

Методика расчета рисков солеотложения по Оддо-Томсону + ЧМИ
(численные методы исследования)

Границы применимости

1. Температура: от 0 до 175°C.
2. Давление: от 1 до 950 атм.
3. Минерализация воды: от 0 до 300 г/л.

Исходные данные

1. Ионный состав воды:
 - 1.1. Концентрация хлорид-ионов $\gamma(Cl^-)$ в мг/л.
 - 1.2. Концентрация сульфат-ионов $\gamma(SO_4^{2-})$ в мг/л.
 - 1.3. Общая щелочность (концентрация гидрокарбонат-ионов $\gamma(HCO_3^-)$ в мг/л).
 - 1.4. Концентрация ионов кальция $\gamma(Ca^{2+})$ в мг/л.
 - 1.5. Концентрация ионов магния $\gamma(Mg^{2+})$ в мг/л.
 - 1.6. Концентрация смеси ионов натрия и калия $\gamma(Na^+ + K^+)$ в мг/л.
 - 1.7. Концентрация ионов бария $\gamma(Ba^{2+})$ в мг/л (опционально).
 - 1.8. Концентрация ионов стронция $\gamma(Sr^{2+})$ в мг/л (опционально).
 - 1.9. Реакция среды pH (опционально, при отсутствии данных о содержании CO₂ в составе попутно-добыываемого газа)
2. Термобарические условия:
 - 2.1. Температура T в градусах Цельсия.
 - 2.2. Давление P в атмосферах.
3. Показатели работы скважины:
 - 3.1. Дебит жидкости $Q_ж$ в м³/сут.
 - 3.2. Обводненность wC в %.
 - 3.3. Газовый фактор ΓF в м³/м³.
4. Информация о CO₂ и нефти:
 - 4.1. Мольная (объемная) доля CO₂ в газовой фазе при стандартных условиях y_{CO_2} .
 - 4.2. Мольная (объемная) доля CO₂ в пластовой нефти при стандартных условиях X_{CO_2} .

4.3. Средняя молекулярная масса пластовой нефти $Mr(oil)$ в г/моль.

4.4. Плотность нефти в пластовых условиях ρ_{oil} в г/см³.

Справочные данные

1. Молекулярные массы ионов по данным химико-аналитической лаборатории:

1.1. Молекулярная масса хлорид-ионов $Mr(Cl^-)$ в г/моль.

1.2. Молекулярная масса сульфат-ионов $Mr(SO_4^{2-})$ в г/моль.

1.3. Молекулярная масса гидрокарбонат-ионов $Mr(HCO_3^-)$ в г/моль.

1.4. Молекулярная масса ионов кальция $Mr(Ca^{2+})$ в г/моль.

1.5. Молекулярная масса ионов магния $Mr(Mg^{2+})$ в г/моль.

1.6. Молекулярная масса смеси ионов натрия и калия $Mr(Na^+ + K^+)$ в г/моль.

1.7. Молекулярная масса ионов бария $Mr(Ba^{2+})$ в г/моль (опционально).

1.8. Молекулярная масса ионов стронция $Mr(Sr^{2+})$ в г/моль (опционально).

2. Заряды ионов:

2.1. Заряд хлорид-иона $z_{Cl^-} = -1$.

2.2. Заряд сульфат-иона $z_{SO_4^{2-}} = -2$.

2.3. Заряд гидрокарбонат-иона $z_{HCO_3^-} = -1$.

2.4. Заряд иона кальция $z_{Ca^{2+}} = +2$.

2.5. Заряд иона магния $z_{Mg^{2+}} = +2$.

2.6. Заряд ионов натрия и калия $z_{Na^+ + K^+} = +1$.

2.7. Заряд иона бария $z_{Ba^{2+}} = +2$ (опционально).

2.8. Заряд иона стронция $z_{Sr^{2+}} = +2$ (опционально).

Этапы расчета

1. Рассчитываются термобарические условия по стволу скважины (не входит в методику Оддо-Томсона).

2. Термобарические условия пересчитываются в американские единицы:

2.1. Температура в градусах Фаренгейта: $\tilde{T} = T * 9/5 + 32$.

2.2. Давление в psi: $\tilde{P} = P * 14.6959$.

3. Пересчитываются концентрации ионов в молярные по формуле:

$$c_{Ion} = \gamma(Ion)/Mr(Ion)/1000$$

4. Рассчитывается ионная сила раствора по формуле:

$$I = 1/2 \sum c_i z_i^2$$

где c_i – молярная концентрация i -того иона в составе воды (моль/л), z_i – заряд i -того иона в составе воды.

5. Рассчитывается факт наличия или отсутствия свободной газовой фазы в потоке для конкретной заданной точки (не входит в методику Оддо-Томсона).

6. В зависимости от наличия/отсутствия свободной газовой фазы производится расчет индекса насыщения по кальциту:

6.1. При наличии газовой фазы:

6.1.1. Рассчитывается суточный дебит воды в баррелях BWPD по формуле:

$$BWPD = Q_{ж} * wc * 6.28981/100$$

6.1.2. Рассчитывается суточный дебит нефти в баррелях BOPD по формуле:

$$BOPD = Q_{ж} * (100 - wc) * 6.28981/100$$

6.1.3. Рассчитывается суточный дебит газа в миллионах кубических футов MMCFD по формуле:

$$MMCFD = Q_{ж} * (100 - wc)/100 * ГФ * 35.3147/1000000$$

6.1.4. Рассчитывается коэффициент летучести (фугитивности) f_g для CO₂ в заданной точке по формуле:

$$f_g = \exp \left[\left(-7,66 \times 10^{-3} + 8,0 \times 10^{-4} \tilde{T}^{0,5} - 2,11 \times 10^{-5} \tilde{T} \right) \tilde{P}^{0,5} + \left(-5,77 \times 10^{-4} + 3,72 \times 10^{-5} \tilde{T}^{0,5} - 5,7 \times 10^{-7} \tilde{T} \right) \tilde{P} + \left(4,4 \times 10^{-6} - 2,96 \times 10^{-7} \tilde{T}^{0,5} + 5,1 \times 10^{-9} \tilde{T} \right) \tilde{P}^{1,5} \right]$$

6.1.5. Рассчитывается мольная (объемная) доля CO₂ в газовой фазе y_g при заданных температуре \tilde{T} и давлении \tilde{P} по формуле:

$$y_g = \frac{y_{CO_2}}{\left[1,0 + \frac{\tilde{P} f_g (5,0 \times BWPD + 10,0 \times BOPD) \times 10^{-5}}{(\tilde{T} + 460) \times MMCFD} \right]}$$

6.1.6. Рассчитывается непосредственно индекс насыщения кальцита по формуле:

$$SI_{Calcite} = \log_{10} \left(\frac{c_{Ca^{2+}} \cdot c_{HCO_3^-}^2}{\tilde{P} y_g f_g} \right) + 6,039 + 1,4463 \times 10^{-2} \tilde{T} - 9,44 \times 10^{-7} \tilde{T}^2 - 6,185 \times 10^{-5} \tilde{P} - 1,895 I^{0,5} + 0,662 I + 3,654 \times 10^{-2} I^{1,5} - 8,00 \times 10^{-7} \tilde{T} I^{0,5}$$

6.2. При отсутствии газовой фазы:

6.2.1. Рассчитывается суточный дебит воды в литрах V_{aq} по формуле:

$$V_{aq} = Q_{ж} * \frac{wc}{100} * 1000$$

6.2.2. Рассчитывается суточный дебит нефти в литрах V_o по формуле:

$$V_o = Q_{ж} * \frac{100 - wc}{100} * 1000$$

6.2.3. Рассчитывается суммарное количество CO_2 (в молях) $n_t^{CO_2}$, которое выдает скважина каждый день по формуле:

$$n_t^{CO_2} = V_o * \rho_{oil} * 1000 / Mr(oil) * X_{CO_2}$$

6.2.4. Рассчитывается концентрация растворенного в воде CO_2 ($c_{aq}^{CO_2}$) в моль/л по формуле:

$$c_{aq}^{CO_2} = \frac{7289 n_t^{CO_2}}{V_{aq} + 3,04 V_o}$$

6.2.5. Рассчитывается непосредственно индекс насыщения кальцита по формуле:

$$SI_{Calcite} = \log_{10} \left(\frac{c_{Ca^{2+}} \cdot c_{HCO_3^-}^2}{c_{aq}^{CO_2}} \right) + 3,801 + 8,115 \times 10^{-3} \tilde{T} + 9,028 \times 10^{-6} \tilde{T}^2 - 7,419 \times 10^{-5} \tilde{P} - 1,961 I^{0,5} + 0,695 I - 1,136 \times 10^{-2} I^{1,5} - 1,604 \times 10^{-4} \tilde{T} I^{0,5}$$

6.3. При отсутствии информации о CO_2 и нефти, а также в случае расчета смешения вод, риски отложения кальцита также могут быть рассчитаны на основе значения рН попутно-добываемой воды по следующей формуле:

$$SI_{Calcite} = \log_{10} (c_{Ca^{2+}} \cdot c_{HCO_3^-}) + pH - 2,53 + 8,943 \times 10^{-3} \tilde{T} + 1,886 \times 10^{-6} \tilde{T}^2 - 4,855 \times 10^{-5} \tilde{P} - 1,470 I^{0,5} + 0,316 I + 5,370 \times 10^{-2} I^{1,5} + 1,297 \times 10^{-3} \tilde{T} I^{0,5}$$

7. Рассчитываются индексы насыщения сульфатных солей по следующему алгоритму:

7.1. Рассчитывается константа стабильности сульфатных комплексов K_{st} по формулам:

$$\log_{10} K_{st} = 2,301 + 1,740 \times 10^{-3} \tilde{T} + 4,553 \times 10^{-6} \tilde{T}^2 - 7,801 \times 10^{-6} \tilde{P} - 3,969 I^{0,5} + 2,280 I - 0,459 I^{1,5} - 6,037 \times 10^{-4} \tilde{T} I^{0,5}$$

$$K_{st} = 10^{\log_{10} K_{st}}$$

7.2. Рассчитывается сумма молярных концентраций двухвалентных металлов $\sum c_M$ по формуле:

$$\sum c_M = c_{Ca^{2+}} + c_{Mg^{2+}} + c_{Ba^{2+}} + c_{Sr^{2+}}$$

7.3. Рассчитывается концентрация свободных сульфат-ионов $c_{SO_4^{2-}}^{free}$ по формуле:

$$c_{SO_4^{2-}}^{free} = \frac{-\{1 + K_{st}(\sum c_M - c_{SO_4^{2-}})\} + \left\{ (1 + K_{st}(\sum c_M - c_{SO_4^{2-}}))^2 + 4K_{st}c_{SO_4^{2-}} \right\}^{0.5}}{2K_{st}}$$

7.4. Рассчитываются концентрации свободных ионов двухвалентных металлов:

$$c_{Ca^{2+}}^{free} = c_{Ca^{2+}} / (1 + K_{st}c_{SO_4^{2-}}^{free})$$

$$c_{Mg^{2+}}^{free} = c_{Mg^{2+}} / (1 + K_{st}c_{SO_4^{2-}}^{free})$$

$$c_{Ba^{2+}}^{free} = c_{Ba^{2+}} / (1 + K_{st}c_{SO_4^{2-}}^{free})$$

$$c_{Sr^{2+}}^{free} = c_{Sr^{2+}} / (1 + K_{st}c_{SO_4^{2-}}^{free})$$

7.5. Рассчитываются условные константы равновесия K_c для заданных термобарических условий для всех сульфатных солей по формуле:

$$-\log_{10}(K_c) = a + b\tilde{T} + c\tilde{T}^2 + d\tilde{P} + eI^{0.5} + fI + gI^{1.5} + h\tilde{T}I^{0.5}$$

	барит <chem>BaSO4</chem>	целестин <chem>SrSO4</chem>	ангидрит <chem>CaSO4</chem>	бассанит <chem>CaSO4x0.5H2O</chem>	гипс <chem>CaSO4x2H2O</chem>
a	10.147	6.090	2.884	4.053	3.599
b	-4.946E-3	2.237E-3	9.327E-3	-1.792E-3	-0.266E-3
c	11.650E-6	5.739E-6	0.188E-6	11.400E-6	9.029E-6
d	-5.315E-5	-4.197E-5	-3.400E-5	-7.070E-5	-5.586E-5
e	-4.003	-2.082	-1.994	-1.734	-0.847
f	2.787	0.944	1.267	0.562	5.240E-2
g	-0.619	-8.650E-2	-0.190	-2.170E-2	8.520E-2
h	-1.850E-3	-1.873E-3	-3.195E-3	-6.436E-4	-2.090E-3

7.6. Рассчитываются индексы насыщения по сульфатным солям по следующему образцу:

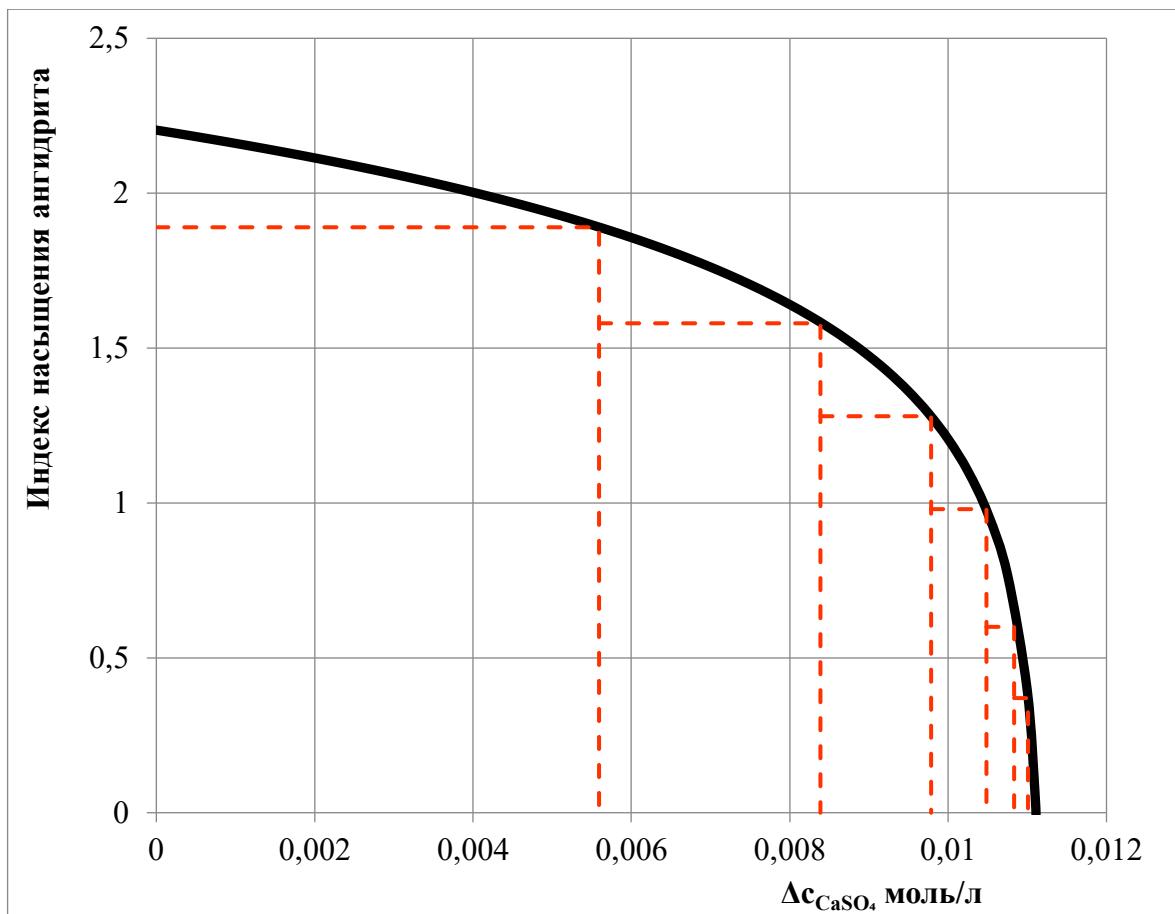
$$SI = \log_{10} (c_{Ca^{2+}}^{free} \cdot c_{SO_4^{2-}}^{free}) - \log_{10}(K_c)$$

8. Расчет максимально возможной массы осадка каждой конкретной соли производится численными методами (делением пополам) по следующему алгоритму:

8.1. В паре противоионов конкретной соли определяется тот, который в растворе находится в недостатке, например:

$$c_{Ca^{2+}} < c_{SO_4^{2-}} \text{ или } c_{Ca^{2+}} > c_{SO_4^{2-}}$$

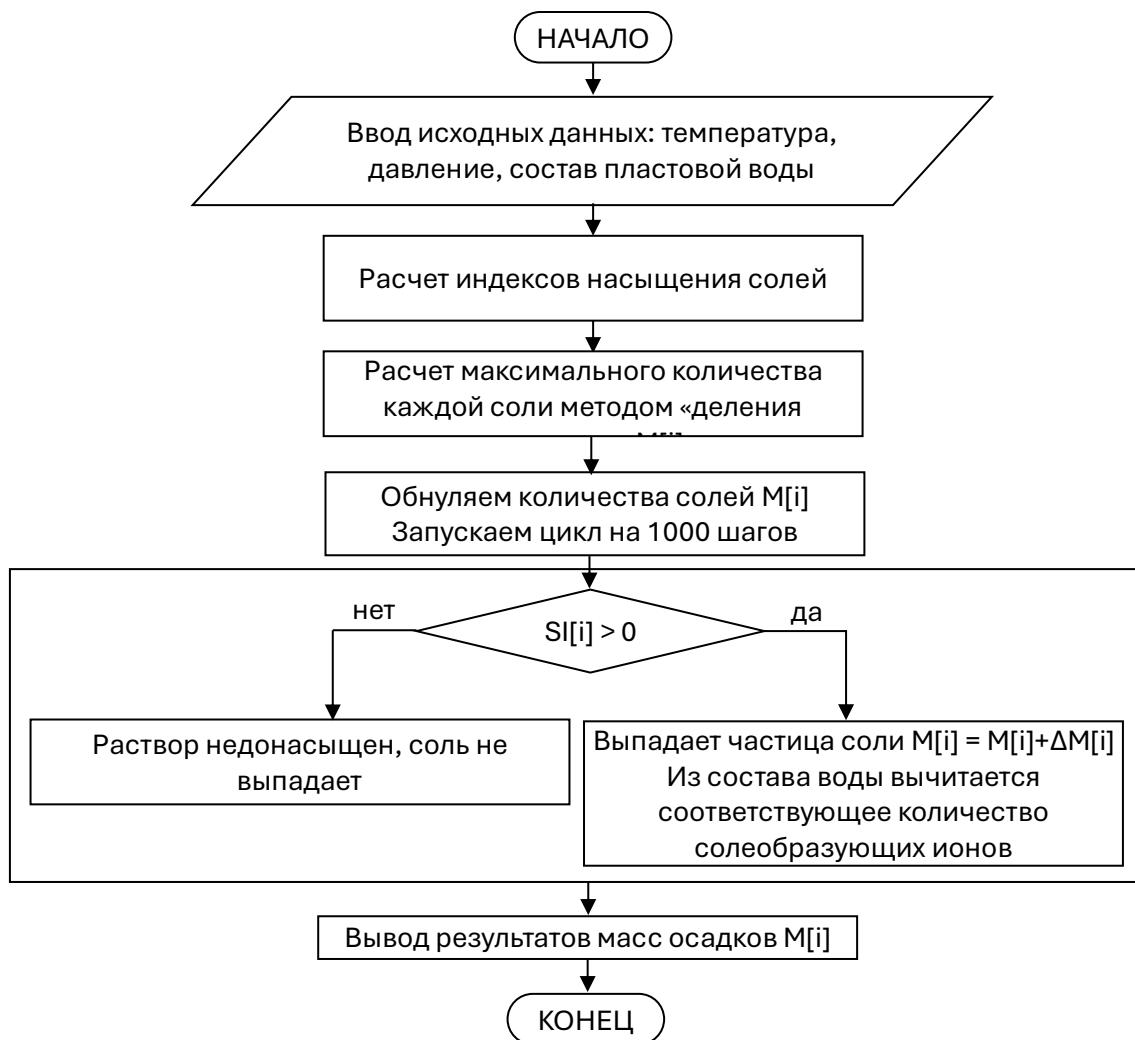
8.2. Концентрация выбранного иона принимается за максимально возможное количество данной соли (например, c_{CaSO_4}), в качестве минимально возможного значения устанавливается 0. Далее методом деления пополам определяется промежуточная точка, как это отражено на рисунке.



Для этого из концентраций противоионов вычитается значение промежуточных точек и рассчитывается значение индекса насыщения для «нового» состава воды по формулам, описанным выше. Если полученный индекс насыщения больше 0, то точка смещается вправо путем деления пополам между текущим значением и максимумом, в противном случае влево между текущим значением и минимумом. Процедура повторяется до тех пор, пока расчетный индекс насыщения не приблизиться к 0 с заданной точностью. Текущее значение Δc_{CaSO_4} считается максимально возможным количеством соли, которое может

выпасть из воды заданного состава. Для получения массы соли необходимо умножить полученное значение на молекулярную массу соли.

9. Для расчета потенциального состава соли необходимо использовать дополнительный алгоритм, так как в процессе наблюдаются конкурирующие реакции (выпадающие кальцит и гипс конкурируют за ионы кальция, барит, гипс и целестин конкурируют за сульфат-ионы). При этом скорость выпадения соли тем быстрее, чем более она пересыщена. Имитацию параллельного выпадения солей из воды можно осуществить следующим алгоритмом:



Суть алгоритма заключается в делении максимально возможного количества каждой выпадающей соли на 1000 частей/шагов (или больше, в зависимости от требуемой точности и вычислительных мощностей) и последовательного вычитания этих частей из ионного состава воды. После каждого шага заново рассчитываются индексы насыщения, чтобы исключить из цикла соли, которые уже перестали быть пересыщенными для скорректированного ионного состава воды. После достижения отрицательных индексов

насыщения для всех солей подсчитывается количество шагов/циклов, которые прошла каждая конкретная соль и умножается на размер этого шага и молекулярную массу соли.

При выходе значения параметра P за границы применимости методики и имеющихся коэффициентов результат R рассчитывается методом экстраполяции по двум результатам R_1 и R_2 , рассчитанным по ближайшим к границе точкам параметра (P_1 и P_2) в соответствии с формулой:

$$R = \frac{(R_2 - R_1) \cdot (P - P_1)}{(P_2 - P_1)} + R_1$$

Примеры расчета

На основе представленных для анализа данных по составам воды подготовлен расчет рисков выпадения неорганических солей по описанной выше методике. Расчет массы солей производится итеративным методом путем последовательного приближения к решению с заданной точностью. Исходные данные и результаты приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Исходные данные и результаты расчета рисков выпадения неорганических солей

№	Скважина	Дата отбора	Концентрация ионов, мг/л								рН	Плотность, г/см ³	Температура, °C	Давление, атм	Общая масса соли, г/л	Масса кальцита, г/л	Масса гипса, г/л	Масса ангидрита, г/л	Масса бассанита, г/л	Масса барита, г/л	Масса целестина, г/л
			Cl ⁻	SO ₄ ²⁻	HCO ₃ ⁻	Ca ²⁺	Mg ²⁺	Na ⁺ +K ⁺	Ba ²⁺	Sr ²⁺											
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
1	1	20.05.2021	12556.39	0	213.5	501	62.5	7537.1	0	0	8.01	1.013	60	30	0.344	0.344	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	1002	19.05.2021	11838.88	0	384.3	460.92	50	7204.98	0	0	7.48	1.011	60	30	0.589	0.589	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3	1015	03.12.2021	12113.27	0	213.5	1162.32	24.3	6559.6	0	0	7.30	1.010	60	30	0.336	0.336	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4	1015	11.12.2021	9975.63	0	207.4	521.04	36.45	5883.4	0	0	7.19	1.009	60	30	0.297	0.297	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5	1015	23.12.2021	11756.99	0	231.8	741.48	36.45	6795.35	0	0	7.11	1.010	60	30	0.343	0.343	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6	1039	22.12.2021	12113.27	0	195.2	601.2	24.3	7196.7	0	0	7.24	1.010	60	30	0.283	0.283	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7	1041	18.05.2021	10762.62	0	176.9	541.08	25	6382.5	0	0	7.38	1.010	60	30	0.264	0.264	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8	1044	27.03.2022	12197.64	0	225.7	841.68	24.3	6986.94	0	0	7.06	1.011	60	30	0.333	0.333	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9	1056	03.12.2021	12113.27	0	280.6	641.28	36.45	7159.9	0	0	7.15	1.009	60	30	0.415	0.415	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10	1068	11.12.2021	10688.18	0	195.2	641.28	36.45	6203.1	0	0	7.13	1.010	60	30	0.279	0.279	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11	1077	17.12.2021	9619.36	0	311.1	360.72	24.3	5898.35	0	0	7.82	1.009	60	30	0.488	0.488	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12	1078	24.04.2021	9290.74	0	292.8	320.64	75	5632.24	0	0	7.59	1.007	60	30	0.435	0.435	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13	1087	19.05.2021	11838.88	0	396.5	480.96	50	7186.58	0	0	7.48	1.009	60	30	0.609	0.609	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14	1087	19.06.2021	11099.4	0	170.8	501	48.6	6598.7	0	0	7.34	0.001	60	30	0.247	0.247	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15	109	31.01.2022	11838.88	0	164.7	641.28	60.75	6892.18	0	0	7.42	1.011	60	30	0.248	0.248	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000