

PREDICCIÓN DE LA DENSIDAD DE GASES NATURALES USANDO LAS ECUACIONES DE ESTADO DE SOAVE-REDLICH- KWONG, PENG-ROBINSON Y AGA8-DC92

PREDICTION OF NATURAL GAS DENSITIES USING EQUATIONS OF STATE OF SOAVE-REDLICH-KWONG, PENG- ROBINSON AND AGA8-DC92

Jack Zavaleta Ortiz¹, Alex Pilco Nuñez², Sergio Villanueva Guzmán³

RESUMEN

En este trabajo se han usado las ecuaciones de estado (EOS) de Soave-Redlich-Kwong (SRK), Peng-Robinson (PR) y AGA8-DC92 (AGA) en la predicción de la densidad para diferentes gases naturales. Se recomienda el uso de las ecuaciones SRK y PR en el intervalo de 240 a 350 K y de 1 a 8 MPa (SRK) y de 1 a 15 MPa (PR), por producir errores menores al 3%, lo que es válido para los 613 puntos experimentales que se tomaron de la literatura; tal situación es ventajosa por ser las ecuaciones de estado más fáciles de manipular que la ecuación AGA. Sin embargo, todos los cálculos realizados demuestran que la ecuación AGA es superior a las ecuaciones SRK y PR en todo el rango de presión y temperatura de los datos experimentales usados. Se ha desarrollado una herramienta computacional para el cálculo de la densidad (ρ) y factor de compresibilidad (Z), que incorpora una base de datos de ρ experimental para diferentes gases naturales.

Palabras clave.- Gas natural, Ecuaciones de estado, Factor de compresibilidad, Densidad.

ABSTRACT

In this work the Soave-Redlich-Kwong (SRK), Peng-Robinson (PR), and AGA8-DC92 (AGA) equations of state have been used to predict the density of different natural gas mixtures. As a result, SRK and PR are strongly recommended for temperatures within the range 240-350 K. As for the pressure, SRK yielded better results within the range 1-8 MPa, whereas PR was more accurate for pressures ranging from 1 to 15 MPa. The errors obtained were smaller than 3% for all the 613 experimental points taken from the literature, which is convenient due to the fact that AGA is not easy to handle. Nevertheless, AGA displayed the best performance in every calculation and proved to be superior to either SRK or PR in the whole range of conditions used in this investigation. Finally, a computational tool has been developed to calculate density (ρ) and compressibility factor (Z). Such a tool incorporates an experimental database of ρ for different gas natural mixtures.

Keywords.- Natural gas, Equation of state, Compressibility factor, Density.

INTRODUCCIÓN

Existen aplicaciones muy importantes en la industria del gas natural como la transferencia de custodia (transacciones comerciales nacionales e

internacionales) donde es imprescindible la cuantificación precisa del flujo volumétrico a una determinada presión, temperatura y composición del gas natural. Una propiedad importante para tal aplicación, es el factor de compresibilidad Z ,

¹Ing. Químico Docente de la Facultad de Ingeniería Química y Textil, ²Ing. Químico Docente de la Facultad de Ingeniería Química y Textil, ³Alumno Integrante del Centro de Investigación y Desarrollo del Gas de la Facultad de Ingeniería Química y Textil de la Universidad Nacional de Ingeniería.

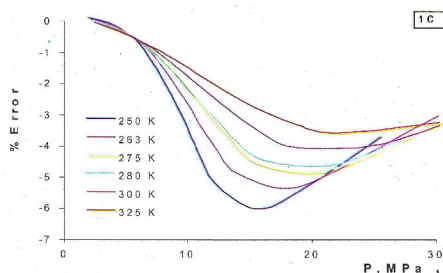
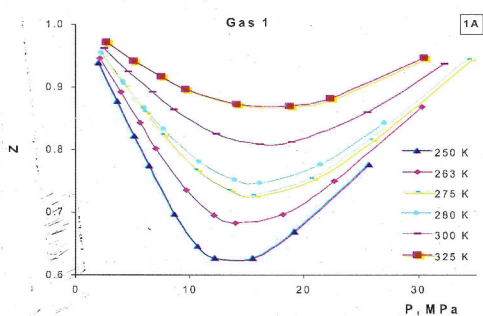
que se define como $Z = P_v / RT = PM / \rho RT$. Para su predicción se usan correlaciones especializadas como AGA 8-DC92 [1] y MGERG-88 [2] ecuaciones de estado (EOS) como Soave-Redlich-Kwong (SRK) y Peng-Robinson (PR).

Las ecuaciones AGA 8-DC92 y MGERG-88 son muy utilizadas en la industria del gas natural, a pesar que son más complejas que las EOS antes mencionadas, pero su uso se justifica cuando se desea conocer con mucha precisión los grandes volúmenes de gas natural que se transportan por los gasoductos.

En este trabajo se demuestra que las ecuaciones de estado SRK y PR poseen una buena capacidad predictiva de la ρ para un conjunto de gases naturales en un rango de temperatura de 240 a 350 K y presión de 1 a 15 MPa. Estos son rangos característicos en la industria del gas natural.

Base teórica y tratamiento de datos

Basándonos en los datos experimentales [3, 7] se han puesto a prueba la ecuación AGA 8-DC92 para determinar Z y las ecuaciones SRK y PR para calcular los errores relativos porcentuales de ρ .



Método AGA8-DC92

El método de Caracterización a Detalle AGA8-DC92 [1], es una excelente ecuación para el cálculo de Z y ρ del gas natural. Fue desarrollada en 1990 bajo la coordinación de la GRI (Gas Research Institute) con la cooperación de compañías de gas e institutos de investigación. Este método ha sido adoptado como un estándar internacional [8].

La ecuación se muestra a continuación:

$$Z = \frac{PM}{\rho RT} = 1 + \frac{DB}{K^3} - D \sum_{n=13}^{18} C_n^* T^{-u_n} + \sum_{n=13}^{58} C_n^* T^{-u_n} (b_n - c_n k_n D^{k_n}) D^{b_n} \exp(-c_n D^{k_n})$$

Donde B es el segundo coeficiente virial, C_n^* son coeficientes los cuales son funciones de la composición, D es la densidad reducida, K es el parámetro del tamaño de mezcla, T es la temperatura absoluta y u_n, b_n, c_n, k_n son constantes. A continuación se muestran las figuras Z de en función de la presión y de los errores relativos porcentuales de ρ con respecto a la presión para diferentes gases naturales.

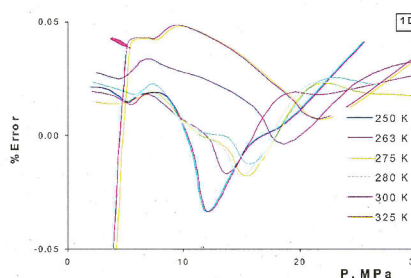
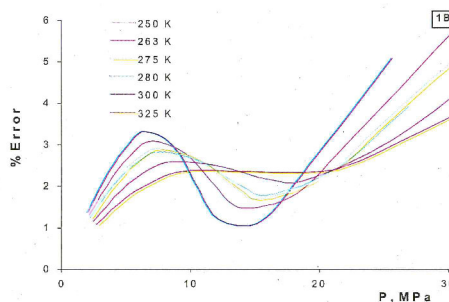


Fig. 1. Para el gas 1 (Referencia [3]) Leyenda: 1A, Z en función de p . 1B: EOS PR, 1C: EOS RKS, 1D: AGA8-DC92, errores relativos porcentuales de ρ .

Predicción de la densidad de gases naturales usando las ecuaciones de estado de Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson y AG8-DC92

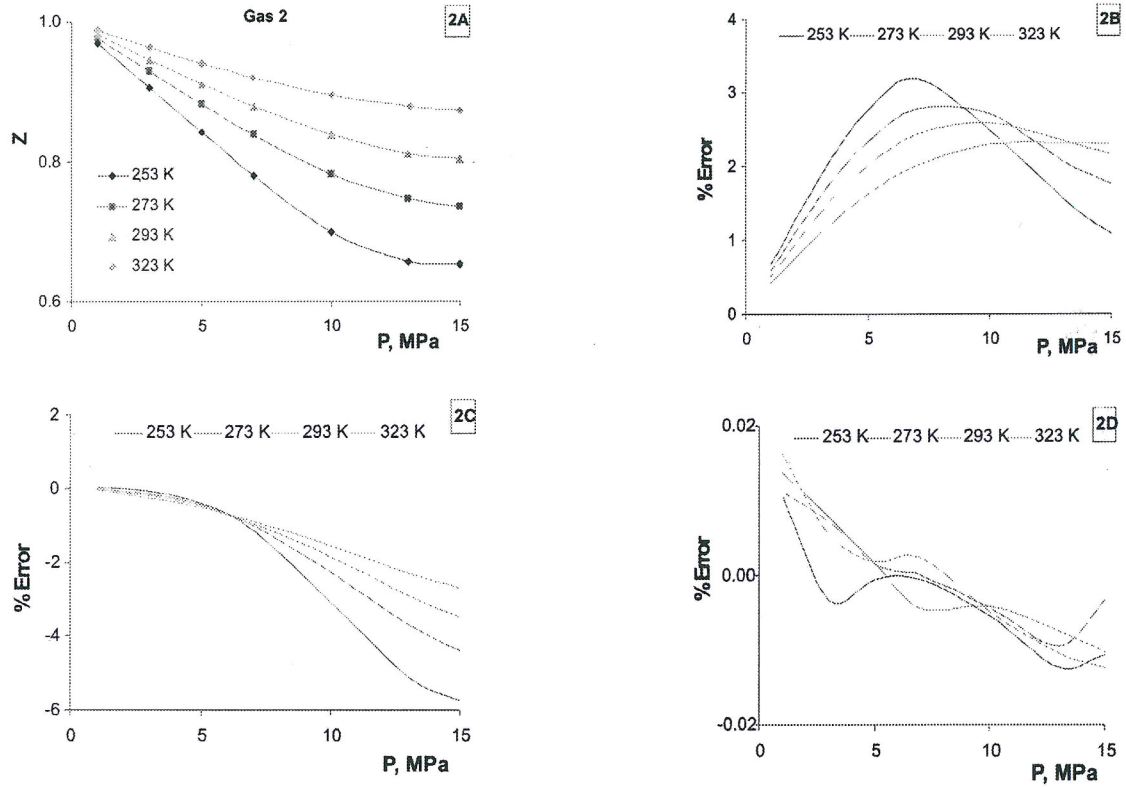


Fig. 2. Para el Gas 2 (Referencia [4]) Leyenda: 2A, Z en función de P. 2B: EOS PR, 2C: EOS RKS, 2D: AGA8-DC92, errores relativos porcentuales de ρ .

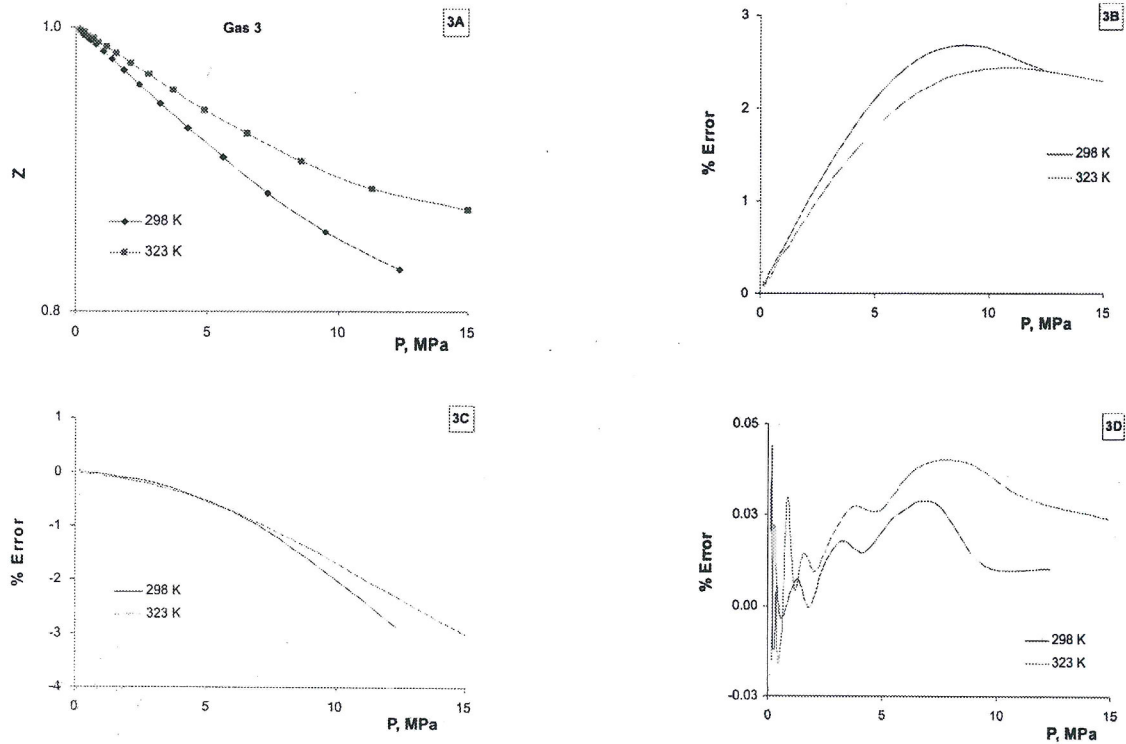


Fig. 3 Para el Gas 3 (Referencia [5]) Leyenda: 3A, Z en función de P. 3B: EOS PR, 3C: EOS RKS, 3D: AGA8-DC92, errores relativos porcentuales de ρ .

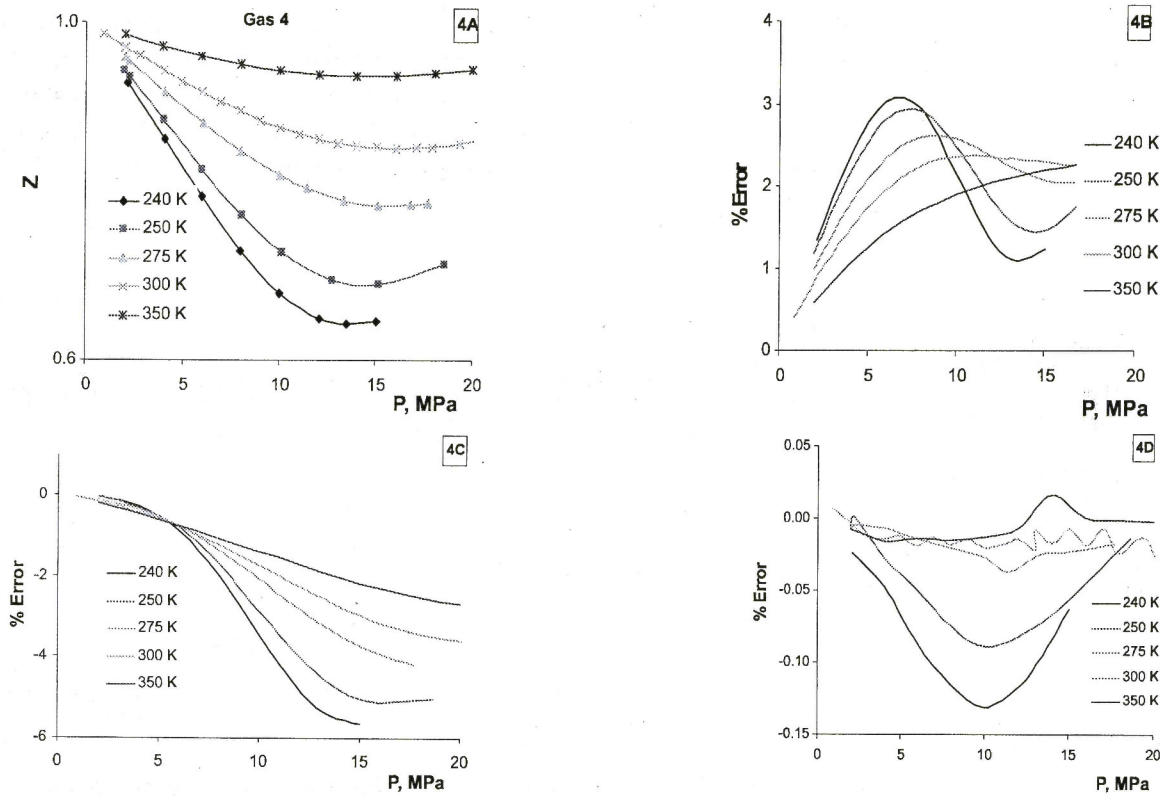


Fig. 4. Para el Gas 4 (Referencia [6]) Leyenda: 4A, Z en función de P . 4B: EOS PR, 4C: EOS RKS, 4D: AGA8-DC92, errores relativos porcentuales de ρ .

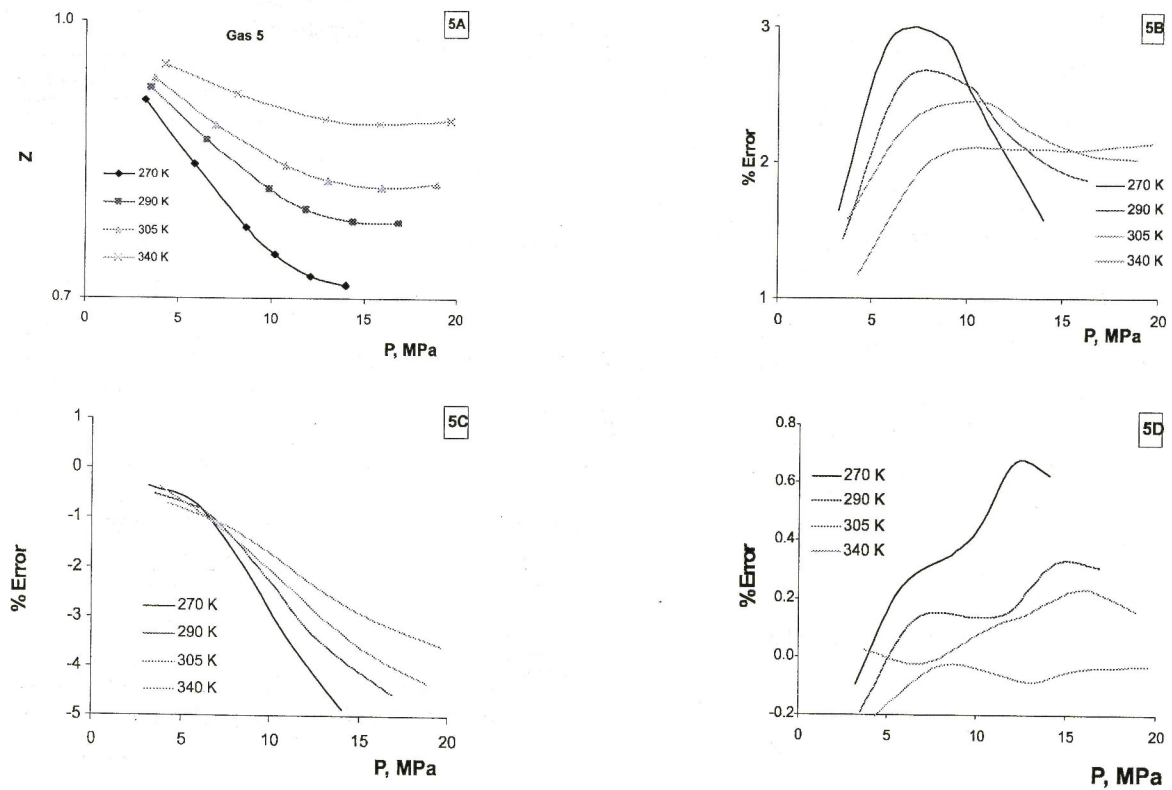


Fig. 5 Para el Gas 5 (Referencia [7]) Leyenda: 5A, Z en función de P . 5B: EOS PR, 5C: EOS RKS, 5D: AGA8-DC92, errores relativos porcentuales de ρ .

Los errores relativos porcentuales mostrados en las gráficas anteriores fueron calculados con la siguiente relación:

$$\%Error = \frac{Densidad_{calc} - Densidad_{exp}}{Densidad_{exp}} \times 100$$

En la fig. 6, se observa la interfaz desarrollada en Matlab para el cálculo del factor de compresibilidad de gas natural usada en este trabajo. En esta interfaz también se ha incluido una base de datos de densidades experimentales de gas natural.

%Composición molar

Methane	98.352
Nitrogen	0.841
Carbon Dioxide	0.066
Ethane	0.511
Propane	0.153
Water	0
Hydrogen Sulfide	0
Hydrogen	0
Carbon Monoxide	0
Oxygen	0
i-Butane	0.021
n-Butane	0.031
i-Pentane	0.008
n-Pentane	0.011
n-Hexane	0.005
n-Heptane	0.001
n-Octane	0.0003
n-Nonane	0
n-Decane	0
Helium	0
Argon	0

CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD (Z) PARA GAS NATURAL

Condiciones

P (MPa)

T (K)

Referencia: L. Capla et al

Gas-1, 253.15 K, 15.008 MPa

Densidad Experimental

E.O.S

AGA 8-DC92

Referencia: J. W. Magee, a W.

GU1

Densidad Experimental

Resultados

Peso Molecular (gr*mol ⁻¹)	<input type="text" value="16.314"/>
Factor de Compresibilidad	<input type="text" value="0.653694"/>
Super Factor de compresibilidad	<input type="text" value="15.0182"/>
Densidad Molar (Kmol/m ³)	<input type="text" value="10.9084"/>
Volumen Especifico Molar (m ³ /Kmol)	<input type="text" value="0.0916726"/>
Densidad (Kg/m ³)	<input type="text" value="177.959"/>
Volumen Especifico (m ³ /Kg)	<input type="text" value="0.00561927"/>

AGAUNI v 1.0, Autor: Sergio C. Villanueva Guzman
vcsergio@hotmail.com UNI-FIQT-2007

Fig. 6 Interfaz de Matlab para el cálculo del factor de compresibilidad de gas natural.

APÉNDICE

- Ecuaciones de RKS y PR, [9, 10].

	SRK	PR
u	0	$1 - \sqrt{2}$
w	$\frac{1}{2}$	$1 + \sqrt{2}$
b	$b_i(T) = \frac{0.0866RT_{ci}}{P_{ci}}$	$b_i(T) = \frac{0.0778RT_{ci}}{P_{ci}}$
a	$a_i(T) = \frac{0.42748\alpha(T_{ri}, \omega)R^2T_{ci}^2}{P_{ci}}$	$a_i(T) = \frac{0.45724\alpha(T_{ri}, \omega)R^2T_{ci}^2}{P_{ci}}$
α	$\alpha_i(T_{ri}, \omega_i) = [1 + (0.48 + 1.574\omega_i - 0.176\omega_i^2)(1 - T_{ri}^{1/2})]^2$	$\alpha_i(T_{ri}, \omega_i) = [1 + (0.375 + 1.54\omega_i - 0.27\omega_i^2)(1 - T_{ri}^{1/2})]^2$

- Regla de mezcla de van der Waals (vdw).

$$a_{vdw} = \sum_i \sum_j y_i y_j \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij})$$

$$b_{vdw} = \sum_i y_i b_i$$

$$a^* = \frac{P \cdot a_{vdw}}{R^2 \cdot T^2} \quad b^* = \frac{P \cdot b_{vdw}}{R \cdot T}$$

$$Z^3 + [(u+w-1) \cdot b^* - 1] \cdot Z^2 + [(u \cdot w - u - w) \cdot b^{*2} - (u+w) \cdot b^* + a^*] \cdot Z - (u \cdot w \cdot b^{*3} + u \cdot w \cdot b^{*2} + a^* \cdot b^*) = 0$$

$$P = \frac{R \cdot T}{v - b} - \frac{a}{(v + u \cdot b) \cdot (v + w \cdot b)}$$

CONCLUSIONES

En este trabajo se verificó la excelente aplicabilidad de la ecuación AGA8-DC92 para el cálculo de la densidad de los gases naturales, comprobando su uso generalizado en operaciones de transferencia de custodia. Los cálculos demuestran errores muy por debajo del 1% en la mayoría de casos. Se recomienda el uso de las ecuaciones de estado SRK y PR en el intervalo de 240 a 350 K y de 1 a 8 MPa (SRK) y de 1 a 15 MPa (PR), por producir errores menores al 3%, lo que es válido para los 613 puntos experimentales que se tomaron de la literatura [3-7].

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Instituto de Investigación de la Facultad de Ingeniería Química y Textil de la UNI por el financiamiento de este trabajo como parte de proyecto Diseño de Redes de Distribución para Gas Natural.

NOMENCLATURA

Gasi: es la mezcla de gas natural tomada de la referencia [i+2] donde i va de 1 a 5

p : Presión.

P_{ci} : Presión crítica.

T : Temperatura.

T_{ci} : Temperatura crítica.

T_{ri} : Temperatura reducida.

v : Volumen molar.

ρ : Densidad másica.

M : Masa molar

R : Constante universal de los gases.

u, w : Constantes de las EOS de PR y RKS.

a : Parámetro atractivo de las moléculas.

b : Covolumen molar.

ω : Factor acéntrico.

α : Parámetro dependiente de la temperatura y el factor acéntrico

a_{vdw} : Parámetro a para la mezcla usando la regla de mezcla de van der Waals.

b_{vdw} : Parámetro b para la mezcla usando la regla de mezcla de van der Waals.

y_i : Fracción molar.

k_{ij} : Parámetro de interacción binaria.

Z : Factor de compresibilidad.

EOS : Ecuación de estado

REFERENCIAS

1. **Starling K.E., Savidge J.L.**, "Compressibility Factors of Natural Gas and Other Related Hydrocarbon Gases", AGA Transmission Measurement Committee Report No. 8, 2nd edition, American Gas Association: Virginia, 1992.
2. **Jaeschke M., Humphreys A.E.**, "GERG Databank of High Accuracy Compressibility Factor Measurements", GERG Technical Monograph 4, Fortschritt-Berichte VDI Reihe 6, No. 251, 1991.
3. **Magee, J.M., Haynes, W.M., Hiza, M.J.**, "Isochoric (p, ρ, T) measurements for five natural gas mixtures from $T = (225 \text{ to } 350) \text{ K}$ at pressures to 35 MPa", J. Chem. Thermodynamics, 29, 1439-1454, 1997.
4. **Èapla L., Buryan P., Jedelský J., Rottner M., Linek J.**, "Isothermal pVT measurements on gas hydrocarbon mixtures using a vibrating-tube apparatus", J. Chem. Thermodynamics, 34, 657-667, 2002.
5. **Biswas, S. N., S., Bominaar, S.A.R. C., Schouten J.A., Michels, J.P. J., Ten Seldam, C.A.**, "Compressibility Isotherms of Simulated Natural Gases", J. Chem. Eng. Data, 35, 35-38, 1990.
6. **Chamorro C.R., Segovia J.J., Martín M.C., Villamañan M.A., Estela-Urbe J.F., Trusler J.P.M.**, "Measurement of the (pressure, density, temperature) relation of two (methane + nitrogen) gas mixtures at temperatures between 240 and 400 K and pressures up to 20 MPa using an accurate single-sinker densimeter", J. Chem. Thermodynamics, 38, 916-922, 2006.
7. **Jingjun Z., Prashant P., Saquib E., Mert A., Holste J. C., Kenneth R. H.**, " (p, V_m, T) and phase equilibrium measurements for a natural gas-like mixture using an automated isochoric apparatus", J. Chem. Thermodynamics, 38, 1489-1494, 2006.
8. **ISO 12213-2:2006**, "Natural gas. Calculation of compression factor". Part 2: Calculation using molar-composition analysis.
9. **E. Poling, B., M. Prausnitz, J., O'Connell, J.P.**, "The Properties of Gas and Liquids", Fifth edition, McGraw-Hill, 2001.
10. **Smith J.M., Van Ness H.C., Abbott M.M.**, "Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química", Sexta edición en español, Editorial McGraw-Hill, Mexico, 2003.

Correspondencia: awpilco@uni.edu.pe

Recepción de Originales: agosto 2006

Aceptación de Originales: octubre 2006

