УДК 622.276+622.279:004.94

Композиційне моделювання покладів вуглеводнів у програмному комплексі ATLAS: від рівняння стану до запасів за PRMS

Коваль В.І., *к.т.н., заступник директора з розробки, експерт ДКЗ, e-mail v.koval@brend-vikltd.com;*
ТзОВ «Бренд-Вік ЛТД», Київ, Україна

Представлено композиційну модель програмного комплексу ATLAS для обґрунтування запасів і проєктних рішень з розробки газоконденсатних і нафтогазоконденсатних покладів. Її основою є нове кубічне рівняння стану KOVAL – узагальнення рівняння Брусиловського з α-функцією Twu, двопараметричною об'ємною трансляцією і коефіцієнтами парної взаємодії, каліброваними за GERG-2008. Для 17 речовин від N_2 до C_{12} середня похибка тиску насиченої пари становить 0,33 %, густини рідини – 0,30 % відносно еталонних рівнянь стану. Початковий склад флюїду розраховується з гравітаційно-хімічної рівноваги від газонафтового контакту, на якому тиск дорівнює тиску насичення: поклад розділяється на газову шапку і нафтову облямівку, а контакт, що суперечить пластовому тиску, виявляється автоматично. Модель пласта працює на декартових і нерегулярних (PEBI) сітках з розломами і тріщинами гідророзриву та розраховується разом зі свердловинами і наземною мережею у відкладеному або спільному режимі. Розглянуто також одночасно-сумісну експлуатацію кількох горизонтів і закачування CO_2 з домішками для зберігання (CCS). Основні показники еталонної задачі SPE4 лежать у межах розкиду опублікованих рішень учасників. Профілі видобутку передаються в модуль оцінки ресурсів і запасів за PRMS.

Ключові слова: композиційне моделювання, рівняння стану, газоконденсатний поклад, нерегулярна сітка, гідророзрив пласта, PRMS.

Compositional simulation of hydrocarbon reservoirs in the ATLAS software suite: from the equation of state to PRMS reserves

Koval Vitalii, *PhD (Engineering), Deputy Director for Field Development, SCMR expert, e-mail v.koval@brend-vikltd.com;*
Brend-Vik LTD LLC, Kyiv, Ukraine

The compositional model of the ATLAS software suite is presented. It is intended to substantiate reserves and field development decisions for gas-condensate and oil–gas-condensate reservoirs. The model is built on KOVAL, a new cubic equation of state that generalizes the Brusilovsky equation with the Twu alpha function, a two-parameter volume translation and binary interaction coefficients calibrated against GERG-2008. For 17 substances from N_2 to C_{12}, the mean deviation from reference equations of state is 0.33% in vapour pressure and 0.30% in liquid density. The initial fluid composition is computed from gravity–chemical equilibrium referenced to the gas–oil contact, where pressure equals saturation pressure: the accumulation is split into a gas cap and an oil rim, and a contact that contradicts the reservoir pressure is flagged automatically. The reservoir model runs on Cartesian and unstructured (PEBI) grids with faults and hydraulic fractures and is coupled with wells and the surface network in deferred or simultaneous mode. Commingled multi-horizon production and injection of impure CO_2 for storage (CCS) are also covered. The key results of the SPE4 benchmark fall within the spread of the published participants' solutions. Production profiles are passed to the PRMS resources and reserves module.

Keywords: compositional simulation, equation of state, gas-condensate reservoir, unstructured grid, hydraulic fracturing, PRMS.

Вступ. Значна частина запасів вуглеводнів України зосереджена в газоконденсатних і нафтогазоконденсатних покладах, де склад флюїду змінюється з глибиною, а вилучення конденсату залежить і від режиму тиску в пласті, і від умов сепарації на поверхні. Обґрунтування запасів таких покладів за PRMS (Petroleum Resources Management System – система управління нафтовими ресурсами) (Society of Petroleum Engineers [SPE], 2018) потребує композиційної моделі: модель «чорної нафти» (black-oil) описує ретроградну конденсацію лише наближено і не відстежує розподілу компонентів за глибиною та складу потоку до установки комплексної підготовки газу (УКПГ). Точність композиційного розрахунку визначає насамперед рівняння стану: класичні кубічні рівняння помиляються в густині рідини на кілька відсотків, а еталонне рівняння GERG-2008 (Kunz & Wagner, 2012) охоплює лише 21 компонент без фракцій C_{7+} і надто повільне для гідродинамічних сіток.

Мета роботи – створити і перевірити в програмному комплексі ATLAS композиційну модель, що поєднує точне рівняння стану, рівноважну ініціалізацію покладу з газовою шапкою і нафтовою облямівкою, нерегулярні сітки з тріщинами гідророзриву пласта (ГРП) і

розрахунок разом зі свердловинами та наземною мережею, і довести її результати до категорій запасів за PRMS.

Рівняння стану. Рівняння KOVAL зберігає чотирипараметричну структуру Брусиловського (Brusilovsky, 1992):

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a_c \alpha(T)}{(v+c)(v+d)} \tag{1}$$

де P – тиск; T – температура; v – молярний об'єм; R – універсальна газова стала; a_c, b, c, d – коефіцієнти, що виражаються через критичні параметри речовини і параметри Z_c^*, W_c; $\alpha(T)$ – температурна функція. Прийнято $W_c = 0{,}75$ (тоді $c = d$) – структуру, оптимальну для густини рідини. Функцію $\alpha(T)$ узято у формі Twu et al. (1991) з окремою надкритичною гілкою, густину уточнено двопараметричною об'ємною трансляцією (Abudour et al., 2012). Для CO_2, N_2, O_2, CH_4 і H_2S рівняння прив'язане до еталонних рівнянь стану у формі вільної енергії Гельмгольца, коефіцієнти парної взаємодії $k_{ij}(T)$ калібровано за GERG-2008, параметри речовин – за еталонними даними NIST (National Institute of Standards and Technology) у реалізації CoolProp (Bell et al., 2014). Розрахунок властивостей займає 2,1 мкс на комірку сітки.

Ініціалізація покладу. Розподіл складу за глибиною визначається умовою гравітаційно-хімічної рівноваги (Høier & Whitson, 2001):

$$\ln f_i(h) = \ln f_i(h_0) + \frac{M_i g (h-h_0)}{RT}, \quad i = 1, \ldots, N \tag{2}$$

де f_i – летючість i-го компонента; M_i – його молярна маса; g – прискорення вільного падіння; h – глибина; h_0 – глибина газонафтового контакту (ГНК); N – кількість компонентів. Тиск на ГНК не задається, а обчислюється як тиск насичення флюїду за пластової температури; від контакту газова частина розраховується вгору, нафтова – вниз, за потреби з термодифузією (моделі Haase або Kempers). Програма знаходить глибину, де пластовий тиск дорівнює тиску насичення, і попереджає, якщо заданий ГНК суперечить тиску на датумі; у недонасиченій колоні газова шапка не будується. Фазу комірки визначає тип насичення (роса чи кипіння), а не густина, що принципово для близькокритичних флюїдів; запаси газу шапки і нафти облямівки підраховуються окремо.

Сітки і тріщини ГРП. Крім декартових, використовуються нерегулярні сітки PEBI (perpendicular bisection) – сітки Вороного (Heinemann et al., 1991), грані яких лягають на сліди розломів і межі зон, зі згущенням кільцями біля свердловин і смугами вздовж тріщин (рис. 3). Тріщини ГРП переносяться з модуля дизайну ГРП у модель пласта одним із двох взаємовиключних способів: як ефективний скін свердловини (Cinco-Ley & Samaniego-V., 1981) або як явні тріщини методом EDFM (embedded discrete fracture model – вбудовані дискретні тріщини) (Moinfar et al., 2014) з поправкою на недарсіївську течію.

Пласт – свердловина – мережа. Склад KOVAL передається з пласта через насосно-компресорні труби, штуцер і шлейфи до низькотемпературної сепарації (НТС) і стабілізації конденсату без переходу на спрощену модель флюїду. У відкладеному режимі (за замовчуванням) прогін пласта записує потік кожної свердловини, і наземне обладнання перераховується без повторного прогону. У спільному режимі на кожному кроці за часом тиск на усті, течія в стовбурі і приплив узгоджуються ітераціями (до трьох, допуск 0,02 МПа).

Результати. Для 17 чистих речовин від N_2 до C_{12} середня похибка KOVAL відносно еталонних рівнянь стану становить 0,33 % за тиском насиченої пари і 0,30 % за густиною рідини (рис. 1); рівень 0,5 % перевищено лише за тиском насиченої пари C_9, C_{11} і C_{12} (0,52–0,73 %). Для сумішей медіанне відхилення фазових обвідних природного газу від GERG-2008 становить 0,3–0,8 %, розрахунок установки НТС відрізняється від Aspen HYSYS у середньому на 0,45 %.

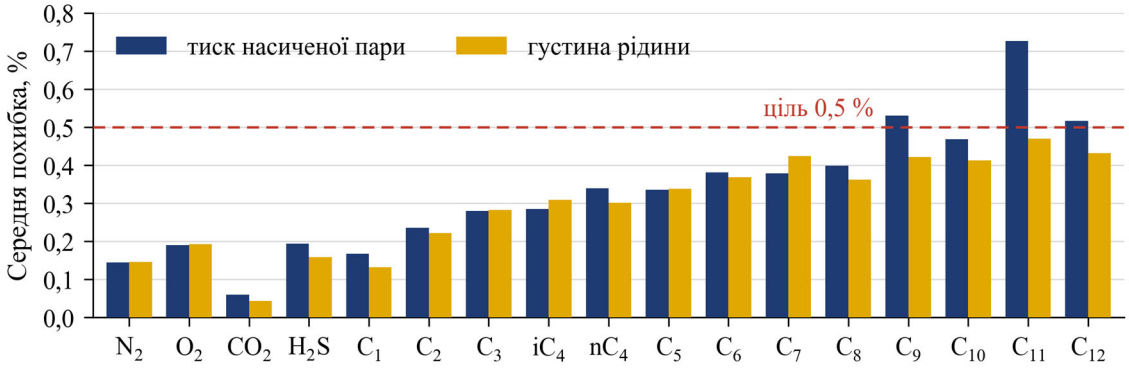

Рис. 1. Середня похибка рівняння стану KOVAL для 17 чистих речовин відносно еталонних рівнянь стану (NIST, CoolProp)

Рівноважний розподіл для дев'ятикомпонентного флюїду за 380 K наведено на рис. 2: на ГНК тиск дорівнює тиску насичення 23,75 МПа, густина стрибком змінюється з 276 до 369 кг/м^3, вміст C_{5+} – з 8,7 до 15,3 мол. %. На одному з реальних горизонтів перевірка показала недонасичення колони на 3,5 МПа, тому газову шапку не побудовано і поклад підраховано як нафтовий.

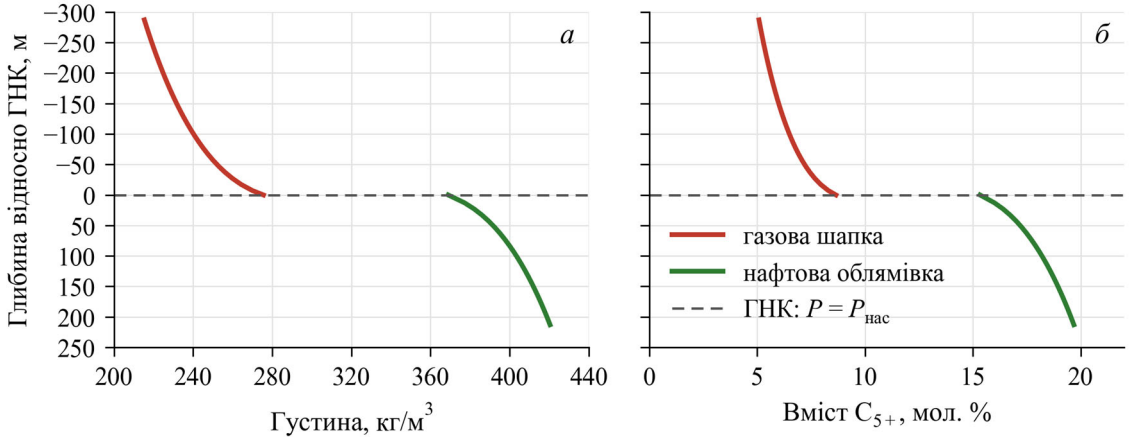

Рис. 2. Рівноважний розподіл густини (*а*) і вмісту C_{5+} (*б*) за глибиною відносно ГНК: дев'ятикомпонентний флюїд, T = 380 K, на ГНК $P = P_{нас}$ = 23,75 МПа

Сітка PEBI тестової моделі (809 комірок, рис. 3) покриває гранями 99,9 % довжини сліду розлому, а відносна нев'язка сумарної площі комірок має порядок 10^{-9}, тож підраховані об'єми не залежать від типу сітки; привибійна комірка на одній з моделей має площу 7 м^2 замість 10 533 м^2 на декартовій сітці. Довжина тріщини 240 м і площа її контакту з пластом 3 600 м^2 відтворюються точно на обох типах сіток, тоді як сходинкове подання похилої тріщини на декартовій сітці завищує площу контакту до 41 %; поправка на недарсіївську течію зменшує накопичений видобуток газу на 3,7 %.

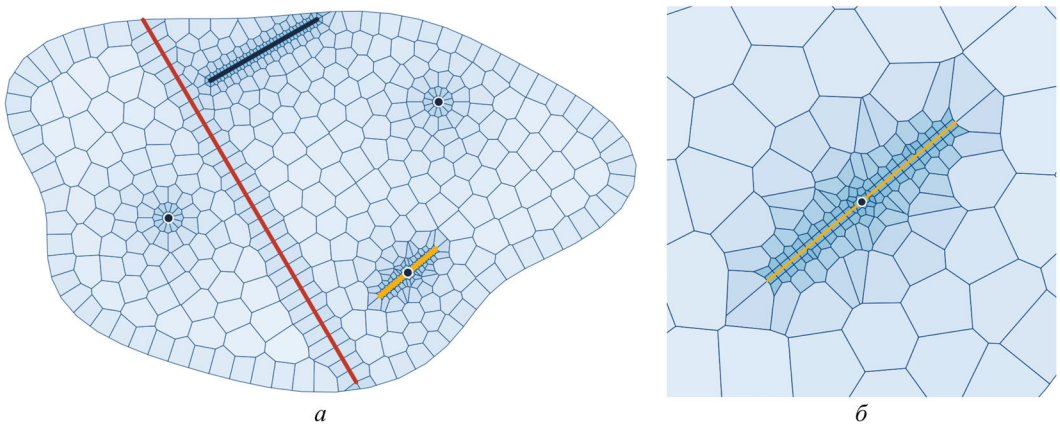

Рис. 3. Сітка PEBI, побудована в ATLAS: *а* – модель з розломом (червоний), горизонтальним стовбуром (чорний) і тріщиною ГРП (жовта); *б* – згущення комірок уздовж тріщини

У спільному режимі з навмисно хибного початкового наближення 99 МПа тиск на усті за ітераціями швидко наближається до робочого (33,9; 14,4; 8,5; 6,8 МПа), баланс маси установки – 117,8 т/д на виході проти 117,9 т/д на вході. У відкладеному режимі перебір тиску сепарації (2, 4, 6, 10 МПа) дав найбільший вихід стабільного конденсату 300,9 м^3/д за 4 МПа.

Верифікацію виконано на задачах SPE Comparative Solution Project. У задачі SPE1 (Odeh, 1981) задані дебіти витримано з нев'язкою балансу маси 0,003 % для нафти і 0,04 % для газу; задачу SPE3 (Kenyon & Behie, 1987) – сайклінг газоконденсатного покладу, 11 компонентів – розраховано в трьох варіантах за 52–95 с на варіант. Для теплових задач SPE4 опубліковано результати всіх учасників (Aziz et al., 1987), і основні показники ATLAS лежать у межах їхнього розкиду (табл. 1, одиниці статті; BTU – британська теплова одиниця). Два проміжні показники варіанта 1A дещо виходять за межі діапазонів, зчитаних з графіків статті: вода на 365-ту добу (8,34 проти 8,5–10 тис. барелів) і тепловтрати на 730-ту добу (1183 проти 1000–1150 млн BTU).

Таблиця 1. Результати ATLAS у задачах SPE4 порівняно з розкидом результатів учасників (Aziz et al., 1987)

Показник	ATLAS	Учасники
Варіант 1A – циклічна закачка пари, 3 роки		
Накопичений видобуток нафти, тис. барелів	18,40	18–21
Накопичені тепловтрати, млн BTU	1766	1500–1900
Початкові запаси нафти, тис. барелів	502,0	498,3–506,8
Нев'язка балансу нафти, барелів	23	12–44
Варіант 2A – витіснення парою, 10 років		
Накопичений видобуток нафти, тис. барелів	178,5	140–185
Відношення «нафта / пара»	0,163	0,13–0,17
Накопичені тепловтрати, млрд BTU	110,2	105–118
Прорив пари: ближня / дальня свердловина, діб	346 / 1612	257–539 / 1398–2245

Модель реального родовища (39 810 комірок, 119 430 невідомих) рахує місячний крок за 26,4 с (до оптимізації розв'язувача – 631,8 с), а продовження з рестарту дає той самий результат, що й безперервний прогін. Профілі видобутку передаються в модуль ГЕО PRMS: оцінка запасів методом Монте-Карло, геологічний ризик, категорії 1P/2P/3P, 1C/2C/3C і 1U/2U/3U (SPE, 2018); клас ресурсів обирає експерт, а програма документує обґрунтування кожного числа.

Одночасно-сумісна експлуатація. Горизонти мають власні сітки, флюїди й тиски і зв'язані лише свердловиною зі спільним вибійним тиском, тож перетікання визначається розв'язком. Видобуток між горизонтами розподіляється узгодженням моделі з даними промислової геофізики, роздільних випробувань і геохімії: на синтетичному двійнику 97,5 % часток лежать у межах ±2σ від істинних, а пропорція $k{\cdot}h$ помиляється до 0,28.

Закачування і зберігання CO_2 (CCS). Розраховано закачування CO_2 з домішками в аквіфер з відбором води (Wang et al., 2026). γ–φ-опис водної фази у флеші KOVAL зменшує похибку розчинності CO_2 відносно еталона (Spycher & Pruess, 2005) з 19,2 до 3,9 %; розчинений CO_2 більше залежить від вертикальної проникності, ніж від моделі рівноваги.

Наукова новизна роботи: 1) узагальнення рівняння стану Брусиловського, що в кубічній формі дає для чистих речовин середню похибку близько 0,3 % відносно еталонних рівнянь стану; 2) алгоритм рівноважної ініціалізації покладу, у якому тиск на ГНК визначається умовою $P = P_{\text{нас}}$, фаза комірки – типом насичення, а неузгоджений контакт виявляється автоматично; 3) поєднання в одній композиційній моделі сіток PEBI, тріщин ГРП і розрахунку разом зі свердловинами та мережею у двох режимах; 4) ув'язка горизонтів спільним вибійним тиском і розподіл видобутку між ними з оцінкою похибки часток.

Висновки. 1. Рівняння стану KOVAL забезпечує в кубічній формі похибку 0,33 % за тиском насиченої пари і 0,30 % за густиною рідини для 17 речовин і 0,3–0,8 % для фазових обвідних сумішей відносно GERG-2008. 2. Газова шапка і нафтова облямівка розподіляються на межі тиску насичення з перевіркою узгодженості контакту, що безпосередньо впливає на підрахунок запасів за зонами. 3. Сітки PEBI зберігають площі й об'єми з нев'язкою порядку

10^{-9} і усувають завищення площі контакту похилих тріщин ГРП до 41 %. 4. Основні показники задач SPE4 лежать у межах розкиду опублікованих рішень. 5. Одночасно-сумісна експлуатація горизонтів і закачування CO_2 з відбором води розраховуються в одній моделі. 6. Таблицю відповідності PRMS і Класифікації запасів і ресурсів корисних копалин державного фонду надр (Cabinet of Ministers of Ukraine, 1997) доцільно напрацювати разом з експертами Державної комісії України по запасах корисних копалин (ДКЗ).

Список використаних джерел:

1. Кабінет Міністрів України. (1997). *Про затвердження Класифікації запасів і ресурсів корисних копалин державного фонду надр* (Постанова № 432 від 05.05.1997). https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/432-97-п

2. Abudour, A. M., Mohammad, S. A., Robinson, R. L., Jr., & Gasem, K. A. M. (2012). Volume-translated Peng–Robinson equation of state for saturated and single-phase liquid densities. *Fluid Phase Equilibria, 335*, 74–87. https://doi.org/10.1016/j.fluid.2012.08.013

3. Aziz, K., Ramesh, A. B., & Woo, P. T. (1987). Fourth SPE comparative solution project: Comparison of steam injection simulators. *Journal of Petroleum Technology, 39*(12), 1576–1584. https://doi.org/10.2118/13510-PA

4. Bell, I. H., Wronski, J., Quoilin, S., & Lemort, V. (2014). Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library CoolProp. *Industrial & Engineering Chemistry Research, 53*(6), 2498–2508. https://doi.org/10.1021/ie4033999

5. Brusilovsky, A. I. (1992). Mathematical simulation of phase behavior of natural multicomponent systems at high pressures with an equation of state. *SPE Reservoir Engineering, 7*(1), 117–122. https://doi.org/10.2118/20180-PA

6. Cinco-Ley, H., & Samaniego-V., F. (1981). Transient pressure analysis for fractured wells. *Journal of Petroleum Technology, 33*(9), 1749–1766. https://doi.org/10.2118/7490-PA

7. Heinemann, Z. E., Brand, C. W., Munka, M., & Chen, Y. M. (1991). Modeling reservoir geometry with irregular grids. *SPE Reservoir Engineering, 6*(2), 225–232. https://doi.org/10.2118/18412-PA

8. Høier, L., & Whitson, C. H. (2001). Compositional grading—Theory and practice. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering, 4*(6), 525–535. https://doi.org/10.2118/74714-PA

9. Kenyon, D. E., & Behie, G. A. (1987). Third SPE comparative solution project: Gas cycling of retrograde condensate reservoirs. *Journal of Petroleum Technology, 39*(8), 981–997. https://doi.org/10.2118/12278-PA

10. Kunz, O., & Wagner, W. (2012). The GERG-2008 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures: An expansion of GERG-2004. *Journal of Chemical & Engineering Data, 57*(11), 3032–3091. https://doi.org/10.1021/je300655b

11. Moinfar, A., Varavei, A., Sepehrnoori, K., & Johns, R. T. (2014). Development of an efficient embedded discrete fracture model for 3D compositional reservoir simulation in fractured reservoirs. *SPE Journal, 19*(2), 289–303. https://doi.org/10.2118/154246-PA

12. Odeh, A. S. (1981). Comparison of solutions to a three-dimensional black-oil reservoir simulation problem. *Journal of Petroleum Technology, 33*(1), 13–25. https://doi.org/10.2118/9723-PA

13. Society of Petroleum Engineers. (2018). *Petroleum resources management system* (Version 1.03). https://www.spe.org/en/industry/petroleum-resources-management-system-2018/

14. Spycher, N., & Pruess, K. (2005). CO_2–H_2O mixtures in the geological sequestration of CO_2. II. Partitioning in chloride brines at 12–100 °C and up to 600 bar. *Geochimica et Cosmochimica Acta, 69*(13), 3309–3320. https://doi.org/10.1016/j.gca.2005.01.015

15. Twu, C. H., Bluck, D., Cunningham, J. R., & Coon, J. E. (1991). A cubic equation of state with a new alpha function and a new mixing rule. *Fluid Phase Equilibria, 69*, 33–50. https://doi.org/10.1016/0378-3812(91)90024-2

16. Wang, Z., Smith, S. A. M., Stenby, E. H., & Yan, W. (2026). An efficient multicomponent gas–brine equilibrium model for CO_2 storage simulation with impurities. *International Journal of Greenhouse Gas Control, 156*, Article 104784. https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2026.104784

References:

Abudour, A. M., Mohammad, S. A., Robinson, R. L., Jr., & Gasem, K. A. M. (2012). Volume-translated Peng–Robinson equation of state for saturated and single-phase liquid densities. *Fluid Phase Equilibria, 335*, 74–87. https://doi.org/10.1016/j.fluid.2012.08.013

Aziz, K., Ramesh, A. B., & Woo, P. T. (1987). Fourth SPE comparative solution project: Comparison of steam injection simulators. *Journal of Petroleum Technology, 39*(12), 1576–1584. https://doi.org/10.2118/13510-PA

Bell, I. H., Wronski, J., Quoilin, S., & Lemort, V. (2014). Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library CoolProp. *Industrial & Engineering Chemistry Research, 53*(6), 2498–2508. https://doi.org/10.1021/ie4033999

Brusilovsky, A. I. (1992). Mathematical simulation of phase behavior of natural multicomponent systems at high pressures with an equation of state. *SPE Reservoir Engineering, 7*(1), 117–122. https://doi.org/10.2118/20180-PA

Cabinet of Ministers of Ukraine. (1997). *On approval of the Classification of reserves and resources of minerals of the state subsoil fund* (Resolution No. 432 of 05.05.1997) [in Ukrainian]. https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/432-97-%D0%BF

Cinco-Ley, H., & Samaniego-V., F. (1981). Transient pressure analysis for fractured wells. *Journal of Petroleum Technology, 33*(9), 1749–1766. https://doi.org/10.2118/7490-PA

Heinemann, Z. E., Brand, C. W., Munka, M., & Chen, Y. M. (1991). Modeling reservoir geometry with irregular grids. *SPE Reservoir Engineering, 6*(2), 225–232. https://doi.org/10.2118/18412-PA

Høier, L., & Whitson, C. H. (2001). Compositional grading—Theory and practice. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering, 4*(6), 525–535. https://doi.org/10.2118/74714-PA

Kenyon, D. E., & Behie, G. A. (1987). Third SPE comparative solution project: Gas cycling of retrograde condensate reservoirs. *Journal of Petroleum Technology, 39*(8), 981–997. https://doi.org/10.2118/12278-PA

Kunz, O., & Wagner, W. (2012). The GERG-2008 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures: An expansion of GERG-2004. *Journal of Chemical & Engineering Data, 57*(11), 3032–3091. https://doi.org/10.1021/je300655b

Moinfar, A., Varavei, A., Sepehrnoori, K., & Johns, R. T. (2014). Development of an efficient embedded discrete fracture model for 3D compositional reservoir simulation in fractured reservoirs. *SPE Journal, 19*(2), 289–303. https://doi.org/10.2118/154246-PA

Odeh, A. S. (1981). Comparison of solutions to a three-dimensional black-oil reservoir simulation problem. *Journal of Petroleum Technology, 33*(1), 13–25. https://doi.org/10.2118/9723-PA

Society of Petroleum Engineers. (2018). *Petroleum resources management system* (Version 1.03). https://www.spe.org/en/industry/petroleum-resources-management-system-2018/

Spycher, N., & Pruess, K. (2005). CO_2–H_2O mixtures in the geological sequestration of CO_2. II. Partitioning in chloride brines at 12–100 °C and up to 600 bar. *Geochimica et Cosmochimica Acta, 69*(13), 3309–3320. https://doi.org/10.1016/j.gca.2005.01.015

Twu, C. H., Bluck, D., Cunningham, J. R., & Coon, J. E. (1991). A cubic equation of state with a new alpha function and a new mixing rule. *Fluid Phase Equilibria, 69*, 33–50. https://doi.org/10.1016/0378-3812(91)90024-2

Wang, Z., Smith, S. A. M., Stenby, E. H., & Yan, W. (2026). An efficient multicomponent gas–brine equilibrium model for CO_2 storage simulation with impurities. *International Journal of Greenhouse Gas Control, 156*, Article 104784. https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2026.104784