Envolventes de fases, de lo simple a lo complejo

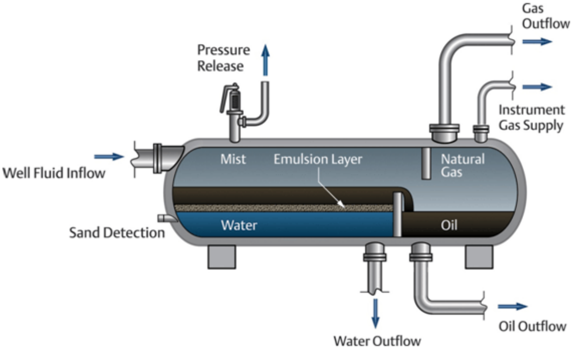
Federico Benelli

Segunda jornada GTF

Introducción

Equilibrio de fases

En los procesos industriales es muy común que exista la necesidad de calcular un equilibrio de fases, ya sea para una extracción, un proceso de separación, etc.



Equilibrio de fases

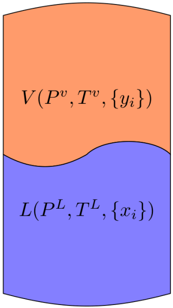
Para que un sistema esté en equilibrio es necesario que se den las condiciones.

Condiciones

$$T^V = T^L$$

$$P^V = P^L$$

$$f_i^V = f_i^L$$



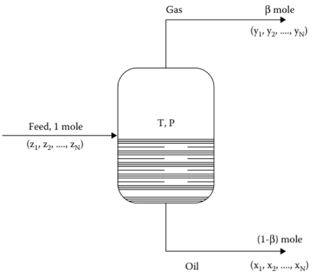
Cálculo flash

En una operación, puede ser importante determinar la composición de fases en equilibrio. Para esto puede realizarse un cálculo Flash.

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\phi_i^L(x,p,T)}{\phi_i^V(y,p,T)}$$

$$\sum_i^N (y_i - x_i)$$

$$z_i = \beta y_i + (1-\beta) x_i$$



Puntos de saturación

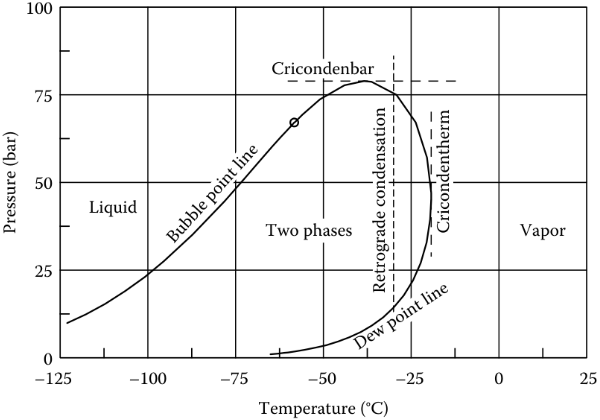
Puntos de transición donde aparece una fase incipiente

- Puntos de burbuja.
- Puntos de rocío.

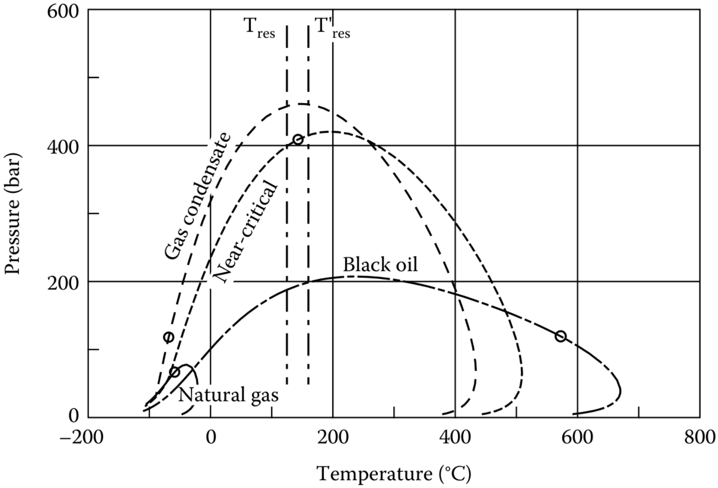
Envolventes de fases

Envolventes de fases

La unión de todos los puntos de saturación a $z = cte$ se la denomina envolvente de fases.



Envolventes de fases



Envolvente bifásica: Cálculo

Una envolvente bifásica puede calcularse resolviendo el sistema de ecuaciones:

$$\ln K_i - (\ln \phi_i^l(x,p,T) - \ln \phi_i^v(y,p,T)) = 0$$
$$\sum_i^N (y_i - x_i) = 0$$

Punto a punto, mediante un método de *continuación numérica*

Método de continuación

Método que realiza el trazado de líneas obtenidas a partir de sistemas de ecuaciones complejos de resolver mediante método Newton.

Método de continuación: Ejemplo simple

Se desea trazar la ecuación de un círculo:

$x^2 + y^2 = 1$

De por si el sistema está subespecificado (GL > 0), por lo que es necesario agregar una ecuación extra:

$x - x_0 = 0$ (punto x_0 donde se desea resolver el sistema)

Método de continuación: Ejemplo simple (Resolución Newton)

$$F = \begin{bmatrix} x^2 + y^2 - 1 \\ x - x_0 \end{bmatrix} = 0$$

$$J = \begin{bmatrix} 2x & 2y \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$J(X_i)\Delta X + F(X_i) = 0$$

$X_0 = [0.5 \;\; -1]$
$X_3 = [0.5 \;\; -0.87]$

Ahora, si se toma $X_0 = [1 \; 0]$
La matriz jacobiana es:

$$J = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Singular! No sirve esta inicialización.

Metodo de conditunacion: Seleccion de especificacion

Variable de especifcacion dinamica

$$F = \begin{bmatrix} x^2 + y^2 - 1 \\ X_s - S \end{bmatrix} = 0$$

$$J = \begin{bmatrix} 2x & 2y \\ \frac{dF_2}{dx} & \frac{dF_2}{dy} \end{bmatrix}$$

Se determina que tanto varian las variables con respecto a la especificacion

$$J \frac{dX}{dS} + \frac{\partial F}{\partial S} = 0$$

$$X_{new} = X_{old} + \frac{dX}{dS} \Delta S$$

Método de continuación: Envolvente bifasica

$$\ln K_i - (\ln \phi_i^l(x,p,T) - \ln \phi_i^v(y,p,T) = 0$$

$$\sum_i^N (y_i - x_i) = 0$$

$$X_S - S = 0$$

Donde S es una variable de especificación (por ejemplo T o P)

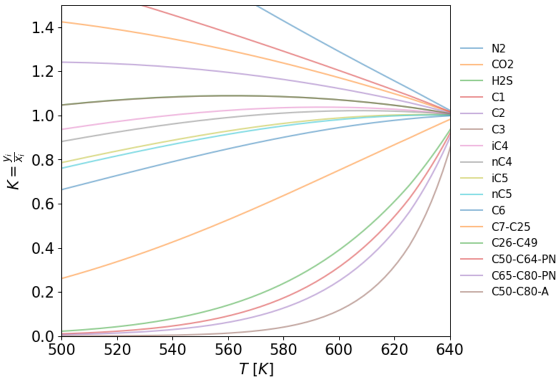
Envolventes: Dificultades

- Buena inicialización
- Correcta de detección de puntos críticos
- Casos con mucha asimetría

Envolventes: Dificultades (PC)

Al acercarse a un punto crítico

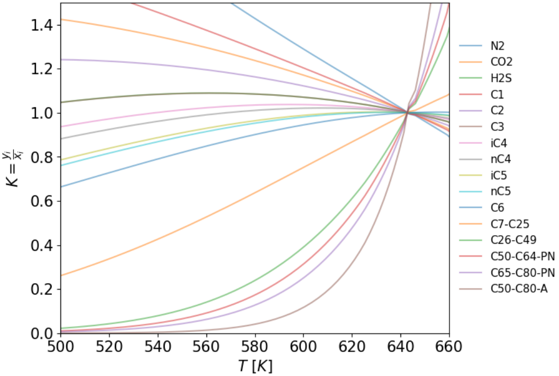
$$x_i \approx y_i \rightarrow K_i \approx 1$$



Envolventes: Dificultades (PC)

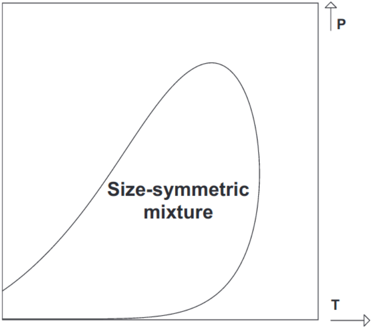
Al acercarse a un punto crítico

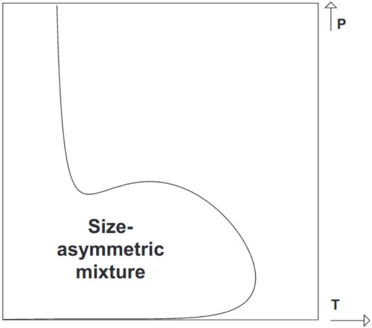
$$x_i \approx y_i \rightarrow K_i \approx 1$$



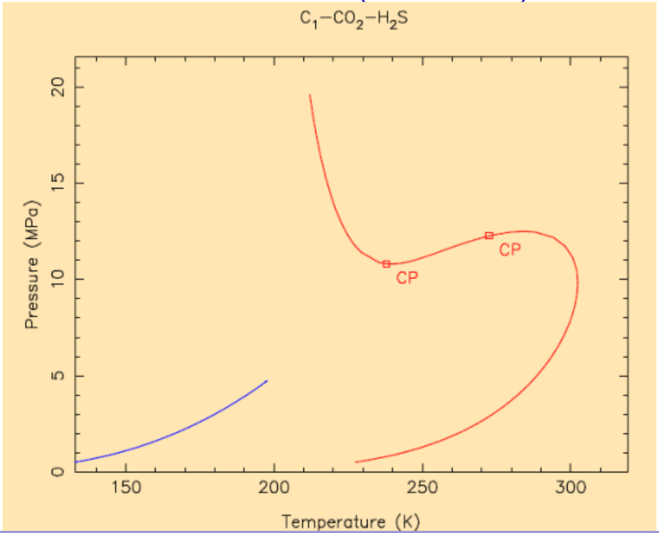
Envolventes: Dificultades (Asimetría)

En sistemas muy asimétricos, pueden surgir otros tipos de problemas.

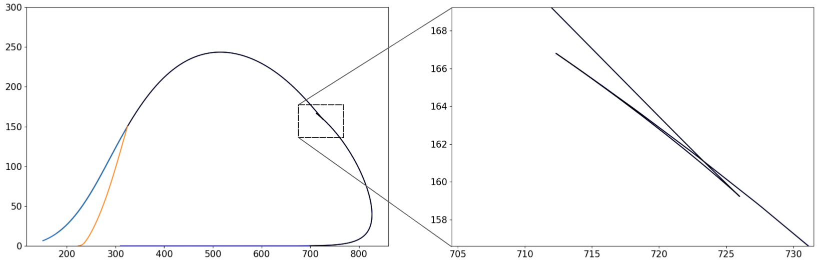




Envolventes: Dificultades (Asimetría)



Envolventes: Dificultades (Asimetría)



Envolventes: Dificultades (Asimetría)

Estos casos son indicadores de posibles equilibrios trifásicos.

Envolvente trifásica

Para resolver un sistema en equilibrio trifásico se añade otro set de ecuaciones, correspondiente a equilibrio y balance de la fase nueva.

$$\ln K_i - (\ln \phi_i^{L1}(x,p,T) - \ln \phi_i^{V}(x,p,T)) = 0$$

$$\sum_i^N (y_i - x_i) = 0$$

$$\sum_i^N (x_i - w_i) = 0$$

$$\ln K_i^s - (\ln \phi_i^{L2}(w,p,T) - \ln \phi_i^{L1}(x,p,T)) = 0$$

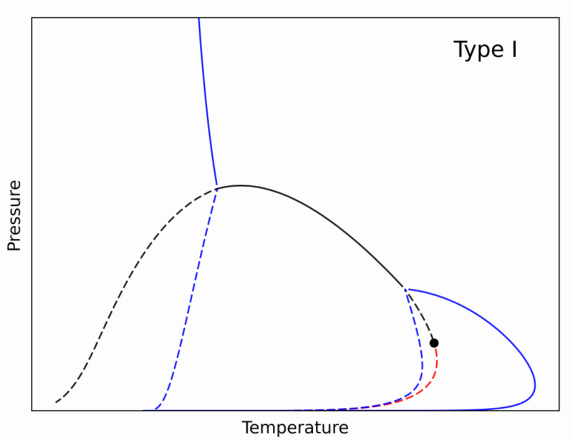
$$X_S - S = 0$$

Envolventes trifásicas: Dificultades

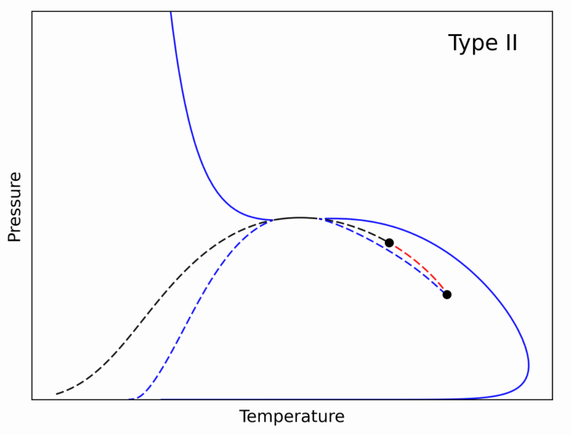
Incrementa la dificultad

- Correctas inicializaciones
- Puntos críticos

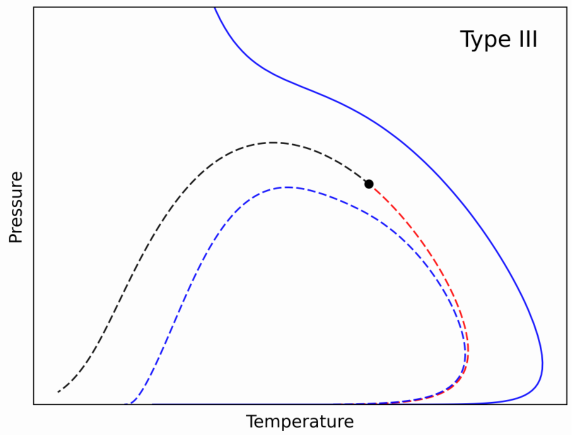
Envolventes trifásicas: Ejemplo de fluido de reservorio con asfaltenos



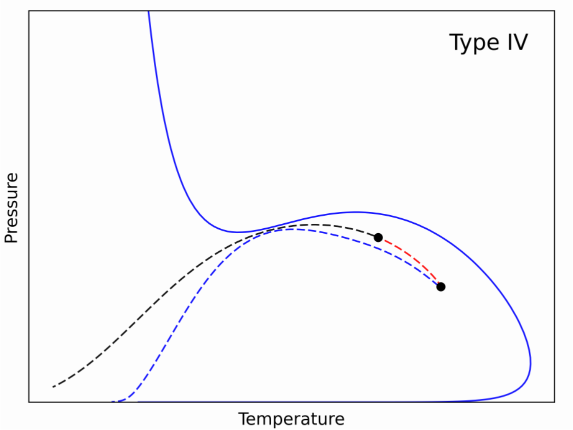
Envolventes trifásicas: Ejemplo de fluido de reservorio con asfaltenos



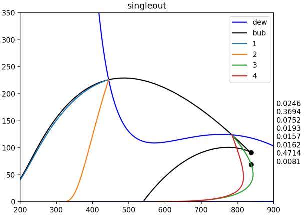
Envolventes trifásicas: Ejemplo de fluido de reservorio con asfaltenos

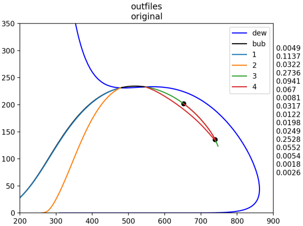


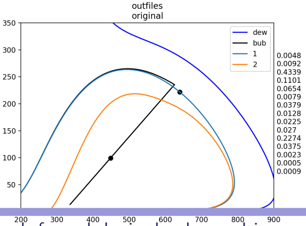
Envolventes trifásicas: Ejemplo de fluido de reservorio con asfaltenos



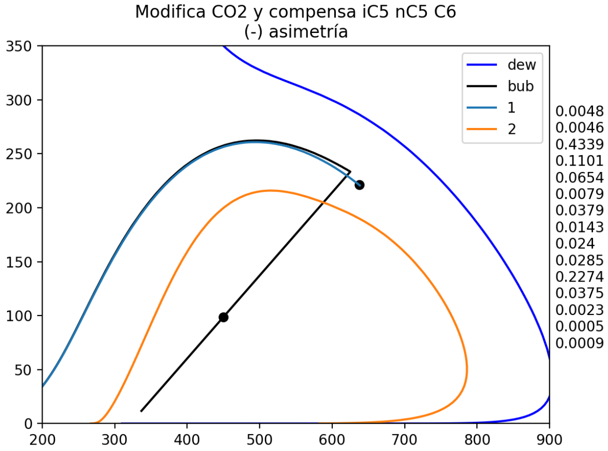
Envolventes trifásicas: Ejemplo de fluido de reservorio con asfaltenos



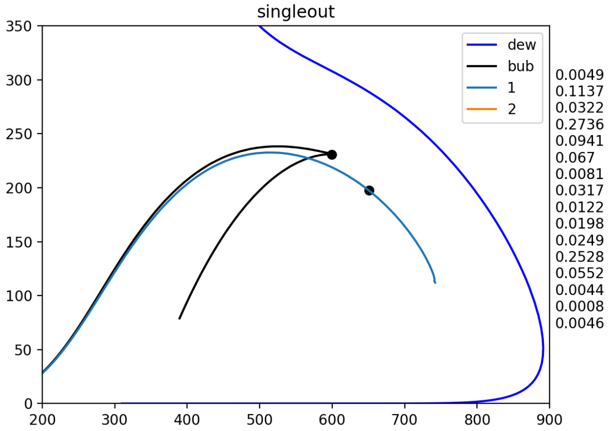




Envolventes trifásicas: Casos fallutos



Envolventes trifásicas: Casos fallutos



Envolventes trifásicas: Hidrocarburos-Agua

Society of Petroleum Engineers

SPE 77770

Phase Envelope Calculations for Hydrocarbon-Water Mixtures

Niels Lindeloff, Calsep, and Michael L. Michelsen, IVC-SEP, Technical University of Denmark

Envolventes trifásicas: Hidrocarburos-Agua

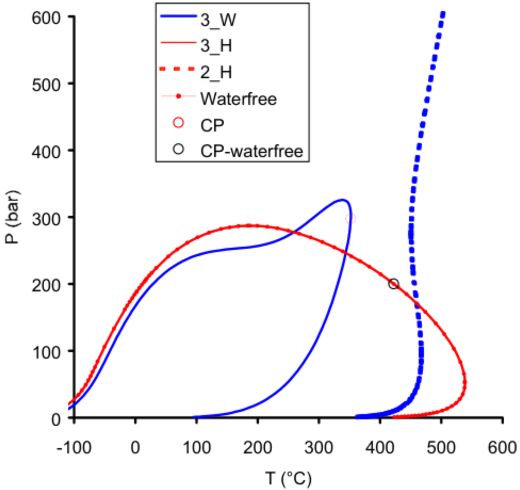


Figure 7: Comparison of phase diagrams for Fluid C with and without aqueous phase present

Envolventes trifásicas: Hidrocarburos-Agua

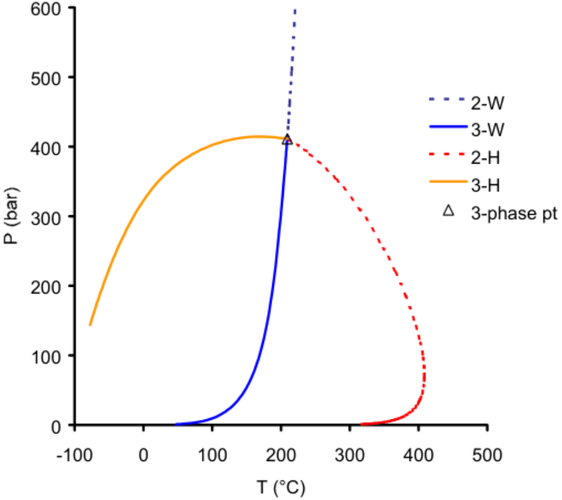


Figure 4: Phase diagram Fluid B with 8 % watercut.

Envolventes trifásicas: Hidrocarburos-Agua

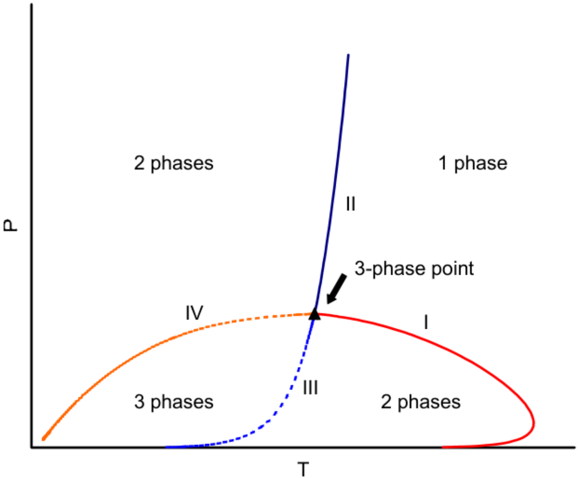


Figure 1: Generic PT phase diagram for a hc-water system

Envolventes trifásicas: Hidrocarburos-Agua

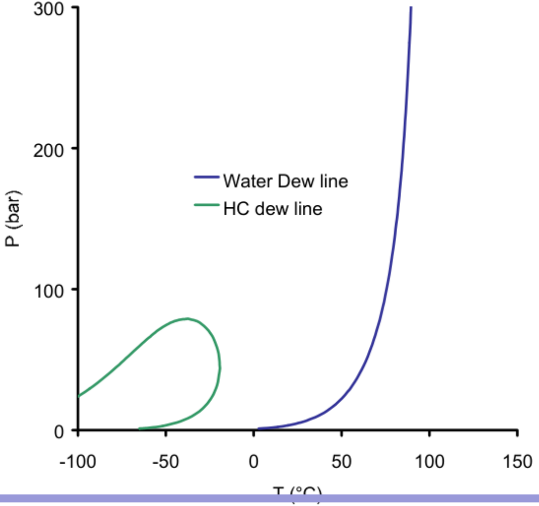


Figure 2: Phase diagram for Fluid A with 500 ppm water

Futuro

- Encontrar más casos.
- Perfeccionar algoritmos:
  - Incluir casos nuevos.
  - Asegurar convergencia de casos conocidos.