МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА ПЛАСТОВОЙ НЕФТИ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ЗАПАДНОЙ СИБИРИ

MODELING OF CRUDE OIL COMPONENT COMPOSITION FOR WESTERN SIBERIA OIL FIELDS

Компонентный состав природных углеводородов в пластовой нефти варьируется в широком диапазоне на разных месторождениях.

В статье представлены результаты анализа хроматографических исследований глубинных проб нефти ряда месторождений Западной Сибири, выявившие существенную неоднородность состава, отраженную в форме кривых зависимостей концентрации мольных долей псевдокомпонент от их молекулярной массы. На графиках зависимостей концентрации мольных долей псевдокомпонент от их молекулярной массы выявлены одинарные и двойные максимумы. Проведена модификация методики математического прогнозирования компонентного состава нефтей С. Н. Whitson. Разработанная методика с помощью регулировочных параметров тарирована для ряда месторождений нефти Западной Сибири. Молекулярная масса расчётных (виртуальных) нефтей (лёгкой и тяжёлой) во всех расчётных случаях оставались без изменения — $M'_{C_{7+}} = 160$ г/моль; $M''_{C_{7+}} = 351$ г/моль. Расхождение расчётных и экспериментальных значений z_i от молекулярной массы M_i для рассмотренных месторождений не превысило 5 %. Проведённые расчёты показали, что в различных скважинах одного и того же пласта месторождения нефть может иметь различные пропорции лёгкой и тяжёлой составляющих компонентов при одинаковых значениях параметров распределения и кривизны трёхпараметрической гамма-функции распределения.

Разработана математическая модель, позволяющая при разбивке остатка разгонки нефти прогнозировать композиционный состав тяжёлых компонентов с получением расчётных зависимостей мольных долей псевдокомпонентов от их молекулярной массы.

The component composition of natural hydrocarbons in crude oil varies in a wide range for different fields.

The results of the analysis of deep oil samples chromatographic research for some Western Siberia oil fields are presented. Significant heterogeneity of the composition presented by the are revealed. On the graphs of the dependence curves of the pseudo-component mole fractions concentration from their molecular weight single and double maxima were discovered. A modification of S.N. Whitson method of mathematical prediction of oil component composition was made. The developed technique by adjusting parameters is calibrated for some oil fields in Western Siberia. The molecular weight of the calculated (virtual) oils (light and heavy) remained unchanged in all calculated cases — $M'_{C_{7+}} = 160$ g/mol; $M''_{C_{7+}} = 351$ g/mol. The discrepancy between the calculated and experimental values z_i from the molecular weight M_i for the examined oil fields did not exceed 5 %. The performed calculations showed that in different wells of the same oil field formation oil can have different proportions of light and heavy components with the same distribution parameters and the curvature of the three-parameter gamma distribution function.

A mathematical model is developed that allows to predict the component composition of heavy components obtaining the calculated dependences of mole fractions of pseudo-components from their molecular weight.

Михайлов В. Г.,
Волков М. Г., Халфин Р. С.
ООО «РН-УфаниПнефть»,
г. Уфа, Российская Федерация

V. G. Mikhailov,
M. G. Volkov, R. S. Khalfin
RN-UfaNIPneft LLC,
Ufa, Russian Federation

Ключевые слова:
скважина, компонентный состав,
псевдокомпонент, анализ,
хроматография, месторождение,
исследование, молекулярная масса,
методика, расчёт.

Key words:
well, component composition,
pseudo-component, analysis,
chromatography, oil field,
research, molecular weight,
technique, calculation.

В настоящее время существенное внимание уделяется исследованиям, направленным на развитие и уточнение методов описания фазового поведения систем природных углеводородов как в пластовых, так и поверхностных условиях, что обусловлено необходимостью повышения качества проектирования разработки и обустройства нефтяных и газоконденсатных месторождений, определения оптимальных технологических условий промысловой подготовки, транспорта и переработки добываемого сырья.

Компонентный состав систем природных углеводородов в пластовой нефти варьируется в широком диапазоне от месторождения к месторождению.

Практически все углеводородные системы включают в себя как лёгкие, так и тяжёлые компоненты. Следует отметить, что лабораторные исследования не обеспечивают полной информацией по компонентному составу нефти, в частности, за мерами мольных долей всех тяжёлых компонент. Зачастую отчёт об исследовании компонентного состава пластовой нефти обрывается на группе углеводородов C_7 . Используя исходные данные в таком урезанном виде, невозможно проведение точного расчёта физико-химических свойств пластового флюида и анализа поведения его фаз путём точного решения уравнения их состояния. Для этого необходимо знание мольных долей (концентра-

ций), критических параметров, ацентрических коэффициентов и бинарных коэффициентов для каждого из компонентов смеси. В связи с этим, если компонентный состав остатка C_{n+} является неопределяемым в процессе лабораторных исследований, то для проведения численного моделирования фазового равновесия углеводородной системы требуется методика разбивки C_{n+} на псевдокомпоненты с дальнейшей тарировкой их критических параметров при настройке модели по результатам экспериментальных данных.

Целью работы является разработка математической модели композиционного состава тяжёлых компонентов нефти для разбивки остатка углеводородов C_{n+} с получением расчётной зависимости мольных долей псевдокомпонентов от их молекулярной массы.

Лабораторные методы исследования компонентного состава пластовых нефтей

Основной принцип исследования химического состава нефти заключается в том, что, комбинируя разнообразные методы разделения флюидов, достигают постепенного упрощения состава отдельных фракций. Химическая природа и молекулярное строение отдельных компонентов нефти при этом не должны изменяться. Полученные фракции затем анализируются химическими, хроматографическими, спектральными и другими методами. В результате в зависимости от молекулярной массы и сложности смеси в выделенных фракциях удаётся установить либо содержание индивидуальных чистых веществ, либо содержание отдельных групп углеводородов (псевдокомпонент) с одинаковым количеством атомов

углерода. При проведении разделения углеводородов на фракции в соответствии с их температурами кипения в них обычно кроме алканов могут попадать циклоалканы и арены (рисунок 1).

Алканы (ациклические соединения) — углеводородные соединения с прямыми или разветвлёнными цепями (нормальные и изоалканы соответственно). Атомы углеводорода в алканах образуют единичные ковалентные соединения.

Циклоалканы — молекулы углеводородов, содержащие кольцевую структуру. Кольца могут состоять из пяти, шести, иногда семи атомов углерода. Большинство циклических алканов имеют в молекуле больше чем одно кольцо.

Арены (ароматические соединения) — молекулы углеводородов, в состав которых входит по крайней мере одно кольцо бензола. Ароматические соединения в нефти могут включать в себя цепи алканов и алкановые кольца.

Гетерокомпонентные соединения — молекулы углеводородов, состоящие из вышеперечисленных групп и включающие в себя один или более гетероатомов (N, S, O, V, Ni, Fe).

В настоящее время для определения распределения фракций нефти по температурам кипения широко используется метод газовой хроматографии. Он предназначен для определения индивидуальных чистых углеводородов C_1-C_5 и компонентно-фракционного состава псевдокомпонент углеводородов C_6-C_{44} с учётом нелетучего остатка, выкипающего при температуре выше 545°C .

В нефтяных соединениях алканы обычно представлены сравнительно небольшим числом струк-

Рисунок 1.

Влияние структуры и размера полимерных молекул на температуру кипения (Altgelt and Boduszynski (1993))

тур (среди изомеров), в то время как циклоалканы (особенно в углеводородах состава C_{10} и выше) присутствуют в виде большого числа структур, концентрация каждой из которых весьма незначительна. Хроматограммы смесей циклоалканов имеют обыкновенно вид горба, т. е. углеводороды элюируются сплошным фоном (рисунок 2). При прохождении анализируемого компонента через детектор хроматографа происходит отклонение уровня сигнала детектора от нулевой линии в виде пика. Пик на хроматограмме характеризуется временем удерживания – временем от начала анализа до выхода пика на максимум. Время удерживания — качественная характеристика анализируемого компонента, площадь и высота — количественные характеристики, необходимые для определения молекулярной массы анализируемого компонента (рисунок 2, б).

Таким образом, хроматографические исследования пластовой нефти позволяют получить зависимость мольных долей псевдокомпонента, состоящего из смеси полимерных молекул с одинаковым числом атомов углерода, от их молекулярной массы. На рисунке 3 приведены результаты хроматографических исследований глубинных проб нефти на ряде месторождений Западной Сибири (до содержания атомов углерода C_{44+}). Такой подробный хроматографический анализ пластовых проб нефти позволяет выявить существенную неоднородность в форме кривых зависимостей концентрации мольных долей псевдокомпонент от их молекулярной массы. На кривой зависимости концентрации псевдокомпонент возможно наличие одного или двух максимумов (рисунок 3, а и б соответственно).

Рисунок 2.

Графическое представление сигнала газохроматографического детектора как функции времени

Рисунок 3.

Хроматографические данные глубинных проб пластовой нефти ряда месторождений Западной Сибири

Метод математического прогнозирования компонентного состава нефтей с содержанием атомов углерода C_{n+}

Для разбиения состава нефтей с содержанием атомов углерода C_{n+} , как правило, применяют метод, предложенный С. Н. Whitson. Трёхпараметрическое гамма-распределение, предложенное Whitson [1–3], является наиболее универсальной моделью для описания распределения мольных долей компонентов нефти в области содержания атомов углерода C_{n+} . Данное распределение тестировалось на базе хроматографических исследований 44 образцов различных типов нефтей и газового конденсата. Предполагалось, что вероятностная плотность распределения фракций в группе C_{n+} определяется следующей гамма-функцией:

$$P(M) = \frac{(M - \eta)^{\alpha-1} \exp(-(M - \eta)/\beta)}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)}, \quad (1)$$

где M — молекулярная масса компонентов нефти, г/моль;

$\beta = \frac{M_{n+} - \eta}{\alpha}$ — параметр распределения;

α — параметр, определяющий кривизну распределения, его значения обычно колеблются в диапазоне $\alpha = 0,5 \dots 2,5$. Применение гамма-функции для описания тяжёлых нефтей, битумов и остатков разгонки показало, что верхний предел может составлять $\alpha = 25 \dots 30$ (рисунок 4);

$\eta = 14N$, где $N = 7$ — примерное минимальное значение молекулярной массы компонента в группе C_{7+} ;

$\Gamma(\alpha)$ — гамма-функция.

Накопленная функция распределения непрерывной случайной величины $XP(X < x)$ — интеграл $P(x)$ от η до x :

$$P(X \leq x) = \int_{\eta}^x p(x) dx = e^{-y} y^\alpha \Gamma(\alpha) \sum_{j=0}^{\infty} y^j \left[\prod_{k=0}^j (\alpha + k) \right]^{-1}, \quad (2)$$

где $y = \frac{x - \eta}{\beta}$.

Мольная доля в группе с содержанием атомов углерода C_{7+} фракции i , имеющей молекулярную массу в границах M_{i-1} , M_i , определяется интегралом $P(M)$ от M_{i-1} до M_i

$$f_i = \int_{M_{i-1}}^{M_i} P(M) dM = P(M \leq M_i) - P(M \leq M_{i-1}). \quad (3)$$

Мольная доля в смеси i -го компонента фракции равна

$$z_i = z_{C7+} f_i, \quad (4)$$

где z_{C7+} — мольная доля группы с содержанием атомов углерода C_{7+} .

На рисунке 4, а приведён образец хроматографических данных для лёгких ($M = 350$ г/моль), средних ($M = 600$ г/моль) и тяжёлых ($M = 1050$ г/моль) нефтей. На рисунке 4, б представлены примеры моделирования компонентного состава различных нефтей с использованием уравнения (1).

а) экспериментальные хроматографические данные для группы фракций после различной степени разгонки;

б) влияние величины параметра α на кривизну гамма-функции

Рисунок 4.

Распределение компонент по гамма-функции

Расчёт компонент по гамма-функции позволяет получить монотонное распределение мольных долей содержания компонентов нефти от их молекулярной массы. Для того чтобы использовать метод, предложенный *С. Н. Whitson* для математического описания компонентного состава нефти с ярко выраженными двумя максимумами (рисунок 3, а), было сделано предположение, что мы имеем дело со смесью двух нефтей — лёгкой и тяжёлой. Сравнение хроматографических данных проб с содержанием атомов углерода до C_{n44+} месторождения № 2 (пласт 1, скважина № 4, молекулярная масса пластовой нефти 183,06 г/моль, $M_{C1-C6} = 14,68$ г/моль; $Z_{C1-C6} = 0,358$) с расчётными результатами суммы двух распределений мольных долей по методике *С. Н. Whitson* показало, что первое распределение с параметрами $M'_{C7+} = 160$ г/моль; $z'_{C7+} = 0,292$; $\alpha'' = 1,6$; второе — $M''_{C7+} = 351$ г/моль; $z''_{C7+} = 0,35$; $\alpha'' = 45$ (рисунок 5).

Как видно из сравнения экспериментальных и расчётных данных, приведённых на рисунке 5, предложенная гипотеза моделирования зависимости мольных долей содержания компонентов нефти от их молекулярной массы (методика *С. Н. Whitson*) для композиции двух нефтей (лёгкой и тяжёлой) позволила обеспечить как качественное, так и количественное совпадение расчётных и экспериментальных данных. Для этого кроме подбора параметров распределения и кривизны (методика *С. Н. Whitson*) для лёгкой и тяжёлой нефтей было необходимо подобрать виртуальные

значения молекулярных масс их остатков M'_{C7+} и M''_{C7+} , а также их процентное содержание z'_{C7+} и z''_{C7+} в нефти.

Для апробации предложенной гипотезы было проведено сопоставление результатов хроматографических исследований глубинных проб нефти, отобранных из скважин пяти месторождений Западной Сибири, с расчётными данными. На рисунке 6 приведено сравнение результатов моделирования разложения остатка нефти C_{7+} с экспериментальными данными хроматографии C_{44+} . В таблице 1 приведены значения регулировочных параметров расчёта трёхпараметрической гамма-функции распределения (1) для различных месторождений.

Из представленных на графиках данных следует, что расчётные данные с использованием полученных зависимостей достаточно хорошо согласуются с лабораторными результатами.

На рисунке 7 приведены результаты сопоставления расчётных и экспериментальных данных композиционного состава нефти с содержанием атомов углерода C_{44+} месторождения № 1, отобранных из различных скважин одного пласта. Из экспериментальных данных следует, что даже для одного пласта композиционный состав нефти отличается как по количеству мольных долей соответствующих псевдокомпонентов, так и по суммарной молекулярной массе нефти (для скважины № 1 $M = 179,91$ г/моль; для скважины № 2 $M = 165,61$ г/моль).

Молекулярная масса пластовой нефти 183,06 г/моль;
 $M_{C1-C6} = 14,68$ г/моль; $Z_{C1-C6} = 0,358$; $M'_{C7+} = 160$ г/моль;
 $z'_{C7+} = 0,292$; $\alpha' = 1,6$; $M''_{C7+} = 351$ г/моль; $z''_{C7+} = 0,35$; $\alpha'' = 45$)

Рисунок 5.

Расчётная и экспериментальная зависимости мольной доли z_i от молекулярной массы (месторождение № 2, пласт ЮС₂, скважина № 4)

Рисунок 6.

Примеры сопоставления расчётных и экспериментальных зависимостей мольной доли псевдокомпонента z_i от молекулярной массы M_i для различных месторождений

Таблица 1.

Значения регулировочных параметров расчёта трёхпараметрической гамма-функции распределения (согласно уравнению (1) для различных месторождений)

Месторождение	α_1	α_2	η	Молекулярная масса нефти, г/моль	M'_{C7+} , г/моль	M''_{C7+} , г/моль	z'_{C7+}	z''_{C7+}
1	1,6	30	83	179,91	160	351	0,404	0,27
2	1,6	45	83	193,06	160	351	0,292	0,35
3	1,2	30	103	211,73	160	351	0,282	0,40
4	1,0	95	83	123,63	160	351	0,279	0,12
5	1,0	25	89	120,71	160	351	0,448	0,06

Моделирование зависимостей z_i от молекулярной массы псевдокомпоненты M_i для остатка нефтей с содержанием атомов углерода C_{7+} , приведённых на рисунке 7, осуществлялось при заданных одинаковых значениях $\alpha_1 = 1,6$; $\alpha_2 = 42$; $\eta = 83$; $M'_{C7+} = 160$ г/моль; $M''_{C7+} = 361$ г/моль. Значения z'_{C7+} и z''_{C7+} подбирались в зависимости от молекулярной массы образцов каждой нефти.

Таким образом, проведённые расчёты показали, что в различных скважинах одного пласта месторождения нефть может иметь разные пропорции лёгкой и тяжёлой составляющих при одинаковых значениях параметров распределения и кривизны трёхпараметрической гамма-функции распределения.

Рисунок 7.

Расчётные и экспериментальные зависимости мольной доли z_i от молекулярной массы (пласт 1)

Выводы

1. Проведена модификация методики С. Н. Whitson для моделирования зависимостей мольной доли псевдокомпонента углеводородов z_i от их молекулярной массы M_i для остатка нефтей с содержанием атомов углерода C_{7+} с немонотонно изменяющейся концентрацией.

2. Разработанная методика с помощью регулировочных параметров тарирована для ряда месторождений нефти Западной Сибири. Молекулярная масса расчётных (виртуальных) нефтей (лёгкой и тяжёлой) во всех расчётных случаях оставались без изменения — $M'_{C_{7+}} = 160$ г/моль;

$M''_{C_{7+}} = 351$ г/моль. Расхождение расчётных и экспериментальных значений z_i от молекулярной массы M_i для рассмотренных месторождений не превысило 5 %.

3. Разработана методика моделирования композиционного состава остатка разгонки нефтей с содержанием атомов углерода C_{7+} , отобранных из различных скважин одного и того же месторождения, одного пласта, по заданным значениям молекулярной массы нефти M и полученных лабораторно для тестируемой скважины значениям регулировочных параметров α_1 ; α_2 ; η ; $M'_{C_{7+}}$; $M''_{C_{7+}}$.

СПИСОК ИСПОЛЪЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Whitson C. H. Effect of C_{7+} Properties on Equation-of-State Predictions // *Paper SPE 11200 presented Annual Technical Conference and Exhibition, New Orleans, 1982.*
- 2 Whitson C. H. Effect of C_{7+} Properties on Equation of State Predictions // *AIME, SPEJ* (December 1984) 685; Trans., 277.
- 3 Whitson C. H., Andersen T.F., Soreide I., Chorn L.G., Mansoori G.A. C_{7+} Characterization of Related Equilibrium Fluids Using the Gamma Distribution, C_{7+} Fraction Characterization // *Advances in Thermodynamics*. New York City: Taylor & Francis, 1989. № 1. P. 35–56.
- 4 Whitson C. H., Brule M. R., Henry L. Phase Behavior // *SPE Monograph. First Printing. Doherty Memorial Fund of AIME Society of Petroleum Engineers Inc. Richardson, Texas, 2000. 230 p.*
- 5 Гервиц Э. С., Скрипка В.Г. Хроматографический метод определения фракционного состава нефтей и конденсатов и разделение их на «условные компоненты» // *Сб. науч. тр. / ВНИИ. М., 1983. Вып. 83. С. 38–45.*

REFERENCES

- 1 Whitson C. H. Effect of C_{7+} Properties on Equation-of-State Predictions. *Paper SPE 11200 presented Annual Technical Conference and Exhibition, New Orleans, 1982.*
- 2 Whitson C. H. Effect of C_{7+} Properties on Equation of State Predictions. *AIME, SPEJ* (December 1984) 685; Trans., 277.
- 3 Whitson C. H., Andersen T. F., Soreide I., Chorn L. G., Mansoori G. A. C_{7+} Characterization of Related

Equilibrium Fluids Using the Gamma Distribution, C_{7+} Fraction Characterization. *Advances in Thermodynamics*, New York City, Taylor & Francis, 1989, № 1, pp. 35–56.

4 Whitson C. H., Brule M. R., Henry L. Phase Behavior. *SPE Monograph. First Printing. Doherty Memorial Fund of AIME Society of Petroleum Engineers Inc. Richardson, Texas, 2000. 230 p.*

5 Gervits E. S., Skripka V. G. [Chromatographic method for determining the fractional composition of oils and condensates and dividing them into «conditional components»]. *Trudy VNII*, 1983, no. 83, pp. 38–45. [in Russian].

Михайлов В. Г., доктор физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Департамента инновационных технологий ООО «РН-УфаНИПИнефть», г. Уфа, Российская Федерация

V. G. Mikhailov, Doctor of Physics and Mathematics, Leading Researcher, Department of Innovative Technologies, RN-UfaNIPIneft LLC, Ufa, Russian Federation

Волков М. Г., канд. техн. наук, директор Департамента развития систем проектирования ООО «РН-УфаНИПИнефть», г. Уфа, Российская Федерация
M. G. Volkov, Candidate of Engineering Sciences, Director of the Department for the Development of Design Systems RN-UfaNIPIneft LLC, Ufa, Russian Federation

Халфин Р. С., главный специалист Департамента развития систем проектирования ООО «РН-УфаНИПИнефть», г. Уфа, Российская Федерация
R. S. Khalfin, Chief Specialist of the Department for the Development of Design Systems, RN-UfaNIPIneft LLC, Ufa, Russian Federation