

ESTUDIO TEÓRICO COMPOSICIONAL SOBRE EL COMPORTAMIENTO TOPOLÓGICO DE ENVOLVENTES DE FASE: SISTEMAS FLUIDOS REPRESENTATIVOS DE FLUIDOS DE RESERVOIRO



Gerardo O. Pisoni; Martín Cismondi
Dpto. de Química Indust. Y Aplic. UNC - IPQA (UNC-CONICET), Córdoba, Argentina
pisoni.gerardo@gmail.com



Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos y Química Aplicada

Objetivo:

Estudiar los cambios topológicos de Isopletas para sistemas multicomponentes representativos de un fluido de reservorio utilizando ecuaciones de estado.

Metodología:

➤ Proponer tres sistemas representativos de un fluido de reservorio evaluando resultados según se modifica la asimetría del sistema y la composición del mismo.

Sistema 1: Tres hidrocarburos lineales → Componente de bajo PM, componente con PM intermedio y componente de alto PM.

Sistema 2: CO₂ + dos hidrocarburos lineales → Componente de bajo PM, y componente de alto PM.

Sistema 3: CO₂ + Aromático + dos hidrocarburos lineales → Componente de bajo PM, y componente de alto PM.

➤ Utilizar la Ecuación de estado Peng-Robinson (PR) [2] para plantear las ecuaciones de equilibrio termodinámico.

➤ Resolver los sistemas de ecuaciones no lineales aplicando el método de Newton Multivariable. Aplicar Métodos de Continuación Numérica para calcular líneas de envolventes de fase completas (Isopletas).

Casos de Estudio: Definición de Sistemas y Parámetros:

Sistemas seleccionados para su estudio

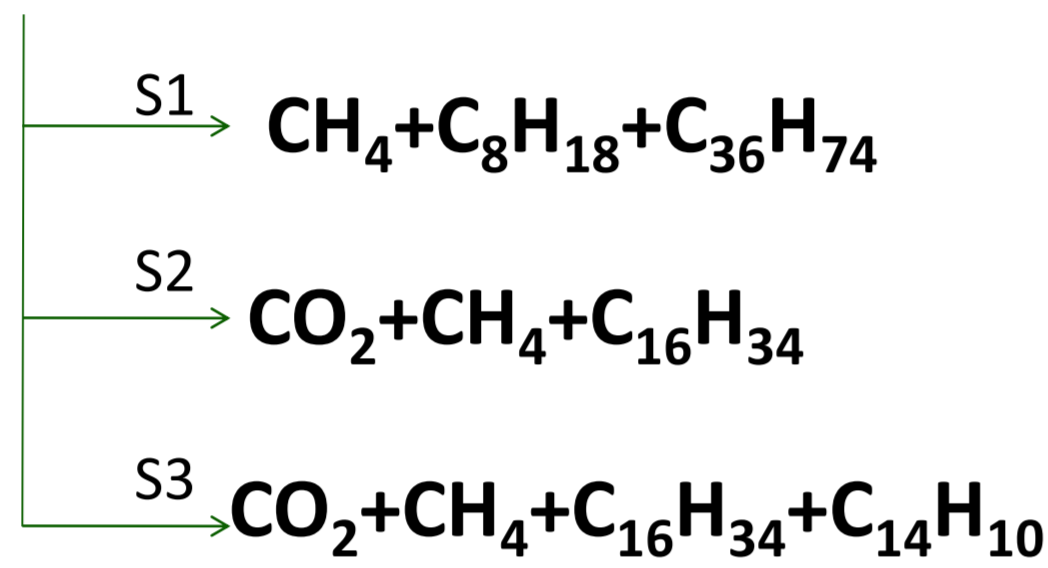


Tabla 1: Parámetros de componente puro utilizados en el cálculo.

Sistema	T _c	P _c	w	PR EOS		
				a _c	b	m
CH ₄	190.56	45.99	0.0115	2.49580	0.026802	0.392340
CO ₂	304.21	73.83	0.2236	3.96208	0.026652	0.705994
C ₈ H ₁₈	568.7	24.9	0.3996	41.05598	0.147733	0.947826
C ₁₄ H ₁₀	869	29	0.4707	82.30967	0.193827	1.040779
C ₁₆ H ₃₄	723	14	0.7174	118.02062	0.334043	1.342140
C ₃₆ H ₇₄	874	6.8	1.52596	355.07760	0.831371	2.099573

Tabla 2: Parámetros de interacción K_{ij} usados con PR EOS (I_{ij} = 0.069 entre CO₂ y C₁₆H₃₄, demás I_{ij} = 0 Parámetros de la referencia [1])

Componente	CH ₄	CO ₂	C ₁₆ H ₃₄	C ₁₄ H ₁₀
CH ₄	-	0.0884	0.0661	0.2025
CO ₂	-	-	0.0898	0.1080
C ₁₆ H ₃₄	-	-	-	0.0039

Resultados: Sistema CH₄+C₈H₁₈+C₃₆H₇₄

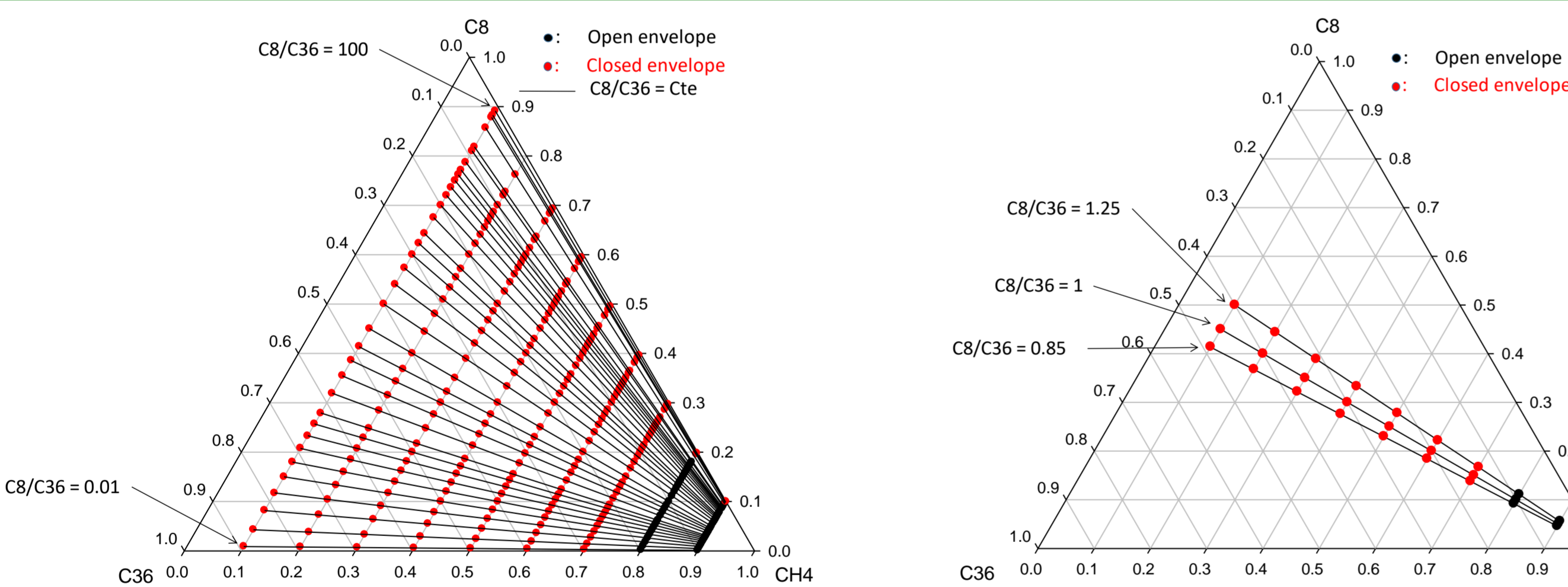


Figura 1. Triángulo de Gibbs de Isopletas calculadas para el Sistema CH₄+C₈H₁₈+C₃₆H₇₄. Cada punto representa la composición de una Isopleta donde la relación C₈/C₃₆ se mantiene constante barriendo un rango desde 0.01 a 100 para tal cociente.

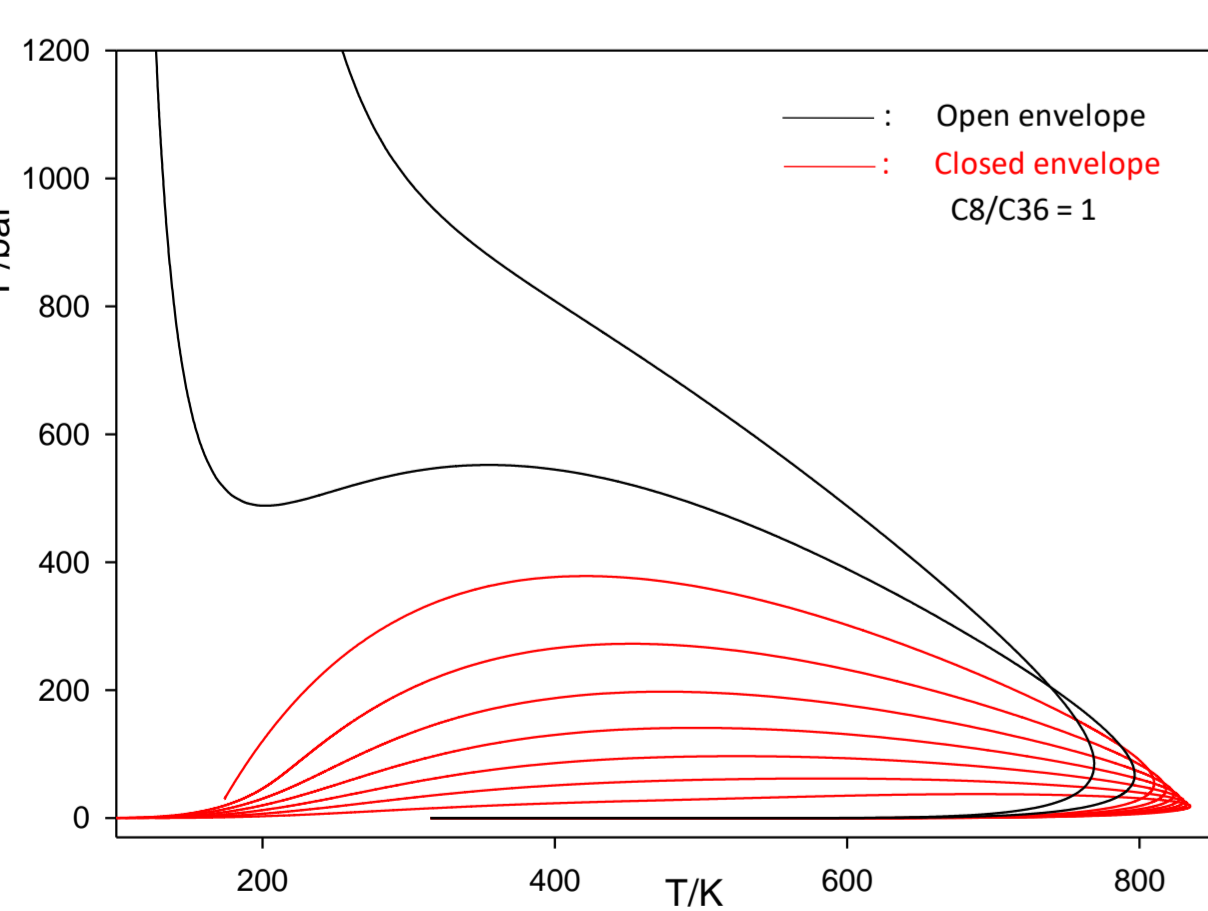


Figura 3. Proyección Presión vs Temperatura de Isopletas calculadas para el Sistema CH₄+C₈H₁₈+C₃₆H₇₄, fracciones molares constantes de CH₄ desde 0.1 a 0.9 y relaciones de composición constante de C₈/C₃₆ igual a 1 para tal cociente.

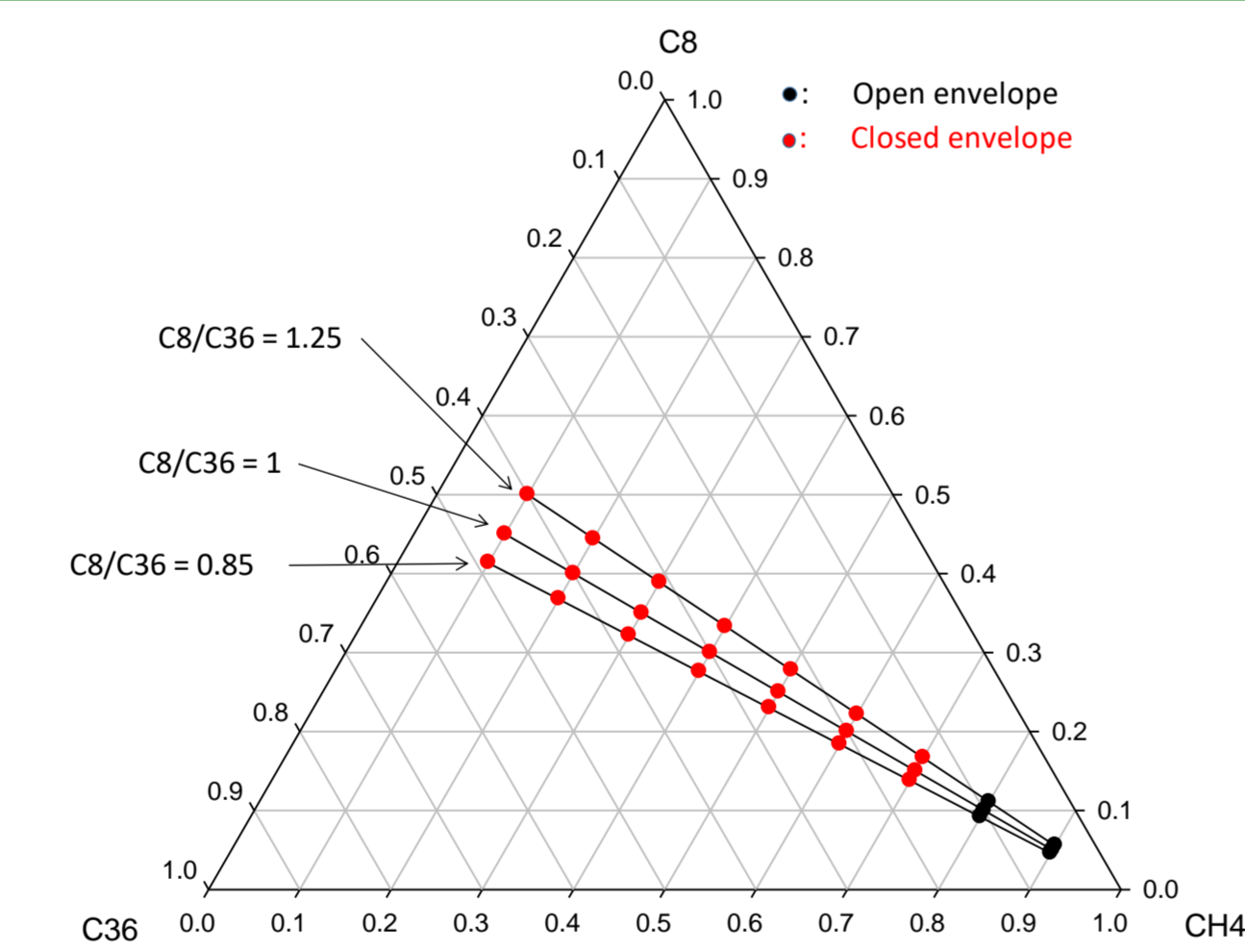


Figura 2. Triángulo de Gibbs de Isopletas calculadas para el Sistema CH₄+C₈H₁₈+C₃₆H₇₄. Cada punto representa la composición de una Isopleta donde la relación CH₄/C₁₆ se mantiene constante. En este caso se muestran las relaciones 1.25, 1, 0.85 para tal cociente.

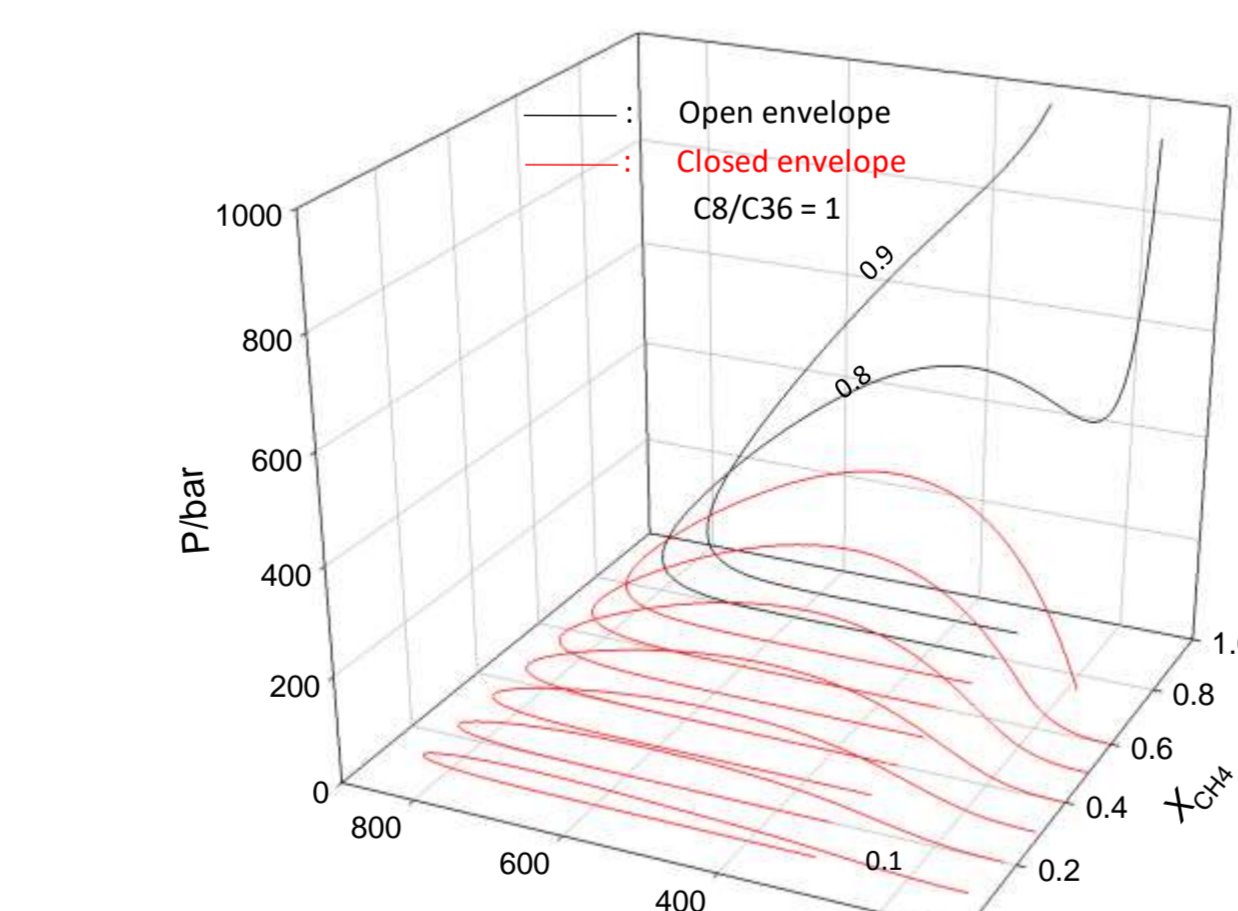


Figura 4. Proyección Presión vs Temperatura vs fracción molar de Metano de Isopletas calculadas para el Sistema CH₄+C₈H₁₈+C₃₆H₇₄, fracciones molares constantes de CH₄ desde 0.1 a 0.9 y relaciones de composición constante de C₈/C₃₆ igual a 1 para tal cociente

Conclusiones:

- Se propusieron tres sistemas representativos de un fluido de reservorio: dos ternarios y uno cuaternario. La variación en la composición en alguno de sus componentes refleja un cambio importante en la topología de las Isopletas.
- Los gráficos muestran una variación desde el 0.1 hasta el 0.9 del componente más liviano (CO₂, CH₄ o ambos, dependiendo el sistema observado) lo que marca un cambio topológico importante de las Isopletas calculadas.
- La línea de equilibrio que divide la región homogénea de la región heterogénea se extiende a altas presiones cuando el componente más liviano está concentrado. Mientras que dicha línea de equilibrio se extiende a bajas presiones y bajas temperaturas en la medida que la concentración del componente más liviano decrece.

Resultados: Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄

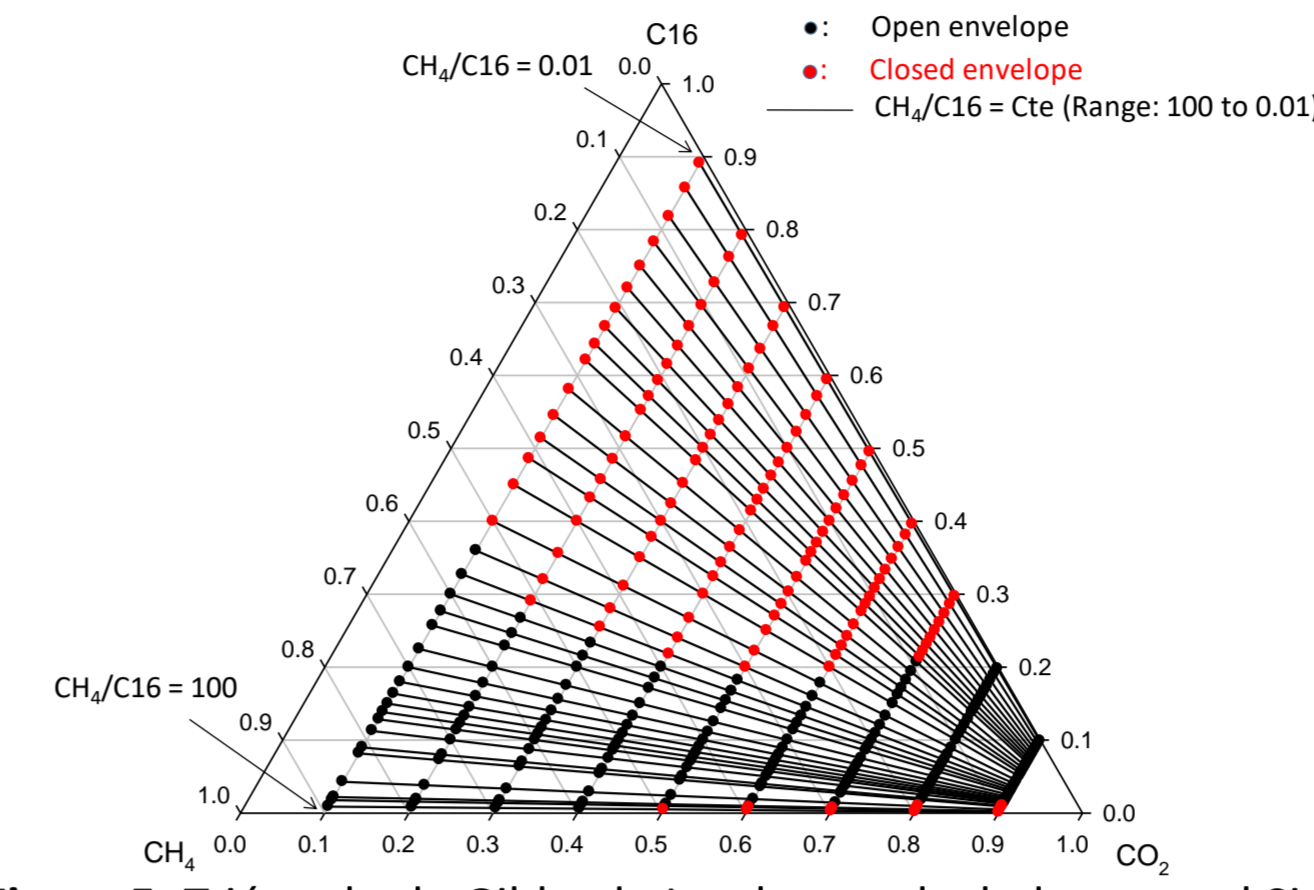


Figura 5. Triángulo de Gibbs de Isopletas calculadas para el Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄. Cada punto representa la composición de una Isopleta donde la relación CH₄/C₁₆ se mantiene constante Barriendo un rango desde 0.01 a 100.

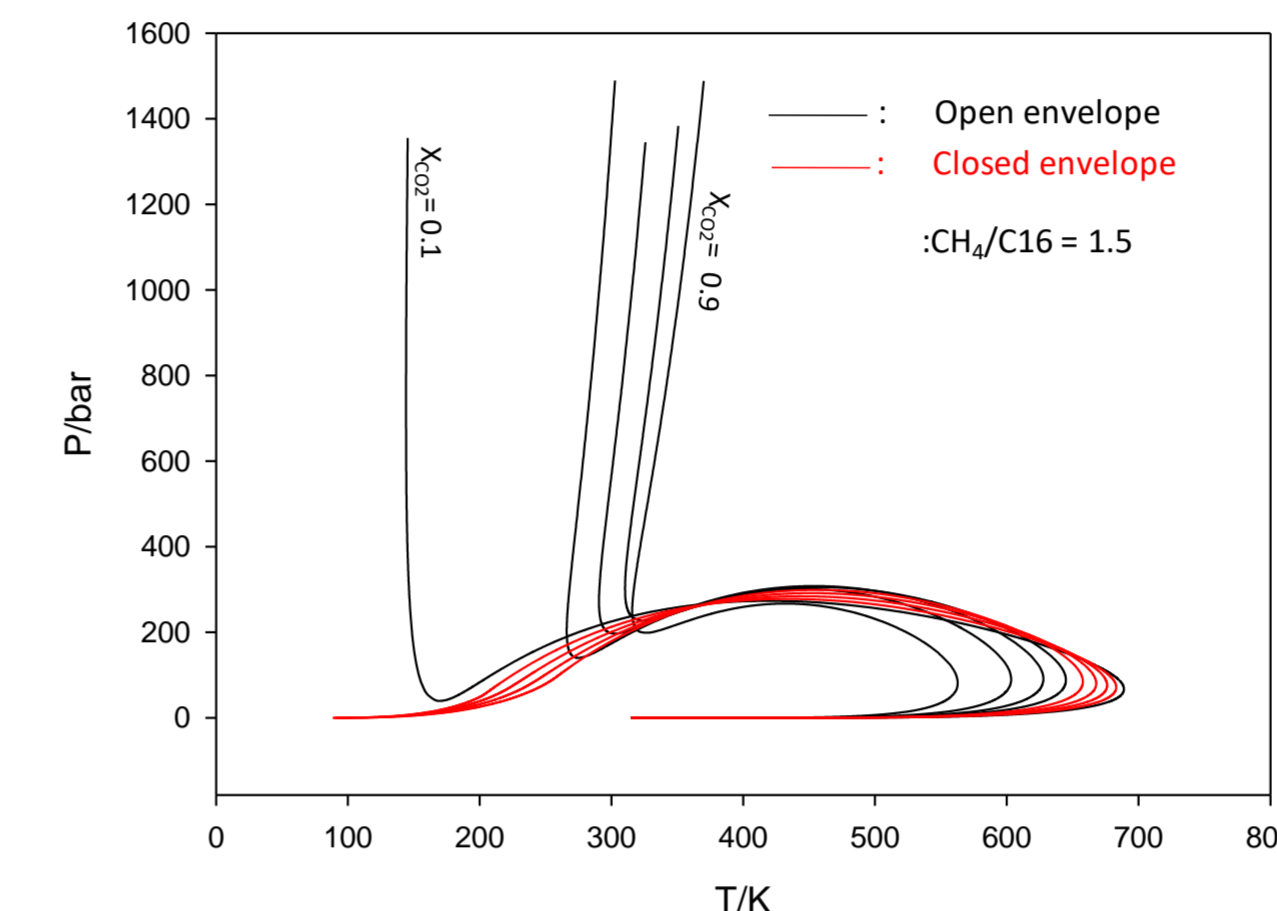


Figura 7. Proyección Presión vs Temperatura de Isopletas calculadas para el Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄, fracciones molares constantes de CO₂ desde 0.1 a 0.9 y relaciones de composición constante de CH₄/C₁₆ igual a 1.5 para cada una de las Isopletas calculadas.

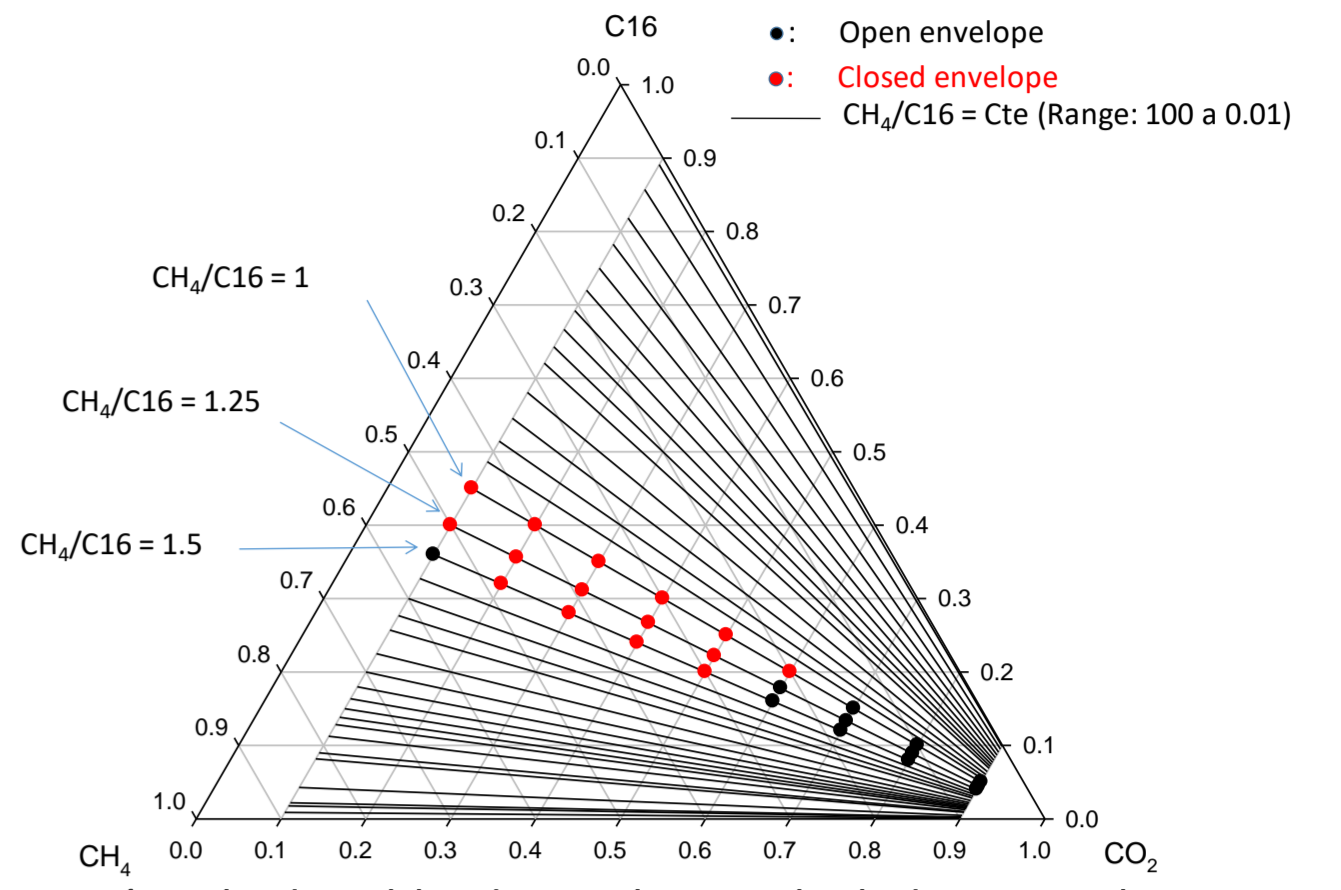


Figura 6. Triángulo de Gibbs de Isopletas calculadas para el Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄. Cada punto representa la composición de una Isopleta donde la relación CH₄/C₁₆ se mantiene constante En este caso se muestran las relaciones constantes 1, 1.25, 1.50

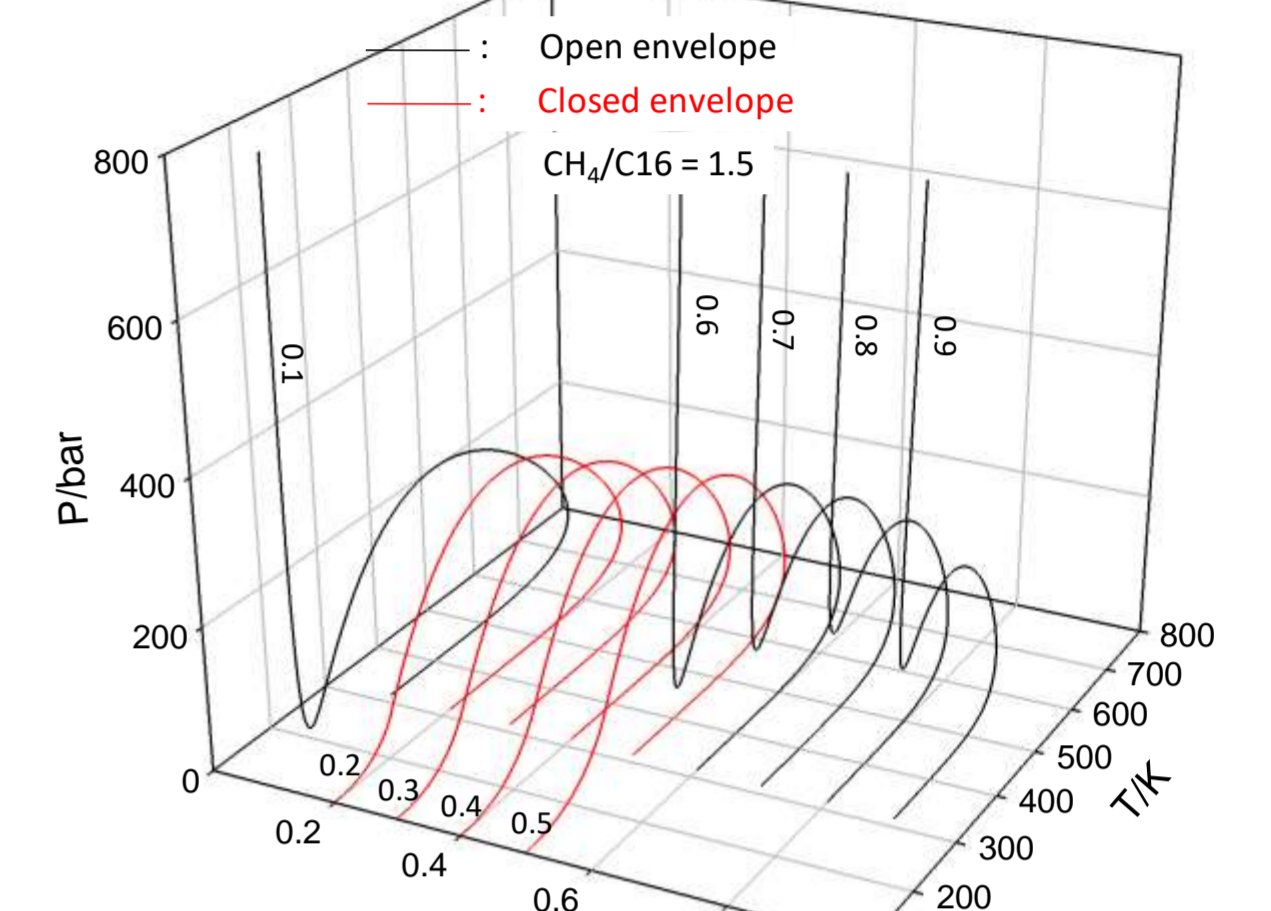


Figura 8. Proyección Presión vs Temperatura vs fracción molar de Etano de Isopletas calculadas para el Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄, fracciones molares constantes de CO₂ desde 0.1 a 0.9 y relaciones de composición constante de CH₄/C₁₆ igual a 1.5 para cada una de las Isopletas calculadas.

Resultados: Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄+C₁₄H₁₀

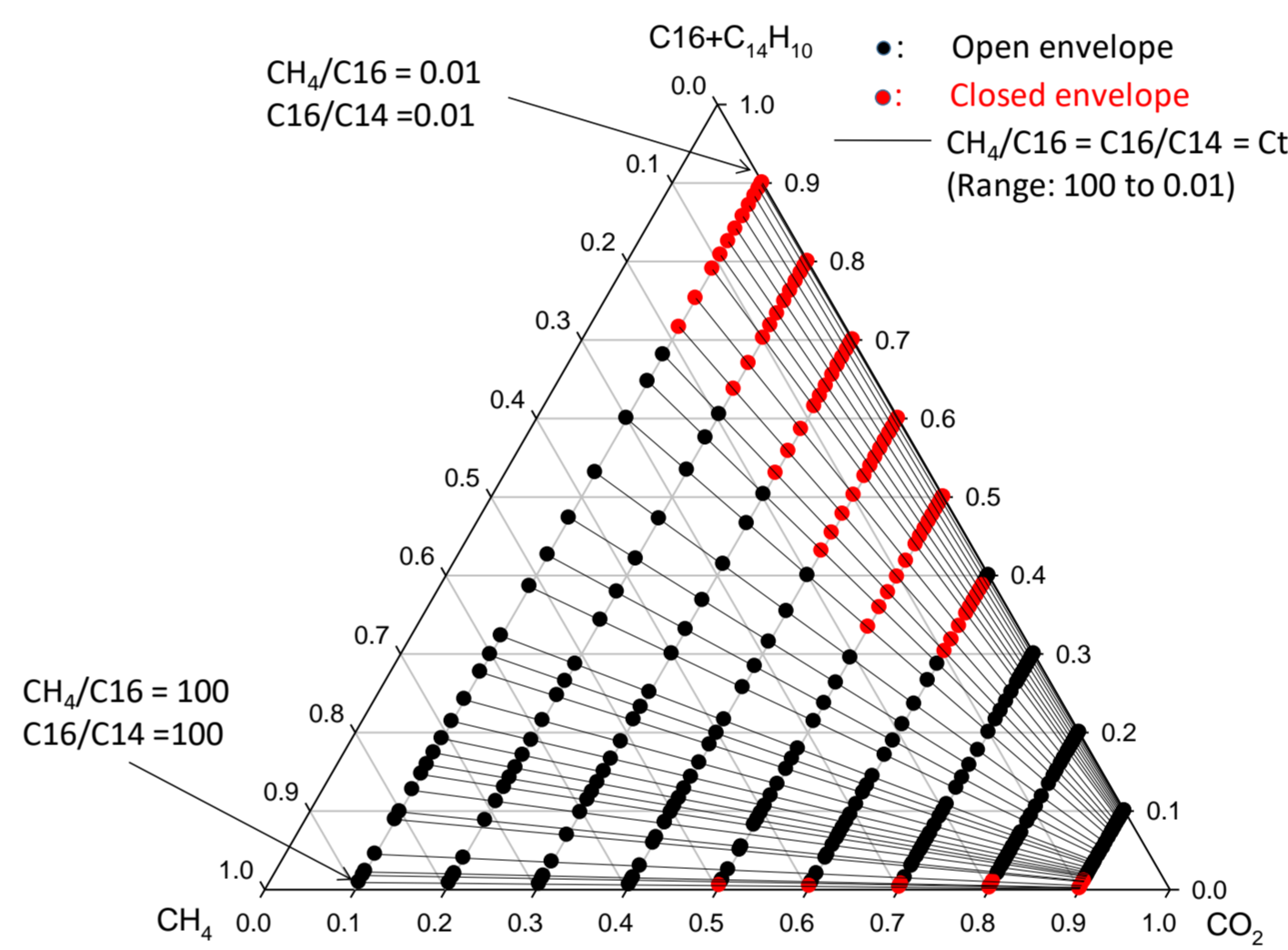


Figura 9. Triángulo de Gibbs de Isopletas calculadas para el Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄+C₁₄H₁₀. Cada punto representa la composición de una Isopleta donde la relación C₁₆/C₁₄ y CH₄/C₁₆ se mantiene constante Barriendo un rango desde 0.01 a 100 para ambas relaciones.

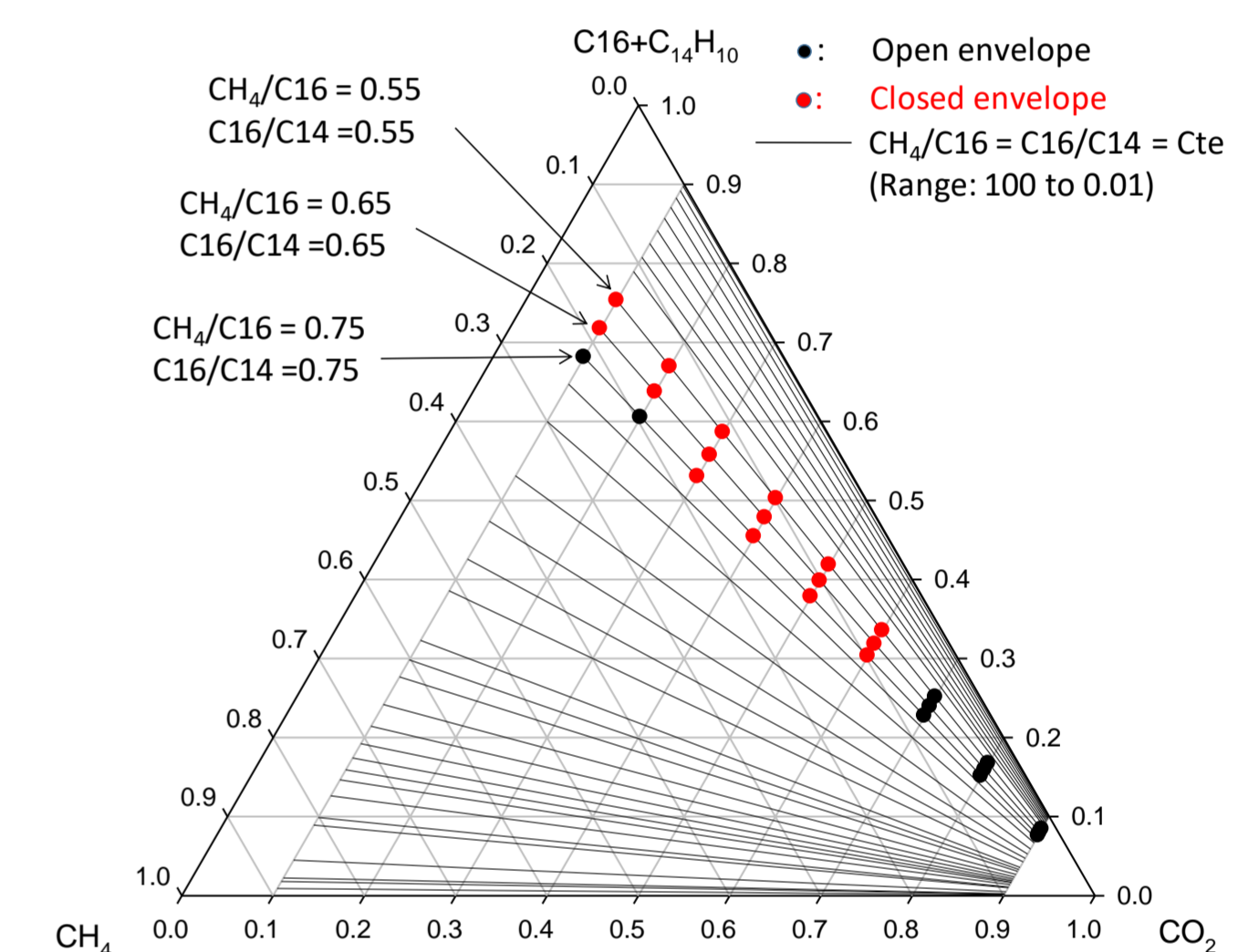


Figura 10. Triángulo de Gibbs de Isopletas calculadas para el Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄+C₁₄H₁₀. Cada punto representa la composición de una Isopleta donde la relación C₁₆/C₁₄ y CH₄/C₁₆ se mantiene constante En este caso se muestran las relaciones 0.55, 0.65, 0.75 para ambos cocientes.

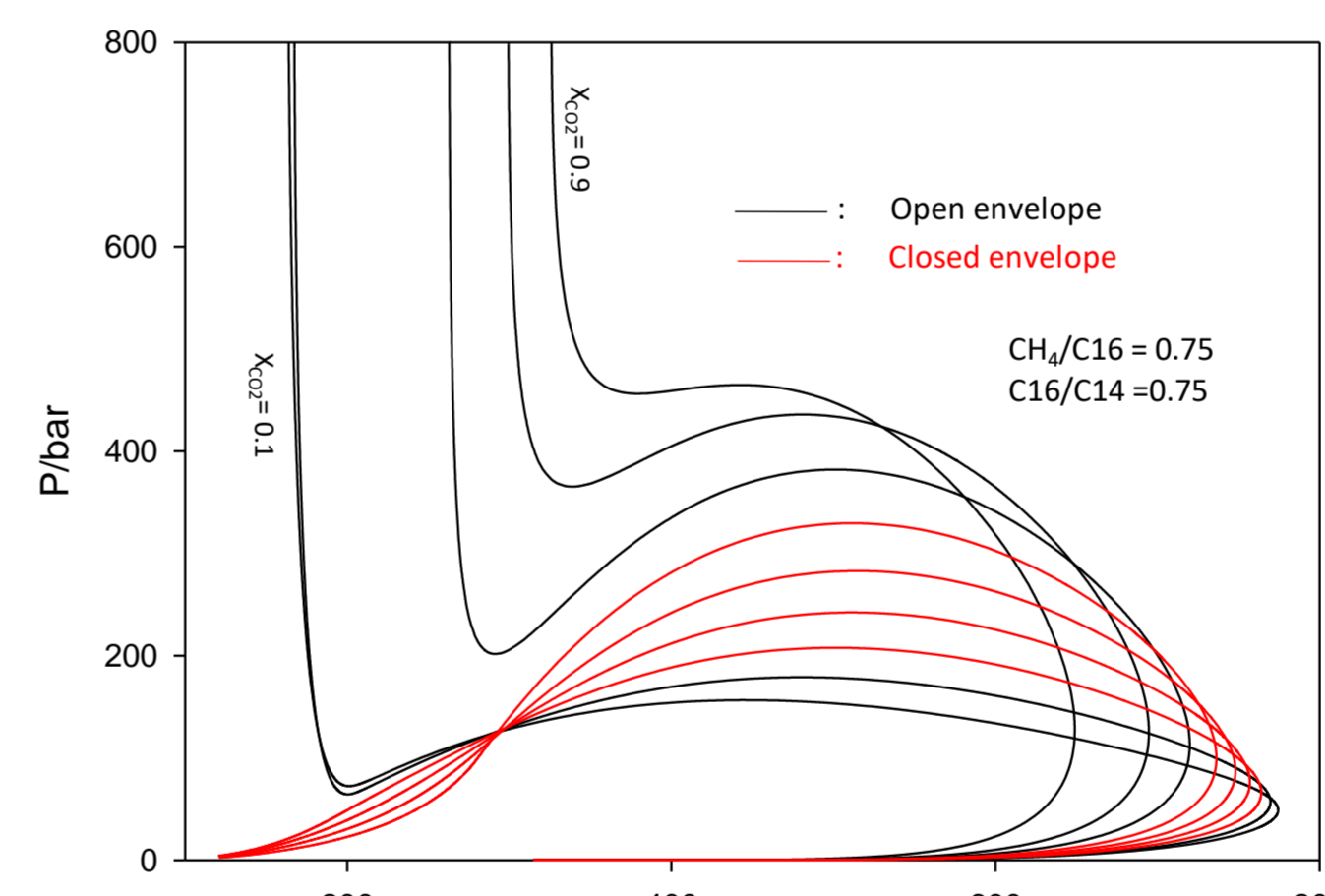


Figura 11. Proyección Presión vs Temperatura de Isopletas calculadas para el Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄+C₁₄H₁₀, fracciones molares constantes de CO₂ desde 0.1 a 0.9 y relaciones de composición constante de CH₄/C₁₆H₃₄ y C₁₆H₃₄/C₁₄H₁₀ igual a 0.75 para cada una de las Isopletas calculadas.

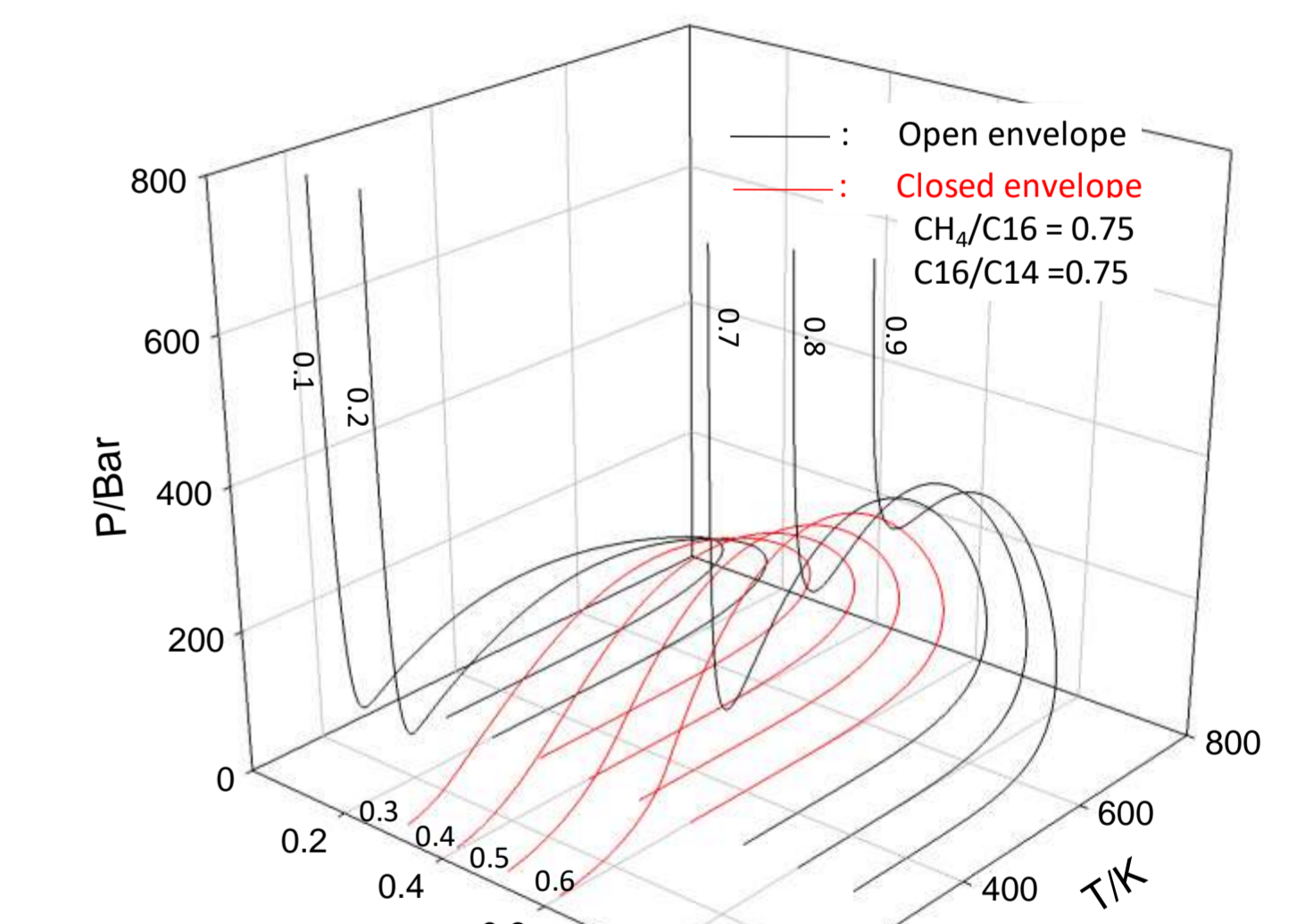


Figura 12. Proyección Presión vs Temperatura vs fracción molar de Etano de Isopletas calculadas para el Sistema CO₂+CH₄+C₁₆H₃₄+C₁₄H₁₀, fracciones molares constantes de CO₂ desde 0.1 a 0.9 y relaciones de composición constante de CH₄/C₁₆H₃₄ y C₁₆H₃₄/C₁₄H₁₀ igual a 0.75 para cada una de las Isopletas calculadas.

Referencias:

- [1] Ana P.P. Simoncelli, Wilfred Gómez, Rafael M. Charin, Felipe P. Fleming, Papa M. Ndiaye, Frederico W. Tavares. Fluid Phase Equilibria 515 (2020) 112574
- [2] D.-Y. Peng, D.B. Robinson, A New Two-Constant Equation of State, Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 15 (1976) 59-64.