



**MODELAMIENTO TERMODINÁMICO PARA LA PREDICCIÓN DE
DEPOSITACIONES INORGÁNICAS INVOLUCRANDO MEZCLAS DE AGUAS**

**WILMER ALEXANDER ROJAS PERDOMO
JHON HARVYN MONTEALEGRE CUELLAR**

**UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA
FACULTAD DE INGENIERÍA
PROGRAMA DE INGENIERÍA DE PETRÓLEOS
NEIVA
2007**



**MODELAMIENTO TERMODINÁMICO PARA LA PREDICCIÓN DE
DEPOSITACIONES INORGÁNICAS INVOLUCRANDO MEZCLAS DE AGUAS**

**WILMER ALEXANDER ROJAS PERDOMO
JHON HARVYN MONTEALEGRE CUELLAR**

Trabajo presentado como requisito parcial para optar al título de Ingeniero de
Petróleos

DIRECTORA

**CARMEN PINZÓN TORRES
QUÍMICA**

**UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA
FACULTAD DE INGENIERÍA
PROGRAMA DE INGENIERÍA DE PETRÓLEOS
NEIVA
2007**



Nota de Aceptación

Presidente del Jurado

Jurado



DEDICATORIA

A Dios por la vida y por ser mi guía,
A mis padres, mis hermanos y a las familias Montealegre y Cuellar por brindarme un hogar
cálido y enseñarme que la perseverancia y el esfuerzo son el camino para lograr objetivos, gracias
por todas sus enseñanzas.
A todas las personas que confiaron en mí. Infinitas gracias.

Jhon Karlyn

La constancia y el esfuerzo se ven recompensados al final del camino.
Esto es el fruto de un arduo trabajo tanto personal como familiar.
Gracias por esa Fe y Confianza.
Ante todo gracias a Dios.

Wilmer Alexander



AGRADECIMIENTOS

Los autores expresamos los más sinceros agradecimientos a:

Qca. CARMEN PINZÓN TORRES, por haber dirigido este proyecto, además de sus valiosos aportes para el desarrollo del mismo.

MsC. JAIRO ANTONIO SEPULVEDA GAONA y Ph.D. FREDDY HUMBERTO ESCOBAR, por su disposición permanente e incondicional en aclarar nuestras dudas y por sus substanciales sugerencias.

A la **Universidad Surcolombiana**, por ser nuestra Alma Mater.



CONTENIDO

	pág
RESUMEN	
ABSTRACT	
INTRODUCCIÓN	.14
1. MODELOS DE PREDICCIÓN DE PRECIPITACIÓN DE DEPOSITACIONES INORGÁNICAS INVOLUCRANDO MEZCLAS DE AGUAS.	15
1.1 PROBLEMAS DE FORMACION DE INCRUSTACIONES ASOCIADOS A LA INYECCIÓN DE AGUAS INCOMPATIBLES.	15
1.2 INCOMPATIBILIDAD ENTRE AGUAS DE FORMACIÓN Y DE INYECCIÓN	18
1.3 PREDICCIÓN DE INCRUSTACIONES DE CARBONATOS Y SULFATOS EN CAMPOS PETROLEROS	20
1.4 UN PROGRAMA INTERACTIVO PARA LA PREDICCIÓN, CONTROL Y MANEJO DE DEPÓSITOS MINERALES	21
1.5 MEZCLAS DE SALMUERAS EN YACIMIENTOS CON INYECCIÓN DE AGUA Y LAS IMPLICACIONES PARA LA PREVENCIÓN DE INCRUSTACIÓN	21
1.6 PREDICCIÓN CUANTITATIVA DE DEPOSITACIÓN DE INCRUSTACIONES INDUCIDA POR LA PRODUCCIÓN DE PETRÓLEO: APLICACIÓN DEL PROGRAMA TERMO-CINÉTICO SCALE2000.	23
1.7 MODELAMIENTO DE LA DEPOSITACIÓN DE INCRUSTACIONES IN-SITU: IMPACTO DE LAS GEOMETRÍAS DEL YACIMIENTO Y DE POZO Y LAS VELOCIDADES DE REACCIÓN.	23
1.8 MÉTODO EN TIEMPO REAL PARA LA DETECCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE INCRUSTACIONES.	25
1.9 RE-INYECCIÓN DE AGUA PRODUCIDA (MANEJO Y VALORACIÓN DEL RIESGO DE FORMACIÓN DE INCRUSTACIONES)	27
1.10 FORMACIÓN DE INCRUSTACIONES EN EL YACIMIENTO Y EN EL EQUIPO DE PRODUCCIÓN DURANTE LA INYECCIÓN DE AGUA (CINÉTICA	28



DEL CRECIMIENTO DE CRISTALES DE $BaSO_4$ Y $CaSO_4$ Y EFECTO EN SOBRE
DAÑO A LA FORMACIÓN).

1.11 IMPLICACIONES DE LAS MEZCLAS DE SALMUERAS EN EL YACIMIENTO PARA EL MANEJO DE INCRUSTACIONES EN EL CAMPO ALBA	28
1.12 PREDICCIÓN DE INCRUSTACIONES DE SULFATO EN OPERACIONES DE CAMPO.	29
2. MODELAMIENTO TERMODINÁMICO PARA LA PREDICCIÓN DE INCRUSTACIONES EN MEZCLAS DE AGUAS.	34
3. ALGORITMO Y PROGRAMACIÓN.	41
3.1 TEMPERATURA	41
3.2 pH DE LA MEZCLA	42
3.3 CONCENTRACIÓN DE LA MEZCLA.	42
4. ESTRUCTURA Y MANUAL DEL PROGRAMA	44
5. VALIDACIÓN DEL PROGRAMA DE CÓMPUTO	52
6. CONCLUSIONES	71
7. RECOMENDACIONES	72
BIBLIOGRAFÍA	73



LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Diagrama de flujo de modelo de precipitación simultánea de Vetter, O. J, Kandarpa, V y Haoruaka, A.	17
Figura 2. Diagrama de flujo del ScaleMixing.	43
Figura 3. Presentación del programa ScaleMixing.	44
Figura 4. Inicio de sesión del programa ScaleMixing.	45
Figura 5. Menú principal del programa ScaleMixing.	45
Figura 6. Datos de entrada del programa ScaleMixing.	46
Figura 7. Menú de resultados.	47
Figura 8. Resultados guardados en formato .txt.	47
Figura 9. Imagen del scaleMixing (Tabla de resultados, % Volumen agua de Inyección y (IS), (mg/L))	48
Figura 10. Imagen del scaleMixing (Tabla de resultados con el cambio de las composiciones, según la proporción de agua de inyección).	49
Figura 11. Imagen del scaleMixing (Gráfica de resultados (%V de inyección vs precipitación))	50
Figura 12. Imagen del scaleMixing (Gráfica de resultados (%V de inyección vs IS)	50
Figura 13. Menú de propiedades de gráfico	51
Figura 14. Propiedades de gráfico desplegado	51



LISTA DE GRÁFICAS

	pág.
Gráfico 1. Resultados de los modelo de Yuan y Todd y Scalemixing (%V agua de inyección versus precipitación (mg/L)) en el Mar del Norte a T= 77 °F y P = 15 psi	54
Gráfico 2. Resultados de los modelo de Yuan y Todd y Scalemixing (%V agua de inyección versus precipitación (mg/L)) en el Mar del Norte a T= 212 °F y P = 15 psi	56
Gráfico 3. Resultados de los modelo de Yuan y Todd y Scalemixing (%V agua de inyección versus precipitación (mg/L)) en el Mar del Norte a T= 77 °F y P = 4500 psi	59
Gráfico 4. Resultados de los modelo de Yuan y Todd y Scalemixing (%V agua de inyección versus precipitación (mg/L)) en el Mar del Norte a T= 212 °F y P = 4500 psi	61
Gráfico 5. Resultados de los modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) a T= 212 °F y P = 3000 psi	64
Gráfico 6. Resultados del modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) a T= 212 °F y P = 3000 psi	66
Gráfico 7. Resultados del modelo de Vetter, Kandarpa, y Haoruaka y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) a T= 212 °F y P = 3000 psi	68
Gráfico 8. Resultados del modelo de Vetter, Kandarpa, y Haoruaka y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) a T= 212 °F y P = 3000 psi	70



LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Análisis cualitativo de aguas incompatibles.	18
Tabla 2. Constante de precipitación para diferentes compuestos	39
Tabla 3. Constantes para el cálculo de la densidad del agua	39
Tabla 4. Coeficientes viriales utilizados en la teoría de Pitzer	40
Tabla 5. Composiciones de agua de formación y agua de inyección en el mar del Norte	52
Tabla 6. Resultados del modelo de Yuan y Todd en el Mar del Norte a $T= 77^{\circ}\text{F}$ y $P= 15$ psi	53
Tabla 7. Resultados de ScaleMixing ejemplo Mar del Norte a $T= 77^{\circ}\text{F}$ y $P= 15$ psi	53
Tabla 8 Resultados del modelo de Yuan y Todd en el Mar del Norte a $T= 212^{\circ}\text{F}$ y $P= 15$ psi	55
Tabla 9. Resultados de ScaleMixing ejemplo Mar del Norte a $T= 212^{\circ}\text{F}$ y $P= 15$ psi	55
Tabla 10. Resultados del modelo de Yuan y Todd en el Mar del Norte a $T= 77^{\circ}\text{F}$ y $P= 4500$ psi	57
Tabla 11. Resultados de ScaleMixing ejemplo Mar del Norte a $T= 77^{\circ}\text{F}$ y $P= 15$ psi	58
Tabla 12. Resultados del modelo de Yuan y Todd en el Mar del Norte a $T= 212^{\circ}\text{F}$ y $P= 4500$ psi	60
Tabla 13. Resultados de ScaleMixing ejemplo Mar del Norte a $T= 77^{\circ}\text{F}$ y $P= 4500$ psi	60
Tabla 14. Composición química de las aguas usadas para el modelamiento	62



Tabla 15. Resultados generados con el ScaleMixing (agua yacimiento 1 - fuente 1)	63
Tabla 16. Resultados generados con el modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka (agua yacimiento 1- fuente 1)	63
Tabla 17. Resultados generados con el ScaleMixing (agua yacimiento 1 - fuente 2)	65
Tabla 18. Resultados generados con el modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka A (agua yacimiento 1- fuente 2)	65
Tabla 19. Resultados generados con el ScaleMixing (agua yacimiento 2 - fuente 1)	67
Tabla 20. Resultados generados con el modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka (agua yacimiento 2- fuente 1)	67
Tabla 21. Resultados generados con el ScaleMixing (agua yacimiento 2 - fuente 2)	69
Tabla 22. Resultados generados con el modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka (agua yacimiento 2- fuente 2)	69



RESUMEN

Se desarrolló el programa de cómputo **ScaleMixing**, basado en el simulador OilScale, del grupo de investigación de comportamiento de fases COFA, anteriormente realizado para la predicción de depositaciones inorgánicas en un sistema de una muestra de agua; este nuevo programa ofrece al usuario la posibilidad de predecir la depositación de inorgánicos en mezclas de aguas.

El **ScaleMixing** se basa en la misma estructura y programación del OilScale; el trabajo desarrollado se enfoca en la implementación de nuevas funciones que calculan la concentración iónica de una mezcla resultante de dos tipos de aguas, agua de inyección y de formación, así como el pH. Estos cálculos se realizan por medio de relaciones sencillas en donde se involucra la proporción de dichas aguas.

El simulador está diseñado para calcular el índice de saturación (IS) y masa precipitada (mg/L) de diferentes depositaciones inorgánicas en sistemas de mezclas de aguas. El programa predice la depositación de compuestos inorgánicos de baja solubilidad normalmente encontrados en estos sistemas, tales como calcita (CaCO_3), anhidrita (CaSO_4), yeso semihidratado ($\text{CaSO}_4 \cdot \frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$), yeso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), barita (BaSO_4), celestita (SrSO_4) y halita (NaCl) en relaciones de aguas de inyección que van desde 0 % a 100%.

La implementación de este nuevo programa **ScaleMixing**, complementará el trabajo del grupo de investigación COFA en el área de inorgánicos; el **ScaleMixing** permitirá la predicción de formación de depósitos en diferentes relaciones de mezcla entre dos tipos de aguas de inyección y de formación, y así tomar decisiones al respecto, antes de iniciar un proyecto de inyección de agua.



THERMODYNAMIC MODELING FOR THE PREDICTION OF SCALE IN MIXTURE OF WATERS SYSTEMS

Wilmer Alexander Rojas and Jhon Harvyn Motealegre

ABSTRACT

The computation program **ScaleMixing** was developed, based on the OilScale simulator, of the investigation group COFA, previously realized for the prediction of inorganic deposits in a system of a single of water; this new program offers the user the possibility to predict the deposit of inorganic in of mixtures of waters.

The program **ScaleMixing** is based on the same structure and programming of the OilScale; the developed work is focused in the implementation of new functions that calculate the ionic concentration of a resulting mixture of two types of waters, injection water and formation, as the pH, data that are necessary for the prediction of inlays by means of the thermodynamic model of Odde and Tomson. These calculations are carried out by means of simple relationships where the proportion of this waters is involved, related with each one of these propertys.

The program is designed to calculate the saturation index (IS) and precipitate mass (mg/L) of different inorganic deposits in systems of mixtures of waters. The program predicts the deposit of compound inorganic of smallest solubility founds in these systems, such as calcite (CaCO_3), anhydrite (CaSO_4), semi-hydrous chalk ($\text{CaSO}_4 \cdot \frac{1}{2} \text{H}_2\text{O}$), chalk ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), baryta (BaSO_4), celestite (SrSO_4) and halita (NaCl) in relations of injection waters that go from 0% to 100%, showing the precipitation of the previous components, to temperatures and pressures in the point that is wanted to evaluate; it can also introduce the changes of data of pressure and temperature that the user wants, illustrating in the graphics, instantaneous changes of the precipitation curves.



INTRODUCCIÓN

La formación de depósitos inorgánicos por causa de la mezcla de aguas incompatibles es un fenómeno repetitivo en la industria, en proyectos de recuperación secundaria, y específicamente en inyección de agua donde comúnmente se presenta dicho problema, el cual ya es de entero conocimiento la magnitud de sus consecuencias. La predicción temprana a la inyección del agua, se ha convertido en la principal ayuda para evitar que se precipiten y se formen dichos depósitos, lo cual ya es posible gracias a los diferentes programas desarrollados con base en modelos químicos y termodinámicos con los cuales es posible determinar la posible formación de incrustaciones para un tipo de agua.

La importancia de los modelos de predicción de depositaciones inorgánicas radica en que a partir de los resultados obtenidos en el modelamiento, el ingeniero podrá determinar la mejor forma de afrontar el problema de la depositación, ya sea por la aplicación de tratamientos mecánicos, químicos y térmicos, dependiendo de las condiciones a las cuales se apliquen dichos tratamientos, o en el mejor de los casos evitando que tenga lugar la precipitación y posterior depositación, realizando análisis de compatibilidad entre los tipos de aguas a mezclar (agua de formación con agua de inyección).

Dos de los más difíciles problemas en operaciones de inyección de agua son:

1. La determinación de las incompatibilidades químicas de las aguas usadas en flujos.
2. Los efectos de estas incompatibilidades en el campo. Este tipo de pronóstico debe involucrar el tipo de incrustación y el punto donde se producen estas precipitaciones por incompatibilidades fisicoquímicas.

El agua original del yacimiento se encuentra en equilibrio químico con la roca, hidrocarburos y otros materiales presentes en el yacimiento (CO_2 , N_2 , H_2S); en contraste, el agua para inyección está en equilibrio con el ambiente de donde se toma ya sea de ríos, lagunas, agua asociada y por lo tanto es bastante diferente a la del yacimiento. En cualquier operación de inyección de agua existe interacción de muchos parámetros fisicoquímicos. Estas interacciones van a depender de todas las fases del yacimiento (líquido, gas y sólido), la proporción de la mezcla, el flujo de partículas, y las temperaturas y presiones en varios puntos del yacimiento. Las operaciones de re-inyección presentan otro problema, pues las aguas tendrán nueva composición, pH, y temperatura.



1. MODELOS DE PREDICCIÓN DE PRECIPITACIÓN DE DEPOSITACIONES INORGÁNICAS INVOLUCRANDO MEZCLAS DE AGUAS

Los depósitos minerales en campos petroleros, que precipitan de las salmueras o sistemas salinos tiene la capacidad de adherirse a las superficies sólidas del yacimiento, tuberías de producción y elementos de superficie, provocando limitaciones en la producción debido a la restricción del flujo del crudo y daños a los equipos de fondo de pozo, tales como las bombas electrosumergibles. Los problemas de incrustación concernientes a operaciones petroleras son particularmente difíciles, e implican altos costos, riesgos a la seguridad y en ocasiones atentan contra la salud, dada la naturaleza radioactiva de algunos de ellos. Por esa razón, muchos trabajos e investigaciones se han realizado para estudiar, analizar y comprender la formación de depósitos minerales y las incidencias de éstos en la formación y en el yacimiento.

Algunos de esos estudios han considerado los efectos de las mezclas de salmueras que llevan a la formación de depositaciones; las investigaciones han ayudado a desarrollar una serie de trabajos que han demostrado dónde y cómo ocurre la mezcla de salmueras incompatibles en yacimientos en donde se realizan operaciones de inyección de agua, y han comprobado que el impacto en las estrategias de prevención de incrustaciones están en función del tiempo y lugar donde se realizan tratamientos de inhibición.

La industria del petróleo con el fin de frenar el impacto negativo generado por la formación de incrustaciones como consecuencia de mezclas de diferentes tipos de agua para llevar a cabo proyectos de recuperación secundaria, ha desarrollado métodos preventivos de tal forma que se evalúe si al mezclar diferentes aguas en el yacimiento se van a formar incrustaciones y así tratarlas, o si es posible evitarlas tratando el agua de inyección previo a la mezcla. Se presentan a continuación algunos modelos desarrollado para tal fin.

1.1 PROBLEMAS DE FORMACION DE INCRUSTACIONES ASOCIADOS A LA INYECCIÓN DE AGUAS INCOMPATIBLES¹

Vetter, Kandarpa y Haoruaka desarrollaron un modelo para predecir las compatibilidades químicas en operaciones de inyección de agua



El modelo calcula la coprecipitación de BaSO_4 , SrSO_4 y CaSO_4 en diferentes puntos en el campo de operación. El modelo usa un extenso archivo de medidas de solubilidad en campo a varias temperaturas y a la presión atmosférica. Las solubilidades a altas presiones son calculadas usando parámetros termodinámicos.

Los modelos anteriores ignoraban el efecto de la presión y la precipitación simultánea de compuestos inorgánicos. El componente que tiene la menor K_{ps} (BaSO_4) precipita primero removiendo algunos iones SO_4^{2-} de la solución. Posteriormente precipita el componente de valor intermedio de K_{ps} (SrSO_4). El producto iónico requerido para calcular la nueva precipitación se ajusta teniendo en cuenta la precipitación previa del BaSO_4 . Por último precipitan el CaSO_4 , la composición de la solución debe ser ajustada nuevamente por las precipitaciones anteriores de BaSO_4 y SrSO_4 , que disminuyen la concentración del ión sulfato (SO_4^{2-}). La desventaja de este modelo es la necesidad de una gran base de datos.

El simulador permite predecir las precipitaciones de componentes formadores de incrustaciones como función de (1) relaciones de mezcla de varias aguas, (2) composiciones de aguas de inyección y de yacimiento, (3) temperaturas en cualquier punto del campo, y (4) presiones en cualquier punto del campo.

El modelo básico es descrito en la figura 1. Este simulador primero determinará cuánto precipitado se formará cuando se mezclan dos aguas incompatibles a determinadas condiciones de campo. Estas condiciones incluyen presión, temperatura y relaciones de mezcla. Las presiones en el campo pueden variar con la locación. Cada vez que una presión y/o una temperatura cambian, el simulador empezará un nuevo ciclo de cálculo para cualquiera de estos cambios. En esta figura también se puede observar las siguientes variables.

Donde:

A= iones comunes de sulfato SO_4^{2-}

C_1 = Concentración BaSO_4

C_2 = Concentración de SrSO_4

C_3 = Concentración de CaCO_3

x_1 = Cantidad de moles precipitados de BaSO_4

y_1 = Cantidad de moles precipitados de SrSO_4

z_1 = Cantidad de moles precipitados de CaCO_3

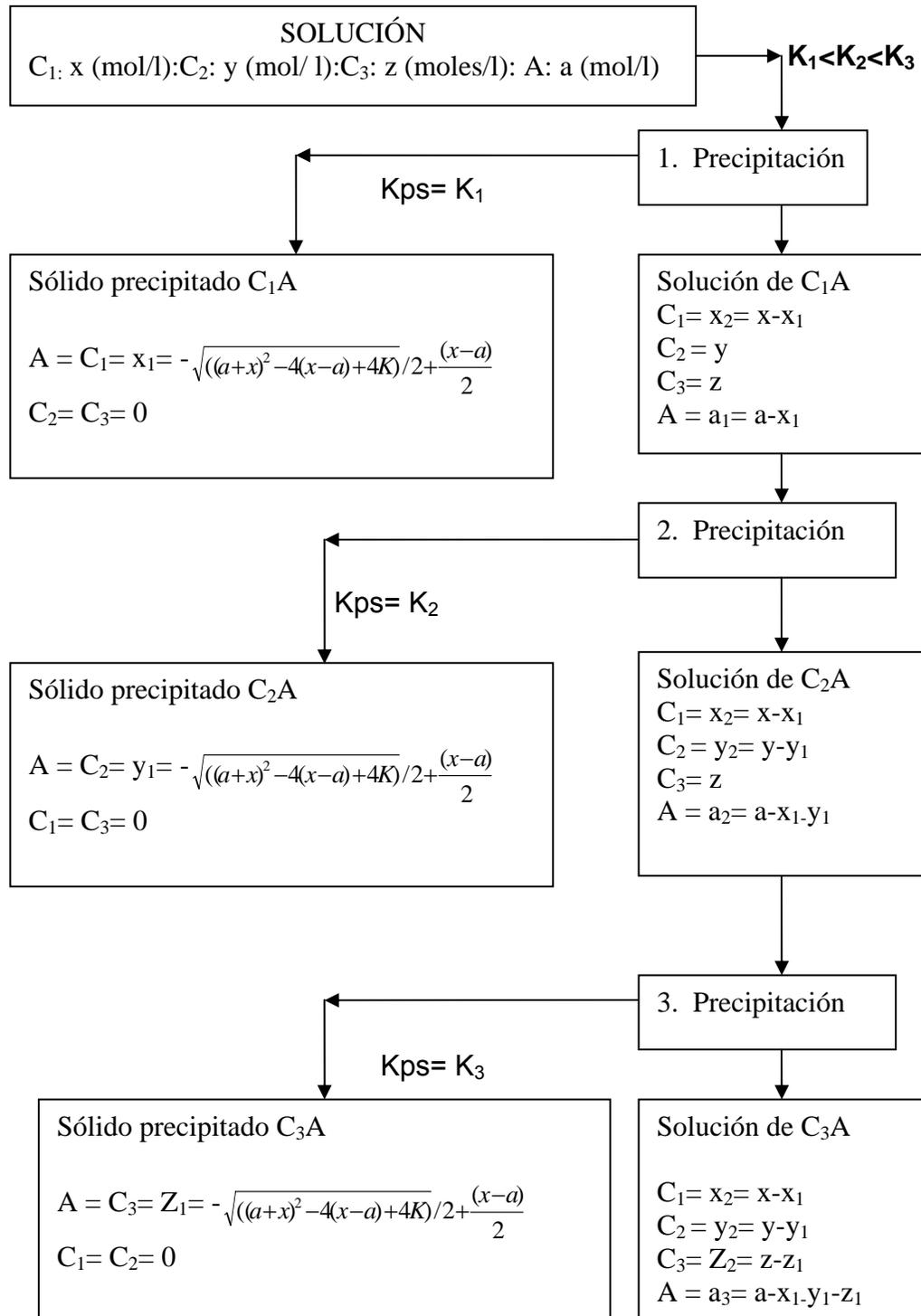




Figura 1 Diagrama de flujo del modelo de precipitación simultánea, de Vetter O. J, Kandarpa, V y Haoruaka

1.2 INCOMPATIBILIDAD ENTRE AGUAS DE FORMACIÓN Y DE INYECCIÓN²

El agua individual es estable y no presenta problemas de incrustación. Sin embargo, una vez que son mezcladas, reaccionan los iones disueltos que hay en cada agua, lo cual producirá productos insolubles. Cuando ésto ocurre, estas aguas son llamadas incompatibles. Por ejemplo, sería un error mezclar un agua que tenga una gran cantidad de bario con otra que contenga gran cantidad de sulfato, porque la formación de BaSO_4 , sería segura.

Tabla 1. Análisis cualitativo de dos tipos de aguas

Componentes	Agua "A"	Agua "B"
Ca^{++}	Presente	Ausente
HCO_3^-	Ausente	Presente
SO_4	Ausente	Presente
Ba^{++}	Presente	Ausente
Fe^{++} o Fe^{+++}	Ausente	Presente
H_2S	Presente	Ausente

En la tabla 1 se muestra un análisis cualitativo de dos tipos de aguas; dependiendo de la cantidad de cada componente presente, del pH, de la temperatura y de la relación a la cual las dos aguas son mezcladas, se espera alguna o todas las siguientes precipitaciones: carbonato de calcio, sulfato de calcio, sulfato de bario y sulfuro de hierro.

La situación se complica si más de dos aguas son mezcladas. Mezclar dos o más aguas incompatibles en superficie para se inyectadas es obviamente indeseable.

Otra de las causas de formación de incrustaciones se debe a incompatibilidades entre el agua de inyección y el agua de formación (agua connata), en las zonas donde el agua está siendo inyectada. Sorprendentemente, ocurren muy pocos problemas de taponamiento por incompatibilidad en el pozo inyector.

Cuando el agua es inyectada dentro del pozo, el agua de inyección desplaza el agua connata. Una mezcla mecánica ocurre entre los dos líquidos. Este fenómeno es llamado dispersión hidrodinámica. La distribución no homogénea de permeabilidad se sugiere como la primera causa de dispersión. Además, los iones disueltos migran a través del límite entre las dos aguas como resultado de la difusión.



La contribución relativa de la dispersión hidrodinámica y la difusión iónica sobre el proceso total de mezclado son función de la velocidad límite entre las dos aguas que se mueven a través de yacimiento. En numerosas operaciones de inyección, las ratas de inyección son tales que la dispersión es la causa predominante de la mezcla. Aunque en muchos estudios de laboratorios, no son separadas la contribuciones individuales de dispersión y difusión, la cantidad de mezcla está dada por un coeficiente de aparente dispersión, que incluye ambos efectos.

Warner propone las siguientes ecuaciones para el ancho y el volumen de la zona mezclada:

$$W = 4.619 \sqrt{D' r} \quad (1.1)$$

$$V_m = 5.17h \phi \sqrt{D' r^3} \quad (1.2)$$

Donde:

W = Ancho de la zona de mezcla, ft

V_m = Volumen de la zona que se mezcla, bbl

$D' = D/v$ = coeficiente de dispersión, ft

D = Coeficiente de dispersión, ft²/seg

v = velocidad promedio de fluido, ft/seg

r = Distancia central de la cara del pozo al centro de la zona mezclada, ft

ϕ = Porosidad de la roca del yacimiento, expresada en fracción

La distancia radial de la cara del pozo inyector, al centro de la zona de mezcla se expresa por:

$$r = \sqrt{1.79 \frac{V_i}{h \phi}} \quad (1.3)$$

Donde:

V_i = Volumen de agua inyectada, bbl.

h = espesor de la formación, ft.

La distancia radial al borde principal de la zona de mezcla de la cara del pozo es igual a $r+0.5w$. Por lo tanto, el volumen total de poros acumulados que es conectado por la zona de mezcla desde el tiempo en que éste deja la cara del pozo hasta que este alcanza un radio, r, es:

$$V_c = 0.56 h \phi (r + 0.5 w)^2 \quad (1.4)$$



Donde: V_c = volumen de espacios de poros contactados por el borde principal de la zona de mezcla, bbl.

Si se asume en el peor de los casos, que dos aguas están completamente mezcladas dentro de la zona de mezcla, es posible calcular el volumen máximo de incrustación que puede precipitarse para unas condiciones establecidas.

$$V_p = 2.9 \times 10^{-6} \frac{V_m PPT}{SG} \quad (1.5)$$

Donde:

V_p = Volumen de incrustación, bbl.

PPT = Peso de incrustación, lb/1000 bbl.

SG = Gravedad específica de la incrustación formada.

V_m = volumen de la mezcla.

1.3 PREDICCIÓN DE INCRUSTACIONES DE CARBONATOS Y SULFATOS EN CAMPOS PETROLEROS³:

Yeboah, Samuah y Sabed, desarrollaron un modelo de predicción basado en parámetros termodinámicos, cinéticos e hidrodinámicos del sistema. El modelo emplea datos de solubilidades experimentales para agua de una sola fuente y mezclas de aguas, con el fin de predecir el potencial de depositación. Se establecen índices de saturación críticos para las depositaciones inorgánicas más comunes como son $SrSO_4$, $CaSO_4 \cdot 2H_2O$, $BaSO_4$ y $CaCO_3$.

El programa tiene opciones para tabular y graficar los resultados obtenidos. El estudio presenta detalles de la exactitud computacional en la predicción del índice de saturación y en el potencial de depositación.

Los modelos de predicción anteriores a este modelo son: Stiff & Davis (1952), Oddo & Tomson (1981), Valone & Skillern (1982), Vetter & Kandarpa (1980), Vetter et al (1982), Kharaka et al. (1988), y Atkinson et al (1991).

El modelo incorpora por primera vez los efectos cinéticos en la predicción de formación de incrustación.

El primer paso del modelo es el análisis del agua y el empleo de datos termoquímicos para determinar el potencial de depositación. El segundo paso es trabajar con datos de pozo para crear un archivo de estudio de la depositación. El modelo presenta dos métodos para predecir el potencial de depositación termodinámico: la solubilidad y el equilibrio químico. Este estudio trata solamente la solubilidad. El método de solubilidad emplea datos de solubilidad experimental en soluciones acuosas de $NaCl$, $MgCl_2$ y $CaCl_2$ y sus mezclas, desarrollando



correlaciones para predecir coeficientes de actividad, solubilidad, potencial de depositación y sobresaturación en salmueras.

Los procedimientos empleados para predicción de incrustaciones de sulfatos (SrSO_4 , BaSO_4 , CaSO_4) son similares, en tanto que los empleados para CaCO_3 son diferentes.

La mayoría de las soluciones sobresaturadas contienen altas concentraciones de minerales de sales disueltas y éstos se encuentran en equilibrio a una temperatura y presión determinada. Cuando el índice de saturación es excedido en sus parámetros cinéticos y termodinámicos, se presentan las condiciones propicias para la formación de incrustación. El índice de saturación al cual ocurrirá la formación de incrustación espontáneamente no está bien definido y depende de diversos factores tales como temperatura, pH, potencial iónico y presencia de componentes antinucleantes en la salmuera.

1.4 UN PROGRAMA INTERACTIVO PARA LA PREDICCIÓN, CONTROL Y MANEJO DE DEPÓSITOS MINERALES⁴:

Los avances tecnológicos en relación en el problema de las incrustaciones se han dirigido hacia el desarrollo de programas de computador que permitan predecir, controlar y manejar estos depósitos. El ScalesoftTM es un programa compuesto por tres módulos computacionales: predicción de tendencia de depositación, selección y características del inhibidor y diseño de nuevos tratamientos como la inyección forzada del inhibidor.

El primero módulo evalúa la tendencia de predicción de depósitos con base en cálculos del índice de saturación, como función de las concentraciones iónicas, la constante de producto de solubilidad K_{ps} , que a su vez depende de la temperatura, presión y coeficiente de actividad iónica.

La selección óptima entre inhibidores y mezcla de inhibidores (fosfatos, ésteres, fosfonatos, poliacrílicos y polisulfonatos) se hace a través de un modelo de nucleación semiempírico que predice la concentración mínima de inhibidor requerida para sistemas de producción.

En el diseño del tratamiento, el programa propone unas recomendaciones para el control y manejo de depósitos y estrategias para desarrollar nuevos tratamientos, tales como la inyección forzada de inhibidor.

Este programa requiere solo de información de campo, como composición química del agua y rata de producción del campo. Se probó con numerables pozos y se obtuvieron muy buenos resultados comparados con otros programas.

1.5 MEZCLAS DE SALMUERAS EN YACIMIENTOS CON INYECCIÓN DE AGUA Y LAS IMPLICACIONES PARA LA PREVENCIÓN DE INCRUSTACIÓN⁵:



Se presentan cinco técnicas de simulación para diseñar eficientemente estrategias, de prevención para la formación de incrustaciones y optimizar el tratamiento de inyección forzada del inhibidor, con el fin de obtener una mejor comprensión del sistema que se va a tratar y minimizar los riesgos.

1. Predicción del agua de producción: Predicen cuándo, dónde y qué tipo de agua de producción podría ser esperada.
2. Predicción de tendencia de incrustación: Predicen el tipo y la cantidad de incrustación que podría ser depositado.
3. Interacción roca – inhibidor: Derivan la isoterma de adsorción que relaciona la masa de inhibidor adsorbida con la concentración de la solución.
4. Predicción del lugar de inhibición: ubican el mejor lugar para realizar la inhibición en el pozo.
5. Tratamiento óptimo: Calcula los tiempos de inyección forzada de inhibidor y es usado para diseñar y optimizar tratamientos por análisis de sensibilidad.

Para proteger adecuadamente los intervalos de producción contra las depositaciones, se debe conocer dónde se forman las incrustaciones y dónde debe ser inyectado el inhibidor, para lo cual se utilizan los simuladores 1 y 4 respectivamente. Si los parámetros anteriormente nombrados no se definen correctamente es muy probable que el tratamiento seleccionado falle.

Por otra parte se identificó por medio de esta investigación que la mezcla de las salmueras ocurre a diferentes proporciones, dependiendo de la geometría del yacimiento y la ausencia o presencia de un acuífero. Se realizó una evaluación de este parámetro (grado de mezcla de las salmueras) para cinco geometrías distintas:

- Flujo en una dirección.
- Flujo bidireccional.
- Flujo bidireccional vertical.
- Flujo tridimensional con ausencia de acuífero.
- Flujo tridimensional con presencia de acuífero.

El último caso (flujo direccional con presencia de acuífero) se estudió con base en datos del yacimiento Alba y se concluyó que la presencia de un acuífero aumenta el grado de mezcla entre las aguas de inyección y las aguas de formación. Por su parte, en el flujo tridimensional pero sin acuífero, se observó que el continuo paso



de iones depositantes a los últimos pies de profundidad de la formación, y la mezcla llevada a cabo en estas zonas de alta velocidad, pueden propiciar el daño en la formación debido a la presencia de incrustaciones.

1.6 PREDICCIÓN CUANTITATIVA DE DEPOSITACIÓN DE INCRUSTACIÓN INDUCIDA POR LA PRODUCCIÓN DE PETRÓLEO: APLICACIÓN DEL PROGRAMA TERMO-CINETICO SCALE2000⁶:

El SCALE2000 versión 2.0 es un programa de computador diseñado específicamente para predecir cuantitativamente la depositación de incrustaciones inducidas por las operaciones de producción de crudo y de energía geotermal.

El SCALE2000 (V 2.0) es un simulador termo-cinético que predice las cantidades másicas de depositaciones inorgánicas, teniendo en cuenta para ello factores importantes tales como: variaciones de temperatura y presión, energía geotermal, e incompatibilidad entre las aguas de yacimiento y de inyección.

Las variables más importantes incluidas en estos cálculos son: solubilidad de cada uno de los minerales disueltos en las aguas de producción, actividades o energías de activación específicas de cada una de las especies disueltas, temperatura, presión, salinidad y las constantes cinéticas y termodinámicas.

Para calcular las energías de activación el programa se basa en el modelo de interacción de ión específico de Pitzer (o aproximación de Pitzer).

El SCALE2000 fue usado para evaluar y cuantificar la depositación a altas temperaturas (164°C), alta salinidad (84 g/L) y alta presión (320 bar) del campo petrolero del bloque 3 de Angola.

El SCALE2000 trabaja sobre una base de datos termodinámicos y una base cinética, en donde se tienen en cuenta factores tales como la constante dieléctrica del agua (usada para calcular el parámetro de Debye-Huckel A^θ), constante cinética, producto de actividad iónica, parámetro de sobresaturación crítica (α), constante de equilibrio y pH.

El SCALE2000 (v2.0) calcula especiación acuosa, índices de saturación mineral, solubilidad mineral, trayectorias de la reacción y efectos de mezclas entre fluidos. Tiene en cuenta el efecto de la presión total de 1 a 1000 bar sobre las constantes termodinámicas de actividad y coeficientes osmóticos en la ecuación de Pitzer. El modelo para los cálculos de las constantes de equilibrio de las especies acuosas, mineral y gaseosa está basado en la ecuación modificada de Halgenson-Kirkham-Flowers.



1.7 MODELAMIENTO DE LA DEPOSITACIÓN DE INCRUSTACIONES IN-SITU: IMPACTO DE LA GEOMETRÍA DEL YACIMIENTO Y DE POZO Y LAS VELOCIDADES DE REACCIÓN:

Mackay⁷ se refiere a la depositación in situ ocasionada por mezcla de dos salmueras incompatibles, tales como el agua de mar y el agua de formación. Para estos estudios se usaron modelos hechos por computador, para conocer el impacto de cada parámetro tratado en el estudio, así como también se estudiaron algunas limitaciones de estos modelos.

Limitaciones del modelo es la dispersión numérica: como consecuencia, de la discretización del yacimiento en mallas; de esta manera se incluyen errores en el momento de insertar los datos de la geología del yacimiento, ya que todas las características referentes a éste son promediadas; hay que tener en cuenta que es difícil promediar la porosidad de una roca ya que las condiciones del yacimiento varían en función de la ubicación. Velocidad de precipitación; la mayoría de los modelos matemáticos calculan un estado de saturación o de equilibrio, con el objetivo de saber en qué momento comienza la precipitación de inorgánicos. Calcular y caracterizar la velocidad de las reacciones en el yacimiento no es fácil; para esto se usa el número de damköhler N_{da} , expresado de la siguiente manera:

$$N_{da} = k \frac{1 \text{ volumen poroso}}{Q} \quad (1.6)$$

Donde:

Q: caudal de fluido que pasa a través del sistema,

K: Velocidad neta de reacción de los componentes.

Si el valor de N_{da} es muy alto se asume el equilibrio termodinámico, pero si es muy bajo es necesario calcular la velocidad de reacción.

Pérdida de permeabilidad en el pozo, ya que todas las estimaciones son hechas por medio de extrapolaciones a partir de las muestras de corazón.

Mackay⁸ en el modelamiento se basa en el cálculo de los lugares de máxima depositación y de las composiciones de las salmueras resultantes en los pozos productores, teniendo en cuenta un arreglo de elementos sensibles tales como la geometría del yacimiento (modelos 1D, 2D areal y vertical, y 3D), geometría del pozo (lugar y orientación del pozo dentro del campo y con respecto a otros pozos y acuíferos), y la velocidad de reacción variando desde no precipitación hasta el equilibrio. El estudio se realiza mediante un simulador de reacción y flujo, el cual modela la formación de incrustación en el yacimiento. Las muestras presentadas



en el estudio describen solo la precipitación de BaSO_4 o barita, debido a que es la más común entre las incrustaciones de sulfato en los sistemas de campos petroleros, que es insoluble en ácido.

A pesar de que el modelo simula de una manera acertada el impacto de la precipitación de sulfato de bario, éste es afectado por ciertas limitaciones tales como tamaño de zona de mezcla, cinética de la reacción e impacto en la permeabilidad.

El modelamiento de la precipitación de la barita y su impacto ocasionado por la mezcla de salmueras, constituye una gran herramienta en yacimientos en donde se realizan operaciones de inyección de agua, puesto que permite visualizar de una manera completa las incidencias de ciertos factores y elementos en la depositación in-situ.

1.8 MÉTODO EN TIEMPO REAL PARA LA DETECCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE INCRUSTACIONES⁹:

El estudio profundiza en los procesos de detección e identificación de depositaciones con un método conocido como atenuación nuclear, que se encarga de medir la intensidad del espectro nuclear para las fracciones constituyentes de un fluido multifase (sólido, líquido y gas), con la densidad o la composición del medio para sustancias puras o para mezclas, con la emisión de rayos gamma en diversos niveles de energía.

Se establecieron cinco pasos para resolver los problemas de incrustación en el pozo y en superficie: **(i)** detección, que se lleva a cabo mediante variadas pruebas in situ, con análisis de concentración de inhibidor residual de tipo electroquímico, midiendo cambios de frecuencia, comparando registros de rayos gamma en presencia de material radioactivo de ocurrencia natural, con ultrasonido o por inspección visual y observación física de los accesorios de tubería; **(ii)** identificación, para la localización de las mayores acumulaciones y determinación de la composición y cantidad de incrustación con procesos multietapas para el estudio del reflujó; **(iii)** remoción e inhibición, con la puesta en marcha de tratamientos químicos analizados previamente en laboratorio y corroborados en campo para determinar la efectividad y éxito de estos procesos y, **(iv)** monitoreo, para anticipar la posible formación de depositaciones después del tratamiento aplicado, repitiendo esencialmente las actividades de detección e identificación. Las variables que se deben calcular son:

- Atenuación de tubería llena: Es la relación entre el número de conteos de rayos gamma detectados para un tiempo t en el vacío y a través de una sustancia pura de densidad específica.



- Atenuación de masa: Es la relación entre la atenuación de la tubería llena y la densidad de la sustancia pura teniendo en cuenta la distancia que se halla separada la fuente emisora de rayos y el sensor de detección (diámetro interno \emptyset de la tubería).
- Atenuación de tubería llena para mezclas: Es la relación entre la fracción en volumen y la atenuación de la tubería llena de cada fase (crudo, agua y gas) de la mezcla.
- Atenuación de masa para mezclas: Es la relación entre la fracción en peso y la atenuación de masa de cada una de las sustancias constituyentes.

Los métodos de radiación de energía se efectuaron a dos y tres niveles de energía emitidos por una fuente de isótopo de bario. El rayo de energía se atenúa más en presencia de depositaciones por el mayor peso de sus elementos atómicos con respecto a los del agua y los hidrocarburos. La presencia de depositaciones se identifica con el aumento en la atenuación a través de las tuberías de transporte, y la naturaleza de la atenuación es usada para determinar la composición y cantidad de incrustaciones en la tubería así: para dos niveles de energía (energía dual) se construyen gráficas para estimar el cambio en la atenuación frente a las tres fases presentes para alta y baja energía, cambio que se atribuye a la formación de incrustaciones. Dado que las atenuaciones de las tres fases se relacionan linealmente, la intervención de líneas auxiliares a un punto de referencia permiten determinar el tipo, composición y cantidad de depositación con la pendiente de cada línea auxiliar.

Para tres niveles de energía; energía en alto, medio y bajo, se construyen gráficas para representar un tipo de atenuación, que es relacionada con otra a un nivel diferente de energía y determinar la clase de incrustación formada para el sistema de tres fases, donde además de la densidad de la sustancia, también se consideran las fracciones de gas y líquido según el régimen de flujo. La cantidad de incrustaciones formadas para los tres niveles de energía según las densidades de cada fase, se determina estimando las fracciones de cada fase y a partir de ésta se calcula el espesor de las incrustaciones (que varía con la profundidad de la zona para el estudio en pozo).

Todas las correlaciones se realizaron con modelos matemáticos, resultado de la solución de sistemas de tres y cuatro ecuaciones con igual número de incógnitas y de análisis estadísticos para la elaboración e interpretación de las gráficas.

El hecho de no considerar la variación de la densidad con la temperatura y la presión, dentro de los cálculos establecidos, hacen presumir un margen de error alto, aunque las diferencias experimentales con las de campo no sean muy influyentes; sin embargo este hecho resta exactitud al proceso.



De cualquier modo, el método de atenuación nuclear es apto para ser utilizado en campos donde no sea recomendable el desmonte del sistema o la interrupción del proceso de producción, como en campos costa afuera o en zonas desérticas totalmente aisladas, por la facilidad de transporte e instalación del equipo de radiación – recepción y su rapidez en la obtención de datos en el momento que ocurre el fenómeno (tiempo real).

1.9 RE-INYECCIÓN DE AGUA PRODUCIDA MANEJO Y VALORACION DEL RIESGO DE FORMACION DE INCRUSTACIONES ¹⁰:

El agua inyectada debe ser tratada de tal forma que no produzca depositaciones y que al mismo tiempo no contamine el medio ambiente. Una técnica muy empleada es la de reinyectar el agua que se produce en el mismo campo, lo que genera beneficios pues atenúa la descarga de aguas en el medio ambiente, disminuye costos facilitando el tratamiento del agua y prolonga la vida del campo.

Una forma de combatir la presencia de incrustaciones es la creación de fracturas en la formación; éstas se pueden realizar causando enfriamiento en la roca o inyectando agua a bajas temperaturas (60°C - 65°C). Otra forma de causar la fractura es con la aplicación de una presión hidrostática mucho mayor a la presión de formación; dicha presión debe ser sostenida para garantizar una gran área de flujo. Esta técnica ha arrojado buenos resultados pues la fractura muestra buena tolerancia hacia los sólidos en suspensión (incrustaciones, productos de corrosión, productos causados por la actividad bacteriana).

El uso de inhibidores es otra medida muy eficaz de controlar la presencia de incrustaciones; dichos inhibidores deben reunir una serie de propiedades para que su desempeño sea eficaz:

1. El inhibidor debe tener buen desempeño a bajas temperaturas (5°C). Si se quiere inducir fractura, ésta se realiza con el fluido a bajas temperaturas, además la formación de carbonatos es inversa a la temperatura.
2. El tiempo de desempeño del inhibidor debe ser prolongado (hasta 48 horas o más). Se requiere así porque el recorrido del fluido se ve retardado por obstáculos dentro de la formación (variación en la porosidad y permeabilidad).
3. Debe ser compatible con materiales en suspensión que son acarreados por la re-inyección de agua producida (arena, arcilla, productos de corrosión y de actividad bacterial)
4. Debe ser compatible con otros inhibidores que se encuentran en la re-inyección de agua producida, como los bactericidas que controlan la población de bacterias presentes en el interior de las formaciones que con su metabolismo producen sólidos y gases corrosivos como el H₂S.



5. El inhibidor no debe tener tendencia a ser absorbido por las rocas; este problema se presenta con mayor frecuencia en zonas recién fracturadas, para lo cual se debe sobresaturar la roca antes del fracturamiento.

1.10 FORMACION DE INCRUSTACIONES EN EL YACIMIENTO Y EN EL EQUIPO DE PRODUCCIÓN DURANTE LA INYECCIÓN DE AGUA (CINÉTICA DEL CRECIMIENTO DE CRISTALES DE $BaSO_4$ Y $CaSO_4$ Y EFECTO SOBRE EL DAÑO A LA FORMACION)¹¹:

La investigación se centra en el estudio experimental de la reducción de la permeabilidad en un medio poroso causado por la formación de incrustaciones durante el proceso de inyección de agua. El estudio se fundamenta en depositaciones de carbonato de calcio y de sulfato de calcio.

Estos componentes pueden precipitar en el medio poroso (roca) ocasionando taponamiento y reducción de presión en la formación, debido a la manera como crecen y como se depositan las incrustaciones, ya que es de forma perpendicular a las paredes del poro.

Para el estudio se contó con diferentes gráficos en los cuales se relacionan diferentes variables que afectan la depositación con la reducción de presión y permeabilidad, siendo la temperatura, la rata de flujo de agua inyectada y la concentración de iones carbonato y sulfato en solución, los factores que regulan la depositación de minerales.

La temperatura afecta la solubilidad de los componentes, dando lugar a la depositación. El carbonato de calcio y el sulfato de calcio, son componentes cuya solubilidad disminuye si aumenta la temperatura, entonces la permeabilidad se verá afectada en menos tiempo y la caída de presión será mayor a altas temperaturas.

A mayor caudal la permeabilidad disminuyó más rápidamente, debido a que en una menor cantidad de tiempo pasaba más cantidad de iones por el medio poroso que si el caudal fuera bajo, lo que da lugar a una mayor depositación.

El último factor estudiado fue la concentración de la solución; a mayor concentración se va a precipitar más rápidamente el carbonato y sulfato de calcio lo que ocasiona el taponamiento de los poros.

1.11 IMPLICACIONES DE LA MEZCLA DE SALMUERAS EN EL YACIMIENTO PARA EL MANEJO DE LAS DEPOSITACIONES EN EL CAMPO ALBA¹²:



El campo Alba, ubicado en el mar del Norte, realiza mezcla de salmueras para las operaciones de recobro mejorado. El agua de mar empleada en la inyección aporta aniones SO_4^- , los cuales al entrar en contacto con los cationes contenidos en el agua de formación principalmente iones Ba^{+2} , Ca^{+2} y Sr^{+2} forman incrustaciones. El problema es muy grave cuando se presenta cerca o en la tubería de producción, ya que lleva a una disminución de la producción de crudo.

El campo Alba se dividió en tres zonas, de acuerdo con la composición de la salmuera, así:

Zona 3: Ubicada en el extremo norte. El comportamiento de los niveles de bario es muy diferente, la concentración de iones bario permanece cercana a cero en todo el porcentaje de corte de agua.

Zona 1: Ubicada al sur de la zona 3. Los niveles de bario están entre 60 a 80 ppm, teniendo porcentajes de corte de agua entre 20 y 80%.

Zona 2: La concentración de bario está entre 60 a 80 ppm cuando el corte de agua está en un porcentaje entre 20 a 80%.

Se propusieron los siguientes métodos para analizar la composición de las salmueras:

- Análisis pozo por pozo de los datos de la composición de la salmuera: se analizaron las composiciones de las salmueras clasificándolas en las tres zonas mencionadas anteriormente. Los análisis se realizaron teniendo en cuenta principalmente la concentración de ión bario.
- Modelamiento del flujo: se realizó el análisis para cada zona. El modelo en 3D consiste de 37.757 celdas, con dimensiones de 200 X 200ft con un espesor que varía de 15 a 105 ft, dependiendo de la ubicación en la estructura. El modelo permite visualizar las áreas con máximo potencial de depositación.

1.12 PREDICCIÓN DE INCRUSTACIONES DE SULFATO EN OPERACIONES DE CAMPO¹³.

Este modelo termodinámico predice la tendencia de la formación de depositaciones de BaSO_4 , CaSO_4 y SrSO_4 resultado de la mezcla de aguas de inyección y de formación, más los efectos de la presión y la temperatura. El modelo también predice la competitividad de la precipitación simultánea del BaSO_4 , CaSO_4 y SrSO_4 donde el SO_4^- es el ión común, reflejando la precipitación de más de un mineral de sulfato. La sobresaturación y las cantidades de precipitado de los sulfatos se calculan en función de las solubilidades por medio de la ecuación de Pitzer.



- **Técnica de Pitzer.** La ecuación de Pitzer se divide en dos partes, la primera parte, es un término modificado por Debye-Huckel, que tiene en cuenta las interacciones electrostática es de largo alcance entre los iones. La segunda parte tiene en cuenta las interacciones de corto alcance entre los iones y el efecto del solvente. Los coeficientes en estos términos son llamados coeficientes viriales.

Los coeficientes viriales se pueden diferenciar así, β_{ij} y C_{ij} los cuales son el segundo y tercer coeficiente virial respectivamente, para electrolitos simples puros. Θ_{ij} es el segundo coeficiente virial para mezclas de electrolitos, el cual tiene en cuenta la interacción entre dos iones diferentes pero del mismo signo. El tercer coeficiente virial ψ_{ijk} representa la interacción entre tres iones diferentes de signos diferentes. $E\Theta$ y $E\Theta'$ son fuerzas electrostáticas de largo alcance entre iones diferentes pero con carga del mismo signo. B_{ij} y su derivada son función de la fuerza iónica de la solución.

Se sugiere¹⁴ sugiere como alternativa, que el coeficiente virial del $MgSO_4$ se use en lugar de los coeficientes viriales del sulfato de bario, sulfato de estroncio y sulfato de calcio, pues los dos primeros no se encuentran en la literatura y el último se encuentra disponible solo a 25°C; pero el coeficiente virial del $MgSO_4$ está disponible en función de la temperatura.

Los parámetros $S\theta_{ij}$ y ψ_{ijk} requeridos en la ecuación de Pitzer, para sistemas electrolíticos acuosos para el cálculo de la solubilidad del SO_4^{-2} no se conocen a temperaturas elevadas, por ende éstos deben ser evaluados en el modelo. Los datos de solubilidad sirven para definir los coeficientes por medio de la ecuación de Pitzer (cálculo del coeficiente de actividad), pero las solubilidades pueden ser calculadas después que todos los coeficientes hayan sido determinados.

El producto de solubilidad termodinámico de la fase sólida está en función de las molalidades y de los coeficientes de actividad iónica de los cationes y aniones y del coeficiente de actividad del agua.

Q_{sp} es la raíz cuadrada del producto de solubilidad estequiométrico del mineral, cuyo valor es idéntico a la solubilidad si la concentración molal de los aniones y cationes es la misma.

Por medio de la siguiente ecuación se puede relacionar el Q_{sp} (producto de solubilidad estequiométrico) y el K_{ps} (producto de solubilidad termodinámico).

$$-\ln Q_{psMX} = -\frac{1}{2} \ln K_{psMX} + \ln \gamma_{MX} + \frac{n}{2} \ln \gamma_{H_2O} \quad (1.7)$$



La ecuación (1.7) es una función logarítmica, que al combinarla con la ecuación de Pitzer se usa para determinar K_{ps} y los parámetros $S\theta_{ij}$ y el ψ_{ijk} (coeficientes viriales). De estos coeficientes viriales y demás términos se hablará en el capítulo 2 donde se hará una extensión de la teoría de interacciones iónicas de Pitzer.

• **Parametrización de los Coeficientes Viriales.** La mayoría de los coeficientes viriales para mezclas electrolíticas están dados a 25°C, pero los necesarios para análisis en campos de producción de hidrocarburos deben estar a temperaturas elevadas y estos no se encuentran disponibles. Pero como se indicó anteriormente, el modelo de Yuan y Todd los calcula, combinando la ecuación logarítmica (1.7) con la ecuación de Pitzer (1.8).

$$\begin{aligned}
 \ln \gamma_{MX} = & \left| z_M z_x \right| f\gamma + (2v_M / v) \sum_a m_a \left[B_{Ma} + \sum m_z C_{Ma} + (v_x / v_M) \phi_{Xa} \right] \\
 & + (2v_X / v) \sum_c m_c \left[B_{cX} + (\sum m_z) C_{cX} + (v_M / v_X) \phi_{Mc} \right] + \sum_c \sum_a m_c m_a \left[\left| z_M z_x \right| B_{ca} \right. \\
 & \left. + v^{-1} (2v_M z_M C_{ca} + v_M \psi_{Mca}) \right] + 1/2 \sum_c \sum_{c'} m_c m_{c'} \left[(v_X / v) \psi_{caX} \right] \\
 & + 1/2 \sum_a \sum_{a'} m_a m_{a'} \left[(v_X / v) \psi_{Maa'} + \left| z_M z_x \right| \phi_{aa'} \right] \dots \dots \dots \quad (1.8) \\
 \sum_c m_c z_c = & \sum_a m_a \left| z_a \right|
 \end{aligned}$$

Donde:

- m : concentración del elemento i (moles/L)
- z_i : carga del elemento i
- Φ_{Xa} : teoría de Pitzer
- Φ_{Mc} : teoría de Pitzer
- $\Phi_{aa'}$: teoría de Pitzer
- Ψ_{caX} : teoría de Pitzer
- $\Psi_{Maa'}$: teoría de Pitzer
- Ψ_{Mca} : teoría de Pitzer
- B : coeficientes viriales

Los coeficientes viriales a temperaturas menores de 25°C se calculan por medio de la correlación de solubilidad, ecuación (1.8), en lugar de tomar valores previamente publicados en la literatura, para hacer la predicción de la solubilidad más consistente. Por la misma razón los K_{ps} termodinámicos también se determinaron por la correlación de solubilidad.

$$SI = \log S \quad (1.9)$$



- **Correlación de Solubilidad en Sistemas Simples Binarios.** Los coeficientes viriales $S\theta_{ij}$, ψ_{ijk} y el K_{ps} termodinámico del sulfato se determinan correlacionando las solubilidades del $BaSO_4$, $CaSO_4$ y $SrSO_4$ en sistemas salinos binarios simples. La expresión general del coeficiente de actividad del sulfato se simplificó para un sistema salino dado y se sustituyó en la ecuación logarítmica.

A una temperatura dada, se utilizó el método de mínimos cuadrados para correlacionar la solubilidad del sulfato con la fuerza iónica y la concentración en un sistema acuoso dado, para así determinar el valor de cada parámetro. Todos los parámetros obtenidos fueron correlacionados con la temperatura.

- **Parametrización del Coeficiente Virial para Sistemas Salinos Ternarios.** Para sistemas salinos acuosos más complejos, el tercer coeficiente virial Ψ_{NXY} se requiere dentro de la ecuación de Pitzer para calcular la solubilidad del $CaSO_4$ y $SrSO_4$.

El método para determinarlo es similar al del sistema binario, pero el uso de los tres coeficientes no mejora el cálculo; por conveniencia esos valores se ingresan al modelo con un valor de cero.

- **Problemas con la Correlación para la Solubilidad del $BaSO_4$.** A temperaturas elevadas, los datos de solubilidad en sistemas acuosos para el $BaSO_4$ son escasos, por lo tanto la parametrización de los coeficientes viriales para el $BaSO_4$ es poco confiable. Las solubilidades calculadas con los parámetros obtenidos para estos sistemas no concuerdan con los datos medidos; para vencer estas dificultades el modelo asume que el efecto de otros electrolitos sobre la solubilidad del $BaSO_4$ en soluciones acuosas complejas es igual al efecto del $NaCl$.

Para poder llevar a cabo esta consideración, las concentraciones de los otros electrolitos en soluciones complejas se convierten a concentraciones equivalentes de $NaCl$ en el cálculo de la solubilidad del $BaSO_4$.

- **Efecto de la Presión.** El efecto de la presión sobre la solubilidad es relativamente pequeño, comparado con el efecto de la temperatura. En operaciones de campos de producción de hidrocarburos, los ΔP son del orden de cientos de bares, por lo cual el cambio en la solubilidad es significativo. Teóricamente la ecuación de Pitzer tiene en cuenta el efecto de la presión, pero el limitado número de datos de solubilidad publicados a altas presiones hacen impráctica dicha ecuación.

Por medio de las siguientes ecuaciones (1.10 a 1.12) se calcula la solubilidad en función de la presión, para predecir los cambios de la solubilidad causados por incrementos de presión de más de 5×10^4 KPa.



$$Q_{ps}^{CORREGIDO} = Q_{ps} \times R \quad (1.10)$$

$$R_{BaSO_4} = \exp\left\{A(P - Pr) + B(P^2 - Pr^2)\right\} \exp\left\{C(FI)^{0.5} + D(FI)\right\} \quad (1.11)$$

$$R_{SrSO_4} = \exp\left\{A\left(2.0 - \frac{T}{298}\right) * (P - Pr) + B(P^2 - Pr^2)\right\} \exp\left\{C(FI)^{0.5} + D(FI)\right\} \quad (1.12)$$

$$R_{YESO} = 1.0 + 0.69(R_{ANHIDRITA} - 1.0) \quad (1.13)$$

Donde

Pr: presión de referencia



2. MODELAMIENTO TERMODINÁMICO PARA LA PREDICCIÓN DE INCRUSTACIONES EN MEZCLAS DE AGUAS

El modelo termodinámico para la predicción de las depositaciones inorgánicas en mezclas de aguas fue desarrollado con base en el programa de cómputo OilScale.

El programa para la predicción termodinámica de depositaciones inorgánicas “OilScale” desarrollado por el Grupo de Investigación en Comportamiento de Fases “COFA” del programa de Ingeniería de Petróleos de la Universidad Surcolombiana, es un programa de computador escrito en lenguaje Visual Basic versión 6.0, debido a las ventajas que ofrece en cuanto a velocidad de ejecución, exactitud en los cálculos y además, por ejecutarse en ambiente Windows que es agradable al usuario.

El programa está diseñado para calcular el índice de saturación (IS), y masa precipitada (mg/L) de diferentes depositaciones inorgánicas en sistemas de producción de hidrocarburos. El programa predice la depositación de compuestos inorgánicos de baja solubilidad normalmente encontrados en estos sistemas, tales como calcita (CaCO_3), anhidrita (CaSO_4), yeso semihidratado ($\text{CaSO}_4 \cdot \frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$), yeso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), barita (BaSO_4), celestita (SrSO_4) y halita (NaCl) a diferentes temperaturas y presiones.

Los cálculos realizados se basan en el modelo termodinámico de Oddo y Tomson, cuya base teórica está representada por la teoría electrolítica de Pitzer, la cual permite trabajar con amplios rangos de temperatura, presión y sólidos.

El modelo inicialmente asigna valores o índices con sus respectivas cargas a los iones (cationes, aniones) y especies neutras y lee los datos de entrada. Luego calcula el volumen de gas total en el sistema; para realizar esto se deben convertir las unidades de concentraciones iónicas de mg/L a molalidad, además de calcular la fuerza iónica (FI) y las constantes de equilibrio termodinámico (Kps) para los componentes. Posteriormente calcula los coeficientes de actividad de Pitzer para cationes, aniones y componentes neutros, coeficiente osmótico del agua y coeficiente de fugacidad para la fase gaseosa (CO_2 , CH_4 , H_2S). Para finalizar, el programa calcula los valores de índice de saturación (IS) con base en los valores de las constantes de equilibrio termodinámico y los coeficientes de actividad.

Para el cálculo de la fuerza iónica (FI) se aplica la ecuación 2.1 expresando m en molalidad:

$$FI = \frac{1}{2} \sum_i m_i z_i^2 \quad (2.1)$$

Donde:

m : concentración del elemento i (moles/L)



z_i : carga del elemento i

Las constantes del producto de solubilidad de cada una de las depositaciones evaluadas se calculan mediante las siguientes relaciones:

Calcita

$$Kps_{CALCITA} = \text{Log}^{-1} \left(\frac{-171.9065 - 0.077993 \times T + 2839319}{T + 71.595 \times \text{Log}(T)} \right) \left(\frac{-48.76 - 0.5304 \times t (P-1)}{R \times T} \right) \quad (2.2)$$

Donde:

T = temperatura (K)

t = temperatura (°C)

P = presión (atm)

R = constante universal de los gases (83.144 mL*bar/mol*K)

Barita

$$Kps_{BARITA} = \text{Log}^{-1} \left(\frac{136.035 - 7680.41}{T - 48.595 \times \text{Log}(T)} \right) \times \text{Log}^{-1} \left((0.349 - 0.0001119 \times t) \left(\frac{P}{500} \right) \right) \quad (2.3)$$

Yeso

$$Kps_{YESO} = \text{Log}^{-1} \left((-1) \left(\frac{-86.156 + 4018.383}{T + 13.569 \times \text{Log}(T)} \right) \right) \times \text{Log}^{-1} \left((0.328 - 0.0000589 \times t) \left(\frac{P}{500} \right) \right) \quad (2.4)$$

Yeso semihidratado

$$Kps_{YESOSEMIHIDRADO} = \text{Log}^{-1} \left((-1) \left(\frac{-183603 + 8033771}{T + 28.173 \times \text{Log}(T)} \right) \right) \times \text{Log}^{-1} \left((0.423 - 0.0001 \times t) \left(\frac{P}{500} \right) \right) \quad (2.5)$$

Anhidrita

$$Kps_{ANHIDRITA} = \text{Log}^{-1} \left((-1) \left(\frac{-150.311 + 6327.323}{T + 23.424 \times \text{Log}(T)} \right) \right) \times \text{Log}^{-1} \left((0.0423 - 0.0001 \times t) \left(\frac{P}{500} \right) \right) \quad (2.6)$$

Celestita

$$Kps_{CELESTITA} = \text{Log}^{-1} \left((-1) \left(\frac{-151.29 + 7159.235}{T + 23.475 \times \text{Log}(T)} \right) \right) \times \text{Log}^{-1} \left((0.417 - 0.0001014 \times t) \left(\frac{P}{500} \right) \right) \quad (2.7)$$

Halita

$$Kps_{HALITA} = \text{Log}^{-1} \left((-1) (0.00001884 \times T^2 - 0.01235 \times T + 0.4177) \right) \times \text{Log}^{-1} \left((0.12 - 0.0002333 \times t) \left(\frac{P}{500} \right) \right) \quad (2.8)$$



Los coeficientes de actividad para los iones y osmótico para el agua se calculan con las siguientes relaciones, según la teoría de Pitzer:

- **Coeficiente de actividad de los cationes:** Se itera para cada catión y anión como lo indican las sumatorias. La m mayúscula (M) indica que permanece constante el catión hasta que pasa a la otra iteración.

$$\ln \gamma_{+,M} = z_+^2 F + \sum_a m_a (2B_{Ma} + ZC_{Ma}) + \sum_c m_c 2\Phi_{Mc} + \sum_a m_a \Psi_{Mca} + \sum_{a < a'} \sum m_a m_{a'} \Psi_{Maa'} + z_+ \sum_c \sum_a m_c m_a C_{ca} + 2 \sum_n m_n \lambda_{nM} + \dots \quad (2.9)$$

z_+ = carga del catión

La magnitud F se calcula mediante la ecuación (310).

$$F = -A_\phi \left[\frac{FI^{1/2}}{1+bFI^{1/2}} + \frac{2}{b} \log(1+bFI^{1/2}) \right] + \sum_c \sum_a m_c m_a B'_{ca} + \sum_{c < c'} \sum m_c m_{c'} \Phi'_{cc'} + \sum_{a < a'} \sum m_a m_{a'} \Phi'_{aa'} \quad (2.10)$$

Para realizar el cálculo del término F se debe iterar en los 3 últimos términos de la relación entre todos los cationes y aniones.

$m_c, m_a, m_{c'}, m_{a'}$ = concentración molal de los cationes y aniones.

$$B_{Ma} = \beta_{Ma}^{(0)} + \beta_{Ma}^{(1)} g(\alpha_1 FI^{1/2}) + \beta_{Ma}^{(2)} g(\alpha_2 FI^{1/2}) \quad (2.11)$$

$\beta_{Ma}^{(0)}, \beta_{Ma}^{(1)}, \beta_{Ma}^{(2)}$ de la tabla 4

$\alpha_1 = 1.4 \text{ kg}^{0.5} \text{ mol}^{-0.5}$ para iones 2:(-2) (teoría de Pitzer)

$\alpha_1 = 2.0 \text{ kg}^{0.5} \text{ mol}^{-0.5}$ para iones 1:(-2), (-1):2, o 1:(-1) (teoría de Pitzer)

$\alpha_2 = 12 \text{ kg}^{0.5} \text{ mol}^{-0.5}$ (teoría de Pitzer)

$$C_{Ma} = \frac{C_{Ma}^\phi}{2|z_+ z_-|^{1/2}} \quad (2.12)$$

C_{Ma}^ϕ = de la tabla 4

$$Z = \sum_i m_i |z_i|$$

Φ_{Mc} = teoría de Pitzer

Ψ_{Mca} = teoría de Pitzer

$\Psi_{Maa'}$ = teoría de Pitzer



$$C_{aa} = \frac{C_{aa}^{\phi}}{2|z_+ z_-|^{1/2}} \quad (3.13)$$

C_{aa}^{ϕ} = de la tabla 3

λ_{nM} = teoría de Pitzer

- **Coeficiente de actividad de los aniones:** Se itera para cada catión y anión como lo indican las sumatorias. La x mayúscula (X) indica que permanece constante el anión hasta que pasa a la otra iteración.

$$\begin{aligned} \ln \gamma_{-,X} = & z_-^2 F + \sum_c m_c (2B_{cX} + ZC_{cX}) + \sum_a m_a \left(2\Phi_{Xa} + \sum_c m_c \Psi_{cXa} \right) \\ & + \sum_{c < c'} \sum m_c m_{c'} \Psi_{cc'X} + |z_-| \left[\sum_c \sum_a m_c m_a C_{ca} + 2 \sum_n m_n \lambda_{nX} + \dots \right] \end{aligned} \quad (2.13)$$

z_- = carga del anión

$$B_{cX} = B_{cX}^{(0)} + B_{cX}^{(1)} g\left(\alpha_1 FI^{1/2}\right) + B_{cX}^{(2)} g\left(\alpha_2 FI^{1/2}\right) \quad (2.14)$$

$$C_{cX} = \frac{C_{cX}^{\phi}}{2|z_+ z_-|^{1/2}} \quad (2.15)$$

Φ_{Xa} = teoría de Pitzer

Ψ_{Xac} = teoría de Pitzer

$\Psi_{cc'X}$ = teoría de Pitzer

$$C_{ca} = \frac{C_{ca}^{\phi}}{2|z_+ z_-|^{1/2}}$$

λ_{nX} = teoría de Pitzer

- **Coeficiente osmótico del agua:** Se itera para cada catión y anión como lo indican las sumatorias.

$$\begin{aligned} \phi - 1 = & \frac{2}{\sum_i m_i} \left[\frac{-A_{\phi} FI^{3/2}}{1 + bFI^{1/2}} + \sum_c \sum_a m_c m_a (B_{ca}^{\phi} + ZC_{ca}) \right. \\ & + \sum_{c < c'} \sum m_c m_{c'} \left(\Phi_{cc'}^{\phi} + \sum_a m_a \Psi_{cc'a} \right) + \sum_{a < a'} \sum m_a m_{a'} \left(\Phi_{aa'}^{\phi} + \sum_c m_c \Psi_{caa'} \right) \\ & \left. + \sum_n \sum_c m_n m_c \lambda_{nc} + \sum_n \sum_a m_n m_a \lambda_{na} + \sum_{n < n'} \sum m_n m_{n'} \lambda_{nn'} + \frac{1}{2} \sum_n m_n^2 \lambda_{nn} + \dots \right] \end{aligned} \quad (2.16)$$



$$A_{\phi} = \frac{1}{3} \sqrt{2 * \pi * N_A * dens} \left(\frac{eElec^2}{4 * \pi * \epsilon_0 * Dielec * kBoltz * T(K)} \right)^{3/2} \quad (2.17)$$

$$B_{ca}^{\phi} = B_{ca}^{(0)} + B_{ca}^{(1)} \exp\left(-\alpha_1 FI^{1/2}\right) + B_{ca}^{(2)} \exp\left(-\alpha_2 FI^{1/2}\right)$$

$$C_{ca}^{\phi} = \frac{C_{ca}^{\phi}}{2|z_+ z_-|^{1/2}}$$

$\Phi_{cc'}$ = teoría de Pitzer

$\Psi_{cc'a}$ = teoría de Pitzer

$\Phi_{aa'}$ = teoría de Pitzer

$\Psi_{caa'}$ = teoría de Pitzer

λ_{nc} = teoría de Pitzer

λ_{na} = teoría de Pitzer

$\lambda_{nn'}$ = teoría de Pitzer

λ_{nn} = teoría de Pitzer

Los índices de saturación se calculan mediante las siguientes relaciones según el modelo de Oddo y Tomson:

$$\text{Calcita:} \quad IS_{CALCITA} = \text{Log} \left\{ \frac{[Ca^{+2}] \cdot [CO_3^{-2}] \cdot \gamma Ca^{+2} \cdot \gamma CO_3^{-2} (K_2 HCO_3)}{Kps_{CALCITA} \times aH} \right\} \quad (2.18)$$

$$\text{Barita:} \quad IS_{BARITA} = \text{Log} \left\{ \frac{[Ba^{+2}] \cdot [SO_4^{-2}] \cdot \gamma Ba^{+2} \cdot \gamma SO_4^{-2}}{Kps_{BARITA} (T, P)} \right\} \quad (2.19)$$

$$\text{Yeso:} \quad IS_{YESO} = \text{Log} \left\{ \frac{[Ca^{+2}] \cdot [SO_4^{-2}] \cdot \gamma Ca^{+2} \cdot \gamma SO_4^{-2} \cdot aH_2O^2}{Kps_{YESO}} \right\} \quad (2.20)$$

Yeso semihidratado:

$$IS_{YESO SEMIHIDRATADO} = \text{Log} \left\{ \frac{[Ca^{+2}] \cdot [SO_4^{-2}] \cdot \gamma Ca^{+2} \cdot \gamma SO_4^{-2} \cdot aH_2O^{0.5}}{Kps_{YESO SEMIHIDRATADO}} \right\} \quad (2.21)$$

$$\text{Anhidrita:} \quad IS_{ANHIDRITA} = \text{Log} \left\{ \frac{[Ca^{+2}] \cdot [SO_4^{-2}] \cdot \gamma Ca^{+2} \cdot \gamma SO_4^{-2}}{Kps_{ANHIDRITA}} \right\} \quad (2.22)$$



Celestita:
$$IS_{CELESTITA} = \text{Log} \left\{ \frac{[Sr^{+2}] \cdot [SO_4^{-2}] \cdot \gamma_{Sr^{+2}} \cdot \gamma_{SO_4^{-2}}}{Kps_{CELESTITA}} \right\} \quad (2.23)$$

Halita:
$$IS_{HALITA} = \text{Log} \left\{ \frac{[Na^+] \cdot [Cl^-] \cdot \gamma_{Na^+} \cdot \gamma_{Cl^-}}{Kps_{HALITA}} \right\} \quad (2.24)$$

Para el cálculo de la masa precipitada de la depositación inorgánica, se tiene como relación general:

$$ppt = \frac{\sqrt{(-b - (b^2 * 4c))}}{2} \quad (2.25)$$

ppt = coeficiente de precipitación

$b = -\text{concentración molal del anión} + \text{concentración molal del catión}$

$c = \text{concentración molal del anión} * \text{concentración molal del catión} - \frac{Kps}{\gamma_{-,X} * \gamma_{+,M}}$

$$\text{Masa precipitada} = ppt * (\rho_w - TDS) / 1000000 * MW \quad (2.26)$$

Tabla 2. pKps para los diferentes compuestos.

Calcita	35.02
Barita	81.74
Yeso	60.30
Yeso semihidratado	50.08
Anhidrita	47.68
Celestita	64.33
Halita	20.47

Fuente. Modelo termodinámico de Oddo y Tomson.

Tabla 3. Constantes para el cálculo de la densidad del agua.

dens0	999.83952
a1	16.945176
a2	-0.0079870401
a3	-0.000046170461
a4	0.00000010556302
a5	-2.8054253E-10
a6	0.01687985
a7	0.043922
a8	-0.000076
a9	0.000000126
a10	0.00000000319

Fuente. Teoría electrolítica de Pitzer



Tabla 4. Coeficientes viriales utilizados en la teoría de Pitzer.

ELECTROLITO	$B_{MX}^{(0)}$	$B_{MX}^{(1)}$	$\beta_{MX}^{(2)}$	C_{MX}^{ϕ}
HCl	0.1775	0.2945	--	0.00080
LiCl	0.1494	0.3074	--	0.00359
NaCl	0.0765	0.2664	--	0.00127
KCl	0.0484	0.2122	--	-0.00084
HBr	0.2085	0.3477	--	0.00152
LiBr	0.1748	0.2547	--	0.00530
NaBr	0.0973	0.2791	--	0.00116
KI	0.0569	0.2212	--	-0.00180
HI	0.2211	0.4907	--	0.00482
Lil	0.2104	0.3730	--	--
Nal	0.1195	0.3439	--	0.00180
NaOH	0.0864	0.2530	--	0.00440
KOH	0.1298	0.3200	--	0.00410
HNO ₃	0.1168	0.3456	--	-0.00539
LiNO ₃	0.1420	0.2780	--	-0.00551
NaNO ₃	0.0068	0.1783	--	-0.00072
KNO ₃	-0.0816	0.0494	--	0.00660
NH ₄ NO ₃	-0.0154	0.1120	--	-0.00003
Na ₂ SO ₄	-0.0187	1.0994	--	0.00555
K ₂ SO ₄	0.4995	0.7793	--	--
MgCl ₂	0.3509	1.6508	--	0.00651
FeCl ₂	0.3359	1.5323	--	-0.00861
NiCl ₂	0.3499	1.5300	--	-0.00471
CaCl ₂	0.3159	1.6140	--	-0.00034
Mg(NO ₃) ₂	0.3671	1.5848	--	-0.02062
MgSO ₄	0.2210	3.3430	-37.23	0.02500
CuSO ₄	0.2340	2.5270	-48.33	0.00440
NiSO ₄	0.1702	2.9070	-40.06	0.03660
AlCl ₃	0.6993	5.8487	--	0.00372

Fuente. Termodinámica molecular de los equilibrios de fases



3. ALGORITMO Y PROGRAMACION

El programa de cómputo **ScaleMixing** desarrollado por el Grupo de Investigación en Comportamiento de Fases “COFA” del programa de Ingeniería de Petróleos de la Universidad Surcolombiana, es un programa de computador escrito en lenguaje Visual Basic versión 6.0.

El programa ofrece al usuario la opción de realizar un análisis fisicoquímico de la mezcla que va a resultar entre el agua que va a ser inyectada y el agua de formación, calculando la composición final de la mezcla a diferentes proporciones entre la dos aguas, además de calcular el pH de la mezcla; el programa permite realizar un análisis detallado con el fin de ir cambiando la temperatura y presión en un amplio rango, en el cual el usuario puede analizar detenidamente qué puede ocurrir con cambios en la temperatura y presión del sistema, con el fin de calcular si hay precipitación con alguna alteración en la temperatura o presión, en esa zona donde posiblemente ocurra dicha alteración debido a las diferencias entre la temperatura de las dos aguas a mezclar. Luego de calcular estas variables de las mezclas son entradas al programa el cual procede a realizar los cálculos de saturación y la predicción de posible depositación de inorgánicos como se muestra en el diagrama 2.

A continuación se exponen únicamente los parámetros nuevos implementados en el programa para no hacer énfasis en la programación que concierne al programa OilScale, por lo tanto se muestran las relaciones para calcular composiciones y pH de la mezcla que es la parte nueva del programa.

3.1 TEMPERATURA.

Un aumento en la temperatura de la mezcla ocasionará precipitación de inorgánicos, dado que algunos compuestos aumentan la solubilidad con el aumento de la temperatura, mientras que otros compuestos se comportan de forma inversa, disminuyendo la solubilidad con el aumento en la temperatura. Hacer un cálculo de temperatura en la zona de mezcla resulta difícil, porque se debe tener en cuenta que la temperatura del agua de inyección varía desde el momento en que se inyecta hasta que hace contacto con el yacimiento y sus fluidos; por lo tanto se debe tener en cuenta la transferencia de calor con las tuberías, el gradiente geotérmico y la transferencia de calor con el yacimiento y sus componentes; para calcular ese cambio en la temperatura se requieren muchos datos y realizar cálculos minuciosos; el programa **ScaleMixing** no calcula la temperatura de la mezcla, pero tiene la opción de realizar cambios en la temperatura de ésta y determinar la predicción de incrustaciones de forma inmediata, ilustrándolo en la grafica de precipitación lo cual le permite al usuario



evaluar alguna zona que el usuario quiera con mayor precisión en cuanto a cambios en la temperatura, en rangos que pueden variar de grado a grado para estimar el efecto de algún cambio leve de temperatura en la formación de incrustaciones.

3.2 pH DE LA MEZCLA

El pH para sistemas de agua puede ser escrito de acuerdo a la ley de mezclas de Kay.

$$\begin{aligned} pH &= -\log[H^+] \quad \text{Por lo tanto, } [H^+] = 10^{-pH} \\ pH &= -\log\{F_1[H^+]_1 + F_2[H^+]_2 + F_3[H^+]_3 + \dots + F_n[H^+]_n\} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Donde: $[H^+] =$ concentraciones del ión hidrógeno moles /litro.
 $F_1, F_2, F_3, \dots, F_n =$ Fracción de cada agua en una mezcla establecida
 $[H^+]_1, [H^+]_2, [H^+]_3, \dots, [H^+]_n =$ Concentración de hidrógeno de cada agua

Para calcular el pH de la mezcla se utiliza la ecuación 3.1

$$pH_{mezcla} = \{F_1[pH]_1 + F_2[pH]_2\} \quad (3.2)$$

Donde:

$F_1, F_2 =$ Fracción de cada agua en una mezcla establecida
 $[pH]_1, [pH]_2 =$ pH de cada agua.

3.3 CONCENTRACIONES PARA MEZCLAS

Para mezclas, la ley de Kay se ajusta a este cálculo, ya que el agua que más aportes haga es la que predominará en la mezcla y el resultado de ésta estará más cercano a esta agua.

$$C_{final} = \{F_1[C]_1 + F_2[C]_2 + F_3[C]_3 + \dots + F_n[C]_n\}$$

$$C_M \text{ mezcla} \equiv \{F_1[C]_1 + F_2[C]_2\} \quad (3.3)$$

Donde:

$C_M =$ concentración del ión en la mezcla (ppm)

$F_1, F_2 =$ Fracción de cada agua en una mezcla establecida

$C_1, C_2 =$ ppm del ión respectivo en cada agua.



Algoritmo general del programa de cómputo ScaleMixing.

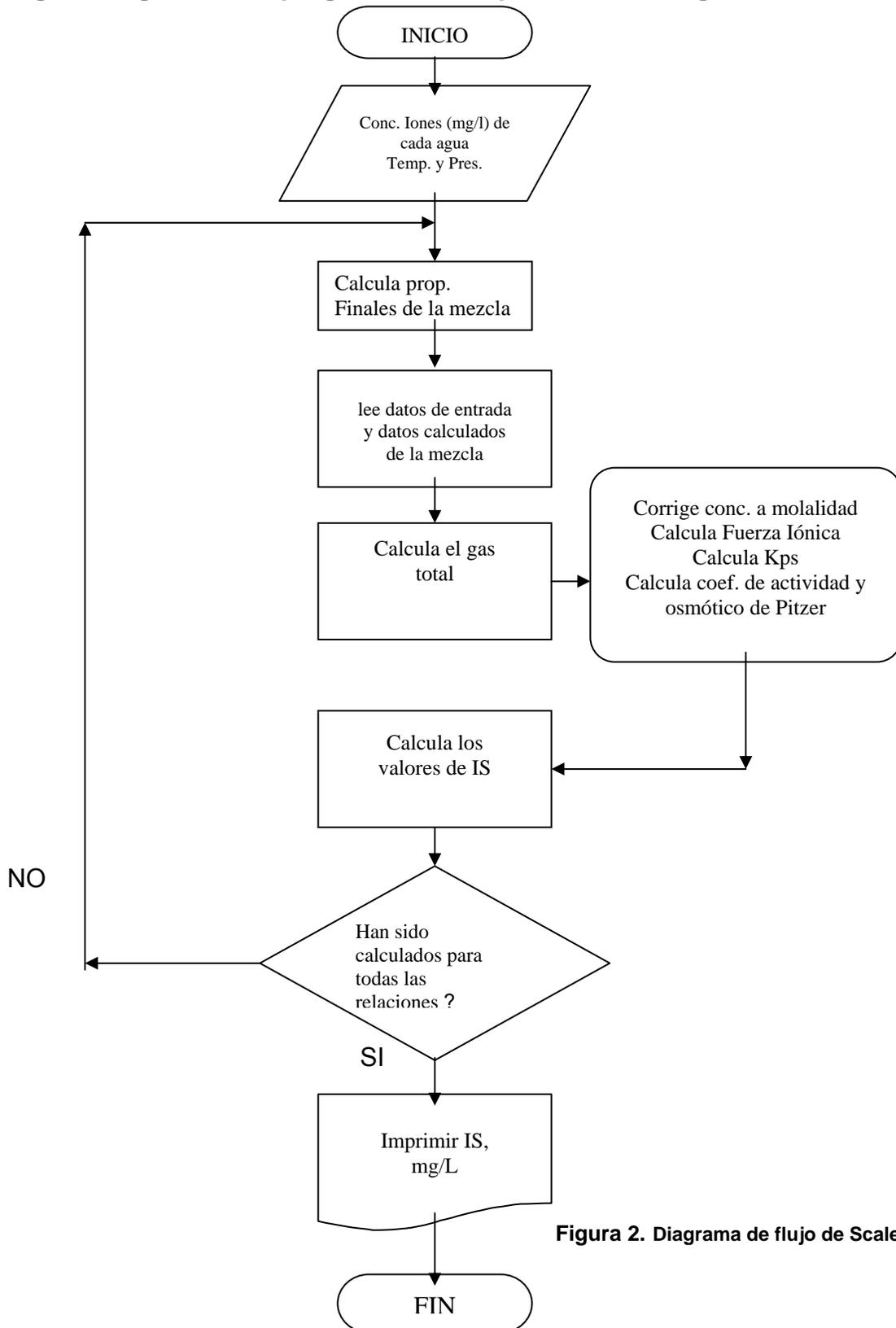


Figura 2. Diagrama de flujo de ScaleMixing



4. ESTRUCTURA Y MANUAL DEL PROGRAMA

Al ejecutarse el programa “**ScaleMixing**” se despliega la pantalla de presentación (figura 3), donde el usuario puede conocer la aplicación del programa.

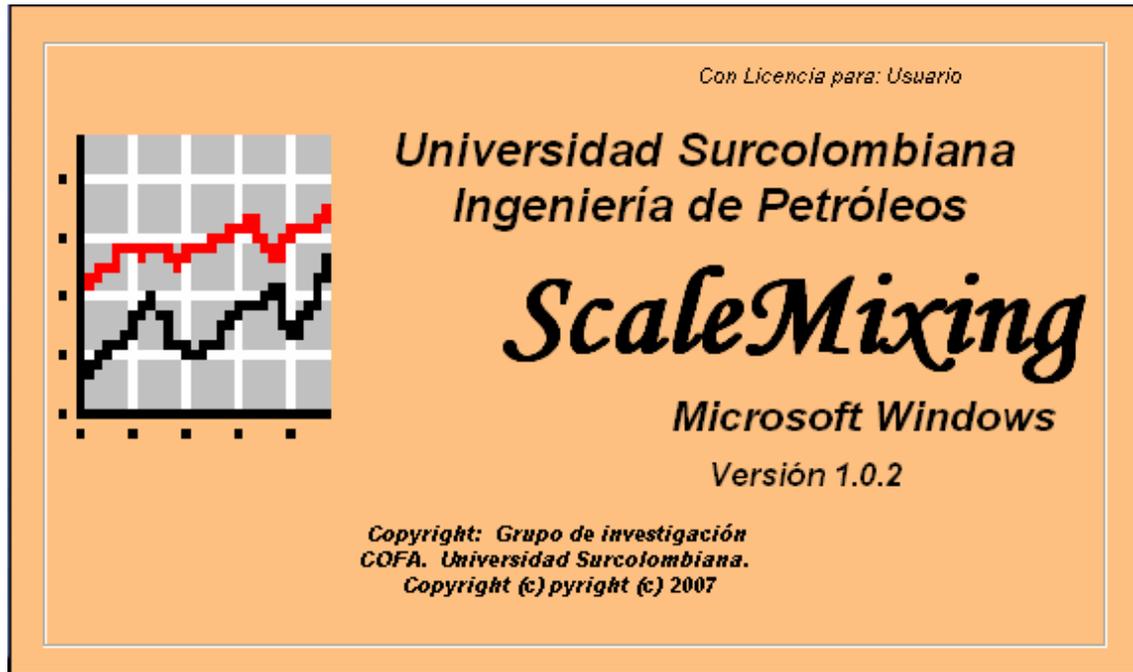


Figura 3. Presentación del programa ScaleMixing

Luego de la presentación del programa aparece un formulario para **Inicio de sesión**, donde se introduce el nombre de la persona que va a ejecutar el programa, información sobre el campo de producción de petróleo que se va a evaluar y la locación específica donde se va a trabajar, con el objetivo de mostrar dicha información en futuros reportes (figura 4).

Después de ingresar estos datos se muestra el menú principal, donde se pueden apreciar las diferentes opciones que tiene el programa para la predicción termodinámica de depositaciones inorgánicas (figura 5).



Inicio de sesión

Nombre:

Campo:

Pozo:

Comentarios:

Aceptar

Cancelar

Figura 4. Inicio de sesión de ScaleMixing

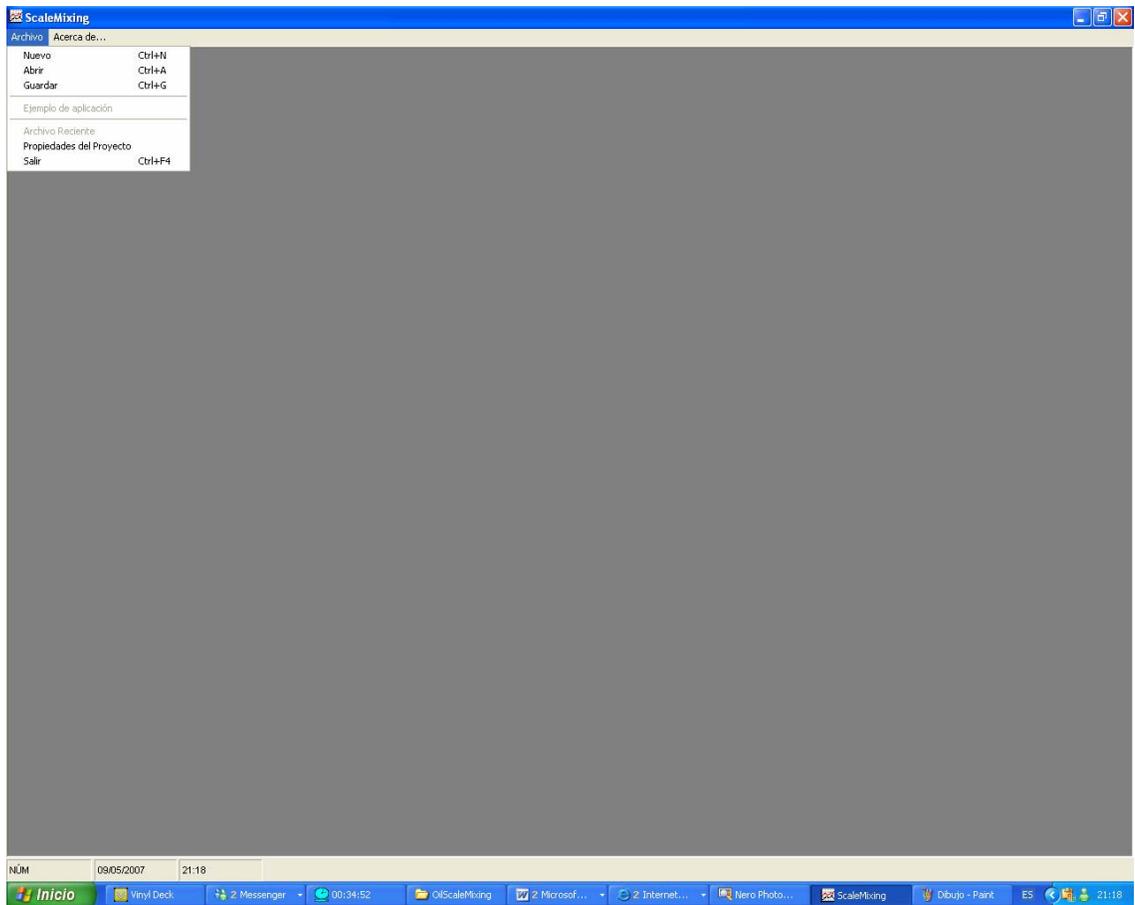


Figura 5. Menú Principal del programa ScaleMixing



El primer comando corresponde al de **Archivo**, donde se despliegan las opciones de nuevo, abrir o guardar un proyecto, además tiene un ejemplo de aplicación y una opción para salir del programa. Al activar cualquiera de los comandos, nuevo o abrir, aparece el formulario para ingresar los diferentes datos necesarios para la predicción de las depositaciones inorgánicas (figura 6) como concentración de los diferentes iones presentes de cada agua, así como su respectivo pH, caudales de crudo, agua y gas y datos de presión y temperatura de la locación evaluada. En este formulario, además aparecen los botones de calcular y salir del formulario.

ScaleMixing - [Datos de entrada]

Archivo Resultados Acerca de...

Caudales:

Gas/Día (MSCF): 8500

Aceite/Día (STB): 50

Agua/Día (STB): 100

Temperatura y Presión:

Temperatura (°F): 340

Presión (Psia): 7000

pH:

pH (Agua Formación): 7

pH (Agua Inyección): 6.86

Usar pH medido para calcular IS? Si No

Especies	Agua de formación	Agua de inyección
Na+	19872	25100
K+ (mg/L)	500	0
Mg2+ (mg/L)	54	137
Ca2+ (mg/L)	6500	1230
Si+2 (mg/L)	700	0
Ba+2 (mg/L)	550	60
Fe2+ (mg/L)	12	7
Zn2+ (mg/L)	1	0
Cl- (mg/L)	43000	41000
SO4-2 (mg/L)	55	20
F- (mg/L)	1	0
Alk total (mg/L)	281	480
Acetatos (mg/L)	10	0
TDS Medido (mg/L)	70900	68050
CO2 Gas (%)	0.27	2.29
H2S Gas (%)	0.0001	0

Borrar Composiciones

Calcular

Salir

NÚM Nombre: Javier Campo: Tello Pozo: T-14 06/05/2007 12:50 p.m.

Figura 6. Datos de entrada del programa ScaleMixing

El segundo comando corresponde a los **Resultados** del programa, (figura 7), donde aparecen los diferentes resultados obtenidos al ejecutar el programa. En este menú se pueden observar los resultados de los índices de saturación para las diferentes depositaciones que maneja el programa, además de una serie de gráficos que facilitan el análisis de los resultados obtenidos y también la opción de guardar o imprimir los resultados. Una vez activado el botón **Calcular**, el programa realiza los cálculos pertinentes al modelo termodinámico descrito para la predicción de depositaciones inorgánicas. En este menú además se tiene la opción de guardar los resultados o imprimirlos; si los resultados se quieren guardar; éstos quedan en un formato de texto (.txt), (figura 8).

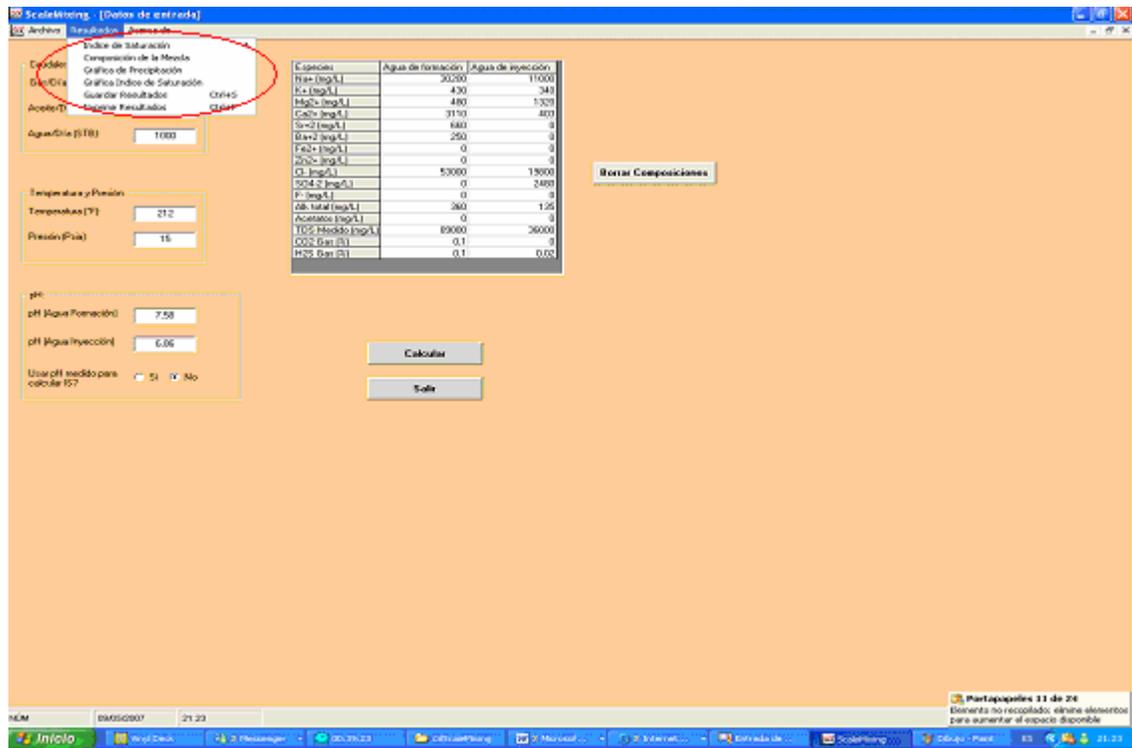


Figura 7. Menú de resultados

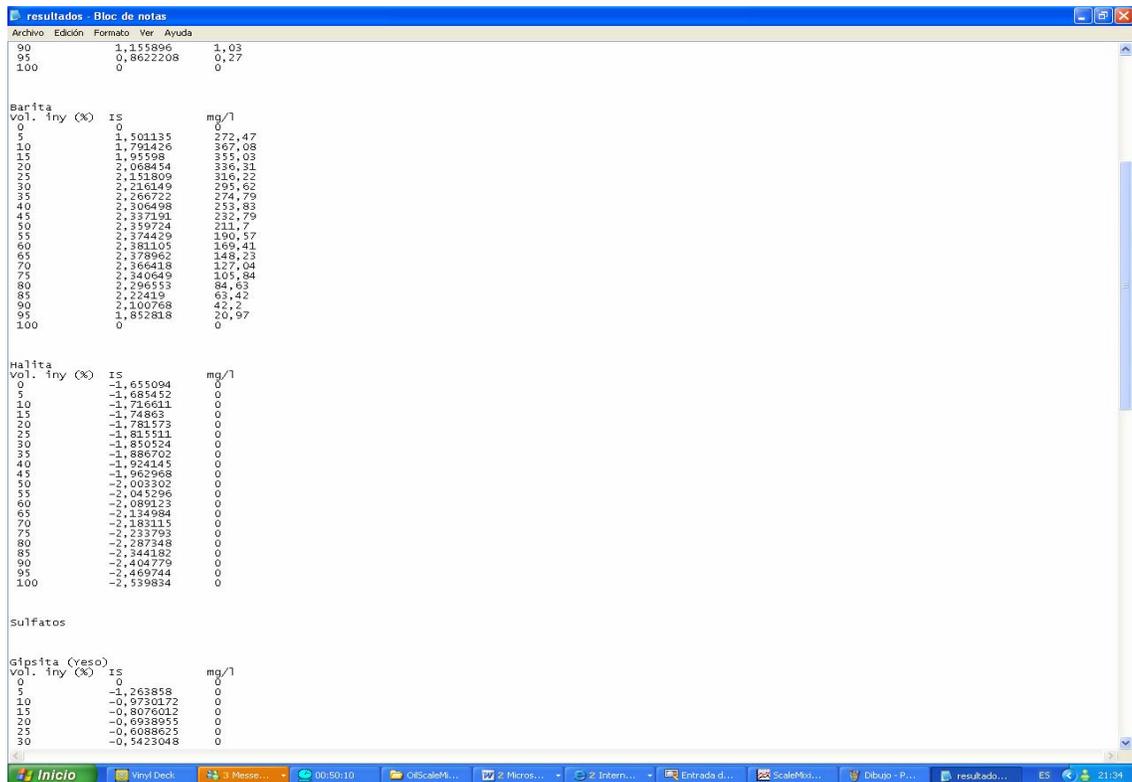


Figura 8. Resultados guardados en formato .txt.



En este comando aparecen varias opciones entre ellas el índice de saturación para cada compuesto incrustante, a diferente relación de mezcla desde 0 a 100% de agua de inyección, pH de la mezcla y los miligramos por litro de precipitado (figura 9), o la concentración de cada ion en la mezcla para cada proporción desde 0 a 100 %, variando cada 5 % (figura 10).

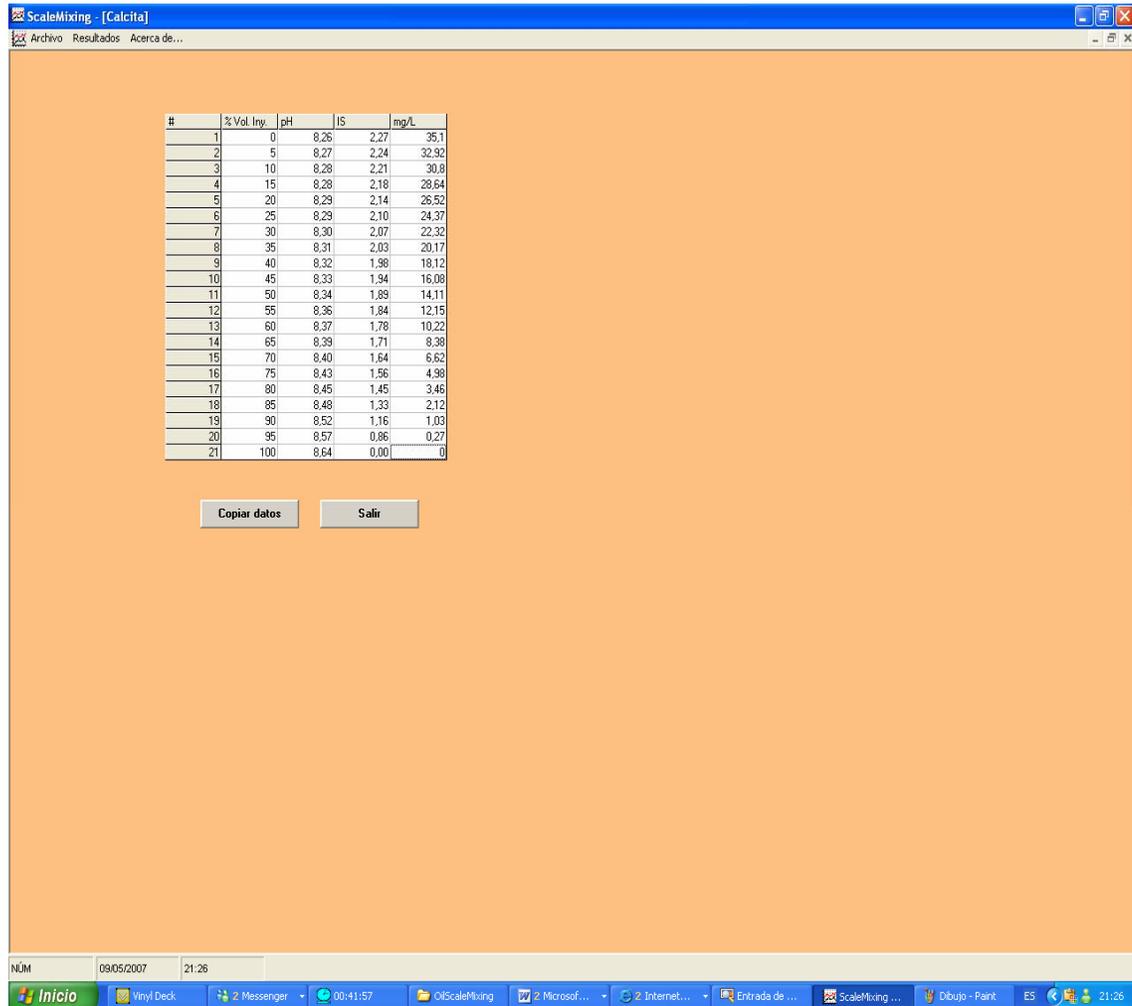


Figura 9. Tabla de resultados, %Volumen agua de inyección, (IS), (mg/L) de masa precipitada

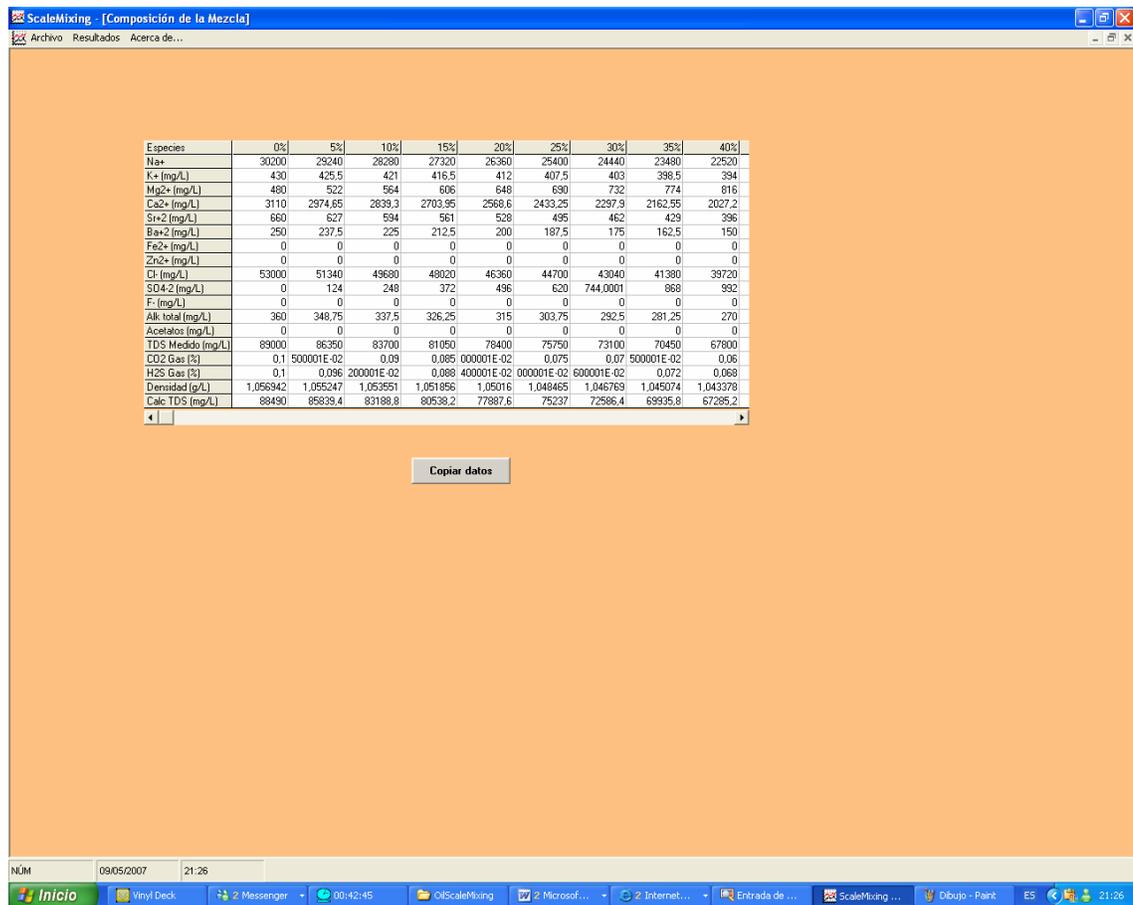


Figura 10. Tabla de resultados de las composiciones, según la proporción de agua de inyección

En el comando de resultados está la opción ilustrar las gráficas generadas por el programa, la gráfica de % de volumen de agua de inyección versus precipitación en la cual se ilustra la precipitación en miligramos por litro para cada compuesto desde 0 hasta 100% de agua de inyección en la mezcla, además la opción de cambiar temperatura y presión desde un comando (figura 11). Los cambios de la depositación que se generan por dichos cambios de temperatura y presión se pueden observar instantáneamente en el gráfico, aclarando que los resultados guardados son los generados con las condiciones iniciales.

El otro gráfico que genera el programa es el de % de volumen de agua de inyección en la mezcla versus IS para cada componente, con las mismas opciones de cambio de temperatura y presión (figura 12).

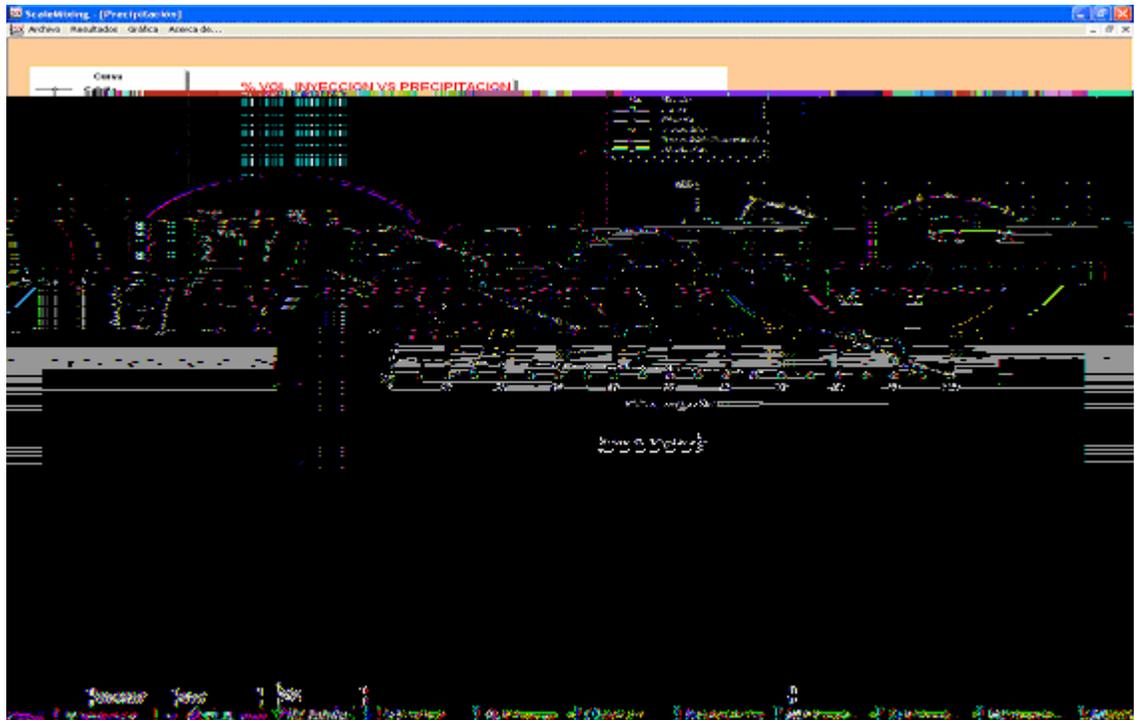


Figura 11. Gráfica de resultados generada por el programa ScaleMixing (%Volumen agua de inyección versus (mg/L) masa precipitada)

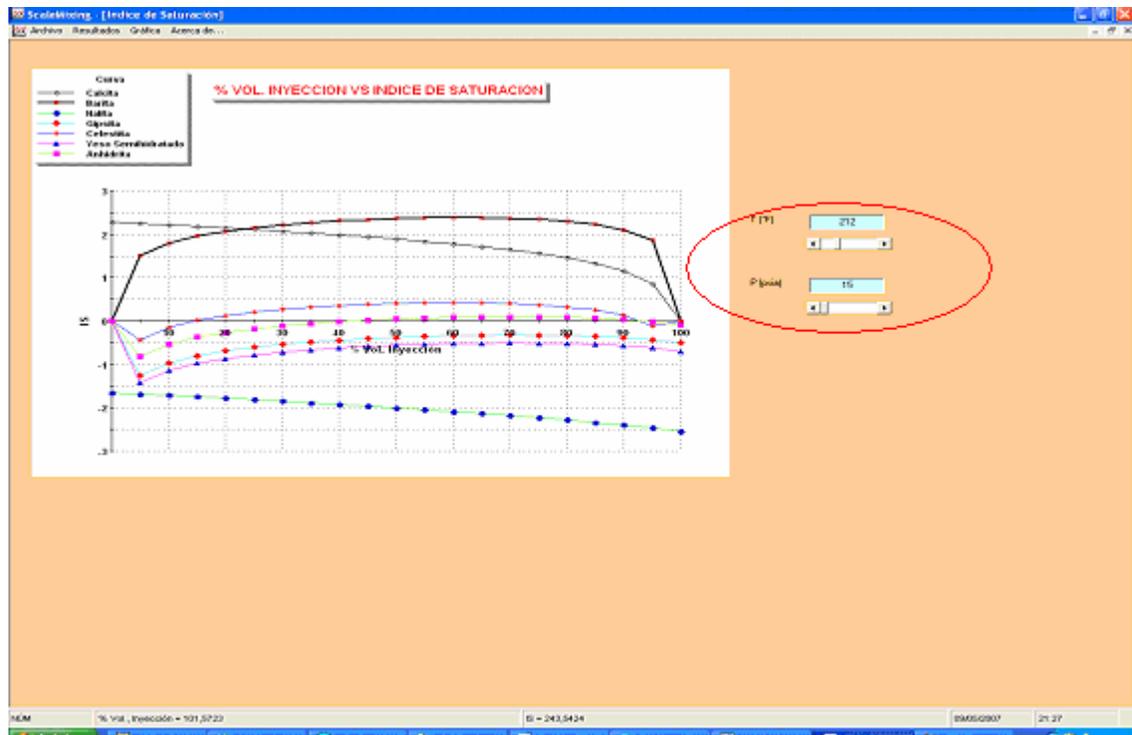


Figura 12. Gráfica de resultados generada por el programa ScaleMixing (%Volumen agua de inyección versus IS)



Las diferentes gráficas generadas por el programa de cómputo poseen un menú (figura 13) para realizar distintas operaciones tales como propiedades de la gráfica (cambio del tipo de líneas, colores, etc.) (Figura 14).

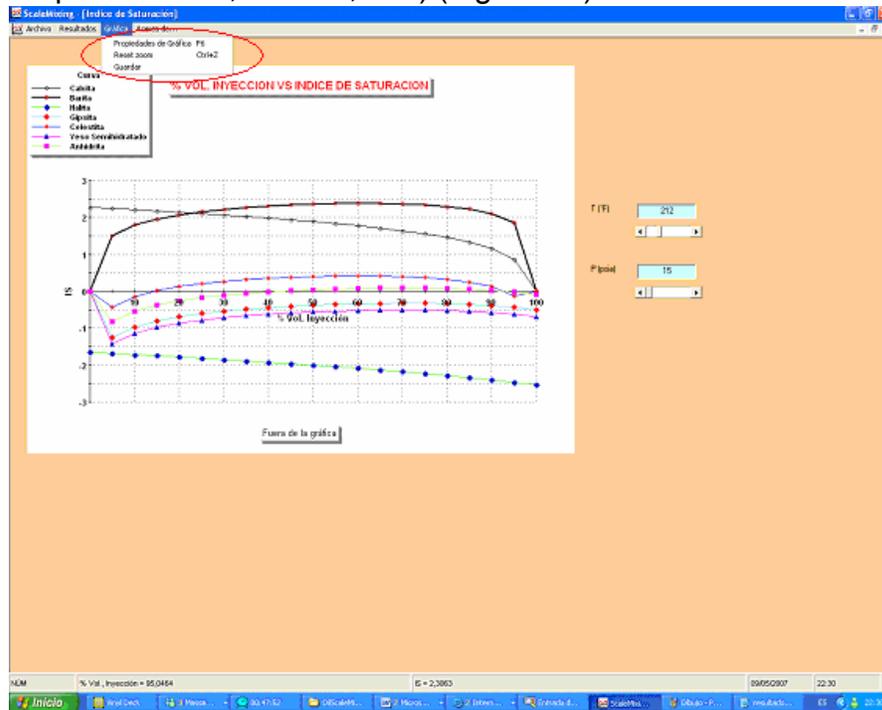


Figura 13. Menú de propiedades de gráfico

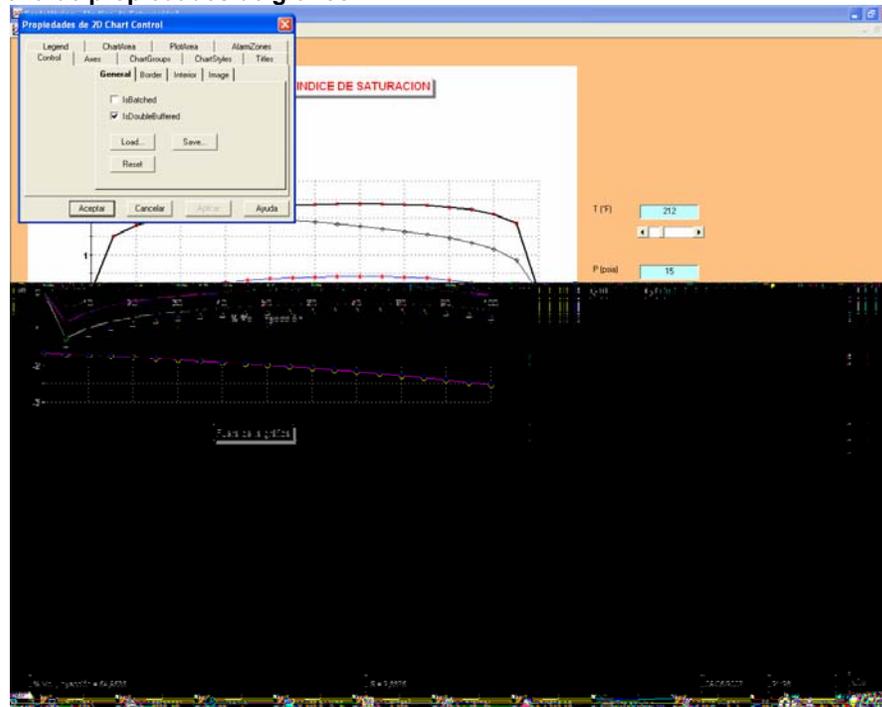


Figura 14. Propiedades de gráfico desplegado



5. VALIDACIÓN DEL PROGRAMA DE COMPUTO

Para validar el programa de cómputo para la predicción de depositaciones inorgánicas “**ScaleMixing**” se utilizaron datos de entrada y resultados de artículos técnicos de la Society of Petroleum Engineers (SPE). Los artículos técnicos seleccionados fueron SPE18484¹³ y SPE 7794¹.

El artículo SPE 18484¹² trata sobre depositaciones de sulfatos (bario, calcio, estroncio), en mezclas de aguas. El artículo muestra una tabla de datos de análisis fisicoquímicos de agua de inyección y de formación en donde se han identificado depósitos de compuestos inorgánicos. Los resultados mostrados en el artículo fueron obtenidos con el modelo termodinámico de Yuan y Todd en el cual calculan las supersaturaciones o IS por la teoría de Pitzer y posteriormente los mg/L de masa precipitada. En la tabla 5 se muestran los datos de entrada para el análisis correspondiente.

Tabla 5. Composiciones de agua de formación y agua de inyección en el Mar del Norte

Iones(mg/L)	Mar del Norte	Agua de formación
Cl ⁻	19800	53000
SO ₄ ⁻²	2480	0
HCO ₃ ⁻	135	360
Mg ⁺²	1320	480
Ca ⁺²	403	3110
Na ⁺	11000	30200
Fe ⁺²	0	0
TDS	35138	86670
pH	7.48	6,5

Fuente. SPE18484¹³

En la tabla 6, se presentan los resultados del modelo de Yuan y Todd y en la tabla 7 se observan los resultados del **ScaleMixing** .



Tabla 6. Resultados obtenidos con el modelo de Yuan y Todd en el Mar del Norte

YUAN Y TODD			
T= 77 ⁰ F & P = 15 psi			
(%)	Barita(BaSO4)	Celestita(SrSO4)	Gipsita (Yeso)
	mg/L	mg/L	mg/L
0	39,13	0	0
5	373,91	0	0
10	360,86	0	0
15	345,82	0	0
20	326,08	78,26	0
25	304,69	195,65	0
30	282,6	282,6	0
35	265,21	326,08	0
40	243,47	347,82	0
45	221,73	345,82	0
50	200	334,78	0
55	182,6	317,39	0
60	160,86	295,65	0
65	139,13	258,17	0
70	119,56	221,73	0
75	100	173,9	0
80	80,21	130,43	0
85	61,23	78,26	0
90	40,75	43,47	0
95	21,25	21,73	0
100	0	0	0

Fuente. SPE 18484

Tabla 7. Resultados obtenidos con el ScaleMixing en el Mar del Norte

SCALEMIXING						
T= 77 ⁰ F & P = 15 psi						
Vol. iny (%)	Barita(BaSO4)		Celestita(SrSO4)		Gipsita (Yeso)	
	IS	mg/L	IS	mg/L	IS	mg/L
0	0	0	0	0	0	0
5	2,171067	294,19	-0,5144683	0	-1,355013	0
10	2,459549	379,31	-0,2301274	0	-1,066105	0
15	2,622248	360,18	-7,16E-02	0	-0,9026586	0
20	2,732812	339,46	3,47E-02	40,08	-0,7909671	0
25	2,814198	318,44	0,1118274	133,81	-0,7080002	0
30	2,8765	297,31	0,1697945	204,09	-0,6435694	0
35	2,924957	276,13	0,2138587	251,84	-0,5923143	0
40	2,962528	254,93	0,2469741	279,32	-0,5511181	0
45	2,990918	233,7	0,2708411	289,5	-0,518065	0
50	3,011036	212,47	0,286364	285,45	-0,4919587	0
55	3,023199	191,23	0,2938545	269,94	-0,4720821	0
60	3,02719	169,98	0,29309	245,33	-0,4580761	0
65	3,022202	148,73	0,2832568	213,5	-0,4498874	0
70	3,006634	127,48	0,2627476	175,94	-0,4477695	0
75	2,977636	106,23	0,2287064	133,78	-0,4523316	0
80	2,930086	84,97	0,1760023	87,92	-0,4646612	0
85	2,854012	63,71	9,47E-02	39,06	-0,4865645	0
90	2,726593	42,45	-3,82E-02	0	-0,5210542	0
95	2,474329	21,2	-0,2959512	0	-0,5734082	0



100 | 0 | 0 | 0 | 0 | -0,6538102 | 0

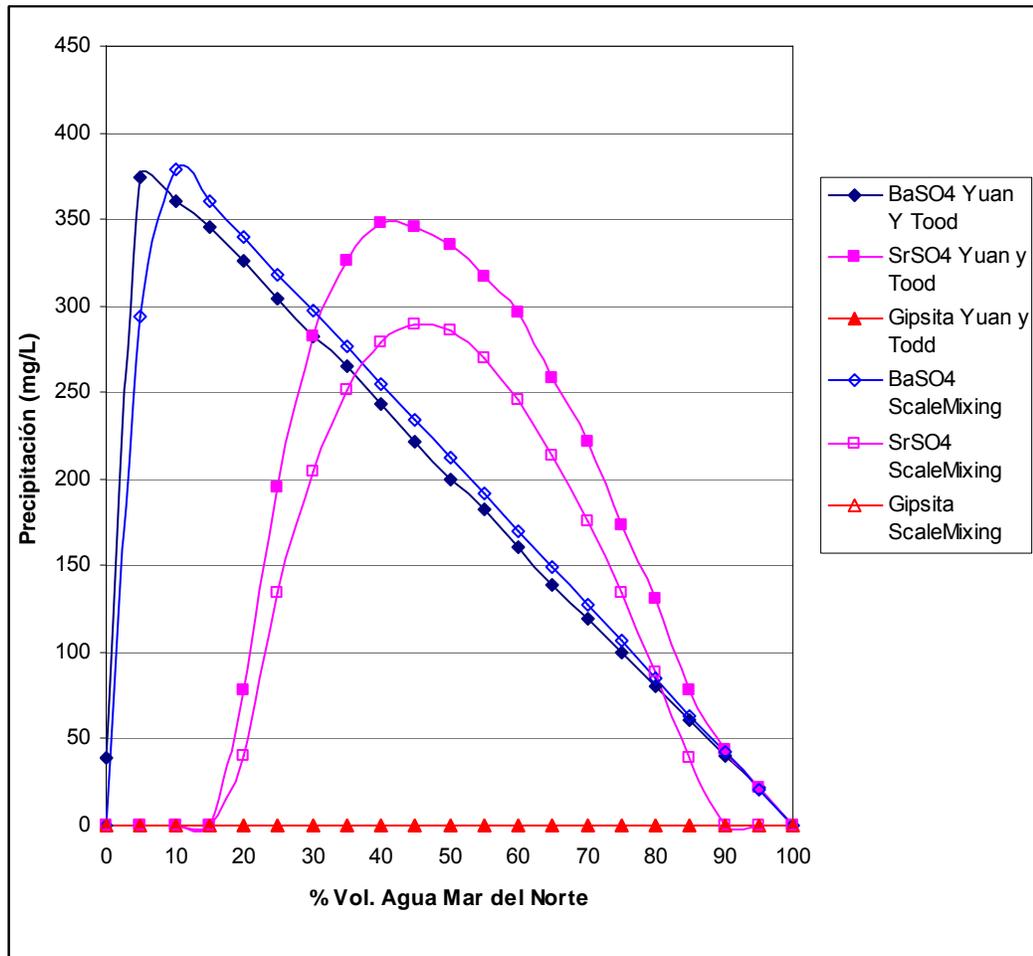


Gráfico 1. Resultados del modelo de Yuan y Todd, y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) en el Mar del Norte a T= 77 °F y P = 15 psi

En el gráfico 1 se muestran los resultados obtenidos con los dos programas a las condiciones anteriores la tendencia de las curvas de precipitación generadas por ambos modelos es similar dando como resultado la depositación temprana de la barita y la celestita cuando apenas una pequeña proporción de agua del Mar del Norte es inyectada, mientras la gipsita en ningún momento se precipita.



Tabla 8. Resultados obtenidos con el modelo de Yuan y Todd en el Mar del Norte

YUAN Y TODD			
T= 212 ° F & P = 15 psi			
(%)	Barita(BaSO4)	Celestita(SrSO4)	Gipsita (Yeso)
	mg/L	mg/L	mg/L
0	30,76	0	0
5	307,69	0	0
10	346,15	0	0
15	330,76	0	0
20	307,69	0	0
25	284,61	0	0
30	265,23	61,9	0
35	246,15	123,8	0
40	230,76	157,14	0
45	210,38	180,95	0
50	192,3	185,71	0
55	171,92	180,95	0
60	153,84	166,66	0
65	138,46	142,85	0
70	118,38	111,28	0
75	100	85,71	0
80	76,92	42,85	0
85	56,84	4,76	0
90	38,46	0	0
95	23,07	0	0
100	0	0	0

Fuente. SPE 18484

Tabla 9. Resultados obtenidos con el ScaleMixing en el Mar del Norte

SCALEMIXING										
T= 212 ° F & P = 15 psi										
(%iny)	Barita		Celestita		Gipsita		Calcita		Anhidrita	
	IS	mg/L	IS	mg/L	IS	mg/L	IS	mg/L	IS	mg/L
0	0	0	0	0	0	0	0,8625	118,4	0	0
5	1,50122	272,5	-0,43774	0	-1,26471	0	0,74004	114	-0,82728	0
10	1,79135	367,1	-0,15005	0	-0,97372	0	0,64668	109,3	-0,53786	0
15	1,95573	355	1,19E-02	12,09	-0,80816	0	0,57319	105,1	-0,37384	0
20	2,06802	336,3	0,12184	133,8	-0,69431	0	0,51076	100,6	-0,26153	0
25	2,15118	316,2	0,20268	230,5	-0,60913	0	0,45627	95,88	-0,17788	0
30	2,21532	295,6	0,26452	301	-0,54243	0	0,4069	90,77	-0,11269	0
35	2,26568	274,8	0,31263	346,6	-0,48883	0	0,36069	85,04	-6,06E-02	0
40	2,30523	253,8	0,34997	370	-0,44522	0	0,31861	79,23	-1,85E-02	0
45	2,33568	232,8	0,37826	375,1	-0,40966	0	0,27784	72,68	1,56E-02	45,14
50	2,35796	211,7	0,39843	365,5	-0,38094	0	0,23703	65,05	4,29E-02	130
55	2,3724	190,6	0,41079	344,5	-0,35833	0	-2,77061	0	6,40E-02	201,9
60	2,37879	169,4	0,41516	314,6	-0,34147	0	-2,80571	0	7,94E-02	258,3
65	2,37634	148,2	0,41075	277,9	-0,33026	0	-2,84447	0	8,92E-02	296,4
70	2,36347	127	0,39598	235,8	-0,32496	0	-2,88569	0	9,31E-02	312,7
75	2,33735	105,8	0,36801	189,5	-0,32615	0	-2,93192	0	9,05E-02	303,5
80	2,29288	84,63	0,32177	139,9	-0,33488	0	-2,98443	0	8,04E-02	265,2
85	2,22011	63,41	0,24729	87,59	-0,35294	0	-3,04351	0	6,09E-02	194,2
90	2,09625	42,19	0,12181	33,06	-0,38331	0	-3,1158	0	2,92E-02	87,75
95	1,84782	20,96	-0,12815	0	-0,43124	0	-3,20505	0	-2,01E-02	0



100 | 0 | 0 | 0 | 0 | -0,50688 | 0 | -3,31999 | 0 | -9,71E-02 | 0

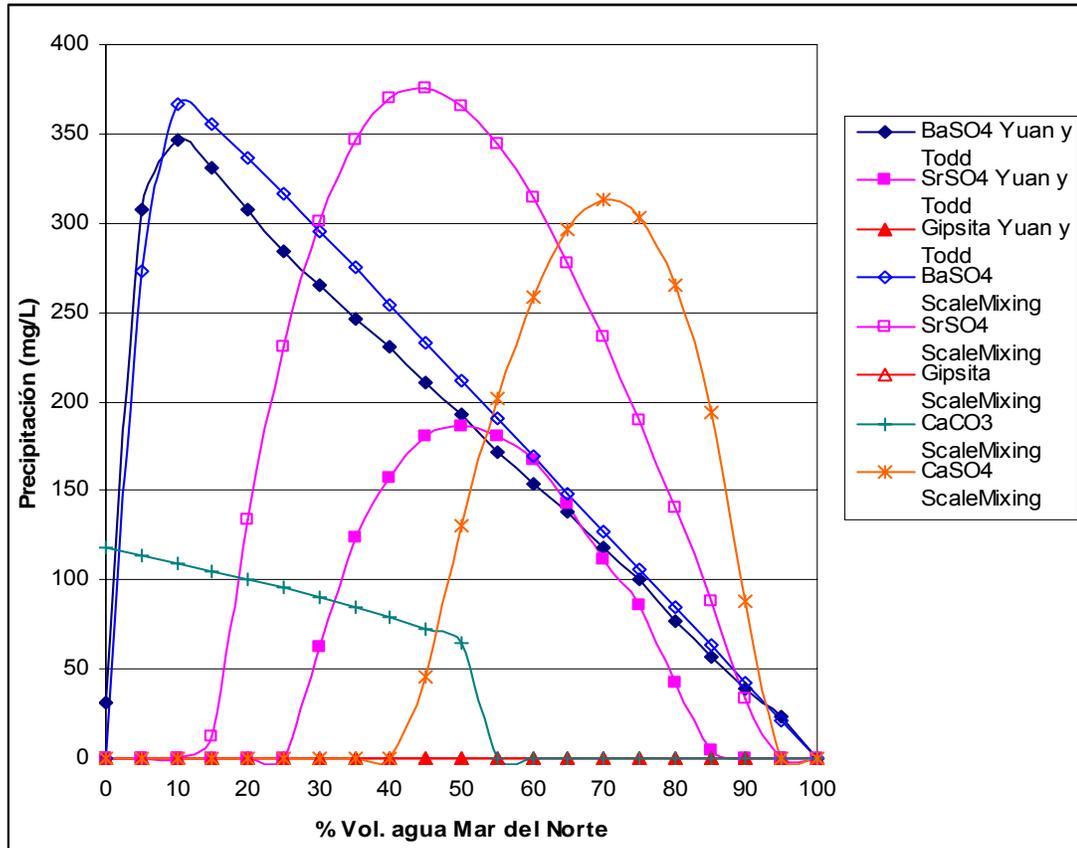


Gráfico 2. Resultados del modelo de Yuan y Todd, y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L) en el Mar del Norte a T= 212 °F y P = 15 psi

Las tablas 8 y 9 muestran los resultados obtenidos con los modelos de Yuan y Todd y ScaleMixing a la misma presión, pero a una temperatura mayor; en gráfico 2 se muestran los resultados de las tablas. Para el modelo de Yuan y Todd se precipitan las mismas sales que se han estado precipitando anteriormente, la barita y la celestita, mientras para el **ScaleMixing** adicional a la precipitación de la barita y la celestita, se suma la precipitación de la calcita y la anhidrita para estas condiciones de temperatura y presión.

La diferencia en las curvas de precipitación de la celestita en ambos modelos es considerable alcanzando un punto máximo de precipitación de 375 mg/L para el **ScaleMixing** mientras que con el modelo de Yuan y Todd el máximo punto que alcanza es de 185.71 mg/L. La barita y la gipsita presentan una tendencia casi igual en los dos modelos con valores de precipitación muy similares.



Tabla 10. Resultados obtenidos con el modelo de Yuan y Todd en el Mar del Norte

YUAN Y TODD			
T= 77 °F & P = 4500 psi			
(%)	Barita(BaSO4)	Celestita(SrSO4)	Gipsita (Yeso)
	mg/L	mg/L	mg/L
0	33,33	0	0
5	385,71	0	0
10	371,42	0	0
15	354,14	0	0
20	333,33	0	0
25	316,04	0	0
30	295,23	61,9	0
35	271,42	123,8	0
40	252,38	157,14	0
45	233,33	180,95	0
50	214,28	185,71	0
55	190,47	180,95	0
60	171,42	166,66	0
65	152,38	142,85	0
70	128,57	114,28	0
75	109,52	85,71	0
80	85,71	42,85	0
85	61,9	4,76	0
90	39,09	0	0
95	19,04	0	0
100	0	0	0

Fuente. SPE 18484¹³



Tabla 11. Resultados obtenidos con el ScaleMixing en el Mar del Norte

SCALEMIXING						
T= 77 °F & P = 4500 psi						
Vol. iny (%)	Barita(BaSO4)		Celestita(SrSO4)		Gipsita (Yeso)	
	IS	mg/l	IS	mg/L	IS	mg/L
0	0	0	0	0	0	0
5	1,371072	264,52	-0,6100146	0	-1,385585	0
10	1,660446	361,97	-0,3230827	0	-1,095334	0
15	1,824058	352,72	-0,1618761	0	-0,9305266	0
20	1,935562	334,87	-5,27E-02	0	-0,8174492	0
25	2,017919	315,19	2,73E-02	34,26	-0,7330652	0
30	2,08123	294,83	8,83E-02	111,33	-0,6671791	0
35	2,13074	274,16	0,1355652	167,54	-0,6144224	0
40	2,169417	253,31	0,1720341	204,39	-0,5716695	0
45	2,198975	232,35	0,1994272	224,12	-0,5369946	0
50	2,220331	211,32	0,2186657	229,24	-0,5091903	0
55	2,233815	190,24	0,2300799	222,22	-0,4875271	0
60	2,239222	169,12	0,2334677	205,27	-0,4716319	0
65	2,235757	147,98	0,2280385	180,25	-0,4614361	0
70	2,221836	126,82	0,2122105	148,68	-0,4571756	0
75	2,194625	105,64	0,1831561	111,79	-0,4594405	0
80	2,149021	84,46	0,1357755	70,54	-0,4692967	0
85	2,075073	63,26	6,01E-02	25,7	-0,4885271	0
90	1,949982	42,05	-6,66E-02	0	-0,5201192	0
95	1,700268	20,84	-0,3178282	0	-0,5693248	0
100	0	0	0	0	-0,6463012	0

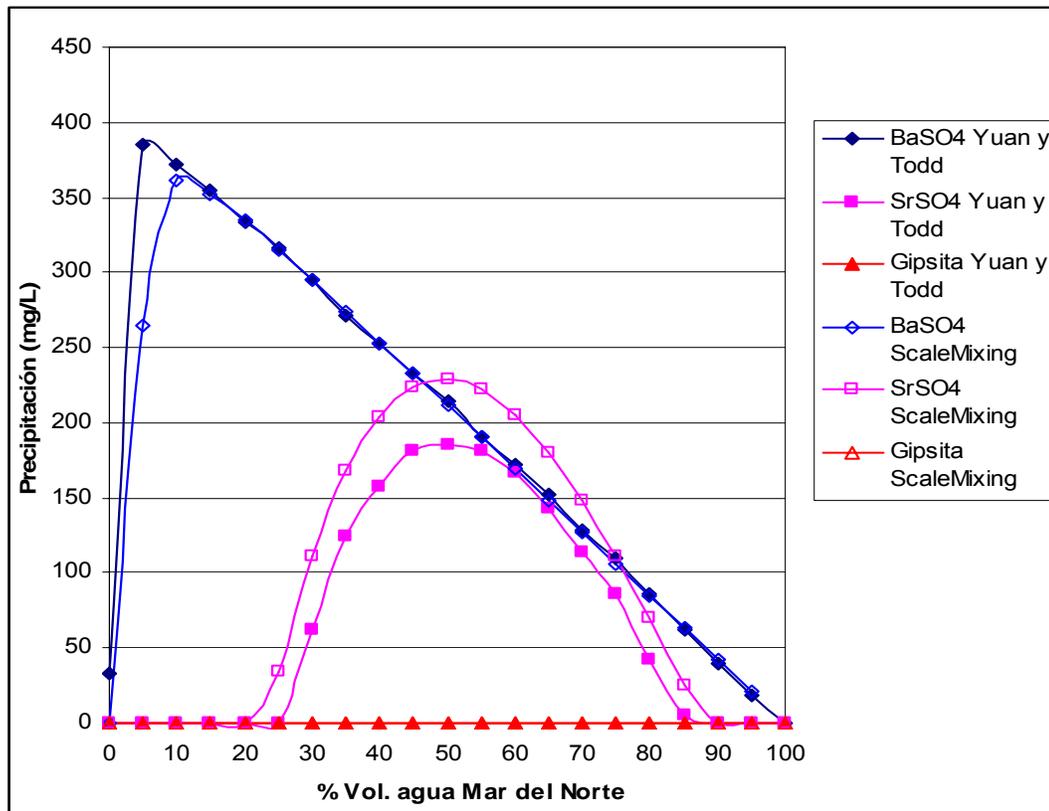


Gráfico 3. Resultados del modelo de Yuan y Todd, y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) en el Mar del Norte a T= 77 °F y P = 4500 psi

En las tablas 10, 11 y gráfico 3 se presentan los resultados de los dos modelos a la temperatura de 77⁰ F pero a una presión de 4500 psi. La tendencia de los resultados son muy similares; se depositan las mismas sales; y en el caso de la barita los resultados son semejantes. La gipsita al igual que a las otras condiciones en ningún momento precipita según ambos modelos.



Tabla 12. Resultados obtenidos con el modelo de Yuan y Todd en el Mar del Norte

YUAN Y TODD			
T= 212 °F & P = 4500 psi			
(%)	Barita(BaSO4)	Celestita(SrSO4)	Gipsita (Yeso)
	mg/L	mg/L	mg/L
0	22,22	0	0
5	311,11	0	0
10	344,44	0	0
15	327,77	111,11	0
20	311,11	261,11	0
25	290,88	366,66	0
30	272,22	422,22	0
35	255,4	450	0
40	238,33	450	0
45	223,21	436,33	0
50	200	411,11	0
55	182,35	383,33	0
60	162,55	338,88	0
65	144,7	300	0
70	123,52	255,55	0
75	105,88	211,11	0
80	82,35	166,66	0
85	55,55	111,11	0
90	36,33	66,66	0
95	16,66	11,11	0
100	0	0	0

Fuente. SPE 18484

Tabla 13. Resultados obtenidos con el ScaleMixing en el Mar del Norte

SCALEMIXING						
T= 212 °F & P = 4500 psi						
Vol. iny (%)	Barita(BaSO4)		Celestita(SrSO4)		Gipsita (Yeso)	
	IS	mg/l	IS	mg/L	IS	mg/L
0	0	0	0	0	0	0
5	1,371072	264,52	-0,6100146	0	-1,385585	0
10	1,660446	361,97	-0,3230827	0	-1,095334	0
15	1,824058	352,72	-0,1618761	0	-0,9305266	0
20	1,935562	334,87	-5,27E-02	0	-0,8174492	0
25	2,017919	315,19	2,73E-02	34,26	-0,7330652	0
30	2,08123	294,83	8,83E-02	111,33	-0,6671791	0
35	2,13074	274,16	0,1355652	167,54	-0,6144224	0
40	2,169417	253,31	0,1720341	204,39	-0,5716695	0
45	2,198975	232,35	0,1994272	224,12	-0,5369946	0
50	2,220331	211,32	0,2186657	229,24	-0,5091903	0
55	2,233815	190,24	0,2300799	222,22	-0,4875271	0
60	2,239222	169,12	0,2334677	205,27	-0,4716319	0
65	2,235757	147,98	0,2280385	180,25	-0,4614361	0
70	2,221836	126,82	0,2122105	148,68	-0,4571756	0
75	2,194625	105,64	0,1831561	111,79	-0,4594405	0
80	2,149021	84,46	0,1357755	70,54	-0,4692967	0
85	2,075073	63,26	6,01E-02	25,7	-0,4885271	0
90	1,949982	42,05	-6,66E-02	0	-0,5201192	0
95	1,700268	20,84	-0,3178282	0	-0,5693248	0
100	0	0	0	0	-0,6463012	0

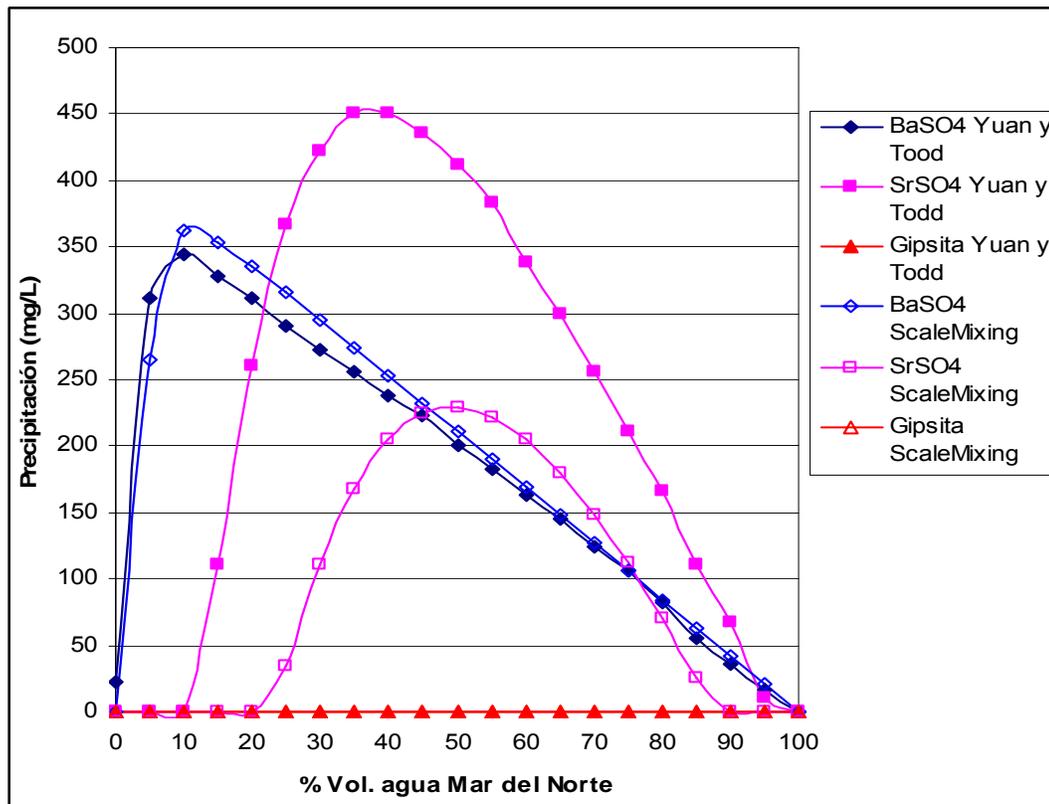


Gráfico 4. Resultados del modelo de Yuan y Todd, y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) en el Mar del Norte a T= 212°F y P = 4500 psi

Las tablas 12, 13 y el gráfico 4 muestran los resultados obtenidos por los dos modelos a la temperatura de 212^o F y presión de 4500 psi, según el modelo de Yuan y Todd, la celestita alcanza un máximo de precipitación de 450 mg/L distando considerablemente del punto de máxima precipitación obtenido del **ScaleMixing** que es 229.24 mg/L. La barita tiene un comportamiento muy similar en ambos modelos y la gipsita en ningún momento se precipita.

Según los resultados obtenidos del artículo, en este campo se ha presentado depósitos de barita y celestita, asociados a la inyección del agua del mar del Norte. Esto se puede corroborar con los resultados del programa de cómputo **ScaleMixing**, donde se encontró que si hay precipitación de barita y celestita en el campo analizado. Para cada una de las condiciones de presión y temperatura la tendencia en los dos programas es la misma mostrando la precipitación de la barita y la celestita y la no depositación de la gipsita, a excepción de la condición de temperatura de 212^o F y presión de 15 psi, en donde el ScaleMixing predice la depositación de la calcita y la anhidrita, además de las anteriores.



El artículo técnico **SPE 7794**¹ trata sobre la predicción de depósitos inorgánicos, tales como celestita, barita y anhidrita, en operaciones de campo. En la tabla 14 se muestran los datos de análisis fisicoquímicos de agua de formación de dos yacimientos y dos aguas de inyección de dos fuentes en donde se han identificado depósitos de compuestos inorgánicos. Los resultados mostrados en el artículo fueron obtenidos con el modelo termodinámico de Vetter , Kandarpa y Haoruaka. Los cuatro tipos de aguas fueron mezcladas para analizar qué tipo de agua es la mejor para inyectar en cada yacimiento.

Tabla 14. Composición química de las aguas usadas para el modelamiento.

Iones(mg/L)	Yacimiento1	Yacimiento 2	Fuente 1	Fuente 2
Cl ⁻	192190	159276	113483	1490
K	524	524	0.5	0.5
Sr	1106	1106	0.5	0.5
HCO ₃ ⁻	363	363	726	145.2
Ba	495	495	0.7	0.7
Mg ⁺²	511	2166	464	188
SO ₄	1.5	1.5	2348	915
Ca ⁺²	1106	1106	1805	289
Na ⁺	98512	98512	72076	72
Fe ⁺²	485	485	0.5	0.5
TDS				
Ph	6.5	6.5	6,5	6.8

Presión	200 atm.
Temp.	100 °C

Fuente SPE 7794¹



Tabla 15. Resultados generados con el ScaleMixing (agua yacimiento1- Fuente 1)

ScaleMixing						
(%)Vol.	Barita		Celestita		Anhidrita	
	IS	mg/L	IS	mg/L	IS	mg/L
0	0,5168204	25,05	-1,235803	0	-1,032059	0
5	1,434907	301,42	-0,3283068	0	-0,1189873	0
10	1,684165	557,13	-8,95E-02	0	0,1254731	88,1
15	1,823955	673,24	3,99E-02	46,08	0,2607094	232,8
20	1,915636	657,53	0,1212852	159,31	0,3481138	375,05
25	1,97959	623,09	0,1750512	251,16	0,4081099	514,4
30	2,025038	584,76	0,2103937	319,59	0,4499729	650,32
35	2,056846	545,04	0,2321664	363,81	0,4786371	782,12
40	2,077792	504,68	0,2431318	384,44	0,49697	908,89
45	2,08949	463,97	0,2448834	383,4	0,5067064	1029,46
50	2,09281	423,05	0,2382636	363,37	0,5088812	1142,24
55	2,088069	381,99	0,2235488	327,36	0,5040424	1245,05
60	2,075092	340,83	0,2005021	278,21	0,4923471	1334,83
65	2,053163	299,62	0,1683169	218,45	0,4735844	1407,1
70	2,020869	258,35	0,1254254	150,17	0,4471325	1455,14
75	1,975723	217,04	0,0690702	75,08	0,4118328	1468,44
80	1,913353	175,71	-5,65E-03	0	0,3657263	1429,8
85	1,82556	134,36	-0,1081252	0	0,3055083	1309,74
90	1,694701	92,99	-0,2593793	0	0,2253182	1055,68
95	1,471009	51,6	-0,523981	0	0,1136291	572,95
100	0,8447201	10,2	-1,585908	0	-5,70E-02	0

Tabla 16. Resultados generados con el modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka , (agua yacimiento1- fuente1)

Modelo Vetter, Kandarpa y Harouaka			
	Barita	Celestita	Anhidrita
(%)Vol.	mg/L	mg/L	mg/L
0	0	0	0
10	516,66	0	33,33
20	666,66	0	166,66
30	600	0	500
40	516,66	0	883,33
50	433,33	0	1216,66
60	350,2	0	1500
70	266,14	0	1783,33
80	200,31	0	1916,66
90	102,3	0	1916,33
100	0	0	1550

Fuente SPE 7794

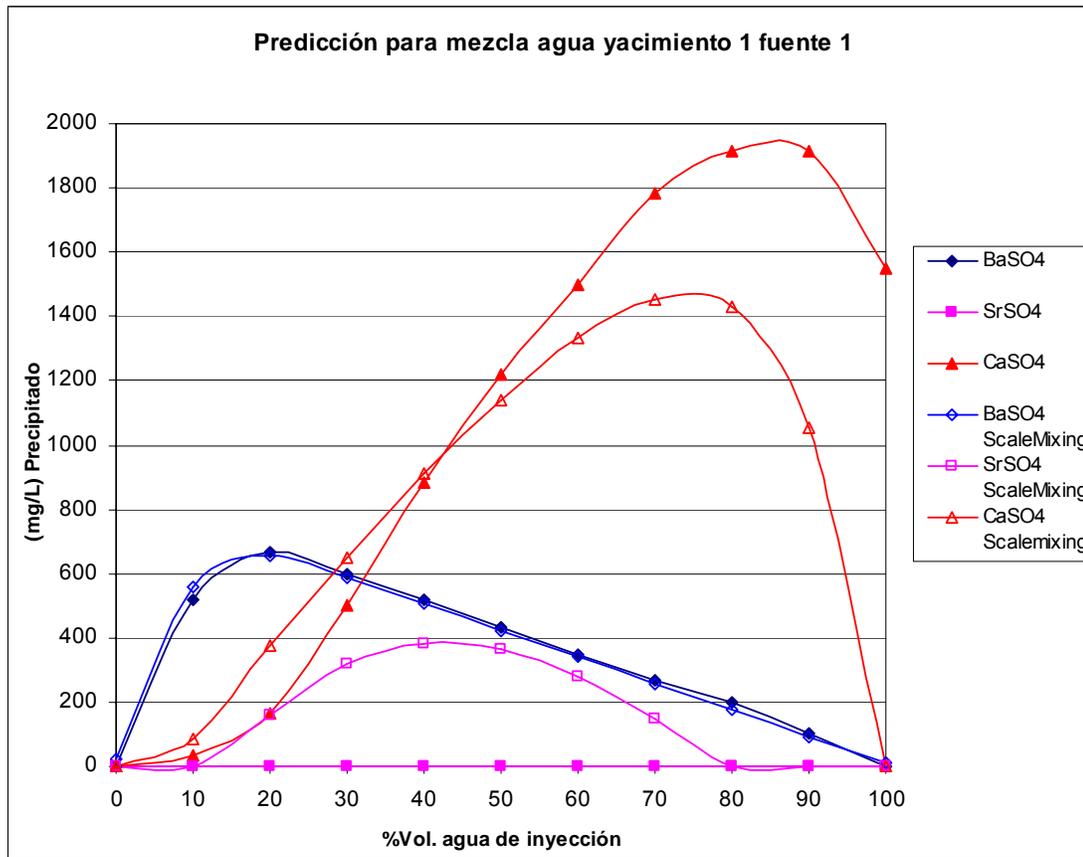


Gráfico 5. Resultados del modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka A, y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) a $T = 212^{\circ}\text{F}$ y $P = 3000 \text{ psi}$

En las tablas 15, 16 y el gráfico 5, se muestran los resultados obtenidos con el Scalemixing y el modelo de Vetter, Kandarpa y Harouaka al mezclar el agua del yacimiento 1 con la fuente 1, van a precipitarse la barita, la anhidrita y la celestita con el **ScaleMixing**, mientras que con el modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka A, la celestita en ningún momento se precipita. El comportamiento de las graficas de precipitación de la barita y la anhidrita con ambos modelos siguen una tendencia muy uniforme aclarando que en el caso de la anhidrita para el modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka A, genera valores mas altos de precipitación que los generados por el ScaleMixing.



Tabla 17. Resultados generados con el ScaleMixing (agua yacimiento1- Fuente 2)

ScaleMixing						
	Barita		Anhidrita		Celestita	
(%)Vol.	IS	mg/L	IS	mg/L	IS	mg/L
0	0,5168204	25,05	-1,032059	0	-1,235803	0
5	1,096348	131,97	-0,4710953	0	-0,6807576	0
10	1,317009	237,53	-0,2689122	0	-0,4839105	0
15	1,449807	340,29	-0,1545241	0	-0,3742644	0
20	1,542046	436,05	-8,06E-02	0	-0,3045203	0
25	1,611059	510,69	-3,00E-02	0	-0,2573531	0
30	1,665224	536,5	5,85E-03	0	-0,2243937	0
35	1,709288	520,97	3,15E-02	32,51	-0,2009047	0
40	1,746248	490,35	5,00E-02	57,3	-0,1839002	0
45	1,778161	454,55	6,33E-02	79,87	-0,1713402	0
50	1,806533	416,54	7,28E-02	100,43	-0,1617388	0
55	1,832534	377,42	7,97E-02	119,24	-0,1539567	0
60	1,857115	337,67	8,47E-02	136,63	-0,1470867	0
65	1,881079	297,53	8,85E-02	152,93	-0,1403963	0
70	1,905116	257,12	9,15E-02	168,39	-0,1333133	0
75	1,929815	216,53	9,40E-02	182,99	-0,1254681	0
80	1,955625	175,78	9,59E-02	196,08	-0,1168499	0
85	1,982751	134,93	9,67E-02	205,48	-0,108289	0
90	2,010751	93,97	9,46E-02	205,14	-0,1032617	0
95	2,036294	52,92	8,34E-02	175,56	-0,1188653	0
100	1,989837	11,79	-1,57E-02	0	-0,5896877	0

Tabla 18. Resultados generados modelo Vetter, Kandarpa y Haoruaka, (agua yacimiento1- Fuente 2)

Modelo Vetter, Kandarpa y Harouaka			
	Barita	Celestita	Anhidrita
(%)Vol.	mg/L	mg/L	mg/L
0	0	0	0
10	200	0	0
20	388,46	0	0
30	538,46	0	0
40	480,76	11,53	0
50	407,69	73,07	0
60	326,92	153,84	0
70	238,46	161,53	0
80	157,69	103,84	0
90	76,92	50	11,53
100	0	0	134,61

Fuente SPE 7794

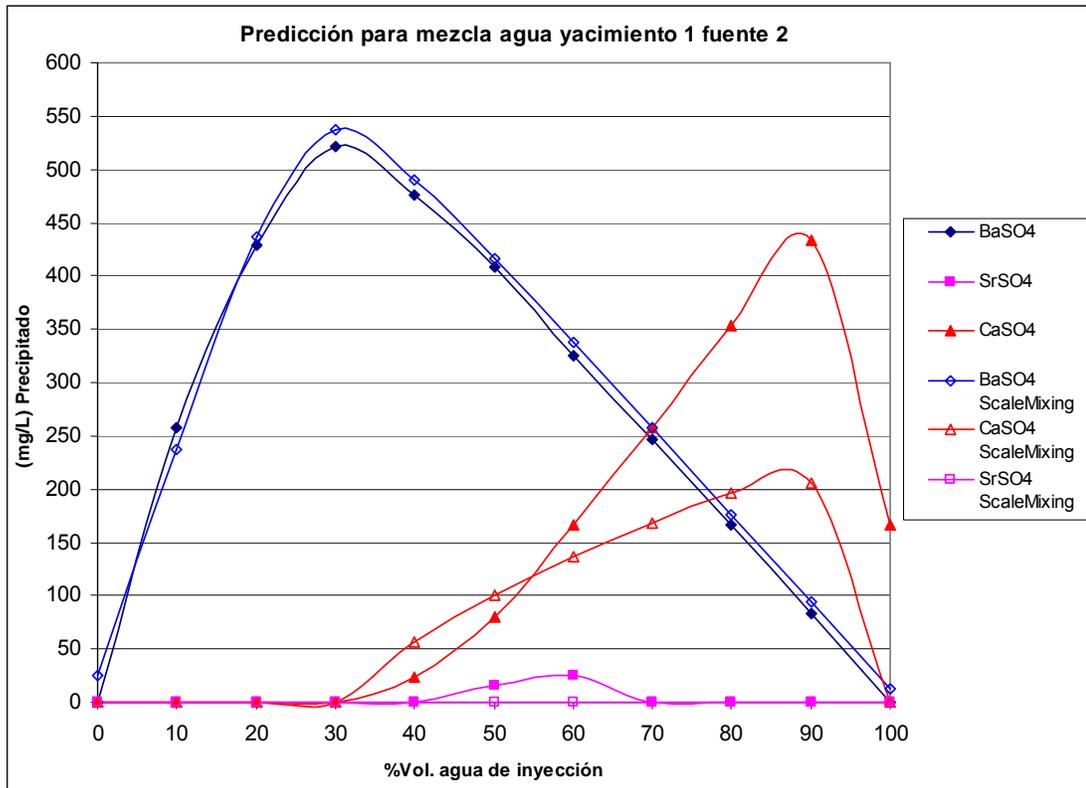


Gráfico 6. Resultados del modelo de Vetter, Kandarpa y Haoruaka A., y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L) a T= 212⁰F y P = 3000 psi

Para la mezcla (agua de yacimiento 1 con la fuente 2) se muestran los resultados en las tablas 17, 18 y gráfico 6, los comportamientos de las curvas son similares y los valores son muy cercanos para la barita.



Tabla 19. Resultados generados con el ScaleMixing (agua yacimiento2- Fuente 1)

ScaleMixing						
	Barita		Anhidrita		Celestita	
(%)Vol.	IS	mg/L	IS	mg/L	IS	mg/L
0	0,5176387	25,07	-2,118929	0	-2,024986	0
5	1,439783	301,62	-1,183807	0	-1,089574	0
10	1,693148	557,91	-0,916316	0	-0,8217907	0
15	1,837084	674,34	-0,7569789	0	-0,6621576	0
20	1,932933	658,24	-0,6442962	0	-0,5491756	0
25	2,001064	623,64	-0,5577176	0	-0,4622945	0
30	2,050682	585,24	-0,4878161	0	-0,3920871	0
35	2,086636	545,48	-0,4294737	0	-0,3334351	0
40	2,111685	505,09	-0,3795985	0	-0,2832468	0
45	2,127424	464,36	-0,3361777	0	-0,2395093	0
50	2,134701	423,42	-0,2978275	0	-0,2008383	0
55	2,133811	382,35	-0,2635542	0	-0,1662405	0
60	2,124551	341,18	-0,23262	0	-0,1349776	0
65	2,106181	299,95	-0,2044618	0	-0,1064866	0
70	2,077255	258,67	-0,1786391	0	-8,03E-02	0
75	2,035254	217,36	-0,1548011	0	-5,61E-02	0
80	1,975771	176,01	-0,1326629	0	-3,37E-02	0
85	1,890565	134,65	-0,1119901	0	-1,26E-02	0
90	1,76195	93,27	-9,26E-02	0	7,12E-02	33,11
95	1,540112	51,87	-7,43E-02	0	2,58E-02	122,42
100	0,91523	10,46	-5,70E-02	0	4,35E-02	210,47

Tabla 20. Resultados generados Modelo Vetter , Kandarpa y Haoruaka (agua yacimiento2- Fuente 1)

Modelo Vetter , Kandarpa y Haoruaka			
	Barita	Celestita	Anhidrita
(%)Vol.	mg/L	mg/L	mg/L
0	0	0	0
10	502,23	0	0
20	633,33	41,66	0
30	572,64	416,66	0
40	498,256	583,33	0
50	408,33	650,23	0
60	316,66	583,33	0
70	233,33	416,66	16,66
80	166,66	225,39	116,64
90	83,33	24,95	291,623
100	0	0	525,12

Fuente SPE 7798

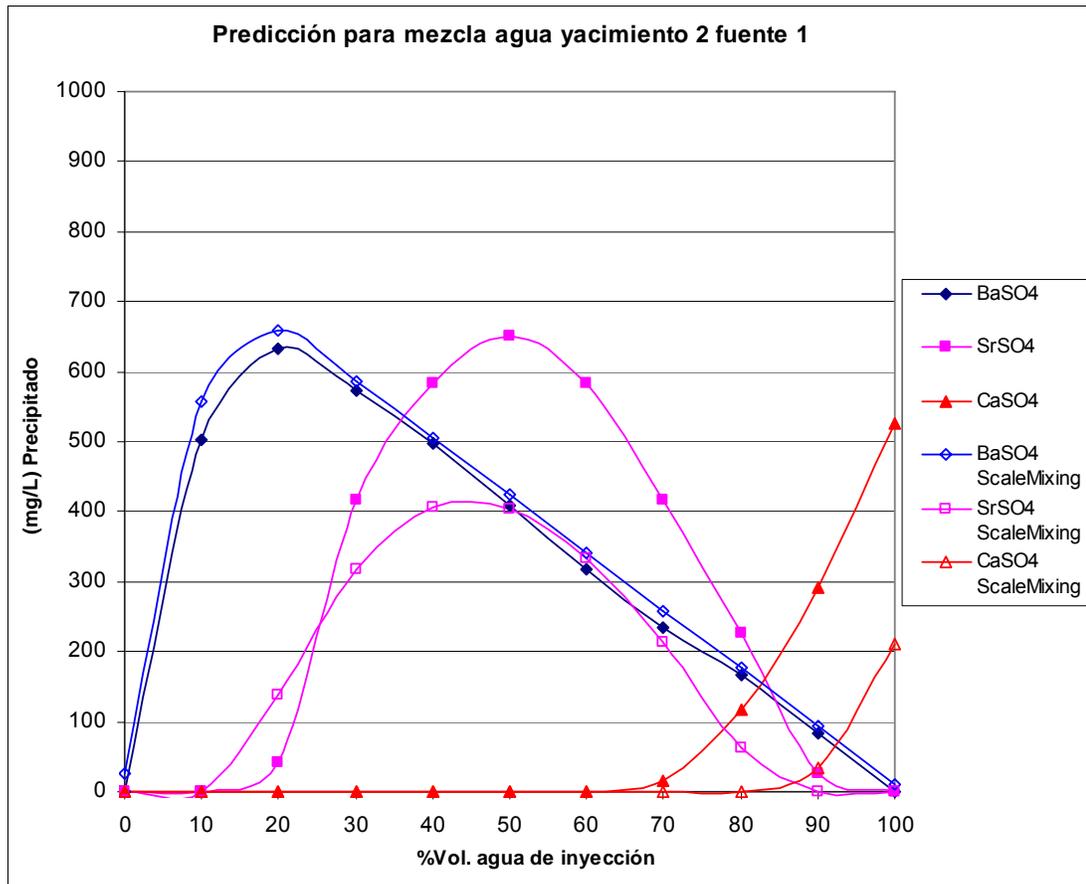


Gráfico 7. Resultados del Modelo Vetter , Kandarpa y Haoruaka A, y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) a T= 212 °F y P = 3000 psi

Las tablas 19, 20 y el gráfico 7 muestran los comportamientos para la mezcla (agua yacimiento 2, fuente 1) y en las tablas 21, 22 y el gráfico 2 se muestran los resultados de la mezcla (agua de yacimiento 2, fuente 2) con los dos modelos.



Tabla 21. Resultados generados con el ScaleMixing (agua yacimiento2- Fuente2)

ScaleMixing						
(%).Vol.	Barita		Anhidrita		Celestita	
	IS	mg/L	IS	mg/L	IS	mg/L
0	0,4536183	23,29	-2,118929	0	-1,380484	0
5	1,375473	298,77	-1,183807	0	-0,4643885	0
10	1,628546	552,03	-0,916316	0	-0,2170469	0
15	1,772185	668,65	-0,7569789	0	-7,91E-02	0
20	1,867735	655,44	-0,6442962	0	1,07E-02	15,14
25	1,935563	621,87	-0,5577176	0	7,29E-02	111,08
30	1,984875	583,95	-0,4878161	0	0,1165206	186,6
35	2,02052	544,47	-0,4294737	0	0,1464754	240,71
40	2,045256	504,26	-0,3795985	0	0,165497	273,43
45	2,060678	463,65	-0,3361777	0	0,1751597	285,75
50	2,067635	422,81	-0,2978275	0	0,1762844	279,45
55	2,06642	381,8	-0,2635542	0	0,1691247	256,79
60	2,056831	340,7	-0,23262	0	0,1534186	220,11
65	2,038128	299,51	-0,2044618	0	0,1283321	171,67
70	2,008865	258,27	-0,1786391	0	9,23E-02	113,46
75	1,966522	216,99	-0,1548011	0	4,24E-02	47,19
80	1,906693	175,68	-0,1326629	0	-2,61E-02	0
85	1,821137	134,34	-0,1119901	0	-0,1227787	0
90	1,692167	92,97	-9,26E-02	0	-0,2686566	0
95	1,469968	51,6	-7,43E-02	0	-0,5283558	0
100	0,8447201	10,2	-5,70E-02	0	-1,585908	0

Tabla 22. Resultados generados Modelo Vetter , Kandarpa y Haoruaka (agua yacimiento2- Fuente 2)

Modelo Vetter, Kandarpa y Harouaka			
	Barita	Celestita	Anhidrita
(%)Vol.	mg/L	mg/L	mg/L
0	0	0	0
10	200	0	0
20	388,46	0	0
30	538,46	0	0
40	480,76	11,53	0
50	407,69	73,07	0
60	326,92	153,84	0
70	238,46	161,53	0
80	157,69	103,84	0
90	76,92	50	11,53
100	0	0	134,61

Fuente SPE 7794

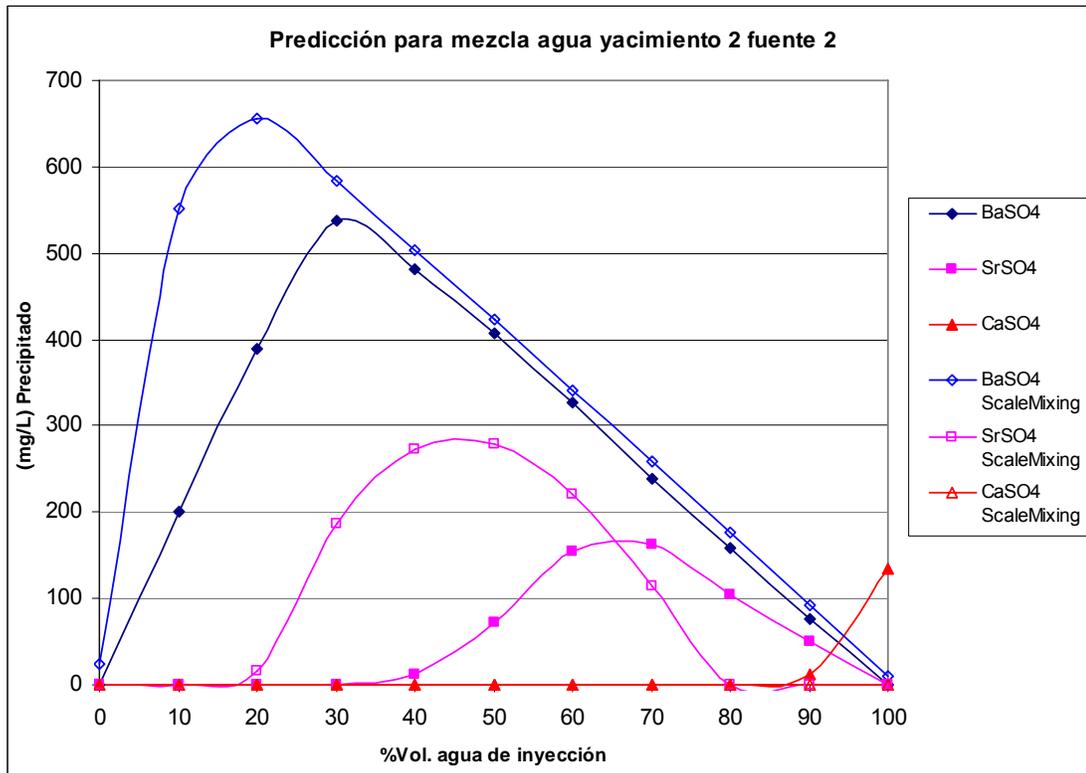


Gráfico 8. Resultados del Modelo Vetter , Kandarpa y Haoruaka A, y Scalemixing (%V agua de inyección versus masa precipitada (mg/L)) a T= 212 °F y P = 3000 psi

En el gráfico 8 se muestran los resultados obtenidos con los dos modelos, se puede concluir que la tendencia es similar con respecto al momento en que se empiezan a precipitar los compuestos y su comportamiento durante el aumento con respecto a la relación de mezcla entre los dos tipos de aguas, en cuanto a la cantidad de precipitado es claro que hay diferencias en unos casos significativa y otro caso a tener en cuenta es en casos donde según un modelo hay precipitación y en el otro no específicamente en el caso de la celestita para las dos primeras condiciones.

La predicción de los dos modelos da como resultado la precipitación de inorgánicos para cada una de las condiciones de mezcla entre estas aguas especialmente precipitándose la barita y la anhidrita y en algunos caso la celestita pero en menor proporción. Los resultados de estos modelos son importantes para la toma de desiciones y tomar medidas al respecto para evitar la formación de incrustaciones.



6. CONCLUSIONES

- Se realizó el estado del arte del modelamiento termodinámico de las depositaciones inorgánicas involucrando mezclas de aguas encontrando varios tipos de modelos empíricos, y diferentes tipos de programas desarrollados.
- Se desarrolló la herramienta de computo **ScaleMixing** que permite al usuario la opción de evaluar de forma rápida la compatibilidad entre el aguas de inyección y aguas de formación.
- El programa **ScaleMixing** ofrece la posibilidad de evaluar el comportamiento de la mezcla en diferentes proporciones, ilustrando gráficamente dicho comportamiento desde relaciones desde 0 a 100 % entre las dos aguas.
- Para la predicción de incrustaciones en sistemas de mezclas de aguas no fue necesario la implementación de un nuevo modelo termodinámico ya que se aplica para sistemas simples y mezclas, utilizando la estructura básica del OilScale en el **ScaleMixing**.
- El programa **ScaleMixing** ofrece la facilidad en el gráfico final que entrega éste, de ir modificando las presiones y temperaturas e ir observando inmediatamente los cambios en las gráficas sobre las nuevas condiciones.
- Se observó el efecto notable de la temperatura en la depositación de incrustaciones en los resultados de los modelos de Yuan y Todd y el **ScaleMixing**.
- Se comparó el programa de computo **ScaleMixing** con los programas desarrollados con base en el modelo termodinámico de Vetter, Kandarpa y Harouaca, y el modelo de Yuan y Todd, dando un resultado muy positivo por la similitud de los resultados que arrojan estos programas especialmente en la tendencia de las graficas de precipitación, dando como resultado una predicción similar para los casos que se evaluaron.



7. RECOMENDACIONES

- El programa **ScaleMixing** se puede complementar con los modelos químicos que predicen depositaciones inorgánicas, con el fin de tener una herramienta de cómputo completa donde se puedan trabajar los dos modelos, el químico y el termodinámico.
- Complementar los modelos teniendo en cuenta la interacción entre roca y fluidos.
- Complementar el programa para que calcule el efecto de cambio de temperatura del sistema causado por diferencias entre la temperatura del yacimiento y el agua de inyección, para entrar al programa datos más precisos de temperatura, y así obtener una mejor predicción.
- Implementar al programa la función de calcular la depositación de inorgánicos en las zonas más importantes de una sola corrida, es decir que calcule depositación en fondo de pozo inyector, en la cara de la formación, en un punto del yacimiento, en el pozo productor en facilidades de superficie, generando gráficos para cada punto de éstos.
- Implementar la predicción cuando se presente corrosión.
- Involucrar varios modelos termodinámicos en el programa **ScaleMixing** para mezclas de aguas, para ver cual se ajusta más a determinado campo.



BIBLIOGRAFIA

1. Vetter, O. J.; Kandarpa, V. and Haoruaka, A. "Prediction of Scale problems Due to Injection of Incompatible waters" SPE 7794.
2. Patton, Charles C. Applied water technology. Oklahoma: Campbell petroleum series, 1986.
3. Yeboah, Y.D.; Samuah, S.K. and Saeed, M,R. "Prediction of Carbonate and Sulfate Scale in Oilfields". SPE 25586.
4. He, S.L., Kan, A.T, Tomson, M.B and Oddo, J.E. "A new Interactive Software for Scale Prediction, Control, and Management". SPE 38801.
5. Mackay, E.J. and Sorbie, K. "Brane Mixing IN Waterflood Reservoirs Ind The Implications For Scale Prevention". SPE 60193.
6. Azaroual, M., Hurtevent, C., Kervévan, C., Brochot, S. and Durance, M.V. "Quantitative Prediction of Scale Deposition Induced by Nil Production: Application of the Thermo-Kinetic Software SCALE2000". SPE 68303.
7. Mackay, E.J. "Modeling in-situ Scale Deposition: The Impact of Reservoir and Well Geometries and Kinetic Reaction Rates". SPE 81830.
8. Mackay, E.J. "Modeling in-situ Scale Deposition: The Impact of Reservoir and Well Geometries and Kinetic Reaction Rates" SPE 74683.
9. Poyet ,J. P.,Ségéral, G., Toskey, E. "Real-Time Method for the Detection and Characterization of Scale". SPE 74659.
10. Mackay, E.J., Collins, I.R., Jordan, M.M. and Feasey, N.N. "Scale Formation Risk Assessment and Management". Paper SPE 80385
11. Moghadasi, J., Jamialahmadi, M., Mulldr-Steinhagen, H. and Sharif, A. "Scale Formation in Oil Reservoir and Production Equipment During Water Injection (Kinetics of CaSO_4 and CaCO_3 Crystal Growth and Effect on Formation Damage)". SPE 82233.



12. Paulo, J., Mackay, E.J., Menzies, N. and Poynton, N. "Implications of Brine Mixing in the Reservoir for Scale Management in the Alba Field ". SPE 68310

13. Yuan, M.D. and Todd A.C. "Prediction of Sulfate Scaling Tendency in Oilfield Operations". SPE 18484.

14. Oddo, J.E and Tomson, M.B. SPE "Production & facilites".1994

15. Termodinámica Molecular de los Equilibrios de Fases. 3ª Edición. Prausnitz, Lichtenthaler y Gomez de Azevedo. Editorial Prentice Hall