

EVALUACIÓN DE LA APLICABILIDAD DEL MÉTODO DE SEUDORRAÍCES AL CÁLCULO DE PRESIONES DE SATURACIÓN EN REGIONES CRÍTICAS DE FLUIDOS DE YACIMIENTO

W. CAÑAS*, R. SALAZAR*, S.P. ROMÁN**, N. SANTOS**

*Escuela de Ingeniería Química, **Escuela de Ingeniería de Petróleos
Universidad Industrial de Santander
Bucaramanga- Colombia
email: rsalazar@uis.edu.co A.A. 678.

RESUMEN

En este trabajo se evalúa la aplicabilidad real del método denominado de "seudorraíces" para originar valores "mejorados" para los factores de compresibilidad, obtenidos a partir de las ecuaciones de estado cúbicas (polinomios de tercer grado), durante el cálculo de presiones de saturación en la región crítica de mezclas de hidrocarburos multicomponentes y en la zona de transición crítica ó hiper crítica del gradiente composicional presente en ciertos yacimientos de petróleo. Se encontró que el método de seudorraíces incrementa ostensiblemente las probabilidades de convergencia y reduce, en forma apreciable, las posibilidades de convergencia a las indeseables soluciones triviales (fases en equilibrio de igual composición).

INTRODUCCIÓN

El cálculo de los equilibrios de fase es esencial en el modelamiento de los procesos químicos y la simulación composicional de yacimientos de petróleo. Tales aplicaciones han llevado a que los métodos para el cálculo de equilibrios de fase, especialmente a altas presiones, hayan merecido una atención especial. Esta circunstancia ha permitido el desarrollo de algoritmos mejorados, en particular para el cálculo de la separación instantánea isotérmica (flash) ¹⁻³ y de puntos críticos ^{4,5}. Sin embargo, los algoritmos para determinar puntos de saturación (burbuja y rocío), especialmente a presiones elevadas, aún necesitan de mucho desarrollo. Según Michelsen ⁶, la necesidad de tales algoritmos es particularmente apremiante en relación con la regresión de datos, en donde se ajustan los parámetros de los modelos a información experimental. En tales cálculos, la falla para converger a puntos difíciles da como resultado un modelo con una capacidad

predictiva inferior. El problema fundamental asociado con la determinación de puntos de saturación se debe a que el número de soluciones no se conoce por anticipado, y una solución que corresponde a un grupo de condiciones puede, quizás, no existir. Además, cerca de la presión máxima sobre una envolvente de fases (cricondenbar), el éxito de los cálculos depende fuertemente de la calidad de los estimativos iniciales para las variables de iteración. En la vecindad del punto crítico de la mezcla (región crítica) se hace incierto si se debe buscar una fase incipiente más ligera ó más pesada. Debido a estos problemas, muchos de los intentos realizados para calcular puntos de saturación llevan a la obtención de la indeseable solución trivial (es decir, fases en equilibrio de igual composición) ⁷.

La mayoría de los cálculos de equilibrio termodinámico llevados a cabo en Ingeniería Química y de Petróleos, se realizan con ecuaciones de estado cúbicas ^{8,9} (EDEC). La

razón principal para esta preferencia es que la solución de tales ecuaciones se reduce a encontrar las raíces de un polinomio cúbico en volumen (o factor de compresibilidad), lo cual puede realizarse en forma analítica¹⁰. Estas ecuaciones, ajustadas con información experimental, pueden predecir el comportamiento termodinámico de sustancias puras y mezclas en un amplio rango de temperatura, presión y composición.

Uno de los principales inconvenientes de las ecuaciones de estado cúbicas es el que se conoce como manejo de la especificación de fase¹¹⁻¹³. Al resolver una ecuación de estado cúbica en términos del factor de compresibilidad es factible encontrar tres raíces reales, de éstas la mayor se toma como perteneciente a la fase de vapor y la menor a la fase líquida. Sin embargo, también es posible que se halle sólo una raíz real y dos de naturaleza compleja. En este último caso es posible que la raíz hallada no sea adecuada para la fase de interés, lo cual puede llevar a fluctuaciones numéricas de los algoritmos y, en últimas, a la convergencia a soluciones triviales ó a la divergencia de los mismos. Para superar esta situación se han diseñado procedimientos, normalmente heurísticos, que permiten analizar si la raíz encontrada al resolver la ecuación de estado es adecuada para la fase de interés. Si no lo es, se han planteado, entonces, métodos que intentan generar las denominadas *seudorraíces* (también conocidas como "raíces falsas"), con el fin de buscar mantener la continuidad de los cálculos numéricos hacia la solución del problema de equilibrio y de reducir la posibilidad de convergencia a soluciones triviales¹¹⁻¹³. El método de las seudorraíces ha sido desarrollado por varios autores. En este trabajo se utilizó el método del dominio complejo de Zhao y Saha.¹¹³

PRESENTACIÓN DEL MÉTODO DEL "DOMINIO COMPLEJO" DE ZHAO Y SAHA

Una ecuación de estado cúbica (EDEC) puede ser representada en forma general como:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + ubV + wb^2} \quad (1)$$

Donde, u y w toman valores que dependen de la EDEC elegida, en el caso de la ecuación de Peng-Robinson, $u = 2$ y $w = -1$.

La ecuación (1) se puede escribir en forma polinomial en términos del factor de compresibilidad:

$$z^3 + a_1 z^2 + a_2 z + a_3 = 0 \quad (2)$$

Con:

$$z = \frac{PV}{RT} \quad (3)$$

$$a_1 = uB - B - 1 \quad (4)$$

$$a_2 = wB^2 - uB^2 - uB + A \quad (5)$$

$$a_3 = -(wB^3 + wB^2 + AB) \quad (6)$$

$$B = bP/RT, A = aP/R^2T^2 \quad (7)$$

Donde: R es la constante universal de los gases, T es temperatura absoluta, P presión y V volumen del sistema. a y b son los parámetros de atracción y repulsión de la ecuación de estado, respectivamente.

Por ser un polinomio cúbico, en la ecuación (2) hay tres raíces. Cuando de las tres raíces obtenidas solo una de ellas es real, que es el caso de interés aquí, las otras dos son complejas y conjugadas. Las tres raíces se pueden expresar de la siguiente manera:

$$z_1 = S + U - \frac{1}{3}a_1 \text{ (real)} \quad (8)$$

$$z_2 = -\frac{1}{2}(S+U) - \frac{1}{3}a_1 + \frac{1}{2}i\sqrt{3}(S-U) \text{ (compleja)} \quad (9)$$

$$z_3 = -\frac{1}{2}(S+U) - \frac{1}{3}a_1 - \frac{1}{2}i\sqrt{3}(S-U) \text{ (compleja conjugada)} \quad (10)$$

Donde,

$$S = \sqrt[3]{M + \sqrt{Q^3 + M^2}}, \quad U = \sqrt[3]{M - \sqrt{Q^3 + M^2}} \quad (11)$$

y

$$Q = \frac{3a_2 - a_1^2}{9}, M = \frac{9a_1a_2 - 27a_3 - 2a_1^3}{54} \quad (12)$$

Una vez encontradas las raíces es necesario evaluar el tipo de raíz real arrojada por la EDEC. Zhao y Saha¹³ diseñaron un procedimiento para chequear si el valor numérico de la raíz real (z_1) expresada por la ecuación (8) es del tipo líquido ó vapor. Este consiste en igualar z_1 con la parte real de las raíces complejas conjugadas. La parte real (pr) de tales raíces es:

$$z_{pr} = -\frac{1}{2}(S + U) - \frac{1}{3}a_1 \quad (13)$$

Al hacer lo anterior se obtiene:

$$S + U = 0 \quad (14)$$

incorporando la ecuación (11) en (14) se llega a,

$$M = \frac{9a_1a_2 - 27a_3 - 2a_1^3}{54} \quad (15)$$

Introduciendo las ecuaciones (4)- (7) en la ecuación (15) se puede llegar fácilmente a un polinomio cúbico en términos de presión, P .

$$q_0P^3 + q_1P^2 + q_2P + q_3 = 0 \quad (16)$$

Donde:

$$q_0 = (9uw + 18w - 2u^3 - 3u^2 + 3u + 2) \left(\frac{b}{RT} \right)^3 \quad (17)$$

$$q_1 = (18w - 3u^2 + 6u + 6) \left(\frac{b}{RT} \right)^2 + (9u + 18) \frac{ab}{(RT)^3} \quad (18)$$

$$q_2 = (3u + 6) \left(\frac{b}{RT} \right) - 9 \frac{a}{(RT)^2} \quad (19)$$

$$q_3 = 2 \quad (20)$$

La solución de este polinomio se efectúa en forma semejante a la ecuación (2). Al igual que

en dicho caso hay dos posibilidades: hallar tres raíces reales ó una raíz real y dos complejas conjugadas.

Si se especifica que la raíz más grande es P_{alta} , la intermedia es P_{int} y la más pequeña es P_{baja} .

En el caso de tres raíces reales se tiene que:

- Si $P \geq P_{int}$, z_1 es una raíz tipo líquido.
- Si $P < P_{int}$ y $z_1 > z_{pr}$, z_1 es una raíz tipo vapor.
- Si $P < P_{int}$ y $z_1 \leq z_{pr}$, z_1 es una raíz tipo líquido.

El caso de sólo una raíz real se presenta normalmente cuando la temperatura reducida del componente puro modelado ó de la mezcla de interés, es superior a 1 ($T_r \geq 1.0$). En este caso z_1 será tomado como tipo líquido en el intervalo ($1.0 \leq T_r \leq 1.25$) si $P \geq P_{int}$. En caso contrario sería tomado como tipo vapor.

Cuando se utiliza el procedimiento anterior para chequear el tipo de fase a la que corresponde la raíz real, z_1 , y se encuentra que tal raíz corresponde a una fase contraria a la de interés, es necesario, entonces, contar con un procedimiento para generar las denominadas *seudorraíces*.

Para generar pseudorraíces tipo vapor a temperaturas se aprovecha la siguiente circunstancia: si la temperatura del sistema (T) es inferior a la temperatura crítica mecánica de la mezcla (T'_{cm}), es posible obtener de la EDEC solo una raíz real tipo líquido. En este caso Mathias y otros¹² proponen utilizar la siguiente ecuación para originar una pseudorraíz para la densidad del vapor:

$$\rho = \rho_0 + \frac{\rho_1}{P} + \frac{\rho_2}{P^2} \quad (21)$$

Donde, ρ_0, ρ_1, ρ_2 , son parámetros que se obtienen a partir de ciertas condiciones de frontera. Zhao y Saha¹³ diseñaron condiciones

de frontera que permiten determinar los parámetros anteriores en forma analítica.

La figura 1 muestra el comportamiento de la ecuación (21) para el caso de una mezcla equimolar (50 /50) de etano y heptano a una temperatura de 420 K.

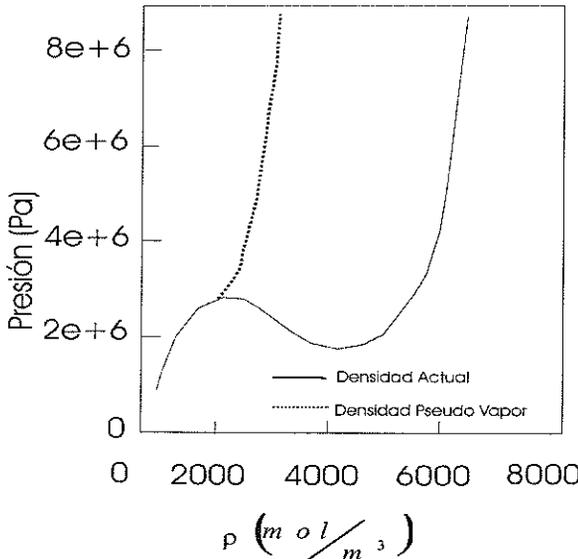


FIGURA 1. Extrapolación de la densidad del vapor a presiones altas (ecuación (21), curva punteada) para una isoterma dada (curva continua).

Como se puede analizar fácilmente si, por ejemplo, se quisiera obtener de la EDEC (curva continua) la densidad de la fase vapor a una presión de Pascales (Bares.), la ecuación de estado no arrojaría una densidad tipo vapor sino tipo líquido de, aproximadamente, 6000 mol / m3, la cual no es adecuada para una fase vapor bajo esas condiciones. Por su parte la ecuación (21), representada por la curva punteada, reportaría a la misma presión un valor cercano a 2500 mol / m3, el cual es mucho más acorde con lo que se esperaría que fuese la densidad de una fase vapor bajo tales condiciones.

Para generar seudoraíces tipo líquido a temperatura alta se acude al método de Mathias y otros. A temperaturas superiores a la temperatura crítica mecánica de la mezcla solo es posible obtener de la EDEC una raíz tipo vapor. Entonces Mathias y otros¹² idearon una extrapolación logarítmica para determinar la seudodensidad para una fase líquida:

$$P = C_0 + C_1 \ln(\rho - 0.7\rho_{mc}) \tag{22}$$

Donde C_0, C_1 son parámetros determinados a partir de condiciones de frontera. Zhao y Saha¹³ los determinaron con la ecuación (22), y su derivada con respecto a densidad, en la región frontera.

La derivada se evalúan en forma analítica a partir de la EDEC utilizada.

Cuando la temperatura y la presión son bajas la EDEC puede arrojar una sola raíz real tipo vapor. En este caso para generar la seudoraíz tipo líquido de nuevo se recurre a la ecuación (22), pero la condición de frontera se toma como $P = P_{baja}$

Los comportamientos de la generación de seudoraíces tipo líquido a temperatura alta y de tipo líquido a temperatura baja se presentan en la figura 2 para la misma mezcla equimolar de etano y heptano. El primer caso corresponde a una temperatura de 500 K (curva punteada superior) y el segundo caso a una temperatura de 420 K (curva punteada inferior).

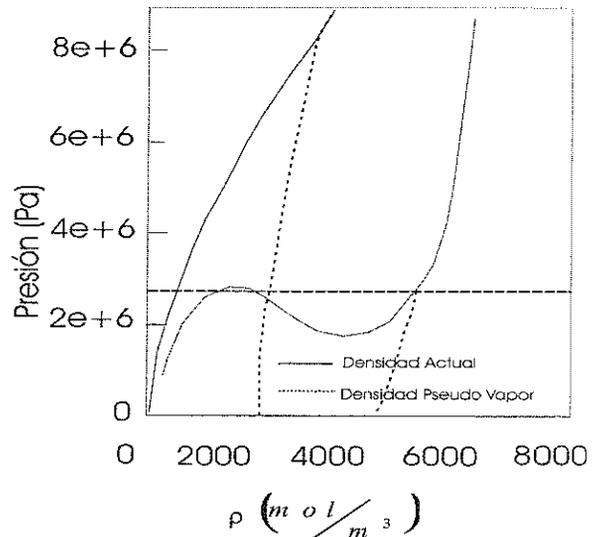


FIGURA 2. Extrapolación de la densidad del líquido a presiones bajas.

El análisis llevado a cabo para el caso mostrado en la figura 1 se puede extender para los casos de la figura 2. De nuevo las ecuaciones para generar las correspondientes seudoraíces

buscan originar densidades más acordes con el rango de valores correspondientes a la fase de interés, en los casos (b) y (c) la fase de interés corresponde a la fase líquida.

Como puede observarse con facilidad en las figuras 1 y 2, todas las ecuaciones de extrapolación usadas para generarseudorraíces son artificios que solo cumplen con la ecuación de estado utilizada en las respectivas condiciones de frontera.

Hasta ahora ha habido dudas relacionadas con la utilidad de los métodos deseudorraíces, principalmente en la región crítica de los fluidos. Según Michelsen⁶, es improbable que la utilización de "raíces falsas" (factores de compresibilidad que no satisfacen la ecuación de estado) sea de gran utilidad en la región crítica cercana¹⁴, ya que en esta región las fases en equilibrio solo exhiben diferencias mínimas en sus respectivos factores de compresibilidad, y además es imposible asociar una fase como "líquida" ó "vapor" basados solamente en dicho factor. Según lo anterior, al parecer no tendría sentido utilizar un método deseudorraíces bajo estas condiciones, ya que la mayor aplicabilidad de estos métodos se encuentra en situaciones en las cuales hay diferencias marcadas en los factores de compresibilidad entre las fases en equilibrio, como por ejemplo en el modelamiento de torres de destilación atmosféricas⁶.

El objetivo de este trabajo fue el de resolver los interrogantes en torno a la aplicabilidad real de los métodos deseudorraíces en las regiones críticas de fluidos de yacimiento y en la zona de transición crítica del gradiente composicional (variación de la composición, y por ende de la presión de saturación, con la profundidad) presente en ciertos yacimientos de petróleo debido al efecto del campo gravitacional terrestre y a la presencia de fluido críticos¹⁵.

MÉTODOLÓGIA DEL TRABAJO

Todos los cálculos fueron realizados con la EDEC de Peng-Robinson¹⁶. En el caso de los fluidos Colombianos, esta ecuación fue ajustada por la empresa estatal colombiana de petróleos (ECOPETROL) a datos experimentales de pruebas PVT y pruebas de separador. Entre los

datos proporcionados por ECOPETROL se encuentra toda la información requerida (temperatura crítica, presión crítica y factor acéntrico) para cada uno de los componentes que conforman las mezclas y los respectivos coeficientes de interacción binarios entre cada par de componentes. Esta información es necesaria para resolver la ecuación (2) durante el cálculo de las respectivas presiones de saturación, las separaciones instantáneas (flash) y los cálculos de análisis de estabilidad.

El cálculo de las presiones de saturación se llevó a cabo con el algoritmo de Michelsen¹⁷, en la versión modificada de Zick¹⁸. Como se dijo anteriormente, el método deseudorraíces utilizado fue el de Zhao y Saha¹³. Este último, parece a los autores, posee características numéricas y de consistencia interna mejores que la de sus antecesores.

A continuación se presenta un diagrama de bloques donde se muestra la metodología seguida para el chequeo de las raíces arrojadas por la ecuación de estado y, si es necesario, la posible generación deseudorraíces.

Para evaluar la aplicabilidad real del método deseudorraíces en el cálculo de presiones de saturación en la región crítica de fluidos de yacimiento se eligieron alrededor de veinte fluidos diferentes; entre los cuales se encontraron fluidos tipo aceites negros, gas condensados, aceites volátiles y un gas natural. Algunos propios del Mar del Norte²³, la China²⁴,²⁵ y Colombia (Floreña y Cusiana).

La idea inicial de utilizar fluidos de yacimiento procedentes de lugares tan diferentes era que los resultados hallados fuesen de aplicabilidad general. Entonces, para cada fluido estudiado se eligieron en forma arbitraria ocho puntos de saturación (burbuja y rocío) cercanos al punto crítico, como se indica en la figura 4. Para cada uno de los puntos de saturación elegidos se tomó como supuesto inicial para la presión, un conjunto de valores comprendidos en el rango entre 1 Bar y una presión, normalmente, mayor que la presión de saturación elegida, a intervalos de 1 Bar. Para inicializar las constantes de equilibrio (K_i 's) necesarias en el cálculo de saturación se utilizaron los dos métodos más comunes: la correlación de Wilson^{19,20} y un cálculo de separación instantánea (flash)^{21,22}.

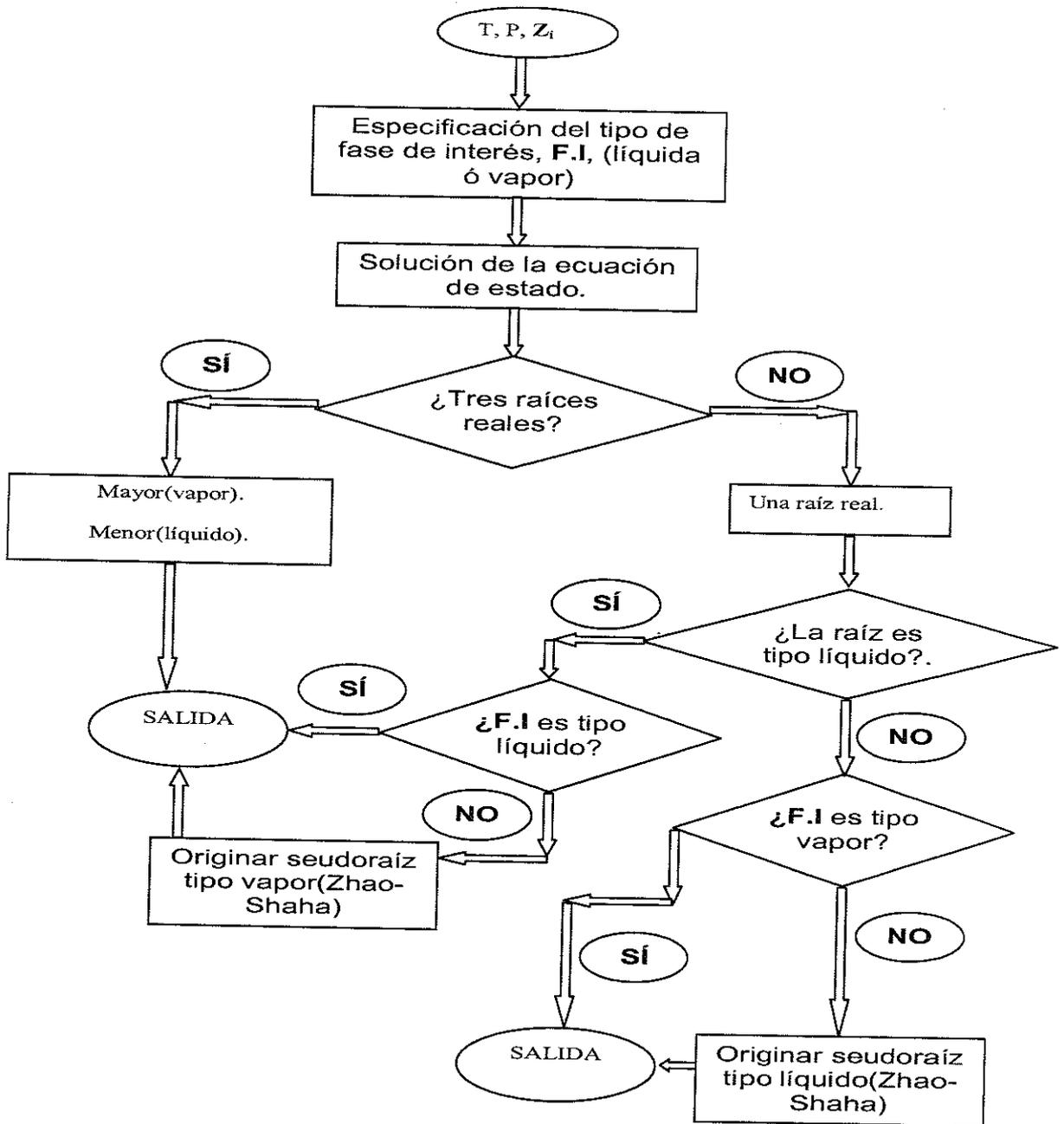


FIGURA 3. Diagrama de bloques mostrando el orden seguido para el cálculo del factor de compresibilidad, su chequeo y la generación de seudorraíces.

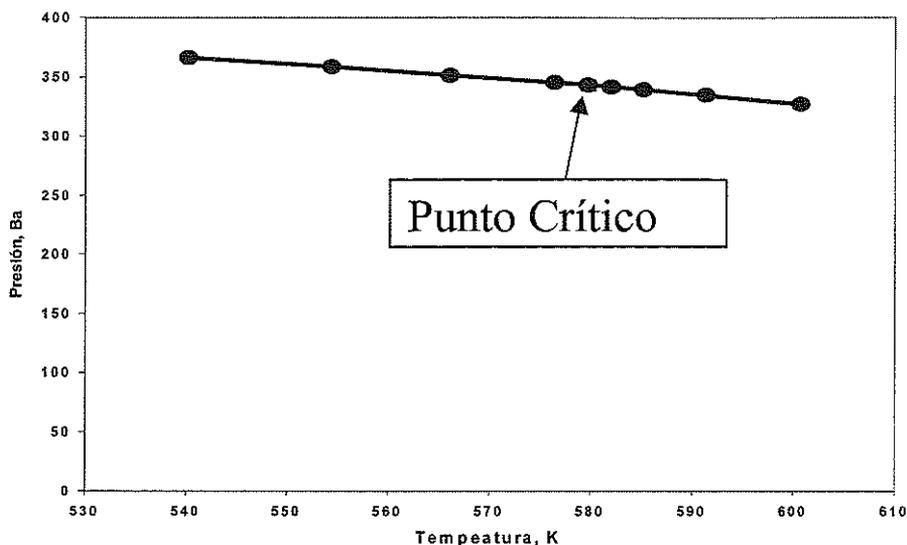


FIGURA 4. Puntos de saturación cercanos al Punto Crítico.

Con cada supuesto inicial de presión y constantes de equilibrio se procedió a realizar el cálculo de los puntos de saturación, en primera instancia utilizando directamente los factores de compresibilidad obtenidos al resolver la ecuación (2), sin analizar si eran adecuados para cada una de las fases de interés (método tradicional), y luego empleando el método de seudorraíces para chequear los factores de compresibilidad y generar las respectivas seudorraíces en caso de que no fueron adecuados para una ó ambas de las fases de interés (método de seudorraíces). Para cada combinación se hizo un total de 5446 cálculos.

Para evaluar la utilidad del método de seudorraíces en la zona de transición crítica de los gradientes composicionales existentes en ciertos yacimientos, se eligió el fluido del Mar del Norte reportado por Montel y Gouel ²⁶, el cual presenta un gradiente composicional con zona de transición crítica; es decir, con contacto gas-aceite. Para este fluido Montel y Gouel reportaron toda la información necesaria para resolver la ecuación de estado, obtenida mediante el procedimiento de ajuste a información experimental. Además del fluido de Montel y Gouel, se eligió el yacimiento de Floreña (Colombia), debido a que este yacimiento presenta una zona de transición hiper crítica (sin contacto gas aceite), que es la transición más compleja ²⁷.

El cálculo del gradiente composicional, es decir la variación de la composición (y por ende, de la

presión de saturación) y de la presión del yacimiento con la profundidad se llevó a cabo con un algoritmo programado por el grupo de "Modelamiento de Procesos Hidrocarburos" de la Universidad Industrial de Santander. En este caso la metodología utilizada fue la de elegir un cierto número de composiciones cercanas a tales zonas de transición y determinarles sus respectivas presiones de saturación, primero utilizando directamente los factores de compresibilidad hallados de la ecuación de estado (método tradicional), y posteriormente empleando el método de seudorraíces.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Debido a la alta no idealidad de los sistemas modelados los cálculos de equilibrio de fases deben ser realizados en forma iterativa. Normalmente los posibles resultados obtenidos de los algoritmos numéricos son: errores numéricos (presiones negativas, factores de compresibilidad fuera del rango físico, desbordamiento de variables, etc.), convergencia a una solución trivial ó convergencia a la solución correcta. Las soluciones triviales y correctas fueron comprobadas mediante un análisis de estabilidad utilizando el criterio del plano tangente de Michelsen ².

Para dar solo dos ejemplos, cuando se intentó localizar el punto de saturación del campo Cusiana para la composición correspondiente a una profundidad de 13080 pies y temperatura de 421.92 K, el método tradicional hizo que durante el proceso iterativo se originaran presiones negativas cuando se tomaron presiones iniciales entre 1 y 84 bar, sin importar el método de inicialización de las constantes de equilibrio (K_i 's). En contraste el método de seudorraíces, bajo las mismas condiciones, hizo que el algoritmo de saturación convergiera a la solución correcta de 368,4 bar, la cual fue chequeada con el criterio del plano tangente de Michelsen. Por otra parte, cuando se intenta localizar el punto de saturación del campo Floreña a una profundidad de 11100 pies y a una temperatura de 566,1 K, el método tradicional provocó que el algoritmo numérico convergiera a la solución trivial de 351,0 bar cuando se tomaron presiones iniciales entre 357 y 359 bar, sin importar el método elegido para inicializar las constantes de equilibrio. El método de seudorraíces, bajo las mismas condiciones, hizo que el algoritmo de saturación convergiera a la solución correcta de 351,2 bar. Es importante anotar que aunque la solución trivial tenga un valor muy próximo a la solución correcta, tal solución es termodinámicamente inestable, como se pudo comprobar aplicando el criterio del plano tangente de Michelsen².

Inicialmente se presentan los resultados obtenidos en este estudio en el caso de la aplicabilidad del método de seudorraíces en el cálculo de presiones de saturación en la región crítica de mezclas multicomponentes de fluidos de yacimiento y, finalmente, los resultados obtenidos en las zonas de transición de los gradientes composicionales.

Resultados del cálculo de presiones de saturación en la región crítica de mezclas multicomponentes

Cuando se utilizaron directamente los factores de compresibilidad obtenidos de la ecuación de estado, sin analizar si eran adecuados para cada una de las fases de interés (método tradicional), y las constantes de equilibrio iniciales (K_i 's) obtenidas a partir de la correlación de Wilson; en un 25% de los 5446 cálculos realizados se produjeron errores numéricos; en un 3,5% se llegó a la convergencia a soluciones

triviales y en el 71,55% se llegó a la convergencia a las respectivas soluciones correctas (según el plano tangente de Michelsen)

Cuando, en vez de inicializar las K_i 's con la correlación de Wilson, se tomaron aquellas arrojadas por el cálculo de separación instantánea (flash), realizado a la temperatura de cálculo y a cada presión inicial supuesta, se obtuvo un 20,34% de errores numéricos, un 4,53% de soluciones triviales, y por último, un 75,11% de soluciones correctas. Se nota, entonces, un incremento del porcentaje de cálculos exitosos. Sin embargo es interesante analizar que el cálculo de separación instantánea produce un incremento en el porcentaje de soluciones triviales. Inicializar los cálculos con una separación instantánea produjo, entonces, una reducción en el porcentaje de errores numéricos, pero agudizó el problema de las soluciones triviales.

Los resultados mostrados hasta ahora fueron obtenidos utilizando en forma directa los factores de compresibilidad arrojados por la ecuación de estado, sin importar lo adecuado ó no para cada una de las fases de interés (método tradicional). Cuando se utilizó el método de seudorraíces de Zhao y Saha y se inicializaron las respectivas K_i 's con la correlación de Wilson se produjo un 17.8% de errores numéricos, 0.90% de soluciones triviales y un 81.3% de convergencia a las respuestas correctas. Si se comparan estos resultados con aquellos obtenidos utilizando el método tradicional e inicializando los K_i 's por medio de la ecuación de Wilson, se encuentra que el método de seudorraíces incrementó en un 14% la posibilidad de éxito en el cálculo de puntos de saturación en la región crítica. Además, si se comparan también los temas referentes a errores numéricos y convergencia a soluciones triviales, resulta que el método de seudorraíces ocasiona una reducción drástica de estas fallas indeseables. Se reduce en un 74% la posibilidad de convergencia a la solución trivial y en un 28.8% la probabilidad de que ocurran errores numéricos.

En contraste con lo anterior, cuando se utiliza el método de seudorraíces y el cálculo de separación instantánea para inicializar las constantes de equilibrio no mejora la posibilidad

de convergencia a la solución correcta, los resultados se distribuyen de la siguiente manera: 20.48% de errores numéricos, 0.97 de soluciones triviales y 78.54% de cálculos exitosos. Se reduce, entonces, el porcentaje de cálculos exitosos y se incrementan los errores numéricos y la convergencia a soluciones triviales, cuando se compara con los resultados anteriores. No obstante, los resultados siguen siendo mucho mejores que los obtenidos utilizando directamente los factores de compresibilidad obtenidos de la solución de la ecuación de estado (método tradicional).

En opinión de los autores las anotaciones de Michelsen⁶ a las que se hizo referencia al comienzo merecen, en principio, una revisión. Lo anterior se debe a que aunque es cierto que en la *región crítica* los valores de los factores de compresibilidad de las dos fases en equilibrio (saturación) son realmente muy próximos

$$\left(\frac{Z_l - Z_v}{Z_v} \right) \cong 10^{-3},$$

tal situación es independiente del esquema numérico utilizado para resolver el sistema de ecuaciones altamente no-lineales que describen el equilibrio de fases. Como el esquema numérico se resuelve en forma iterativa normalmente los supuestos iniciales, y por ende los valores de los factores de compresibilidad iniciales, están muy alejados de los valores de equilibrio. Lo que hace un método como el deseudorraíces es "suavizar" la trayectoria de cálculo (disminución de las fluctuaciones), ayudando a reducir las posibilidades de convergencia a soluciones triviales y de errores numéricos dentro de los algoritmos de cálculo.

Como se analizó anteriormente, cuando se utiliza el método tradicional combinado con un flash para inicializar los K_i 's, en vez de la ecuación de Wilson, se incrementa la posibilidad de convergencia a la solución correcta. Sin embargo, muchas veces el cálculo de separación instantánea (flash) no converge cuando las condiciones son cercanas al punto crítico. El método deseudorraíces, por su parte, mostró ser muy superior bajo estas condiciones cuando se utilizó en combinación con la sencilla ecuación de Wilson.

Resultados del cálculo de presiones de saturación en las zonas de transición críticas de los gradientes composicionales.

En esta ocasión solamente se utilizó la ecuación de Wilson para originar las constantes de equilibrio (K_i 's) iniciales y siempre se tomó como supuesto inicial para la presión un valor de 70 Bares.

Para los yacimientos que presentan gradientes composicionales es fundamental conocer la zona en la cual la columna de fluido pasa de ser gaseosa a líquida (zona de transición), y por lo tanto la naturaleza de los puntos de saturación cambia de rocío a burbuja. Tal conocimiento es fundamental para calcular las reservas de hidrocarburos en el yacimiento y diseñar estrategias adecuadas para su explotación^{26, 27}.

En la figura 5 se presenta la variación de la presión de saturación (lo cual se debe a la variación de la composición) y de la presión del yacimiento a medida que incrementa la profundidad para el fluido Montel-Gouel²⁶ cuando las presiones de saturación son calculadas con el método tradicional.

Cuando se utilizan directamente los factores de compresibilidad obtenidos de la ecuación de estado sin importar si son adecuados para cada una de las fases de interés (método tradicional) se presenta falla del algoritmo de saturación en cercanías al contacto gas-aceite ($(H - H_{ref}) \approx 0$), produciéndose, principalmente, soluciones triviales. En contraste, el gradiente composicional calculado introduciendo el método deseudorraíces de Zhao y Saha¹³ reporta la presión de saturación en la zona de transición sin ninguna dificultad, como se presenta en la figura 6.

Como puede observarse claramente en la figura 6, la presión de saturación llega a igualarse a la presión del yacimiento, como es el caso para un yacimiento con un gradiente composicional que exhibe una zona de transición crítica (contacto gas-aceite).

Finalmente se muestran los resultados para el campo Floreña (Colombia), el cual exhibe una zona de transición hipercrítica (sin contacto gas-aceite), en la cual la presión de saturación siempre es inferior a la presión del yacimiento.

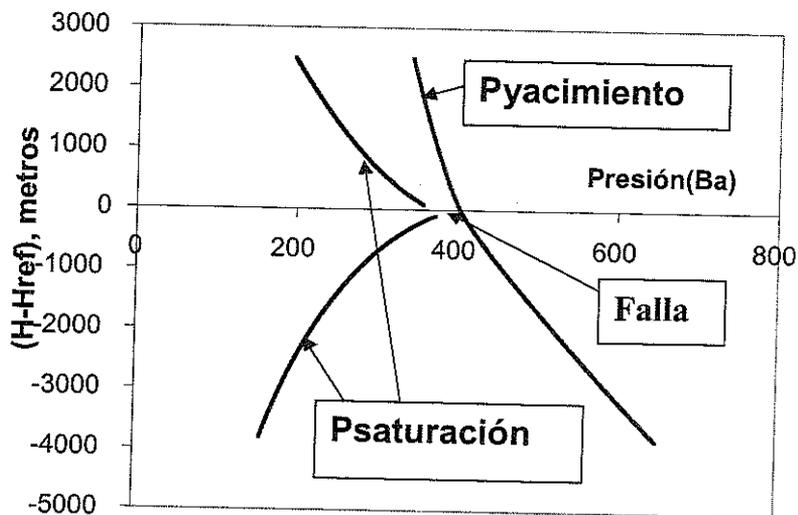


FIGURA 5. Variación de la presión de saturación y la presión del yacimiento con la profundidad para el fluido de Montel-Gouel. Cálculos realizados con el método tradicional.

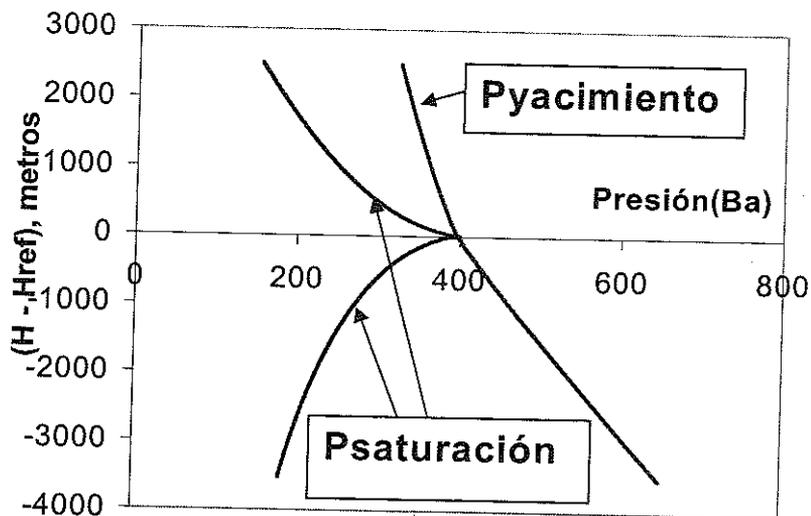


FIGURA 6. Variación de la presión de saturación y la presión del yacimiento con la profundidad para el fluido de Montel-Gouel. Cálculos realizados utilizando el método de seudorraíces.

La figura 7 muestra la falla del algoritmo de saturación en la zona de transición cercana cuando se utiliza el método convencional. Por su parte, el gradiente composicional calculado introduciendo el

método de seudorraíces reporta las presiones de saturación en la zona de transición hipercrítica sin ninguna dificultad, como se describe en la figura 8.

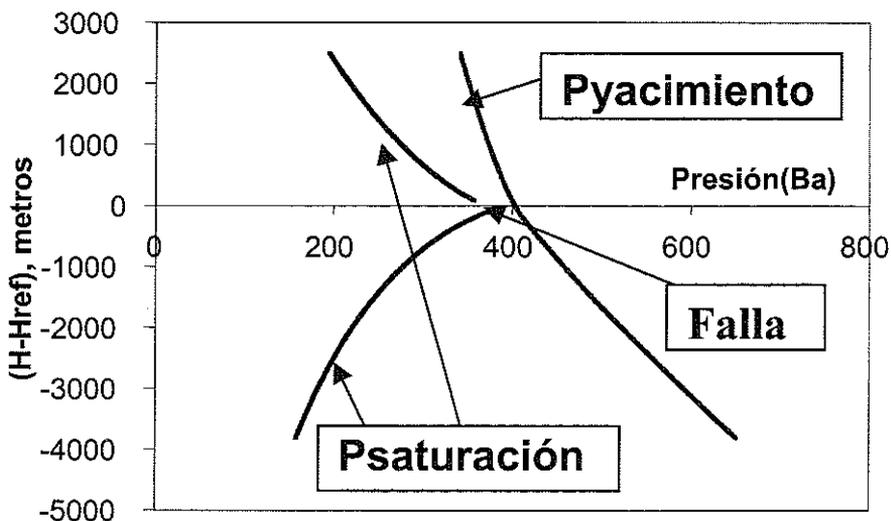


FIGURA 7. Variación de la presión de saturación y la presión del yacimiento con la profundidad para el campo Floreña (Colombia). Cálculos realizados con el método tradicional.

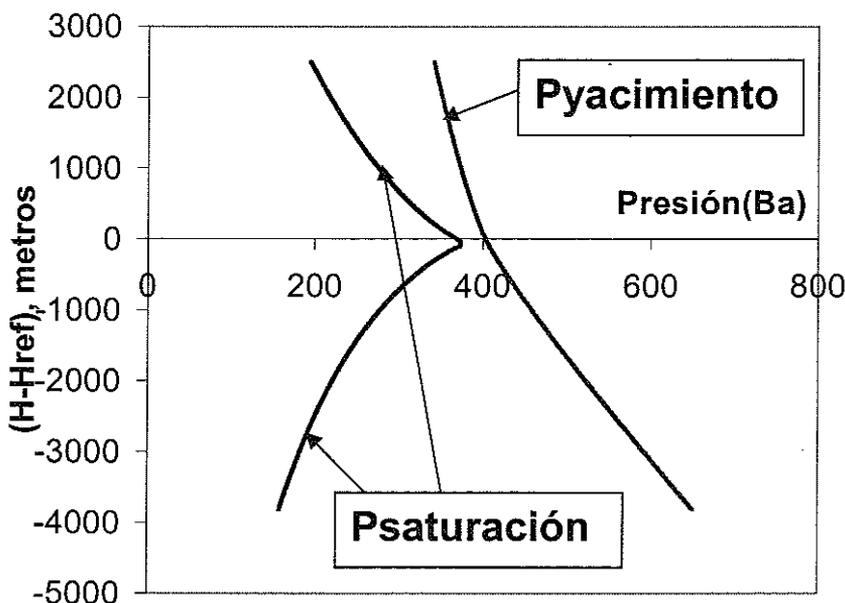


FIGURA 8. Variación de la presión de saturación y la presión del yacimiento con la profundidad para el campo Floreña (Colombia). Cálculos realizados con el método de seudorraíces.

El método de seudorraíces es, entonces, superior al método tradicional en el cálculo de las presiones de saturación en las zonas de transición crítica e hipercrítica de los gradientes composicionales que se presentan en ciertos yacimientos de petróleo.

CONCLUSIONES

El método de seudorraíces tiene una aplicabilidad real en el cálculo directo de puntos de saturación en la región crítica de mezclas de hidrocarburos multicomponentes. Es más, utilizar el método de seudorraíces en

combinación con la ecuación de Wilson surge como la mejor alternativa para realizar cálculos de saturación en la región crítica. De esta forma se torna innecesario utilizar un algoritmo de separación instantánea (el cual es un cálculo iterativo y que no siempre converge) para inicializar las constantes de equilibrio, siendo suficiente el uso de la correlación de Wilson, la cual es analítica y muy simple.

El método de seudorraíces es más robusto que el método tradicional de utilizar directamente los factores de compresibilidad obtenidos de la ecuación de estado (sin importar lo adecuados que sean para las fases de interés que se están modelando) para determinar las presiones de saturación en la zona de transición crítica e hiper crítica de los gradientes composicionales de yacimientos hidrocarburos.

ABSTRACT

The real applicability of the method of "false root" – well-known as "complex domain"- in the calculation of saturation pressures in the critical region of hydrocarbon reservoir mixtures, and in the critical transition zone of the compositional gradients is evaluated in this work. In both cases, it was found that the "false root" method, substantially reduces, the possibilities that the saturation algorithm diverges or that it converges to trivial solutions.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el aporte financiero de COLCIENCIAS y del Instituto Colombiano del Petróleo(ICP). Además se agradece de manera muy especial a ECOPETROL(Regional Piedemonte) por la información técnica y confidencial proporcionada.

BIBLIOGRAFÍA

1. R. Mehra, R. Heidemann, K. Aziz, An accelerated successive substitution algorithm, *Can. J. Chem. Eng.*, 61: 590-595, 1983.
2. M. Michelsen, The isothermal flash problem. I. Stability, *Fluid Phase Equilibria*, 9:1-9, 1982.
3. M. Michelsen, The isothermal flash problem. II. Phase split calculations, *Fluid Phase Equilibria*, 9:21- 40, 1982.
4. D. Peng, D. Robinson, A rigorous method for predicting the critical properties of multicomponent systems, *AIChE J.*, 23:137-145, 1977.
5. R. Heidemann, A Khalil, The Calculation of Critical Points, *AIChE J.*, 15(3):769- 779, 1980.
6. M. Michelsen, Phase Equilibrium Calculations. What is easy and what is difficult?, *Computer chem. Engng.*, 17(5/6):431- 439, 1993.
7. M. Michelsen, A simple method for calculation of approximate phase boundaries, *Fluid Phase Equilibria*, 98:1- 11, 1994.
8. R. Sadus, *High Pressure Phase Behavior of Multicomponents Fluid mixtures*, Amsterdam, Elsevier, 1992.
9. J.M. Prausnitz, R. Lichenthaler, E. Gomez de Acevedo, *Termodinámica Molecular de los Equilibrios de Fase*, Madrid, Prentice Hall, 2000.
10. I. Sneddon, *Encyclopaedic Dictionary of Mathematics*, University of Glasgow, Pergamon press, 1976.
11. B. Poling, E. Grens II, J.M. Prausnitz, Thermodynamic properties from a cubic equation of state: Avoiding trivial roots and spurious derivatives, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 20: 127- 130, 1981.
12. P.M. Mathias, J.F. Boston, S. Watanasiri, Effective utilizations of equations of state for thermodynamic properties in Process simulation, *AIChE. J.*, 30:182-201, 1984.
13. E. Zhao, S. Saha, Applications of complex domain in Vapor-Liquid Equilibrium calculations using a cubic equation of state, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 37:1625-1633, 1998.
14. J.M.H. Levelt Senger, G. Morrison, R.F. Chang, Critical behavior in fluids mixtures, *Fluid. Phase. Equilibria*, 14:19- 44, 1983.
15. C. Whitson, Compositional gradients in petroleum reservoirs, Paper *SPE.J.*28000, 1994.
16. D. Peng, D. Robinson, A new two-constant equation of state, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 15(1):59- 65, 1976.
17. M. Michelsen, Saturation point calculations, *Fluid Phase Equilibria*, 23:181- 192, 1985.
18. I. Soreide, *Doctoral Dissertation*. Norwegian Institute of Technolgy, Norway, April 1989.

19. G.M. Wilson, A modified Redlich-Kwong equation of state, Application to general physical data calculations. Paper No.15c presented at the *AICHE 65 th National Meeting*, Cleveland, May 4 -7, 1969.
20. D. Peng, D. Robinson, Discussion of critical point and saturation pressure calculations for multicomponents systems, *SPE, J.* 75- 76, April, 1980.
21. D.D. Fussell, J.L. Yanosik, J.L. An iterative sequence for phase-equilibria calculations incorporating the Redlich-Kwong equation of state, *SPE. J.*, 173-182, june, 1978.
22. C. Whitson, M. Michelsen, The negative flash, *Fluid Phase Equilibria*, 53:51- 71, 1989.
23. K. Aasberg-Petersen, E. Stenby, Prediction of thermodynamic properties of oil and gas condensate mixtures, *Ind.Eng.Chem.Res.*, 30(1):248- 254, 1991.
24. P. Wang, Prediction of phase behavior for gas condensate, *SPE.J*, Unsolicited, feb 20, 1989.
25. T. Yang, W.D. Chen, T.M. Guo, Phase behavior of near -critical reservoir fluid mixture, *Fluid. Phase, Equilibria*, 128:183-197, 1997.
26. F. Montel, P. Gouel, Prediction of compositional grading in a reservoir fluid column, paper SPE 14410, presented at the 1985 *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*, Las Vegas, Sept. 22-25.
27. A. Firoozabadi, *Thermodynamics of Hydrocarbon Reservoirs*, Mc Graw Hill, 1999