engineering Research Center, Xi'an Siyuan University, Xi'an Shaanxi

²Ningxia Sanfang Coal Quality Testing Technology Co., Ltd., Yinchuan Ningxia

³121 Geological Brigade of Fujian Province, Longyan Fujian

⁴Xinjiang Coalfield Geology Bureau, Urumqi Xinjiang

Received: Nov. 1st, 2023; accepted: Jan. 8th, 2024; published: Jan. 15th, 2024

*第一作者。

#通讯作者。

文章引用: 张学梅, 魏亚玲, 王立岩, 吴斌, 马青华, 李东. 古生物有机质演化热动力学定量计算刍议[J]. 自然科学, 2024, 12(1): 113-121. DOI: 10.12677/ojns.2024.121014

Abstract

The thermal dynamic equation of organic matter evolution is modified based on the thermal dynamic equation of coal metamorphism. The equation takes the undisputed Vitrinite reflectance and Geologic age as independent variables to calculate the paleotemperature. And a measured data of the unconformity surface exploration well between the Paleozoic erathem and Paleogene system for verification. The highest paleotemperature in the measured data is considered as the reference temperature. The results show that for 15 measurement points of the Paleogene system, the calculated temperature mean relative error against the reference temperature is 0.71%. For the 14 measurement points of the Paleozoic erathem, the calculated temperature mean relative error against the reference temperature is 0.31%. The calculated results and measured data are represented by the three-dimensional surface and solid point of vitrinite reflectance time paleotemperature, respectively.

Keywords

Thermal Dynamics, Paleotemperature, Vitrinite Reflectance, Geologic Age

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

为了正确了解连续沉积的地层中固体有机质(煤)或气液体有机质(煤层气、油、气)的时空分布、运移和储存,必须研究该地层的现今热状态和热历史。在有机质变质、演化和成熟漫长过程中,温度和时间是两个最为重要的参数。由于镜质组在沉积有机质变质、演化和成熟过程中对温度和时间的影响效应最为敏感,且其变化具有不可逆性,故镜质组反射率被用于客观反映盆地构造变化过程和热历史,如最大埋深、古地温信息,以及变质作用过程中经历的最高古地温信息。从早期包含三个变量的研究有将有机成熟度、受热温度与有效受热时间三者的定量关系做成了对应关系图谱[1](后经 Teichmuller 校正[2]),经 Hood [3]提出一个有机质标尺(LOM)、最高古地温(t_{\max})和有效受热时间(t_{eff})关系图谱[3],到几种拟合时间-温度-有机质镜质组反射率的计算法[4][5][6][7]。镜质组反射率已成为反映沉积有机质有机成熟度或煤化程度的重要指标,用于沉积地层地史时期古地温推算和地层剥蚀厚度恢复。本文将以吴冲龙[8]煤变质热动力学方程为蓝本,修正建立有机质演化热动力学方程,并以 Dow [9]关于印度尼西亚一口包含中生界和古近系之间的不整合面探井实测数据进行验证、绘图。

2. 演化热动力学方程

2.1. 煤变质热动力学方程

以“杨起煤变质理论”为代表的文章[10][11]科学系统地描述煤变质的种类、现象和特征。吴冲龙和杨起根据地热学与化学动力学的一般原理,参照 Bostick 曲线和我国中、新生界实测数据,采用双重回归的方法来建立温度-时间-反射率的三变量经验公式[12],如方程(1)所示:

$$\ln(T - 273) = \frac{646.32}{\ln t + 111.85} - \frac{0.492t^{0.093}}{R_0} \quad (1)$$

式中： t ：开始用“岩层绝对年龄”然后用“有效受热时间”，百万年； R_0 ：镜质体反射率，%， T ：计算的热力学温度，K。

因为上述方程用了时间这个变量，所以是动力学方程。加之发生煤变质的原因是以温度为变量的热源，所以称为热动力学方程。

对于该方程的三个变量都是有科学定义连续函数。煤的镜质体反射率的测定方法参照国家标准[13]。所以该数据从时间上看是现在测的，从标准上看是科学的可重复的，因此镜质体反射率这个变量是无争议的。

如果是用“岩层绝对年龄”即地质年龄来代表时间，则时间这个变量是无争议的。如我国最早的煤炭资源形成期古生代石炭纪晚期至二叠纪早期的时间是距今约 3.20 亿年~2.78 亿年，基本上分布在黄河流域，且煤种范围从长焰煤到无烟煤，这是无争议的。但如果用“有效受热时间”却会产生某些争议。尽管如此，“岩层绝对年龄”是长于“有效受热时间”。

由此可见，方程(1)温度是唯一不确定需要求解的因变量。用二个无争议的自变量(镜质组反射率与岩层绝对年龄)求得有争议的因变量(古地温)是合理的。需要注意的是：对应岩层绝对年龄要达到特定的变质程度所需的古地温是最低古地温。近几年来，煤变质热动力学方程也被用于计算已知煤层绝对年龄并测得其镜质体反射率的煤的最低变质温度和定量比较提高温度和延长这两个因素中的哪一个因素对提高煤变质程度的影响大[14] [15]。

2.2. 有机质演化热动力学方程

因为古生物中的古动物和微体古生物演化成油气藏，而古生物中的古植物则演化变质为煤，所以有机质演化与煤变质的现今热状态、热历史和机理有相似性。煤以及煤层气的研究中也采用油气勘探开发的有机质温度 - 时间 - 反射率关系图谱[16] [17] [18]。本文先假定有机质演化热动力学方程与煤变质热动力学方程相同的形式，但其所具有的系数是待定的，如方程(2)所示：

$$\ln(T - 273) = \frac{A}{\ln t + D} - \frac{Ct^B}{R_0} \quad (2)$$

式中： t ：岩层绝对年龄，百万年； R_0 ：镜质体反射率，%， T ：计算的热力学温度，K。 A ， B ， C ， D 则为四个待定系数。

2.3. 应用实例

Dow [9]发表一口位于印度尼西亚的探井实测数据。井下 3.6 km 处为中生界和古近系之间的不整合面。表 1 为实测该井古近系构造层(15 个测点)和古生界各构造层(14 个测点)的镜质组反射率及最高古地温数据。这组数据曾经被许多学者讨论过[6] [19] [20] [21]。

Table 1. Measured data from an exploratory well in Indonesia

表 1. 印度尼西亚的一口探井实测数据

古近系 6500 万~2350 万年			古生界 250~66 百万年		
深度/m	R_0 /%	最高温/°C	深度/m	R_0 /%	最高温/°C
1250	0.28	35.7	3650	0.95	149.56
1350	0.26	35.9	3680	1	150.42
1450	0.32	52.38	3850	1.15	159.68
1650	0.34	58.13	3900	1.2	165.71

续表

1800	0.35	60.87	4000	1.35	170
2100	0.38	68.68	4080	1.25	169.54
2200	0.37	68.7	4150	1.3	172
2300	0.4	71.54	4250	1.35	174.88
2450	0.4	71.58	4300	1.4	176.33
2550	0.42	76.16	4400	1.5	182.87
2650	0.42	76.16	4480	1.65	189.6
2700	0.44	80.58	4550	1.7	191.9
2850	0.49	88.78	4700	1.95	199.75
2950	0.54	97.99	4770	2	202.15
3100	0.52	94.42			

该井的古近系构造层和古生界些构造层的镜质组反射率及最高古地温将分别被用于求解方程(2)中的代定系数 A , B , C , 和 D 。将求出各构造层的系数代入方程(2)求相应测点的温度。将表 1 中的最高古地温记为 $T_{参考}$, 将代入各系数所求的温度记为 $T_{计算}$ 。按以下方程(3)、(4)计算相对误差和平均相对误差。

$$\delta = \frac{|T_{参考} - T_{计算}|}{T_{参考}} * 100\% \quad (3)$$

$$\text{平均相对误差} = \frac{\sum_{i=1}^n \delta_i}{n} \quad (4)$$

式中, δ 是相对误差, %; n 是各构造层的测试点数。小的平均相对误差意味着所选定的系数 A , B , C , 和 D 比较合适。如此重复选定新系数 A , B , C , 和 D , 代入方程(2)求新的温度 $T_{计算}$, 直至达到满意的平均相对误差。

2.4. 古近系和古生界的时间与镜质组反射率对应关系

将反应速率与时间为线性增加的原理理解为: 对同一构造层地层中的镜质体来说其反射率(R_0)与时间存在正线性相关关系。对于不整合面上覆的古近系(Paleogene System)构造层而言, 自下而上包括古新统、始新统和渐新统。中国古近系以陆相为主, 仅在中国边缘地带如台湾、西藏等地有海相沉积。湿润气候条件下凹陷盆地的含油、煤堆积, 是中国较重要的含油、煤地层, 如辽宁的抚顺组、黑龙江的三姓组、广东茂名的油柑窝组, 在山东的昌乐也发现这一类型沉积; 从时间上可以从 6 千 5 百万年起至 2 千 3 百 50 万年止。

在古近系构造层, 任何镜质组反射率值 R_0 的岩层绝对年龄 t 为:

$$t = \frac{0.54 - 0.26}{65 - 23.5} (R_0 - 0.26) + 23.5 \quad (5)$$

对于不整合面下伏的中生界(Paleozoic erathem)构造层而言, 自下而上包括三叠系、侏罗系和白垩系。中国中生界以陆相为主。三叠系分南方和北方两种类型, 南方为海相, 北方为陆相。侏罗系、白垩系仅在中国边缘地带具有海相沉积, 其余广大地区全为陆相沉积, 已无南北之分, 而为东西两区所代替。沉积矿产有煤、石油、油页岩、岩盐、石膏及沉积铁矿和铜矿等。从时间上可以从 2 亿五千万年起至 6 千 6 百万年止。

在古生界构造层, 任何镜质组反射率值 R_0 的岩层绝对年龄 t 为:

$$t = \frac{2.0 - 0.95}{250 - 66} (R_0 - 0.95) + 66 \quad (6)$$

3. 结果与讨论

3.1. 构造层的影响

控制 R_0 值大小的是地层中有机质的埋藏温度和时间以及有机质的类型。当 R_0 数据随深度的分布在非整合面处存在跳跃而不连续时, 方程(2)就不适用了。这种不连续性意味着上覆古近系和下伏古生界属于不同构造层, 因此必须将古近系和古生界两个构造层分别进行计算和验证。在煤田勘探中的这种镜质组反射率的跳跃而不连续性一般出现在断层或褶皱。表 2 列出煤变质热动力学参数和最终选定的古近系有机质热动力学参数以及古生界有机质热动力学参数。

Table 2. Thermodynamic parameters of coal at different ages

表 2. 不同年龄煤的热动力学参数

项目	A	B	C	D
煤变质热动力学参数	646.320	0.093	0.492	111.850
古近系有机质热动力学参数	680.000	0.068	0.492	111.850
古生界有机质热动力学参数	673.000	0.100	0.492	111.850

3.2. 有机质热动力学方程的验证

按前面所述, 将最终选定的古近系有机质热动力学参数和古生界有机质热动力学参数分别代入相应结构层, 计算温度后再计算相对平均误差。表 3 列出古近系镜质组反射率、岩层绝对年龄、计算古地温、参考古地温、相对误差和平均相对误差。

Table 3. Paleogene R_0 , layer absolute age, calculated paleotemperature, reference paleotemperature, relative error, and average relative error

表 3. 古近系 R_0 、层绝对年龄、计算古地温、参考古地温、相对误差和平均相对误差

$R_0/\%$	$t/\text{百万年}$	计算古地温/K	参考古地温/K	相对误差/%
0.28	26.46	313.71	308.85	1.57
0.26	23.50	308.25	309.05	0.26
0.32	32.39	324.65	325.53	0.27
0.34	35.36	330.05	331.28	0.37
0.35	36.84	332.72	334.02	0.39
0.38	41.29	340.56	341.83	0.37
0.37	39.80	337.97	341.85	1.13
0.4	44.25	345.64	344.69	0.28
0.4	44.25	345.64	344.73	0.26
0.42	47.21	350.59	349.31	0.37
0.42	47.21	350.59	349.31	0.37
0.44	50.18	355.41	353.73	0.47

续表

0.49	57.59	366.83	361.93	1.36
0.54	65.00	377.40	371.14	1.69
0.52	62.04	373.27	367.57	1.55
平均相对误差/%				0.71

从表 3 的数据可以看出, 对于古近系构造层, 用最终选定的系数计算得到的温度与参考温度的平均相对误差为 0.71%。

表 4 列出古生界镜质组反射率、岩层绝对年龄、计算古地温、参考古地温、相对误差和平均相对误差。

Table 4. Paleozoic R_0 , layer absolute age, calculated paleotemperature, reference paleotemperature, relative error, and average relative error

表 4. 古生界 R_0 、层绝对年龄、计算古地温、参考古地温、相对误差和平均相对误差

$R_0/\%$	$t/\text{百万年}$	计算古地温/K	参考古地温/K	相对误差/%
0.95	66.00	423.02	422.71	0.07
1.00	74.76	426.63	423.57	0.72
1.15	101.05	436.76	432.83	0.91
1.20	109.81	439.86	438.86	0.23
1.35	136.10	448.37	443.15	1.18
1.25	118.57	442.83	442.69	0.03
1.30	127.33	445.66	445.15	0.12
1.35	136.10	448.37	448.03	0.08
1.40	144.86	450.96	449.48	0.33
1.50	162.38	455.79	456.02	0.05
1.65	188.67	462.26	462.75	0.11
1.70	197.43	464.24	465.05	0.17
1.95	241.24	472.96	472.9	0.01
2.00	250.00	474.50	475.3	0.17
平均相对误差/%				0.30

从表 4 的数据可以看出, 对于古生界构造层, 用最终选定的系数计算得到的温度与参考温度的平均相对误差为 0.31%。

由此可见, 古近系和古生界最终选定的系数是满意的。

3.3. 有机质热动力学方程的可视性

方程(2)是镜质组反射率和岩层绝对年龄为自变量, 古地温为因变量的三元非线性方程, 所以可以用三维曲面来表示。而表 1 所列的参考温度在这三维曲面就是一连串的立体点。图 1 显示古近系构造层的温度 - 时间 - 镜质组反射率的关系图。不整合面上覆的古近系所有的参考温度点也在图中表示。

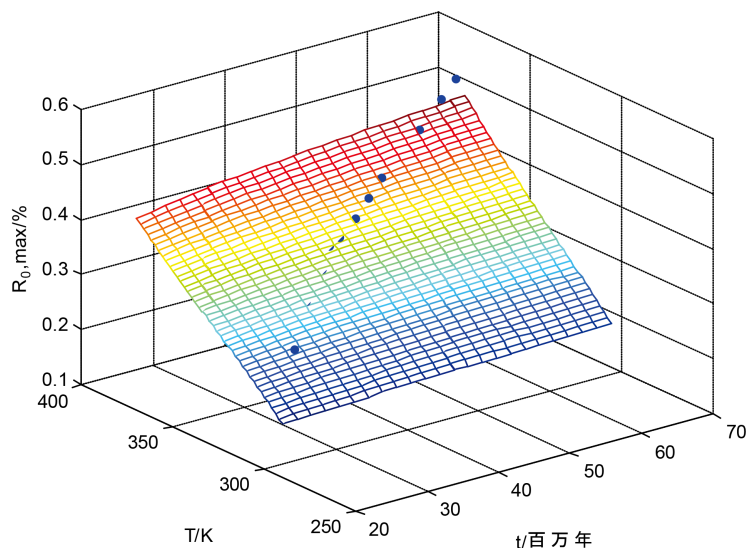


Figure 1. Relationship between temperature, time, and degree of organic matter metamorphism in the Paleogene tectonic layer

图 1. 古近系构造层温度、时间及有机质变质程度关系图

图 2 显示古生界构造层的温度 - 时间 - 镜质体反射率的关系图。不整合面上伏的古生界所有的参考温度点也在图中表示。

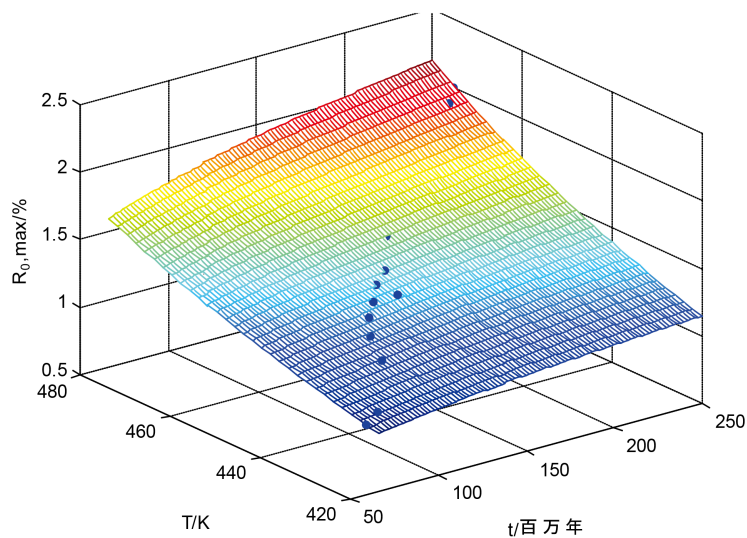


Figure 2. Relationship between temperature, time, and degree of organic matter metamorphism in the Paleozoic tectonic layer

图 2. 古近系构造层温度、时间及有机质变质程度关系图

从图 1 和图 2 中的曲面变化的趋势可以看出古地温和古地质时间与镜质体反射率是正相关，即随着温度的升高，镜质体反射率是增大；随着时间的延长，镜质体反射率也是增大。同时还可以看出温度对镜质体反射率的影响远大于时间的影响。

图 3 显示古近系和古生界构造层的所有列于表 1 的参考温度，其中的时间坐标是按古近系和古生界的时间与镜质体反射率对应关系进行赋值。

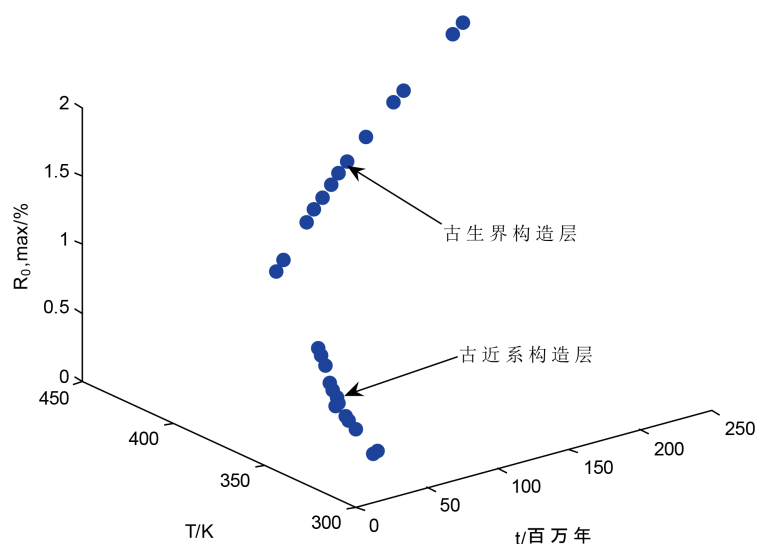


Figure 3. Relationship between reference temperature, time, and organic matter metamorphism degree of the Paleogene and Paleozoic tectonic layers

图 3. 古近系和古生界构造层参考温度、时间及有机质变质程度关系图

4. 结论

(1) 有机质演化热动力学方程与煤变质热动力学方程相同的形式。

(2) 用“岩层绝对年龄”即地质年龄来代表时间，则时间这个变量是无争议的。从时间的长短来看，“岩层绝对年龄”是长于“有效受热时间”，也就是“岩层绝对年龄”包括了“有效受热时间”。对应岩层绝对年龄要达到特定的变质程度所需的古地温是最低古地温。

(3) 对于古近系构造层，用最终选定的系数计算得到的温度与参考温度的平均相对误差为 0.71%。对于古生界构造层，用最终选定的系数计算得到的温度与参考温度的平均相对误差为 0.31%。

(4) 以镜质组反射率和岩层绝对年龄为自变量，古地温为因变量的三元非线性方程，所以可以用三维曲面来表示。

基金项目

新疆煤田地质局三类科研项目“新疆多煤层、复杂煤层样品采集成果精度研究”(编号: 2022-KY05) 资助; 陕西省教育厅一般专项科研计划项目“榆神矿区富油煤低温干馏动力学研究”(编号: 23JK0611) 资助。

参考文献

- [1] Karweil, J. (1955) Die Metamorphose der Kohlen vom Standpunkt der Physikalischen Chemie. *Zeitschrift der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften*, **107**, 132-139. <https://doi.org/10.1127/zdgg/107/1956/132>
- [2] Teichmüller, M. (1989) The Genesis of Coal from the Viewpoint of Coal Petrology. *International Journal of Coal Geology*, **12**, 1-87. [https://doi.org/10.1016/0166-5162\(89\)90047-5](https://doi.org/10.1016/0166-5162(89)90047-5)
- [3] Hood, A., Gutjahr, C.C.M. and Heacock, R.H. (1975) Organic Metamorphism and the Generation of Petroleum. *AAPG Bulletin*, **59**, 986-996. <https://doi.org/10.1306/83D91F06-16C7-11D7-8645000102C1865D>
- [4] 冉启贵, 胡国艺, 陈发景. 镜质体反射率的热史反演[J]. 石油勘探与开发, 1998, 25(6): 46-49.
- [5] 蒋国豪, 胡瑞忠, 方维萱. 镜质体反射率(RO)推算古地温研究进展[J]. 地质地球化学, 2001(1): 40-45.
- [6] 胡圣标, 汪集斌, 张容燕. 利用镜质体反射率数据估算地层剥蚀厚度[J]. 石油勘探与开发, 1999, 26(4): 42-45.

- [7] 肖贤明, 刘祖发, 刘德汉, 等. 含油、气盆地成烃史恢复新方法: 地质地球化学剖面法[J]. 科学通报, 2000(S1): 2725-2730.
- [8] 吴冲龙, 杨起, 刘刚, 等. 煤变质作用热动力学分析的原理与方法[J]. 煤炭学报, 1991, 22(3): 225-229.
- [9] Dow, W.G. (1977) Kerogen Studies and Geological Interpretations. *Journal of Geochemical Exploration*, **63**, 79-99. [https://doi.org/10.1016/0375-6742\(77\)90078-4](https://doi.org/10.1016/0375-6742(77)90078-4)
- [10] 杨起. 中国煤变质研究[J]. 地球科学, 1989, 14(4): 341-345.
- [11] 杨起, 吴冲龙, 汤达祯, 等. 中国煤变质作用[J]. 地球科学, 1996, 21(3): 311-319.
- [12] 杨起. 中国煤的叠加变质作用[J]. 地学前缘, 1999(S1): 1-8.
- [13] 煤炭科学研究总院西安研究院. GB/T 6948-2008. 煤的镜质体反射率显微镜测定方法[S]. 北京: 中国标准出版社, 2008.
- [14] 张学梅, 李东, 马青华, 郝静远. 煤变质热动力学方程的初步评判[J]. 地球科学前沿, 2021, 11(6): 827-834.
- [15] 张学梅, 李东, 马青华, 郝静远. 温度-时间-煤变质程度的定量计算[J]. 地球科学前沿, 2021, 11(7): 937-946.
- [16] 谭勇杰. 煤变质古地温恢复方法探讨[J]. 煤田地质与勘探, 1989(2): 30-36.
- [17] 黄克兴, 谭勇杰. 四川南桐煤田煤变质的古地温场研究[J]. 煤炭学报, 1990, 15(4): 54-62.
- [18] 胡善亭, 杨起, 潘治贵. 鸡西煤田煤化作用的古地温场研究[J]. 中国煤炭, 1996(2): 18-21.
- [19] 佟彦明, 宋立军, 曾少军, 等. 利用镜质体反射率恢复地层剥蚀厚度的新方法[J]. 古地理学报, 2005, 7(3): 417-424.
- [20] 刘东娜, 马美玲. 镜质组反射率在推算古地温和恢复地层剥蚀厚度方面的研究与进展[J]. 太原理工大学学报, 2014, 45(5): 643-648.
- [21] 金成林, 周晓峰, 乔诚, 等. 利用古地温标法恢复地层的剥蚀厚度[J]. 石化技术, 2015(7): 219-220.