

ACIPET

Ajuste de la Ecuación de Peng-Robinson a Datos PVT Utilizando Algoritmos Genéticos.

F. E. Calvete G.*; Z. H. Calderón C.**

* Ingeniero de Petróleos, ECOPETROL, Casabe. fernando.calvete@ecopetrol.com.co

** Docente, Escuela de Ingeniería de Petróleos, Universidad Industrial de Santander. calderon@uis.edu.co

Derechos de Autor 2003, ACIPET

Este artículo técnico fue preparado para presentación en el X Congreso Colombiano del Petróleo organizado por ACIPET en Bogotá D.C. Colombia, 14-17 de Octubre de 2003.

Este artículo fue seleccionado para presentación por el comité técnico de ACIPET, basado en información contenida en un resumen enviado por el autor(es).

Resumen

Los yacimientos de fluidos composicionales además de ser muy valiosos presentan una gran complejidad e inestabilidad. En ingeniería de petróleo, se han utilizado ecuaciones de estado para predecir y estimar el comportamiento de las fases presentes en ellos, constituyéndose en la base fundamental de la simulación composicional. Sin embargo, su utilización es limitada porque pierden validez en diferentes rangos de temperatura y presión.

Por otro lado, se han utilizado algoritmos de análisis estadístico, basados en el método de mínimos cuadrados, con el fin de ajustar los datos predictivos de las ecuaciones de estado a los datos experimentales PVT y de esta manera obtener los parámetros que permitan utilizarla a diferentes condiciones de temperatura y presión. Estas metodologías, tiene gran aplicación y una alta precisión, pero ofrecen una gran desventaja: el ajuste estadístico fuerza a cambiar los parámetros de la ecuación de estado sin tener en cuenta que estos reflejan características físico-químicas de los compuestos que hacen parte de la mezcla de hidrocarburos.

El presente trabajo tiene como fin, presentar una metodología, basada en algoritmos genéticos, que permite generar los parámetros de la ecuación de estado que reproducen con exactitud los datos PVT de laboratorio; permitiendo posteriormente predecir el comportamiento de fases de los fluidos a condiciones de yacimiento.

Esta nueva metodología ajusta los Coeficientes de Interacción Binaria, los cuales son parte fundamental de la ecuación de estado y reflejan las interrelaciones moleculares de los compuestos químicos de los fluidos. Los algoritmos genéticos que se utilizan no permiten que los cambios de los parámetros sean forzados sino que lleguen a valores tales que

continúen representando las características físicas de los compuestos y permitan predicciones del orden del 99% de precisión como se muestra en los respectivos análisis de resultados.

Introducción

En simulación composicional es requisito fundamental tener una herramienta numérica que permita predecir el comportamiento termodinámico a condiciones de yacimiento. Esta herramienta es la ecuación de estado. La data PVT es utilizada para poder configurar y calibrar las ecuaciones de estado utilizadas en los simuladores composicionales. La evaluación matemática del desarrollo de un experimento PVT se dificulta, en ocasiones debido a la inestabilidad de fases en el equilibrio y a la pérdida de validez de las ecuaciones de balance de energía en zonas de alta presión.

Uno de los problemas que hacen más sensibles los resultados de la ecuación de estado es la descripción adecuada de la fracción pesada. Para suplir esta deficiencia se ha venido trabajando en métodos que permitan la caracterización apropiada de las propiedades de la misma para su posterior utilización en cálculos del equilibrio termodinámico. Las principales desventajas de estos procedimientos son su complejidad y la gran cantidad de tiempo de cómputo.

Básicamente la herramienta que se ha utilizado tradicionalmente en las diversas metodologías de ajuste es la *regresión de mínimos cuadrados* de los parámetros de la Ecuación de Estado (EdE)¹. Estas metodologías ajustan parámetros por separado a una función de error, producto de la diferencia entre los datos obtenidos experimentalmente con respecto a los arrojados por la ecuación de estado, sin embargo en algunas metodologías^{2,3} no se tiene en cuenta que los parámetros de ajuste representan características reales de los compuestos que conforman los fluidos de los yacimientos y al variarlos la EdE pierde representatividad aún cuando reproduce fidedignamente los datos PVT experimentales. Esta falta de representatividad del fluido puede causar una mala

evaluación de los fenómenos composicionales que puedan estar presentando en el yacimiento.^{4,5}

En términos matemáticos el problema del ajuste de los parámetros de la ecuación de estado a datos experimentales PVT es una *regresión multi-paramétrica y multi-objetivo*, ya que se pretende ajustar los valores de varios parámetros de la ecuación de estado de manera que permitan reproducir todos los datos experimentales y a su vez mantener los valores de estos parámetros dentro de rangos que les permitan seguir representando las propiedades físico-químicas de las especies químicas que componen los fluidos.

Aunque existen diversas metodologías que permiten realizar el ajuste de las ecuaciones de estado^{6,7,8}, algunas de ellas de manera automática⁹, otras basados en un fuerte trabajo de regresión con respecto a los datos experimentales de laboratorio¹⁰, se presentan grandes restricciones y problemas debido a la heurística y las condiciones matemáticas de las cuales fueron derivadas –principio de los estados correspondientes–¹¹. Estas metodologías permiten efectuar un ajuste estadístico que minimiza el error entre los datos experimentales y los predichos por la ecuación de estado, modificando los parámetros de la misma sin tener en cuenta los límites de estas variables, es decir sin respetar los valores de las propiedades termodinámicas de las especies químicas que están presentes en los fluidos de los yacimientos hidrocarburíferos. Al efectuar un ajuste con esta visión netamente estadística se logra un mínimo error pero la modificación de los parámetros de la ecuación le resta representatividad, ya que estos son los valores de las propiedades naturales de cada compuesto químico.

Ecuación de Estado

Una Ecuación de Estado (EdE) es la relación entre presión, volumen y temperatura, la cual permite estudiar el comportamiento físico de una sustancia con respecto a las variables mencionadas.

La ecuación de estado más conocida es la de los gases ideales:

$$P \cdot V = R \cdot T \quad \text{..... (Ec.1)}$$

Donde:

P: Presión absoluta a la que se encuentra el gas.

V: Volumen que ocupa una mol a las condiciones de P y T.

R: Constante Universal de los gases.

T: Temperatura absoluta a la cual se encuentra el gas.

La Ec.1 tiene poca aplicación práctica pues rara vez un gas se comporta como ideal; esto hizo necesario que se buscara el desarrollo de una ecuación de estado para gases reales.

Una de las ecuaciones de estado más usadas en la industria del petróleo en el estudio del comportamiento de fases, es la ecuación de Peng-Robinson la cual presenta la siguiente forma:

$$\left(P + \frac{a(T)}{V(V+b)+b(V-b)} \right) \cdot (V-b) = RT \quad \text{..... (Ec.2)}$$

Los parámetros de esta ecuación están relacionados con las propiedades de los elementos que conforman el fluido sometido a las condiciones de presión, temperatura y volumen y su interrelación entre las diferentes especies químicas presentes en la mezcla. Los parámetros de esta ecuación y las ecuaciones anexas a ésta que permiten definir el comportamiento de fases se dan en el anexo A.

Para aplicar la ecuación de Peng-Robinson a mezclas multicomponentes se debe conocer la composición de ésta. Esta composición se da en fracción molar de los componentes más livianos y una fracción pesada o fracción C_7^+ pues generalmente en el análisis que se hace a los hidrocarburos se identifica hasta el componente hexano.

Las propiedades físicas de los compuestos puros se pueden obtener de tablas existentes en la literatura, pero la fracción pesada es una mezcla indefinida a la cual se le deben conocer sus propiedades críticas (Presión, Volumen) y el factor acéntrico (ω)¹ para poder calcular los parámetros a y b de la ecuación de estado para la mezcla.

Las principales dificultades que se presentan, para aplicar una ecuación de estado a una mezcla de hidrocarburos reales son:

- Manejo de la Fracción pesada C_7^+ .
- Obtención de los coeficientes de interacción binaria (δ_{ij}).

Ajuste de Ecuaciones de Estado a Datos PVT

El proceso de ajuste ha sido muy estudiado y aplicado en la industria del petróleo⁶⁻¹⁰, para mejorar las predicciones realizadas con ecuaciones de estado y lograr reproducir el comportamiento real de mezclas de hidrocarburos de yacimiento. Aunque los trabajos son diversos, la mayoría se fundamenta en la minimización de una función de error aplicando métodos numéricos y estadísticos para variar propiedades de componentes como la fracción pesada, Coeficientes de Interacción Binaria (CIB) o parámetros propios de las ecuaciones de estado.

Entre estos trabajos se encuentra el realizado por Coats y Smart¹² donde se presenta un programa de ajuste de los parámetros de la ecuación de estado $-\Omega_a$ y Ω_b – de cualquier componente así como los CIB, y se busca reproducir simultáneamente los diferentes tipos de información experimental disponible para un fluido. Se utilizaron en este trabajo las EdE de Zudkevitch-Joffe¹³, Redlich-Kwong¹⁴ y la de Peng-Robinson¹⁵. En este caso la función a minimizar E dada por:

¹ El Factor acéntrico es una medida de la desviación del Principio de los Estados Correspondientes de una sustancia dada; Es característico de cada sustancia, y aumenta con el peso molecular de ésta.

$$E(\vec{\lambda}) = \sum_{i=1}^{ND} W_i \left| \frac{(d_i - dc_i)}{d_i} \right| \dots\dots\dots (Ec.3)$$

Donde $\vec{\lambda}$ es el conjunto de variables de regresión, d_i el dato experimental, dc_i el dato calculado, W_i el factor de peso que se asigna a la propiedad a la cual se está aplicando la ecuación y ND el número de datos experimentales con que se cuenta. El método de minimización utilizado es una extensión de la técnica de mínimos cuadrados, donde se definen regiones o rangos para cada variable y en cada iteración estas se acotan en subregiones cada vez más pequeñas hasta lograr que todas las variables alcancen un valor estable permaneciendo en la última subregión alcanzada. Es importante anotar que en este estudio se concluye que los parámetros más importantes y que deben estar presentes en cualquier ajuste son: Ω_a y Ω_b del metano y la fracción pesada junto con los CIB entre estos componentes.

Otro estudio realizado acerca de técnicas de regresión para representar el comportamiento de fases fue planteado por Agarwal y Nghiem³ en el cual se realiza un proceso de selección y descarte de variables, que permite utilizarlas o no como parámetros de ajuste dependiendo de la sensibilidad que a éstas presente la función objetivo –función a minimizar–, durante el proceso de ajuste. Dentro del conjunto de posibles parámetros de regresión se encuentran las propiedades críticas de los componentes de la mezcla y los CIB. La función objetivo utilizada fue:

$$E(\vec{\lambda}) = \sum_{i=1}^{ND} \left[W_i \frac{(dc_i - d_i)}{d_i} \right]^2 \dots\dots\dots (Ec.4)$$

Para minimizar la función objetivo se utilizó una modificación del algoritmo de mínimos cuadrados de Dennis¹⁶ que generaliza conceptos de optimización no lineal para seleccionar la dirección y el incremento de las variables. La EdE utilizada para realizar los cálculos fue la de Peng-Robinson.

Por otro lado Da Silva y Rodríguez² presentan una metodología diferente a las anteriores para hacer el ajuste. Ellos dividen el proceso en dos partes, una inicial donde mediante la variación de los CIB entre el metano y la fracción pesada se reproduce la presión de saturación. Posteriormente aplican un proceso de regresión no lineal utilizando la técnica de mínimos cuadrados ajustando los valores de Ω_a y Ω_b del metano y la fracción pesada hasta lograr reproducir con el menor error posible los datos experimentales de una fase. La función objetivo utilizada fue la siguiente:

$$E(\vec{\lambda}) = \sum_{i=1}^{ND} \left[\frac{(dc_i - d_i)}{d_i} \right]^2 \dots\dots\dots (Ec.5)$$

Los cálculos se llevan a cabo con la EdE de Peng-Robinson. Mediante esta técnica los autores lograron reproducir los datos experimentales satisfactoriamente, sin

embargo se presentaron desviaciones en el cálculo de la presión de saturación.

Este inconveniente fue posteriormente superado por Trujillo⁹ que utiliza en su metodología el mismo esquema de Da Silva y Rodríguez para llevar a cabo el ajuste, pero lo hace en forma iterativa. Trujillo incluye además un conjunto alterno de variables de regresión conformado por las propiedades críticas – P_c y T_c – y el factor acéntrico de la fracción pesada. La función objetivo trabajada por Trujillo fue la siguiente:

$$E(\vec{\lambda}) = \sum_{i=1}^{ND} (dc_i - d_i)^2 \dots\dots\dots (Ec.6)$$

En este trabajo se utilizaron datos experimentales de las regiones monofásica y bifásica obteniéndose resultados similares. Es importante anotar que el tiempo de cálculo empleado al utilizar datos de la región bifásica se incrementa notablemente debido a la complejidad de los cálculos de equilibrio.

En un estudio posterior, San Miguel⁷ retoma la metodología de Da Silva y Rodríguez aplicándola en forma iterativa pero utilizando técnicas de minimización diferentes a la de mínimos cuadrados, como son: mínimo valor absoluto –MVA– y mínimo valor absoluto modificado –MVAM–, para cada una de las cuales utiliza una función objetivo diferente. Para la técnica MVA se minimiza la sumatoria de las desviaciones de los valores absolutos:

$$E(\vec{\lambda}) = \sum_{i=1}^{ND} |d_i - dc_i| \dots\dots\dots (Ec.7)$$

Mientras que, para la técnica MVAM se minimiza:

$$E(\vec{\lambda}) = \sum_{i=1}^{ND} W_i (d_i - dc_i)^2 \dots\dots\dots (Ec.8)$$

Donde:

$$W_i = \frac{1}{|d_i - dc_i|} \dots\dots\dots (Ec.9)$$

El ajuste se lleva a cabo con datos experimentales de la región monofásica y bifásica alcanzando resultados satisfactorios con pequeñas desviaciones y reduciendo el tiempo de cálculo empleado cuando se trabaja en la zona de dos fases.

Esquemáticamente las diferentes técnicas estadísticas de ajuste se representan en la Fig.1.

Algoritmos Genéticos

Los Algoritmos Genéticos (AG) son métodos adaptativos que pueden ser utilizados para implementar búsquedas y problemas de optimización. Ellos están basados en los procesos genéticos de organismos biológicos como la selección, cruzamiento y mutación, codificando una posible

solución a un problema en un "cromosoma" compuesto por una cadena de bits o caracteres¹⁷.

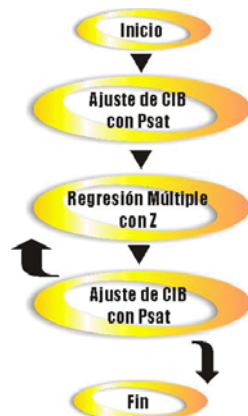


Fig. 1. Estructura jerárquica del ajuste estadístico de los parámetros de la ecuación de estado⁶.

Los Algoritmos Genéticos utilizan una analogía directa del fenómeno de evolución en la naturaleza. Trabajan con una población de individuos, cada uno representando una posible solución a un problema dado. A cada individuo se le asigna una puntuación de adaptación, dependiendo de que tan buena fue la respuesta al problema. A los más adaptados se les da la oportunidad de reproducirse mediante cruzamientos con otros individuos de la población, produciendo descendientes con características de ambos padres. Los miembros menos adaptados poseen pocas probabilidades de que sean seleccionados para la reproducción, y desaparecen.

Una nueva población de posibles soluciones es generada mediante la selección de los mejores individuos de la generación actual, emparejándolos entre ellos para producir un nuevo conjunto de individuos. Esta nueva generación contiene una proporción más alta de las características poseídas por los mejores miembros de la generación anterior. De esta forma, a lo largo de varias generaciones, las características buenas son difundidas a lo largo de la población mezclándose con otras. Favoreciendo el emparejamiento de los individuos mejor adaptados, es posible recorrer las áreas más prometedoras del espacio de búsqueda. Si el Algoritmo Genético ha sido diseñado correctamente, la población convergerá a una solución óptima del problema.

Los dos procesos que más contribuyen a la evolución son el cruce y la adaptación basada en la selección / reproducción. La mutación también juega un papel significativo pero es de menor relevancia en el funcionamiento de un Algoritmo Genético, aunque la mutación utilizada de una manera correcta puede ser de gran ayuda para la convergencia del Algoritmo, sin embargo ella no debe ser utilizada demasiado, ya que el Algoritmo Genético se puede convertir en una búsqueda al azar, pero su utilización asegura que ningún punto en el espacio de búsqueda tiene probabilidad 0 de ser examinado.

Terminología. Para comprender el funcionamiento de los algoritmos genéticos es necesario tener en cuenta los siguientes conceptos básicos:

Gen: Es un campo que puede tomar el valor de 0 ó 1.

Cromosoma: Es un conjunto de varios genes, cuya longitud (L) depende de la precisión con que se quiera trabajar. Poseen ciertos parámetros que son característicos de cada uno como su valor, su aptitud, porcentaje de aptitud también llamado probabilidad, entre otros. Llamados también individuos (Teoría de Darwin), y es sobre los cuales se aplican los operadores, que más adelante se describirán.

Generación: Es un conjunto de cromosomas de tamaño N. También conocida como población. También posee parámetros propios como la Aptitud de la generación.

Función de Aptitud: Es la función que nos determina que tan bueno o tan malo es un cromosoma.

Función Objetivo: Es la ecuación o modelo matemático que representa el problema a resolver en forma abstracta y aproximada.

Operadores. En la utilización de los algoritmos genéticos, se utilizan operadores que permiten efectuar el proceso de optimización numérica entre los datos ó población de trabajo del problema a tratar. Estos operadores son:

Selección: Simula el proceso de selección natural, en el que el más fuerte tiene mayor capacidad de supervivencia. En los AG la capacidad de supervivencia de un individuo está relacionado con el valor numérico de la función objetivo (*fitness of good*). Como el algoritmo genético es un algoritmo de carácter iterativo al igual que los métodos numéricos de optimización, esta selección se aplica en cada iteración, sobre una población de N individuos, para escoger los mejores N individuos de la siguiente iteración. Por consiguiente, en los N individuos escogidos para la siguiente iteración, pueden encontrarse dos o más individuos idénticos debido a que los individuos con bajo *fitness of good* tienen menos posibilidades de ser escogidos, en cambio, los que poseen altos *fitness of good* tienen más posibilidades de ser frecuentemente seleccionados.

Cruza: Una vez que los individuos fueron seleccionados se aplica a cada par de individuos escogidos, el operador de cruzamiento. En primer lugar, se escoge aleatoriamente un punto de corte que se aplicará al par de cromosomas de los individuos seleccionados. Luego, los caracteres más significativos, a partir del punto de corte, conservan sus posiciones relativas en el nuevo par de cromosomas y los caracteres restantes son intercambiados de los cromosomas progenitores a los nuevos dos cromosomas obtenidos.

Mutación: El proceso de mutación es básicamente una búsqueda aleatoria. Se selecciona aleatoriamente una posición específica dentro de un cromosoma, para cambiar luego el valor contenido en dicha posición. Como en la naturaleza, la probabilidad de que ocurra una mutación en los individuos de una especie es muy pequeña, en condiciones normales de vida, en el AG se trata de representar lo mismo con un valor de probabilidad muy baja para la aplicación del operador de mutación.

Estructura del algoritmo genético. Para la utilización de un algoritmo genético en un problema de optimización, se debe utilizar un esquema de trabajo como el que se da en la Fig.2. La utilización del algoritmo genético será efectiva si se escogen unos buenos datos iniciales, las reglas y criterios de cruce, mutación y estimación de la población final.

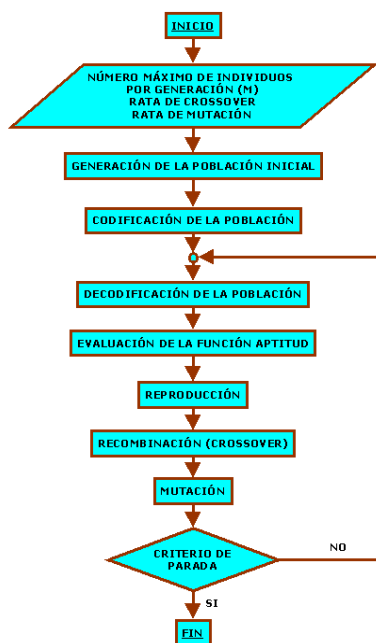


Fig. 2. Estructura jerárquica de un algoritmo genético¹⁸

Planteamiento del Problema

Las ecuaciones de estado son muy importantes en el estudio de fases, una de las más utilizadas debido a su sencillez y aproximación en los resultados producidos es la Ecuación de Peng-Robinson. Una de las propiedades físicas de la fracción pesada que más influye en el resultado de la ecuación de estado de Peng-Robinson, es el coeficiente de interacción binaria entre el Metano (C_1) y la fracción pesada (C_7^+) ($\delta_{C_1-C_7^+}$), por ello se debe tener especial cuidado en el cálculo de dicho parámetro; Otro parámetro de igual importancia en el comportamiento de la ecuación de estado es el factor acéntrico de la fracción pesada ($\omega_{C_7^+}$) el cual mide la desviación de la idealidad del pseudocomponente pesado.

Como se ha visto, los diversos desarrollos estadísticos ofrecen la posibilidad de acercar notoriamente los resultados de la ecuación de estado a la data PVT. Estos permiten

recalcular los coeficientes de interacción binaria y los factores acéntricos de manera efectiva. La desventaja aquí presente radica en que el esfuerzo numérico no tiene en cuenta los límites físicos que las variables deben tener, si se efectúan cambios sustanciales en los valores de los parámetros individuales, los compuestos a quienes ellos representan en la ecuación de estado dejan de ser y se transforman en otros. Otra desventaja de la metodología tradicional de minimización de cuadrados es la posibilidad de encontrar mínimos locales y dar respuestas falsas, la metodología de optimización basada en los algoritmos genéticos permite encontrar un mínimo global ya que utiliza como población la totalidad de las posibles respuestas en su desarrollo, permitiendo encontrar un mínimo global en los rangos estipulados para cada variable.

Metodología Propuesta

Para resolver el problema planteado se desarrolló una nueva metodología con Algoritmos Genéticos para ajustar el coeficiente ($\delta_{C_1-C_7^+}$) y el factor acéntrico ($\omega_{C_7^+}$) con los datos del experimento a composición constante.

Para ajustar el coeficiente ($\delta_{C_1-C_7^+}$) y el factor acéntrico ($\omega_{C_7^+}$), se tomo como base la metodología utilizada en la aplicación PVTLAB¹⁹, la cual se basa en la simulación de los experimentos PVT de gases condensados y aceites volátiles. Esta metodología utiliza la ecuación de estado y los cálculos flash de equilibrio entre la fase gaseosa y la fase líquida de un fluido composicional de yacimiento para simular pruebas experimentales de laboratorio PVT.

De manera general la Fig.3 muestra el desarrollo de los cálculos en la metodología planteada para trabajar con una ecuación de estado. Se muestra el cambio en la función de actualización de variables, donde se utiliza el algoritmo genético en reemplazo de la función tradicional basada en los parámetros de interacción binaria entre el metano y la fracción pesada ($\delta_{C_1-C_7^+}$) y el factor acéntrico de la fracción pesada y de esta manera optimizar la selección de estos parámetros.

Cálculo del volumen relativo. En el algoritmo genético se utilizó como población inicial los valores de $\delta_{C_1-C_7^+}$ calculados por el método de Varotsis²⁰ y el factor acéntrico de la fracción pesada ($\omega_{C_7^+}$) calculado por medio de las correlaciones de propiedades físicas de los hidrocarburos propuesto por Whitson²¹. De la población inicial de valores se generó cada nueva población por el cruce de los cromosomas binarios de estos datos. Para evaluar los individuos más aptos de la población se utilizó una función de aptitud definida por la comparación del error generado al evaluar los volúmenes relativos del experimento PVT dados por la ecuación de estado con los parámetros $\delta_{C_1-C_7^+}$, $\omega_{C_7^+}$ obtenidos genéticamente contra la data experimental. Luego de tener cada nueva población se efectuó el mismo procedimiento hasta alcanzar la convergencia definida por el cálculo flash.

La población de datos en cada iteración se define por medio de las correlaciones de Varotsis y Whitson, las cuales

son tomadas de experimentación con la fracción pesada, por lo cual representan fielmente el comportamiento de esta fracción a diferentes condiciones de temperatura y presión. Estas correlaciones experimentales aseguran al algoritmo genético tener siempre poblaciones que cumplan con los rangos de validez de los parámetros.

Cálculo de la presión de saturación. Para el cálculo de la presión de saturación el procedimiento con algoritmos genéticos es equivalente al efectuado para el volumen relativo, la función de aptitud que se define en este caso es el error entre la presión de saturación dada por la ecuación de estado y la obtenida en la experimentación PVT. A su vez se utilizan las mismas correlaciones de propiedades de Varotsis y Whitson para la fracción pesada.

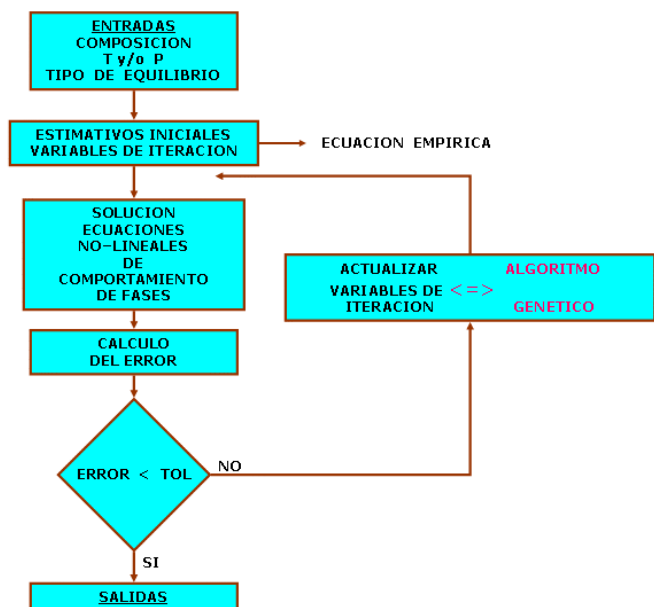


Fig.3. Cálculo del comportamiento de fases por medio de una Ecuación de Estado.¹⁹

Análisis de Resultados

Con el fin de validar la metodología y comprobar la consistencia de las predicciones del comportamiento de fases, se utilizaron las muestras Gas 2*, Gas 2**, Gas 5, Oil 1, Oil 2, Oil 3, Oil 4, Oil5, Oil 6 del estudio efectuado por Coats y Smart²², la muestra NS-1 de Whitson²³ y el fluido 88002 de Corelab²⁴.

Para la evaluación de los resultados se utilizó la desviación absoluta promedio definida por:

$$DAP = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{|Valormedido - Valorcalculado|}{Valormedido}}{n} \dots\dots\dots (Ec.10)$$

Para el cálculo del error porcentual se utilizó la siguiente expresión:

$$\%Error = \frac{P_{exp} - P_{calc}}{P_{exp}} * 100 \dots\dots\dots (Ec.11)$$

Los resultados numéricos y comparativos se muestran en el anexo B.

Conclusiones

- Se desarrolló una nueva metodología conjunta entre los Algoritmos Genéticos y la metodología utilizada en PVTLAB, para el ajuste de los Parámetros de la Ecuación de Estado de Peng-Robinson.
- Se verificó la gran influencia que tienen los parámetros de interacción binaria y el factor acéntrico de la fracción pesada en el comportamiento composicional de una muestra de gas condensado y/o aceite volátil.
- La nueva metodología habilita a la ecuación de estado de Peng-Robinson para efectuar cálculos volumétricos en la región bifásica, donde es bien sabido que esta ecuación presenta fallas debido a su baja definición de la fracción líquida.
- La nueva metodología se implementó dentro de una aplicación software llamada PVT_AG. Los resultados que se derivan de esta son la disminución del error relativo total y una mejor aproximación al valor experimental de la presión de saturación en comparación con los resultados obtenidos con PVTLAB.
- La gran ventaja de la utilización del método AG radica en el nivel de exactitud y precisión mucho mayor que con la metodología PVTLAB.
- La principal desventaja del nuevo método es el tiempo utilizado en los cálculos, esta desventaja se debe a la gran cantidad de iteraciones que los AG tiene que efectuar antes de dar la respuesta. Pero en este tipo de problemas de ajuste se requiere una mayor exactitud y precisión en la respuesta y este mayor tiempo de cálculo se compensa con la exactitud que se debe manejar en la simulación de millones de celdas en una malla composicional, disminuyendo así el tiempo total de cálculo en la simulación composicional.
- La metodología desarrollada permite mejorar de manera Meta-Heurística la selección de los parámetros de ajuste en la ecuación de estado.
- Se aplicaron los Algoritmos Genéticos al experimento de expansión constante, permitiendo simular por medio de la ecuación de estado las propiedades PVT de la muestra: Volumen relativo y presión de saturación.

Nomenclatura

$a(t)$	Coefficiente de la EDE.
b	Coefficiente de la EDE.
C_1	Metano.
C_{n+}	Fracción pesada.
d	Dato experimental.
dc	Dato calculado.
E	Función error.
P	Presión, MPa.
P_c	Presión crítica, MPa.
R	Constante universal de los gases.
T	Temperatura, °K.
T_c	Temperatura crítica, °K.
V	Volumen, m ³ .
V_c	Volumen crítico, m ³ .
W	Factor de peso.
λ	Vector de variables de regresión.
Ω_a	Parámetro de la EDE.
Ω_b	Parámetro de la EDE.
δ_{ij}	Coefficiente de interacción binaria.
ω	Factor acéntrico.

Superíndices y subíndices

ND	Número de datos experimentales
i	elemento
j	elemento

- Schlumberger (Geoquest - Intera Group). *PVTi Reference Manual. Version 99A*. Denver. Colorado. USA. 1999.
- Da Silva M. B., Rodriguez, F. "Automatic Fitting of Equation of State for Phase Behavior Matching". SPE 23703. (1992).
- Agarwal, Rajeev K.; Li, Yau-Kun and Nghiem, Long X. "A Regression Technique with Dynamic Parameter Selection for Phase Behavior Matching". *SPE* (Feb/90). p.115 - 120.
- Wang P. and Pope G.A. "Proper Use of Equations of State for Compositional Reservoir Simulation". Distinguished Author Series. *JPT* (Jul/01). p.74-81.
- Osorio Raúl. "Estrategias de Modelamiento Composicional de Fluidos en Yacimientos Colombianos de Aceite Volátil, Gas Condensado y Sistemas Cercanos al Punto Crítico". VIII Congreso Colombiano del Petróleo. Bogotá. 1999.
- Castiblanco Galvis, Iowany y Niz Velásquez Eider. *Ajuste de la Ecuación de Estado de Peng-Robinson a Datos PVT de Yacimientos Cercanos al Punto Crítico Mediante Regresión Múltiple*. Proyecto de Grado UIS. Bucaramanga (2000).
- San Miguel, Luis Alberto. *Métodos Alternos para el Ajuste Automático de las Ecuaciones de Estado*. Tesis de Maestría UNAM. México (1998).
- Merrill, R.C.; Hartman K.J. and Creek J.L. "A Comparison of Equation of State Tuning Methods". SPE 28598. (1994).
- Trujillo, C. W. *Ajuste Automático de la Ecuación de Estado de Peng-Robinson a Mezclas de Hidrocarburos*. Tesis de Maestría UNAM. México (1996).
- Christensen J. "Regression of PVT Data". *J. Can. Pet. Tech.* Vol. **38**(1999), p.57.
- Pedersen K.S.; Thomassen P. and Fredenslund A. "On the Dangers of Tuning Equations of State Parameters". *Chem. Eng. Sci.* (1988). p.269 - 278.
- Coats K.H. and Smart G. T. "Application of a Regression Bases EOS PVT Program to Laboratory Data". *SPE* (May/86). p.277-299.
- Zudkevitch D. and Joffe J. "Correlation and Prediction of Vapor - Liquid Equilibria with the Redlich-Kwong Equation of State". *AIChE Journal* (Jan/70). p.112-119.
- Redlich O. and Kwong J. "On the Thermodynamics of Solutions. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions". *Chemical Reviews* **44**(1949). p.233-247.
- Peng D.Y. and Robinson D.B. "A new Two-Constant Equation of State". *Ind. Eng. Chem. Fund.* **15**(1976). No.1. p.59-64.
- Dennis Jr, J.E. Non-Linear Least Squares and Equations. In *The State of the Art in Numerical Analysis*. (A.H. Jacobs Ed.) p. 269-312. Academic Press. London. UK. 1977.
- Goldberg, David. *Genetic Algorithms in search, optimization, and machine learning*. Adison Wesley. USA. 1989.
- Fernando E. Calvete G.; Nicolás Santos S.; Silvia P. Román V.; Claudia P. Soto T. "Computación Evolutiva: Algoritmos Genéticos y Simulated Annealing. Técnicas Meta-Heurísticas de Optimización en Ingeniería de Petróleos". *IX Congreso Colombiano del Petróleo*. ACIPET. Bogotá. Colombia. Octubre 2001.
- Fernando E. Calvete G.; Nohora P. Rangel. "Simulación de Experimentos PVT Para Yacimientos de Gas Condensado y Aceite Volátil". *VIII Congreso Colombiano del Petróleo*. ACIPET. Bogotá. Colombia. Octubre 1999.
- Varotsis N.; Stewart G.; Todd A.C. and Clancy M. "Phase Behavior of Systems Comprising North Sea Reservoir Fluids and Injection Gases". *JPT* (Nov/86).
- Whitson C.H. "Characterizing Hydrocarbon Plus Fractions". *SPEJ* (Aug/83).
- Coats, K.H. and Smart, G.T. "Application of a Regression Bases EOS PVT Program to Laboratory Data". *SPE* (May/80).
- Whitson C.H. and Torp S.B. "Evaluating Constant Volume Depletion Data". *JPT* (March/83).
- CORELAB Laboratories, Report 88002.

Tabla A-1. Ecuaciones y procedimientos numéricos utilizados en el Comportamiento de Fases presente en las mediciones PVT de laboratorio.

PROCEDIMIENTO	ECUACIONES
Cálculos Volumétricos y Relaciones PVT	Ecuación de estado de Peng-Robinson: $P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v(v+b)+b(v-b)} \quad \text{ó} \quad Z^3 - (1-B)Z^2 + (A-3B^2-2B)Z - (AB-B^2-B^3) = 0$ $a(T) = a(T_c) \cdot \alpha(T_r, \omega) \quad A = \frac{aP}{R^2 T^2} \quad \alpha = (1 + m(1 - T_r^{0.5}))^2$ $b(T) = b(T_c) \quad B = \frac{bP}{RT}$ $b(T_c) = 0.07780 \frac{RT_c}{P_c} \quad m = 0.379642 + 148503\omega - 0.1644\omega^2 + 0.016667\omega^3$
Cálculo del Equilibrio de Fases	Para el equilibrio: $f_i^V = f_i^L$ $\ln\left(\frac{f}{p}\right) = (Z-1) - \ln(Z-B) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \ln\left(\frac{Z+2.414B}{Z-0.414B}\right)$ $\Phi_i^V = \frac{f_i^V}{y_i p} \quad \Phi_i^L = \frac{f_i^L}{x_i p}$ $\ln \Phi_i^L = \frac{b_i}{b} (Z^L - 1) - \ln(Z^L - B) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left[\frac{2\psi_i}{\psi} - \frac{b_i}{b} \right] \ln \left[\frac{Z^L + 2.414B}{Z^L - 0.414B} \right]$ $\psi_i = \sum_j \left[x_j (a_i a_j \alpha_i \alpha_j)^{0.5} (1 - \delta_{ij}) \right] \quad \psi = \sum_i \sum_j \left[x_i x_j (a_i a_j \alpha_i \alpha_j)^{0.5} (1 - \delta_{ij}) \right]$ $a = \sum_i \sum_j x_i x_j a_{ij} \quad b = \sum_i x_i b_i$ $a_{ij} = (1 - \delta_{ij}) a_i^{1/2} a_j^{1/2}$
Cálculos Flash	1. Balance total de materia: $F = L + V$ 2. Balance de materia por componente: $Z_i F = X_i L + Y_i V$ Donde $\beta = \frac{V}{F}$ 3. Equilibrio termodinámico: $f_i^L = f_i^V$ Definiendo la relación de equilibrio como: $K_i = \frac{Y_i}{X_i} = \frac{\Phi_i^L}{\Phi_i^V}$ Reduciendo la expresión: $Y_i = \frac{K_i \times Z_i}{1 + \beta \times (K_i - 1)}$ y $X_i = \frac{Z_i}{1 + \beta \times (K_i - 1)}$ Aplicando el balance de materia en cada fase: $\sum_{i=1}^{N_c} Z_i = \sum_{i=1}^{N_c} X_i = \sum_{i=1}^{N_c} Y_i = 1$ De tal manera: $\sum_{i=1}^{N_c} X_i = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{Z_i}{1 + \beta \times (K_i - 1)} = 1$ Y por lo mismo: $\sum_{i=1}^{N_c} Y_i = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{K_i \times Z_i}{1 + \beta \times (K_i - 1)} = 1$

Tabla B-1. Comparación de resultados en el cálculo de la presión de saturación para sistemas de hidrocarburos por medio de diferentes procedimientos.

MEDICION	GAS 2*		GAS 2**		GAS 5		NS-1		RFL-88002	
EXPERIMENTAL	4465 (190°F)		4430 (190°F)		4857 (267°F)		6764.7 (280°F)		4535.7 (275°F)	
CALC (PR-EOS)	3680	17.58%	3664	17.29%	4494	7.47%	ND		ND	
CALC (PVTLAB)	3899	12.68%	3827	13.61%	4808	1.00%	6201	8.33%	4047.5	10.76%
CALC (PVTLAB_AG)	4435	0.68%	4415	0.34%	4840	0.35%	6678	1.28%	4435	2.22%
MEDICION	OIL 1		OIL 2		OIL 3		OIL 4		OIL 6	
EXPERIMENTAL	2534.7 (180°F)		4475 (176°F)		2612 (180°F)		2562 (250°F)		2760.7 (234°F)	
CALC (EDE PR)	ND (*)		3344	25.27%	2195	15.96%	2259	11.83%	2412.7	12.61%
CALC (AHMED)	ND (*)		4502	-0.603%	2289	12.37%	2640	-3.044%	2930.7	-6.16%
CALC (PVTLAB)	2494.3	1.59%	4478.5	-0.078%	2368.5	09.32%	2647.45	-3.335%	2907	-5.29%
CALC (PVTLAB_AG)	2530.8	0.15%	4470.5	0.10%	2561	1.95%	2534.6	1.07%	2780.1	-0.70%

(*) ND: Dato No Disponible.

Tabla B-2. Resultados para el Gas 2.

MEDIDA	EXP	PVTLAB	PVT_AG
δ_{C1-C7+}		0,061441	0,10366484
ω_{C7+}		0,58734834	0,53246336
PRESIÓN SAT	4465	3823,04	4434,63
DAP (%)		0,5862993	0,24740387
ERROR RELATIVO (%)		6,55397992	1,16634421
ERROR (PSAT) (%)		14,3778	0,68017086

Tabla B-3. Resultados de la fracción volumétrica para el Gas 2.

PRESIÓN	% FRACCIÓN DE VOLUMEN		
(PSIG)	EXPERIMENTAL	PVTLAB	PVT_AG
4440	4,35	0	0
4420	47,38	0	33,56353
4388	50,82	0	34,53989
4339	51,64	0	35,66077
4300	51,94	0	36,63072
4180	51,95	0	39,34753
3993	51,32	0	43,05863
3780	50,07	35,75683	46,79117
3490	47,86	43,69655	48,57951
2998	42,96	45,78994	41,18708
2505	36,75	36,51561	33,54723
2000	28,88	27,32753	25,7809
1485	20,2	18,15569	17,42014
1058	13,06	11,05435	10,73368

Tabla B-4. Interfase de la aplicación PVT_AG.



Tabla B-5. Comparación grafica de resultados de la aplicación PVT_AG.

