



**Борисов В.Е., Критский Б.В.,
Марченко Н.А., Митрушкин Д.А.,
Савенков Е.Б.**

Композиционная
неизотермическая модель
фильтрации в пористой
среде с учетом химических
реакций и активной твердой
фазы

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Композиционная неизотермическая модель фильтрации в пористой среде с учетом химических реакций и активной твердой фазы / В.Е.Борисов [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2013. № 91. 32 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-91>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. КЕЛДЫША

В.Е. Борисов, Б.В. Критский, Н.А. Марченко,
Д.А. Митрушкин, Е.Б. Савенков

**Композиционная неизотермическая модель фильтрации
в пористой среде с учетом химических реакций
и активной твердой фазы**

Москва, 2013

В.Е. Борисов, Б.В. Критский, Н.А. Марченко, Д.А. Митрушкин, Е.Б. Савенков, Композиционная неизотермическая модель фильтрации в пористой среде с учетом химических реакций и активной твердой фазы

Аннотация. Данная работа посвящена описанию математической модели многофазной многокомпонентной фильтрации углеводородов в пласте с учетом композиционных и термических эффектов, химических реакций и процессов адсорбции, которая может быть использована при моделировании процессов разработки нефтегазовых месторождений. В работе дано краткое и замкнутое описание модели, пригодное для дальнейшего анализа, в частности, для построения вычислительных алгоритмов.

Ключевые слова: неизотермическая пластовая фильтрация, композиционная модель, химические реакции, активная твердая фаза.

V.E. Borisov, B.V. Kritskiy, N.A. Marchenko, D.A. Mitrushkin, E.B. Savenkov, Non-isothermal compositional flow model with chemical reactions and active solid phase for reservoir simulation

Abstract. The goal of this paper is to provide comprehensive description of non-isothermal model for compositional flow simulation in subsurface media suitable for further analysis and construction of numerical algorithms. The model accounts for compositional and thermal effects, chemical reactions and adsorption, diffusion and mechanical dispersion, as well as active solid phase, which can participate in chemical reactions.

Key words and phrases: reservoir simulation, non-isothermal compositional model, chemical reactions, active solid phase.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 12-01-00793-а)

Содержание

1	Введение	3
2	Основные допущения	4
3	Структура компонентного и фазового состава	5
4	Структура порового пространства	6
5	Описание фазового и компонентного состава	6
6	Система законов сохранения массы и энергии	9
7	Пустотность и пористость	10
8	Капиллярные силы	11
9	Диффузионный поток	11
10	Тепловой поток	12
11	Свойства флюида и фазовое равновесие	13
12	Энтальпия и внутренняя энергия	24
13	Химические реакции	26
14	Адсорбция	28
15	Учет скважин	29

1 Введение

Данная работа посвящена описанию математической модели многофазной многокомпонентной фильтрации углеводородов в пласте с учетом композиционных и термических эффектов, которая может быть использована при моделировании процессов разработки нефтегазовых месторождений. Предложенная модель позволяет численно моделировать такие современные методы добычи углеводородов, как закачка теплоносителя в пласт, внутрислоевогорение, полимерное заводнение и другие. В работе дано краткое и замкнутое описание модели, пригодное для дальнейшего анализа, в частности, для построения вычислительных алгоритмов. Различные детали, связанные с построением композиционной модели, рассмотрены, например, в [1].

К особенностям данной модели можно отнести:

- наличие 4 активных фаз (вода, нефть, газ, твердая фаза) с произвольным количеством подвижных и неподвижных компонент;
- учет неподвижной активной твердой фазы (Компоненты, присутствующие в твердой фазе, не содержатся в подвижных фазах. В результате химических реакций из твердой фазы могут появляться подвижные компоненты и наоборот);

- учет переноса энергии за счет конвективных потоков и процесса теплопроводности;
- учет химических реакций между компонентами, образующими подвижные и неподвижную фазы (для описания химической кинетики используется закон Аррениуса);
- учет эффектов молекулярной диффузии, механической дисперсии и адсорбции.

2 Основные допущения

В основу математической модели положены некоторые допущения.

- Исследуемая многофазная система включает в себя четыре активные фазы:

W — жидкая водная фаза,

L — жидкая углеводородная фаза,

G — газовая фаза,

S — твердая фаза —

и одну инертную (неактивную) твердую фазу:

R — скелет.

- Учитывается возможность присутствия нефтяных и газовых компонент в водной фазе.
- Изменение количества вещества и компонентного состава твердой фазы возможно только в ходе химических реакций.
- Изменение пористости связано со сжимаемостью скелета и изменением объема активной твердой фазы за счет химических реакций.
- Компоненты твердой фазы не могут присутствовать в подвижной фазе. И наоборот — компоненты подвижной фазы не могут содержаться в твердой фазе.
- Предполагается наличие локального термодинамического равновесия, которое заключается в равенстве температур фаз и химических потенциалов компонент в подвижных фазах.
- Фазовые скорости фильтрации флюидов определяются законом Дарси. Тепловые потоки подчиняются закону Фурье.

3 Структура компонентного и фазового состава

Будем считать, что в поровом пространстве присутствуют компоненты четырех типов.

1. **Нефтяной компонент** может быть чистым компонентом (состоять из молекул одного типа, например, бензол C_6H_6), либо псевдокомпонентом, то есть объединять в себе группу чистых компонентов. Такое объединение может производиться на основе различных критериев: псевдокомпонент может состоять из чистых компонент с заданным диапазоном молекулярного веса, или из чистых компонент, которые переходят в газообразную фазу при изменении температуры в заданном диапазоне.
2. **Водный компонент** является чистым компонентом: он состоит из одного химического соединения — воды H_2O . Водный компонент может находиться в газовой, нефтяной и водной фазах.
3. **Газовый компонент**. Обычно к ним относят компоненты, которые при стандартных условиях являются газами. Газовый компонент может быть конденсируемым или неконденсируемым. Конденсируемый компонент может присутствовать как в жидкой, так и в газовой фазе; неконденсируемый — только в газовой. Примерами неконденсируемых компонентов являются кислород O_2 , азот N_2 , углекислый газ CO .
4. **Твердый компонент** — неподвижный компонент, входящий в состав твердой фазы, например, это может быть кокс, «выпавший» на инертный скальный скелет в ходе крекинга тяжелых компонент, или подвижный компонент, часть которого может быть адсорбирована твердой фазой, то есть стать неподвижной. Подвижная и неподвижная часть адсорбированного компонента находятся в термодинамическом равновесии, которое описывается с помощью изотерм Ленгмюра.

Будем считать, что подвижные компоненты имеют номера от 1 до N_f , твердые компоненты имеют номера с $N_f + 1$ до N .

Фазы $\alpha = W, L, G$, состоящие из подвижных компонент, будем также называть подвижными.

Особенностью данной модели флюида является наличие двух жидких фаз, содержащих некоторые одинаковые компоненты, но различных по составу. Например, углеводородный и водный компоненты могут одновременно находиться как в нефтяной, так и в водной фазах.

Компонентный состав фаз определяется условиями фазового равновесия.

4 Структура порового пространства

Пусть элементарный объем V пространства, включающий скелет, флюиды и активную твердую фазу, состоит из следующих пяти частей:

$$V = V_R + V_S + V_W + V_L + V_G,$$

где V_R — объем скелета (инертной твердой фазы), V_S — объем, занятый активной твердой фазой, V_W — объем, занятый жидкой водной фазой, V_L — объем, занятый жидкой углеводородной фазой, V_G — объем, занятый газообразной фазой.

Тогда объем, занятый флюидом, будет равен:

$$V_f = V_W + V_L + V_G,$$

а пустотный объем:

$$V_v = V - V_R = V_S + V_f.$$

Введем понятия пустотности ϕ_v — доли объема, занятой активными фазами $\alpha = W, L, G, S$, и пористости ϕ_f — доли объема, занятой подвижными фазами $\alpha = W, L, G$:

$$\phi_v = V_v/V, \quad \phi_f = V_f/V.$$

5 Описание фазового и компонентного состава

Насыщенность. Введем понятие насыщенности (объемной концентрации) подвижных фаз следующим образом:

$$S_\alpha = V_\alpha/V_f, \quad \alpha = W, L, G; \quad \sum_{\alpha=W,L,G} S_\alpha = 1. \quad (1)$$

Насыщенность всего флюида (занимающего объем V_f) и активной твердой фазы (занимающей объем V_S) относительно пустотного объема V_v определяются как:

$$\tilde{S}_S = V_S/V_v, \quad \tilde{S}_f = V_f/V_v; \quad \tilde{S}_S + \tilde{S}_f = 1. \quad (2)$$

С учетом введенных определений имеем следующую связь между пустотностью и пористостью:

$$\phi_f = \frac{V_f}{V} = \frac{V_f}{V_v} \cdot \frac{V_v}{V} = \phi_v \cdot \tilde{S}_f = \phi_v \cdot (1 - \tilde{S}_S). \quad (3)$$

Компонентный состав фаз. Пусть n_i — число молей i -го компонента, $i = \overline{1, N}$; n_α — число молей фазы $\alpha = W, L, G, S$, $n_{i\alpha}$ — число молей компонента i в фазе α .

При использовании введенных обозначений справедливы следующие соотношения:

$$n_\alpha = \sum_{i=1}^N n_{i\alpha}, \quad n_i = \sum_{\alpha=W,L,G,S} n_{i\alpha}. \quad (4)$$

Полное число молей подвижной фазы есть:

$$n_f = \sum_{i=1}^{N_f} n_i = \sum_{\alpha=W,L,G} n_\alpha = \sum_{i=\overline{1, N_f}, \alpha=W,L,G} n_{i\alpha}. \quad (5)$$

Молярные концентрации. Молярная концентрация компонента i в фазе α определяется как

$$x_{i\alpha} = \frac{n_{i\alpha}}{n_\alpha}, \quad n_\alpha > 0, \quad \alpha = W, L, G, S. \quad (6)$$

Из соотношения (4) следует, что для каждой фазы справедливо следующее равенство:

$$\sum_{i=1}^N x_{i\alpha} = 1, \quad \alpha = W, L, G, S. \quad (7)$$

Молярные концентрации подвижных фаз определим как

$$C_\alpha = n_\alpha/n_f, \quad \alpha = W, L, G; \quad \sum_{\alpha=W,L,G} C_\alpha = 1. \quad (8)$$

Молярные плотности. Молярная плотность компонента i подвижных фаз $\alpha = W, L, G$ определяется как

$$m_i = n_i/V_f, \quad i = \overline{1, N_f}; \quad (9)$$

Молярная плотность компонента i твердой фазы $\alpha = S$:

$$m_i = n_i/V_v, \quad i = \overline{N_f + 1, N}. \quad (10)$$

Отдельно введем обозначение полной молярной плотности подвижных компонент:

$$m_{tot} = \sum_{i=1}^{N_f} m_i = n_f/V_f. \quad (11)$$

Молярная плотность фазы $\alpha = W, L, G, S$ определяется как

$$b_\alpha = n_\alpha/V_\alpha. \quad (12)$$

Полные молярные концентрации. Полные концентрации подвижных компонент по определению равны:

$$Z_i \equiv m_i / \sum_{i=1}^{N_f} m_i = m_i / m_{tot}, \quad i = \overline{1, N_f}. \quad (13)$$

Они выражаются через концентрации компонент в фазах и концентрации фаз как

$$Z_i = \sum_{\alpha=W,L,G} x_{i\alpha} C_\alpha = x_{iW} C_W + x_{iL} C_L + x_{iG} C_G. \quad (14)$$

Вспомогательные соотношения. Выразим насыщенности подвижных фаз через полную молярную плотность подвижных компонент, молярные концентрации и молярные плотности подвижных фаз:

$$S_\alpha = \frac{V_\alpha}{V_f} = \frac{n_\alpha / b_\alpha}{n_f / m_{tot}} = m_{tot} \frac{n_\alpha / n_f}{b_\alpha} = m_{tot} \frac{C_\alpha}{b_\alpha}, \quad \alpha = W, L, G, \quad (15)$$

или

$$C_\alpha = S_\alpha b_\alpha m_{tot}, \quad \alpha = W, L, G.$$

Суммируя выражения (15) по всем подвижным фазам, получаем:

$$\frac{1}{m_{tot}} = \sum_{\alpha=W,L,G} \frac{C_\alpha}{b_\alpha}. \quad (16)$$

Таким образом, полная молярная плотность m_{tot} определяется с помощью коэффициентов C_α как среднее гармоническое.

Умножив обе части (15) на b_α и суммируя по всем подвижным фазам, получаем:

$$m_{tot} = \sum_{\alpha=W,L,G} b_\alpha S_\alpha. \quad (17)$$

Из (13), (14) и (17) получаем:

$$m_i = \sum_{\alpha=W,L,G} b_\alpha S_\alpha x_{i\alpha}, \quad i = \overline{1, N_f}, \quad (18)$$

Аналогично, для молярных плотностей компонент, составляющих твердую фазу, имеем:

$$m_i = \frac{n_i}{V_v} = \frac{n_i}{n_S} \cdot \frac{n_S}{V_S} \cdot \frac{V_S}{V_v} = b_S x_{iS} \tilde{S}_S, \quad i = \overline{N_f + 1, N} \quad (19)$$

где n_S — число молей всей твердой фазы,

$$n_S = \sum_{i=N_f+1}^N n_i.$$

6 Система законов сохранения массы и энергии

Закон сохранения массы подвижных компонент. Уравнение закона сохранения массы для i -го подвижного компонента имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi_f m_i + \phi_v A_i) + \operatorname{div} \left(\sum_{\alpha=W,L,G} b_\alpha x_{i\alpha} \mathbf{u}_\alpha + \mathbf{D}_{i\alpha} \right) = Q_i^{(m)} + Q_{ch,i}^{(m)}, \quad i = \overline{1, N_f}. \quad (20)$$

Здесь величины m_i выражаются согласно (18), A_i — концентрация адсорбированной доли компонента i , \mathbf{u}_α — скорость фильтрации подвижной фазы $\alpha = W, L, G$, $\mathbf{D}_{i\alpha}$ — диффузионный поток, Q_i^w — интенсивность притока компонента i от внешних источников (скважин), Q_i^{ch} — интенсивность притока компонента i вследствие химических реакций.

Фазовые скорости \mathbf{u}_α подвижных фаз $\alpha = W, L, G$ удовлетворяют закону Дарси:

$$\mathbf{u}_\alpha = -K \frac{k_{r\alpha}(\mathbf{S})}{\mu_\alpha} \nabla \Phi_\alpha, \quad \alpha = W, L, G,$$

где K — абсолютная проницаемость, $k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(\mathbf{S}, T)$ — относительная фазовая проницаемость фазы, $\mu_\alpha = \mu_\alpha(p_\alpha, T, x_{i\alpha})$ — вязкость фазы, $\Phi_\alpha = p_\alpha - \rho_\alpha g z$ — напор, $p_\alpha = p_\alpha(\mathbf{S})$ — поровое давление фазы, ρ_α — массовая плотность фазы, g — ускорение свободного падения, z — глубина.

Вязкость фазы обычно задается как функция концентраций компонент, вязкости которых, в свою очередь, задаются явно.

Зависимости относительных фазовых проницаемостей от насыщенностей и температуры считаются известными и заданы в явном виде, например, с помощью таблиц, корреляций или аналитических моделей.

Закон сохранения массы твердых компонент имеет вид:

$$\frac{d}{dt} (\phi_v m_i) = Q_i^{ch}, \quad i = \overline{N_f + 1, N}, \quad (21)$$

где величины m_i выражаются согласно (19).

Данная система обыкновенных дифференциальных уравнений описывает изменение количества вещества компонентов твердой фазы в ходе химических реакций.

Закон сохранения энергии имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} E + \operatorname{div} \mathcal{F}_E = Q_E, \quad (22)$$

где

$$E = \phi_v \cdot \sum_{\alpha=W,L,G} b_\alpha S_\alpha U_\alpha + \phi_v b_S U_S + (1 - \phi_v) U_R$$

— удельная энергия единицы объема,

$$\mathcal{F}_E = \sum_{\alpha=W,L,G} b_\alpha \mathbf{u}_\alpha H_\alpha + \mathbf{W}$$

— поток энергии, связанный с потоком массы и теплопроводностью,

$$Q_E = Q_E^w + Q_E^{\text{ch}},$$

Q_E^{ch} — приток энергии за счет химических реакций, Q_E^w — приток энергии за счет внешних источников, U_α , H_α — молярные плотности энергии и энтальпии фазы α соответственно, \mathbf{W} — вектор плотности теплового потока.

7 Пустотность и пористость

Пустотность ϕ_v является функцией давления и температуры, будем использовать для нее следующее соотношение:

$$\phi_v = \phi_{v,ref} [1 + c_p(p - p_{ref}) - c_T(T - T_{ref})], \quad (23)$$

где $\phi_{v,ref}$ — опорное значение пустотности при заданных опорных значениях давления $p = p_{ref}$ и температуры $T = T_{ref}$; c_p — коэффициент сжимаемости; c_T — коэффициент температурного расширения.

Так как

$$\frac{m_i}{b_i} = \frac{n_i}{V_v} \cdot \frac{V_i}{n_i} = \frac{V_i}{V_v}, \quad i = \overline{N_f + 1, N},$$

то

$$\sum_{i=N_f+1}^N \frac{m_i}{b_i} = \sum_{i=N_f+1}^N \frac{V_i}{V_v} = \frac{V_S}{V_v} = \tilde{S}_S,$$

где использовался тот факт, что

$$\sum_{i=N_f+1}^N V_i = V_S.$$

Отсюда, используя выражение (3), получим следующую связь между пористостью и пустотностью:

$$\phi_f = \phi_v \tilde{S}_f = \phi_v (1 - \tilde{S}_v) = \phi_v \left(1 - \sum_{i=N_f+1}^N \frac{m_i}{b_i} \right). \quad (24)$$

Отсюда видно, что изменение пористости связано как с изменением пустотности ϕ_v за счет сжимаемости и температурных деформаций инертного скелета, так и с появлением или исчезновением активной твердой фазы за счет химических превращений.

8 Капиллярные силы

Давления жидких фаз связаны между собой выражениями

$$p_\alpha - p_\beta = p_{\alpha\beta}^c(\mathbf{S}, T), \quad \alpha \neq \beta, \quad \alpha, \beta = W, L, G,$$

где $p_{\alpha\beta}^c(\mathbf{S}, T)$ — заданные функции вектора насыщенностей фаз $\mathbf{S} = (S_W, S_L, S_G)$ и температуры. Не все $p_{\alpha\beta}^c$ могут быть заданы независимо, т.к. (для $\alpha \neq \beta \neq \gamma$):

$$p_\alpha - p_\beta = p_{\alpha\beta}^c, \quad p_\beta - p_\gamma = p_{\beta\gamma}^c,$$

откуда

$$p_\alpha - p_\gamma = p_{\alpha\beta}^c + p_{\beta\gamma}^c = p_{\alpha\gamma}^c.$$

В настоящей работе

$$p_L = p_W + p_{LW}^c(S_W), \quad p_G = p_L + p_{GL}^c(S_G), \quad (25)$$

где $p_{LW}^c(S_W, T)$, $p_{GL}^c(S_G, T)$ — капиллярные давления на границе между водной и жидкой углеводородной фазой (WL) и жидкой и газовой углеводородными фазами (LG), соответственно. Эти зависимости считаются заданными функциями насыщенностей.

9 Диффузионный поток

Диффузионный поток $\mathbf{D}_{i\alpha}$ компонента i в фазе α складывается из двух частей [2]:

$$\mathbf{D}_{i\alpha} = \mathbf{D}_{i\alpha}^{diff} + \mathbf{D}_{i\alpha}^{disp}, \quad i = \overline{1, N_f}, \quad \alpha = W, L, G,$$

где $\mathbf{D}_{i\alpha}^{diff}$ — поток за счет молекулярной диффузии, $\mathbf{D}_{i\alpha}^{disp}$ — поток за счет механической дисперсии.

Поток за счет молекулярной диффузии имеет вид:

$$\left(\mathbf{D}_{i\alpha}^{diff} \right)_k = -\phi_f S_\alpha \frac{D_{i\alpha}^*}{F_{ik}} \nabla_k (\rho_\alpha x_{i\alpha}),$$

где k — номер компонента вектора потока, $D_{i\alpha}^*$ — коэффициент молекулярной диффузии для компонента i в фазе α , $F_{\alpha k}$ — коэффициент извилистости для фазы α в направлении k .

Поток за счет механической дисперсии имеет вид:

$$\left(\mathbf{D}_{i\alpha}^{disp}\right)_k = -\phi_f S_\alpha A_{\alpha k} \|u_\alpha\| \nabla_k(\rho_\alpha x_{i\alpha}),$$

где $A_{\alpha k}$ — коэффициент механической дисперсии фазы α в направлении k .
Для диффузионного потока фазы имеем:

$$\mathbf{D}_\alpha = \sum_{i=1}^{N_f} \mathbf{D}_{i\alpha}.$$

10 Тепловой поток

Тепловой поток определяется законом Фурье:

$$\mathbf{W} = -\kappa \nabla T,$$

где $\kappa = \kappa(\mathbf{S}, T)$ — коэффициент теплопроводности. Для вычисления коэффициента теплопроводности обычно используются модели линейного и нелинейного смешивания [3].

Модель линейного смешивания описывается следующим соотношением:

$$\kappa = \phi_f (S_W \kappa_W + S_L \kappa_L + S_G \kappa_G) + (1 - \phi_f) \kappa_R,$$

где κ_α — известный коэффициент теплопроводности фазы $\alpha = W, L, G, R$.

В модели нелинейного смешивания используются корреляции Ананда, учитываются различные виды смачивания породы фазами. Для пары жидкость-порода значение коэффициента равно:

$$\kappa_{LR} = \kappa_L \cdot a^b,$$

где

$$\begin{aligned} \kappa_L &= \frac{S_L \kappa_L + S_W \kappa_W}{S_L + S_W}, \\ a &= \frac{\kappa_R}{\kappa_L}, \\ b &= 0.28 - 0.757 \log_{10} \phi - 0.057 \log_{10} a. \end{aligned}$$

Для пары газ-порода:

$$\kappa_{GR} = \kappa_G \cdot c^d,$$

где

$$\begin{aligned} c &= \frac{\kappa_R}{\kappa_G}, \\ d &= 0.28 - 0.757 \log_{10} \phi - 0.057 \log_{10} c. \end{aligned}$$

Окончательно для газ-жидкость-порода имеем

$$\kappa_{GLR} = (1 - e)\kappa_{GR} + e\kappa_{LR},$$

где $e = \sqrt{S_W + S_L}$.

Дополнительно для случая нелинейного смешивания можно учесть зависимость от температуры. Для этого используется модификация Сомертона [4], учитывающая изменение теплопроводности с ростом температуры. Данная модификация применяется после окончательного вычисления значения коэффициента:

$$\kappa = a - 1.7524 \cdot 10^{-5}(T - T_r)(a - 119616) \cdot b \cdot c,$$

где κ имеет размерность [Дж/м·сут·К], температура T измеряется в Кельвинах. Величины a, b, c, d, e имеют вид:

$$\begin{aligned} a &= \kappa_{GLR}, \\ b &= a^{-0.64}, \\ c &= a \cdot d^e + 110644.8, \\ d &= 1.8 \cdot 10^{-3}T, \\ e &= -3.6784 \cdot 10^{-6}a, \end{aligned}$$

где $T_r = T/T_c$ — приведенная температура, T_c — критическая температура.

11 Свойства флюида и фазовое равновесие

В данном разделе описана модель термодинамических свойств фаз и компонент, которая используется в следующих случаях:

- для расчета плотности фаз и компонент как функций давления и температуры;
- для расчета компонентного состава фаз, то есть концентраций компонент в фазе $x_{i\alpha}$, $\alpha = W, L, G, S$, $i = \overline{1, N}$.

Формально наиболее универсальным способом описания термодинамического состояния флюида является задание уравнений состояния для каждого компонента. На их основе можно вычислить необходимые плотности фаз, при условии, что концентрации компонент в фазах известны. Сами же концентрации определяются уравнениями фазового равновесия, которые представляют собой условия равенства летучестей компонента в тех фазах, в которых он присутствует.

Условия фазового равновесия представляют собой сложную систему нелинейных алгебраических уравнений, аккуратное решение которой (с учетом возможности вырождения и появления фаз) представляет собой вычислительно дорогостоящую задачу.

Поэтому часто используют следующий способ:

- расчет плотностей производится с использованием уравнений состояния;
- расчет фазового равновесия производится с использованием метода K -значений (метода констант фазового равновесия).

В последнем случае считается, что концентрация компонента в фазах является заданной функцией температуры и давления, которая может быть получена, например, табулированием аналитического уравнения состояния в специальной программе (симуляторе термодинамических свойств) или из физического эксперимента. В настоящей работе мы будем использовать именно такой подход.

Уравнения состояния определяют связь давления температуры и объема фазы. Для описания термодинамического поведения углеводородов в пластовых условиях в основном используются кубические уравнения (типа уравнений Ван-дер-Ваальса), к числу которых относятся уравнения состояния Пенга-Робинсона, Редлиха-Квонга, Соаве-Редлиха-Квонга, Зудкевича-Иоффе и др. (см., например, [5]).

Плотности фаз

Плотности фаз b_α , $\alpha = W, L, G, S$, входящие в соотношения (20), (21), (22), (24), рассчитываются как взвешенное среднее гармоническое плотностей компонент, составляющих фазу:

$$\frac{1}{b_\alpha} = \sum_{i=1}^{N_f} \frac{x_{i\alpha}}{b_i}, \quad \alpha = W, L, G; \quad \frac{1}{b_S} = \sum_{i=N_f+1}^N \frac{x_{iS}}{b_i}.$$

Это соотношение является следствием допущения о справедливости закона Амага об объеме смеси различных компонент:

$$v_\alpha = \sum_{i \in \alpha} x_{i\alpha} v_i, \quad \alpha = W, L, G, S,$$

где суммирование ведется по всем компонентам i , которые могут присутствовать в фазе α ,

$$v_i = \frac{1}{b_i} = \frac{w_i}{\rho_i}, \quad i = \overline{1, N},$$

— молярный объем компонента i , w_i — его молекулярный вес, $\rho_i = \rho_i(p_\alpha, T)$ — его массовая плотность в фазе α . При этом для молярного объема фазы также имеем:

$$v_\alpha = w_\alpha / \rho_\alpha, \text{ где } w_\alpha = \sum_{i \in \alpha} x_{i\alpha} w_i.$$

Массовые и молярные плотности фаз определяются согласно

$$\rho_\alpha = \frac{w_\alpha}{v_\alpha}, \quad b_\alpha = \frac{1}{v_\alpha}, \quad \alpha = W, L, G, S.$$

Более точное приближение для плотности газовой фазы можно получить из решения кубических уравнений состояния для смеси различных компонент, о которых упоминалось выше.

Плотность нефтяных компонент

Молярный объем v_L нефтяной фазы рассчитывается из закона парциальных давлений Авогадро:

$$v_L = \sum_{i=1}^{N_f} x_{iL} v_{iL},$$

где $v_{iL} = w_i / \rho_i$, w_i — молекулярный вес компонента i , ρ_i — массовая плотность компонента i , вычисляемая, например, по формуле:

$$\rho_i = \frac{\rho_i^{ref}}{\left[1 - C_{p,i}(p - p_i^{ref})\right] \left[1 + C_{T,i}(T - T_i^{ref})\right]},$$

где ρ_i^{ref} , p_i^{ref} , T_i^{ref} — заданные опорные значения параметров, причем $\rho_i^{ref} = \rho_i(p_i^{ref}, T_i^{ref})$. Тогда молярную плотность жидкой фазы получаем, по определению, как

$$b_L = \frac{1}{v_L},$$

Другой часто используемой корреляцией для плотности жидких углеводородных компонентов является:

$$b_i = b_i^{ref} \exp \left[C_{p,i}(p - p_i^{ref}) - C_{T,i}^{(1)}(T - T_i^{ref}) - \frac{1}{2} C_{T,i}^{(2)}(T - T_i^{ref})^2 \right].$$

Плотность воды

На практике часто используются описанные далее способы задания плотности воды:

1. При помощи корреляции:

$$b_w = \frac{1}{w_w} \frac{A_0 + A_1 T + A_2 T^2 + A_3 T^3 + A_4 T^4 + A_5 T^5}{1 + A_6 T} \exp [C_{p,w}(p - A_7)],$$

где $w_w = 18 \text{ кг/моль}$ — молярный вес воды, температура T имеет размерность градусов Цельсия, давление p — МПа, сжимаемость $C_{p,w}$ — МПа⁻¹. Значения коэффициентов A_i приведены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры уравнения для плотности чистой воды.

A_0	999.83952
A_1	16.955176
A_2	$-7.987 \cdot 10^{-3}$
A_3	$-46.170461 \cdot 10^{-6}$
A_4	$105.56302 \cdot 10^{-9}$
A_5	$-280.54353 \cdot 10^{-12}$
A_6	$16.87958 \cdot 10^{-3}$
A_7	102.0

Для массовой плотности [кг/м³] имеем

$$\rho_w = m_w \cdot w_w.$$

2. С использованием выражения вида:

$$\rho_w = \frac{\rho_{w,ref}}{[1 - C_{p,w}(p - p_{ref})] \left[1 + C_{T,w}^{(1)}(T - T_{ref}) + C_{T,w}^{(2)}(T - T_{ref})^2 \right]},$$

где

$$\rho_{w,ref} = \rho_w^{STC} / B_w(p_{ref}).$$

$p_{ref}, T_{ref}, \rho_w^{STC}, C_{p,w}, C_{T,w}^{(1)}, C_{T,w}^{(2)}$ — известные параметры.

3. При помощи таблиц.

Эмпирические уравнения состояния воды и водяного пара в широких диапазонах температур и давлений:

$$\begin{aligned} 273.15 \text{ K} \leq T \leq 1073.14 \text{ K}, & \quad \text{при } p \leq 100 \text{ МПа} \\ 1073.15 \text{ K} \leq T \leq 2273.15 \text{ K}, & \quad \text{при } p \leq 50 \text{ МПа} \end{aligned}$$

приведены в документе [6], подготовленном Международной ассоциацией свойств воды и пара (<http://www.iapws.org>). Уравнения состояния, описанные в [6] доступны в виде программных библиотек для языков C и C++ (<http://freesteam.sourceforge.net/>).

Плотность газовой фазы

Как отмечалось выше, молярная плотность газовой фазы задается формулой:

$$b_G = \frac{1}{v_G}, \quad v_G = \sum_{i=\overline{1, N_f}, i \neq w} x_{iG} v_{iG} + x_{wG} v_{wG},$$

индекс w обозначает водяной пар.

Здесь $v_{wG} = w_w / \rho_{wG}$, а v_{iG} определяется из уравнения:

$$pV_{iG} = Z_i RT, \quad (26)$$

где $Z_i = Z_i(p, T)$ — коэффициент сверхсжимаемости, для которого в простейшем случае используется соотношение:

$$Z_i = Z_i^{(0)} + Z_i^{(1)} \frac{p}{RT},$$

где коэффициенты $Z_i^{(0)}$ и $Z_i^{(1)}$ известны.

В более общих случаях для отыскания Z_i используются различные уравнения состояния.

Для плотности водяного пара можно использовать соответствующие таблицы или рассчитывать ее, например, по корреляции:

$$\rho_{wG}(p, T) = \exp \left(\sum_{i=0}^5 C_i T^i \right) \cdot \frac{T_b(p)}{T}.$$

где

$$T_b(p) = a \left(\frac{p}{10} \right)^b, \quad a = 180.89, \quad b = 0.2350.$$

Значения коэффициентов C_i приведены в таблице 2, температура задается в градусах Кельвина, а давление в барах.

Плотность твердой фазы

Уравнение состояния твердой фазы рассчитывается как среднее гармоническое от плотностей компонент i , составляющих фазу:

$$\frac{1}{b_S} = \sum_{i=N_f+1}^N \frac{x_i}{b_i}.$$

Таблица 2. Параметры уравнения для плотности водяного пара.

C_0	-93.7072
C_1	0.833941
C_2	-0.003208
C_3	$6.57652 \cdot 10^{-6}$
C_4	$6.93747 \cdot 10^{-9}$
C_5	$2.97203 \cdot 10^{-12}$

При этом для расчета молярных плотностей b_i отдельных компонентов твердой фазы обычно используются соотношения:

$$b_i = \frac{\rho_{ref,i}}{M_i [1 - C_{p,i}(p - p_{ref,i})] [1 + C_{T,i}(T - T_{ref,i})]},$$

или

$$\rho_i = \rho_{ref,i} \exp [C_{p,i}(p - p_{ref,i}) - C_{T,i}(T - T_{ref,i})],$$

где $\rho_{ref,i}, p_{ref,i}, T_{ref,i}, M_i, C_{p,i}, C_{T,i}$ — известные параметры.

Кубические уравнения состояния

Уравнения состояния определяют связь давления, температуры и объема фазы. При расчёте фильтрации углеводородов в основном используются кубические уравнения типа уравнений Ван-дер-Ваальса. При выборе уравнения нужно четко представлять себе границы его применимости (стандартные уравнения, используемые в инженерной практике, хорошо описывают фазовое состояние пластовых флюидов в диапазоне 0.1 – 100 МПа, 15 – 200С°).

Для описания состояния жидкой и газовой фаз часто используется уравнение Мартина [7], обобщающее в себе наиболее часто используемые в нефтяной практике уравнения состояния: Пенга-Робинсона, Редлиха-Квонга, Соаве-Редлиха-Квонга, Зудкевича-Иоффе.

Это уравнение имеет вид:

$$Z^3 + E_2 Z^2 + E_1 Z + E_0 = 0,$$

где

$$E_2 = (m_1 + m_2 - 1) B - 1,$$

$$E_1 = A - (m_1 + m_2 - m_1 m_2) B^2 - (m_1 + m_2) B,$$

$$E_0 = - [AB + m_1 m_2 B^2 (B + 1)],$$

$$Z = pv/(RT),$$

где v — молярный объем, Z — коэффициент сверхсжимаемости.

В случае, если уравнение имеет три действительных положительных корня, то для жидкости используется минимальный, для газа — максимальный.

Параметры $m_{1,2}$ в коэффициентах кубического уравнения приведены в таблице 3, параметры A и B имеют вид:

$$A = \sum_{j=1}^{N_f} \sum_{k=1}^{N_f} x_j x_k A_{jk}, \quad B = \sum_{j=1}^{N_f} x_j B_j,$$

$$A_{jk} = (1 - \delta_{jk}) (A_j A_k)^{1/2}, \quad A_j = \Omega_a \frac{p_{rj}}{T_{rj}^2}, \quad B_j = \Omega_b \frac{p_{rj}}{T_{rj}},$$

$$T_r = T/T_c, \quad p_r = p/p_c.$$

Таблица 3. Параметры уравнений состояния.

Уравнение	m_1	m_2
Редлих-Квонг	0	1
Соаве-Редлих-Квонг	0	1
Зудкевич-Иоффе	0	1
Пенг-Робинсон	$1 + \sqrt{2}$	$1 - \sqrt{2}$

Таким образом, для полного задания уравнения состояния необходимо выбрать тип уравнения и в общем случае задать параметры:

T_c — критическая температура;

p_c — критическое давление;

δ_{jk} — коэффициенты парного взаимодействия.

Значения величин Ω_a и Ω_b зависят от выбранного уравнения состояния:

1. для уравнения Редлиха-Квонга

$$\Omega_a = \Omega_{a_0} T_{rj}^{-1/2}, \quad \Omega_b = \Omega_{b_0};$$

2. для уравнения Соаве-Редлиха-Квонга

$$\Omega_a = \Omega_{a_0} \left[1 + (0.48 + 1.574w_j - 0.176w_j^2) (1 - T_{rj}^{1/2}) \right]^2, \quad \Omega_b = \Omega_{b_0};$$

3. для уравнения Зудкевича-Иоффе

$$\Omega_a = \Omega_{a_0} F_{aj}(T) T_{rj}^{-1/2}, \quad \Omega_b = \Omega_{b_0} F_{dj}(T);$$

4. для уравнения Пенга-Робинсона

$$\Omega_b = \Omega_{b_0},$$

при $w_j > 0.49$:

$$\Omega_a = \Omega_{a_0} \left[1 + (0.375 + 1.542w_j - 0.270w_j^2) (1 - T_{rj}^{1/2}) \right]^2,$$

при $w_j \leq 0.49$:

$$\Omega_a = \Omega_{a_0} \left[1 + (0.3796 + 1.485w_j - 0.1644w_j^2 + 0.0167w_j^3) (1 - T_{rj}^{1/2}) \right]^2.$$

Подробно уравнения состояния рассмотрены в [5].

Фазовое равновесие

Для расчета фазового равновесия, то есть определения компонентного состава фаз по температуре, давлению и известному компонентному составу многофазной смеси обычно используют два способа.

1. Так называемый «флеш-расчет». В этом случае решается система нелинейных уравнений, которая описывает равенство летучестей компонент в фазах.
2. Метод констант фазового равновесия (метод K -значений). В этом случае считается, что значения констант фазового равновесия при заданных температуре, давлении и составе известны.

Рассмотрим подробнее второй способ.

Для описания состава фаз в условиях фазового равновесия удобно использовать константы фазового равновесия $K_i^{\alpha\beta}$, которые, по определению, равны:

$$K_i^{\alpha\beta} = \frac{x_{i\alpha}}{x_{i\beta}}, \quad i = \overline{1, N_f}, \quad \alpha = W, L, G, \quad (27)$$

где концентрации $x_{i\alpha}$ компонента i в фазе α определены согласно (6). Константы фазового равновесия должны быть заданы для всех конденсируемых компонентов.

Будем считать, что константы фазового равновесия зависят только от давления и температуры и не зависят от компонентного состава флюида.

В силу определения (27), для констант фазового равновесия справедливы следующие соотношения:

$$K_i^{\alpha\beta} K_i^{\beta\gamma} = K_i^{\alpha\gamma}, \quad K_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{K_i^{\beta\alpha}}, \quad K_i^{\alpha\alpha} \equiv 1, \quad i = \overline{1, N_f}, \quad \alpha = W, L, G. \quad (28)$$

Приведенные выше соотношения показывают, что не все константы фазового равновесия независимы и возможно задать лишь часть из них.

В дальнейшем будем считать, что константы фазового равновесия являются явно заданными функциями давления и температуры,

$$K_i^{\alpha\beta} = K_i^{\alpha\beta}(p, T),$$

удовлетворяющими соотношениям (28).

Задание констант фазового равновесия полностью определяет компонентный состав фаз.

Построим систему уравнений, которая позволяет определить молярные концентрации $x_{i\alpha}$ компонент $i = \overline{1, N_f}$ в фазах $\alpha = W, L, G$ по заданным K -значениям и полным концентрациям компонент $Z_i, i = \overline{1, N_f}$.

Пусть $\alpha \in \{W, L, G\}$ — какая-либо из подвижных фаз. Тогда из (14) следует, что:

$$Z_i = \sum_{\beta=W,L,G} C_\beta x_{i\beta} = \sum_{\beta=W,L,G} C_\beta K_i^{\beta\alpha} x_{i\alpha} = x_{i\alpha} \sum_{\beta=W,L,G} C_\beta K_i^{\beta\alpha}, \quad i = \overline{1, N_f}.$$

Отсюда для концентраций компонент в фазах получаются соотношения:

$$x_{i\alpha} = Z_i \left/ \sum_{\beta=W,L,G} C_\beta K_i^{\beta\alpha} \right., \quad i = \overline{1, N_f}, \quad \alpha = W, L, G. \quad (29)$$

Эти соотношения позволяют определить концентрации компонент в фазах по известным концентрациям фаз $C_\alpha, \alpha = W, L, G$.

Для определения фазовых концентраций C_α , выберем какую-нибудь фазу $\bar{\alpha} \in \{W, L, G\}$, которую будем называть опорной. Вычитая уравнение (7) для опорной фазы $\bar{\alpha}$ из остальных уравнений (7), получим:

$$\sum_{i=1}^{N_f} (x_{i\alpha} - x_{i\bar{\alpha}}) = 0, \quad \alpha \in \{W, L, G\} \setminus \bar{\alpha}.$$

Подставляя (29) в последнее уравнение, получим:

$$\sum_{i=1}^{N_f} Z_i \left(\frac{1}{\sum_{\beta=W,L,G} C_\beta K_i^{\beta\alpha}} - \frac{1}{\sum_{\beta=W,L,G} C_\beta K_i^{\beta\bar{\alpha}}} \right) = 0, \quad \alpha = \{W, L, G\} \setminus \bar{\alpha}. \quad (30)$$

Так как число уравнений (30) на единицу меньше числа подвижных фаз, то в качестве замыкающего уравнения будем использовать условие нормировки:

$$\sum_{\beta=W,L,G} C_\beta = 1. \quad (31)$$

Уравнения (30) и (31) составляют полную систему для определения фазовых концентраций C_α , $\alpha = W, L, G$. Число этих уравнений равняется числу фаз, принимающих участие в расчете фазового равновесия.

Концентрации $x_{i\alpha}$ могут быть получены с помощью известных K -значений и фазовых концентраций C_α с помощью соотношений (29).

Вязкость воды

Известно, что вязкость воды мало меняется в зависимости от давления и примерно равна 1 сПз, уменьшаясь до 0.1 сПз при температуре 300°C.

На практике используются следующие способы задания зависимости вязкости от температуры:

1. использование таблиц зависимости вязкости от температуры, с возможностью учета солености;
2. с помощью корреляции вида $\mu_w = A_w \exp(B_w/T)$, где T задается в градусах Кельвина, A_w, B_w — заданные константы;
3. зависимость вязкости от температуры и давления (формула *Grabowski*):

$$\mu_w(p, T) = \mu_w(T) \cdot \frac{\mu(p)}{\mu_{ref}}, \quad \mu_w(T) = \frac{A_w}{1 + B_w T + C_w T^2},$$

где $A_w = 7.56$, $B_w = 0.2519$, $C_w = 5.778 \cdot 10^{-5}$, $\mu(P)$ — заданная зависимость, а p_{ref} — заданное опорное давление, $\mu_{ref} = \mu(p_{ref})$ — значение μ при $p = p_{ref}$, температура T измеряется в градусах Цельсия.

Для учета растворенных в воде компонентов используется метод *Ezrokhi*:

$$\log_{10} \mu_W = \log_{10} \mu_w(p, T) + \sum_{i=1, N_f, i \neq w} B_i(T) w_i,$$

где w_i — массовая доля неводного компонента i , $\mu_w(p, T)$ — вязкость чистой воды. Коэффициенты B_i имеют вид:

$$B_i(T) = b_{0,i} + b_{1,i} T + b_{2,i} T^2,$$

где температура задана в градусах Цельсия, параметры $b_{0,i}, b_{1,i}, b_{2,i}$ — заданные величины.

Вязкость пара

Для вязкости пара используется корреляция Эджиугу и Фиори:

$$\mu_v = A_v + B_v T + C_v p^{D_v},$$

где T задана в градусах Цельсия, p — в МПа, $A_v = 4.9402 \cdot 10^{-3}$, $B_v = 5.0956 \cdot 10^{-6}$, $C_v = 2.9223 \cdot 10^{-6}$, $D_v = 2.5077$.

Вязкость газа

Вязкость газа существенно меньше вязкости воды и жидких углеводородов и составляет порядка 0.01 сПз.

На практике используются следующие методы задания вязкости газа:

1. $\mu_G = 0.0136 + 3.8 \cdot 10^{-5} T$,

где T измеряется в градусах Цельсия, зависимостью от состава пренебрегают;

2. $\mu_G = \frac{\sum_{i=1}^{N_f} \omega_i \mu_{Gi}}{\sum_{i=1}^{N_f} \omega_i}$,

где вязкости компонентов вычисляются как μ_{Gi} , величины A_i, B_i — заданы, M_i — молекулярный вес компонента;

3. табличное задание зависимости от температуры.

Вязкость нефти

Вязкость нефти существенно зависит от температуры: при небольших изменениях последней вязкость может меняться на несколько порядков. В то же время вязкость нефти может сильно меняться и при растворении ней газа. Для описания этих эффектов используется линейное логарифмическое правило смесей:

$$\ln \mu_L = \sum_{i=1}^{N_f} x_{iL} \ln \mu_{Li}.$$

Для отдельных компонент имеются следующие способы задания значений μ_{Li} :

1. корреляция вида $\mu_{Li} = A_i \exp(B_i/T)$, в которой коэффициенты A_i, B_i либо заданы, либо могут быть найдены по двум заданным значениям функции $\mu_{Li}(T)$;

2. непосредственное задание таблицы зависимости μ_{Li} от T .

В тех случаях, когда не работает линейное правило смешивания, используют нелинейный закон:

$$\ln \mu_L = f(x_{jL}) \ln \mu_{Lj} + \frac{1 - f(x_{jL})}{1 - x_{jL}} \sum_{i=\overline{1, N_f}, i \neq j} x_{iL} \ln \mu_{Li},$$

где j — какой-то произвольный, но фиксированный компонент, который называется опорным.

Для зависимостей вязкостей чистых веществ от температуры используются приведенные ниже соотношения с заданными параметрами A, B, C .

1. Корреляция *ASTM*:

$$\log_{10}(\mu_{Li} + A) = B \cdot T^{-C}.$$

2. Формула Амураде:

$$\log_{10}(\mu_{Li}) = A + \frac{B}{T}.$$

3. Формула Фогеля:

$$\log_{10}(\mu_{Li}) = A + \frac{B}{T + C}.$$

4. Логарифмическая формула:

$$\log_{10}(\mu_{Li}) = A + B \log_{10}(T).$$

Для смеси используется аналогичное логарифмическое правило, однако в качестве весов можно использовать заданные пользователем функции от соответствующих концентраций.

Для учета зависимости вязкости от давления используется соотношение:

$$\mu_L(p, T) = \mu_L(T) \frac{\mu_L(p)}{\mu(p_{ref})},$$

где зависимость $\mu_L(p)$ и значение p_{ref} — заданы.

12 Энтальпия и внутренняя энергия

Энтальпии и теплоемкости жидкой и газовой фаз можно определять двумя способами.

Способ 1.

$$C_{p\alpha}(T) = \left(\frac{\partial H_\alpha}{\partial T} \right)_P, \quad \alpha = L, G,$$

где $C_{p\alpha}(T)$ — теплоемкость фазы. Тогда энтальпия вычисляется как интеграл от опорного значения T_{ref} до данной температуры T :

$$H_\alpha(T) = \int_{T_{ref}}^T C_{p\alpha}(T) dT,$$

Теплота парообразования определяется как

$$H_{var}(T) = H_G(T) - H_L(T).$$

Способ 2.

$$C_{p\alpha} = C_{p\alpha}^{(0)} + C_{p\alpha}^{(1)}T + C_{p\alpha}^{(2)}T^2 + C_{p\alpha}^{(3)}T^3, \quad \alpha = L, G,$$

где $C_{p\alpha}^{(0)}, C_{p\alpha}^{(1)}, C_{p\alpha}^{(2)}, C_{p\alpha}^{(3)}$ — известные постоянные.

Для теплоты парообразования используется соотношение:

$$H_{var} = h_{vr}(T_c - T)^{e_v},$$

где T_c — критическая температура.

Для фаз, состоящих из смеси различных компонент, энтальпии вычисляются как средневзвешенное значение по мольным долям энтальпий компонент:

$$H_\alpha = \sum_{i=1}^{N_f} H_{i\alpha}.$$

Для теплоемкости твердой фазы используется выражение:

$$C_{pS}(T) = C_{pS}^{(0)} + C_{pS}^{(1)}T$$

Для водной компоненты энтальпия определяется так же, как для жидких углеводородных компонент.

Внутренняя энергия для подвижных фаз имеет вид:

$$U_\alpha(p_\alpha, T) = H_\alpha - \frac{p_\alpha}{\rho_\alpha}, \quad \alpha = W, L, G.$$

Для твердой фазы:

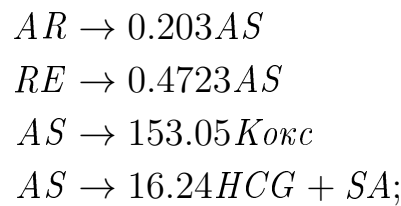
$$U_S(T) = H_S.$$

13 Химические реакции

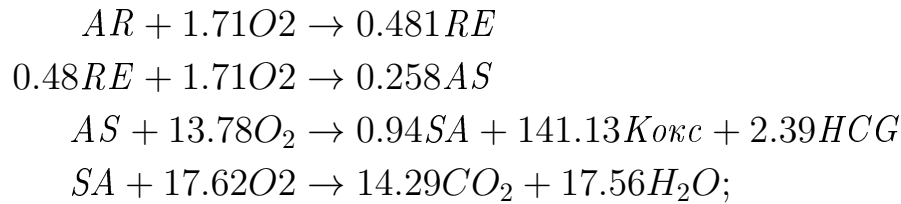
Учет химических реакций часто бывает необходим при описании современных высокотехнологичных методов увеличения нефтеотдачи. Характерным примером является разработка коллекторов нетрадиционного сырья, например, нефтематеринских пород (керогена) Баженовской свиты.

Для примера укажем, например, модель компонентного состава SARA (Saturates, Aromatic, Resins, Asphaltens) часто используемую для моделирования процессов внутрипластового горения [8]. В рамках этой модели рассматривают следующие типы химических реакций [9]:

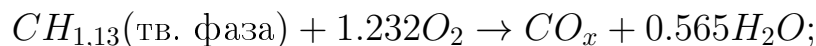
- термический крекинг:



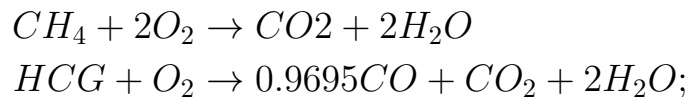
- низкотемпературное окисление нефти в жидкой фазе:



- высокотемпературное окисление твердых углеводородов (кокса):



- горение летучих УВ компонент:



где «AR» — ароматические УВ, «AS» — асфальтены, «RE» — резины, «SAT» — насыщенные углеводороды, «HCG» — газовый углеводородный компонент.

Модель реакции. В общем случае уравнение k -й химической реакции может быть записано в виде:

$$\sum_{i=1}^N s_{ki}C_i \rightarrow \sum_{i=1}^N s'_{ki}C_i + H_k^{\text{ch}}, \quad k = \overline{1, N_r}, \quad (32)$$

где s'_{ki} — вектор стехиометрических коэффициентов для конечных компонентов; s_{ki} — вектор стехиометрических коэффициентов для исходных компонентов; C_i — конкретный реагент (компонент или псевдо-компонент); H_k^{ch} — энтальпия реакции.

Если компонент i не участвует в реакции k , то полагаем в (32) $s_{ki} = 0$ или $s'_{ki} = 0$.

Скорость химической реакции. Будем считать, что объемная скорость реакции k определяется законом Аррениуса:

$$r_k = A_r \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right) \prod_{i=1}^N c_{ri}^{n_{ri}},$$

где A_r — константа скорости реакции, зависимостью которой от температуры будем пренебрегать; E_r — энергия активации; n_{ri} — порядок зависимостей скорости реакции от компонента; R — универсальная газовая постоянная; T — температура.

В реакции может участвовать только часть компонента, находящаяся в определенной фазе (например, окисление в ходе горения происходит с участием кислорода, присутствующего только в газовой фазе). Величина c_{ri} представляет собой концентрацию компонента в реагирующей фазе α , которая определяется следующим образом:

$$c_{ri} = \phi_f \cdot b_\alpha \cdot S_\alpha \cdot x_{i\alpha}, \quad \alpha = W, L, G$$

— для подвижных фаз,

$$c_{ri} = \phi_v \cdot x_{iS}$$

— для активной твердой фазы.

Приток массы и энергии за счет химических реакций. Поток массы i -го компонента вследствие химической реакции k равен

$$Q_{ik}^{\text{ch}} = (s'_{ki} - s_{ki})r_k.$$

Тогда полный приток компонента i от всех реакций, в которых он участвует, будет иметь вид:

$$Q_i^{\text{ch}} = \sum_{k=1}^{N_r} Q_{ik}^{\text{ch}} = \sum_{k=1}^{N_r} (s'_{ki} - s_{ki})r_k. \quad (33)$$

Поток энергии за счет химической реакции номер k равен:

$$Q_{E,k}^{\text{ch}} = H_k r_k,$$

где H_k^{ch} — энтальпия химической реакции с номером k .

Полный приток энергии за счет всех химических реакций:

$$Q_E^{\text{ch}} = \sum_{k=1}^{N_r} Q_{E,k}^{\text{ch}} = H_k^{\text{ch}} r_k.$$

14 Адсорбция

Сорбция — поглощение твердым телом или жидкостью (сорбентом) жидкого вещества или газа (сорбата) из окружающей среды. Поглощение вещества из газовой фазы всем объемом жидкого сорбента называется абсорбцией, поглощение вещества поверхностным слоем сорбента — адсорбцией.

При адсорбции газов на твердых телах описание взаимодействия молекул адсорбата и адсорбента представляет собой весьма сложную задачу, поскольку характер их взаимодействия, определяющий характер адсорбции, может быть различным. Поэтому обычно задачу упрощают, рассматривая два крайних случая, когда адсорбция вызывается физическими или химическими силами — соответственно, физическую и химическую адсорбцию.

Механическая (физическая) адсорбция возникает за счет ван-дер-ваальсовских взаимодействий. Она характеризуется обратимостью и уменьшением адсорбции при повышении температуры, то есть экзотермичностью, причем тепловой эффект физической адсорбции обычно близок к теплоте сжижения адсорбата (10-80 кДж/моль). Таковой является, например, адсорбция инертных газов на угле.

Химическая адсорбция (хемосорбция) осуществляется путем химического взаимодействия молекул адсорбента и адсорбата. Хемосорбция обычно необратима и, в отличие от физической, является локализованной, то есть молекулы адсорбата не могут перемещаться по поверхности адсорбента. Так как хемосорбция является химическим процессом, требующим энергии активации порядка 40-120 кДж/моль, повышение температуры способствует ее протеканию.

Явления физической и химической адсорбции четко различаются в очень редких случаях, обычно взаимодействие является комбинацией различных механизмов.

Модель адсорбции учитывает:

- адсорбцию любого компонента в любой фазе;
- зависимость от состава: как при помощи модели изотерм Ленгмюра, так и таблиц;
- зависимость от температуры;

- множественность типов адсорбирующей породы;
- обратимость и необратимость процесса;
- фактор остаточного сопротивления.

Для описания явления адсорбции используется феноменологический подход, основой которого являются изотермы адсорбции, задающие уровень адсорбции как функцию состава флюида. Данные изотермы могут быть заданы как в табличном виде, так и с помощью хорошо известной корреляции Ленгмюра [10]:

$$A = \frac{A_A \cdot C_\alpha}{1 + B_A \cdot C_\alpha},$$

где C_α — молярная концентрация в фазе, а параметры A_A и B_A в общем случае зависят от температуры. Максимальный уровень адсорбции, в соответствии с данной формулой, равен A/B .

Процесс адсорбции учитывается в уравнениях баланса массы в виде выражения

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi_v A_i].$$

Таким образом, величина A_i имеет смысл количества молей i -го компонента, адсорбированного в единице пустотного объема.

Адсорбированный компонент неподвижен и находится в равновесии с той частью, которая находится в флюиде. Равновесие описывается при помощи указанных выше изотерм адсорбции, описывающих количество адсорбированного вещества как функцию состава фазы флюида. По существу, изотермы адсорбции являются аналогами констант равновесия (K -значений) для флюида и твердого тела.

15 Учет скважин

Метод учета скважин в численных моделях фильтрации основан на допущении того, что вблизи скважины течение описывается аналитическим решением, граничные условия для которого определяются из численного решения задачи для пласта. Данный подход впервые был предложен Писманом [11]. Основным предположением при этом является то, что в окрестности скважины характер течения близок к радиальному.

Одним из основных параметров работы каждой скважины является забойное давление p_{bh} . Под забойным давлением будем понимать давление в стволе скважины на заданной глубине z_{bh} .

Подробное описание модели скважины невозможно без введения сеточной модели и описания используемых при этом вычислительных алгоритмов.

Поскольку целью данной работы являлось описание только математических моделей, без введения расчетных сеток и описания соответствующих аппроксимаций и алгоритмов, ограничимся лишь общим видом зависимости объемного притока фазы к скважине:

$$Q_{\alpha}^{(V)} = Q_{\alpha}^{(V)}(p_{\alpha}, p_{bh}, T, k_{r\alpha}(\mathbf{S})).$$

С описанием различных аспектов сеточной модели скважин и используемых вычислительных алгоритмов можно ознакомиться, например, здесь: [12–17].

Список литературы

- [1] Coats K. H., Thomas L. K., Pierson R. G. Compositional and Black Oil Reservoir Simulation // SPE paper 29111, SPE Reservoir Simulation Symposium, 12-15 February 1995, San Antonio, Texas.
- [2] Reid R. C., Prausnitz J. M. and Sherwood T. K. The properties of Liquids and Gases. McGraw-Hill, Page 546, 1977.
- [3] Anand J., Somerton W. H. and Gomaa E. Predicting thermal conductivities of formations from other known properties: Journal of the Society of Petroleum Engineers, V. 13, p. 267-273, 1973.
- [4] Somerton W.H. Thermal properties and temperature-related behavior of rock/fluid systems. Developments in petroleum science, 37. Amsterdam, Netherlands: Elsevier Science publishers B.V. 257 p., 1992.
- [5] Баталин О.Ю., Брусиловский А.И., Захаров М.Ю., Фазовые равновесия в системах природных углеводородов. — М.: Недра, 1992. 272 с.
- [6] IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam (IAPWS-IF97), 49 p., <http://www.iapws.org/relguide/IF97-Rev.pdf>.
- [7] Martin J.J. Cubic Equations of State-Which?, I and EC Fundamentals, Vol. 18, Page 81, May 1973
- [8] Fan T., Wang J., Buckley J.S. Evaluating crude oils by SARA analysis // SPE75228, 2002. - 7 p
- [9] Ursenbach M.G., Bennion D.W., Belgrave J.D.M., Moore R.G. A comprehensive approach to in-situ combustion modeling // SPE Advanced Technology Series. - 1993. – V.1, No. 1. – P. 98-107.
- [10] Langmuir I. The Constitution and Fundamental Properties of Solids and Liquids. Part I. Solids. Journal of the American Chemical Society 38 (11): 2221–2295, 1916.
- [11] Peaceman D.W. Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation // SPE Journal, V. 18, N. 3, P. 183–194, 1978.
- [12] Holmes J.A. Enhancements to the Strongly Coupled, Fully Implicit Well Model: Wellbore Crossflow Modeling and Collective Well Control // SPE paper 12259, SPE Reservoir Simulation Symposium, 15-18 November 1983, San Francisco, California.

- [13] Oballa V., Coombe D.A., Buchanan W.L. Aspects of Discretized Wellbore Modelling Coupled to Compositional/Thermal Simulation // JCPT, April 1997, Volume 36, No. 4, page 45.
- [14] Semenova A., Livescu S., Durlofsky L.J., Aziz Kh. Modeling of Multisegmented Thermal Wells in Reservoir Simulation // SPE 130371, SPE EUROPEC/EAGE Annual Conference and Exhibition held in Barcelona, Spain, 14–17 June 2010.
- [15] Livescu S., Durlofsky L.J., Aziz Kh., Ginestra J.C. A new model for simulating nonisothermal multiphase flow in wellbores and pipes // Preprint submitted to Elsevier, 16 January 2008.
- [16] Livescu S., Durlofsky L.J., Aziz Kh., Ginestra J.C. A fully-coupled thermal multiphase wellbore flow model for use in reservoir simulation // Journal of Petroleum Science and Engineering, 71, PP. 138–146, 2010.
- [17] Ramey H.J.Jr. Wellbore Heat Transmission // SPE Paper 96, Journal of Petroleum Technology, Vol. 14, pp. 427-435, 1962.