〈응용논문〉 DOI:10.3795/KSME-B.2010.34.10.947 ISSN 1226-4881

다성분 탄화수소혼합물 포화물성해석 수렴도 향상 연구

신창훈*† · 안승희* · 이정환* · 성원모**
* 한국가스공사 연구개발원, ** 한양대학교 자원환경공학과

Study on the Convergency Improvement Method for the Saturation-Property Calculation of Multi-Component Hydrocarbon Systems

Chang Hoon Shin*†, Seung Hee An*, Jeong Hwan Lee* and Won Mo Sung**
* Research & Development Division, Korea Gas Corporation,
** Dept. of Natural Resources and Environmental Engineering, Hanyang Univ.

(Received May 31, 2010 ; Revised July 27, 2010 ; Accepted July 27, 2010)

Key Words: Multi-phase Behavior(다상거동), Saturation Property(포화물성), Dew Point(이슬점), Bubble Point (기포점), Chopping Method(썰기법), Forward Guessing(전진추정)

초록: 대부분의 석유·가스전은 탄화수소혼합물과 일반기체 등 저류층 내부 유체의 성분조성에 따라 저류층내 상거동 특성이 매우 민감하게 변화한다. 석유·가스전의 평가와 개발·생산계획을 수립함에 있어, 이러한 상거동에 따른 기체와 액체의 성분비 결정과 석유와 가스의 이상유동 해석을 위한 저류유체의 PVT관계 및 포화물성의 규명은 필수적이다. 이중에서 특히, 포화물성의 계산은 수렴성이 나빠, 이상유동의 해석적 연구에 있어서 많은 어려움을 초래하는 원인이 되고 있다. 이에 본 연구에서는 포화물성의 계산에 있어서 수렴도 향상을 위한 새로운 초기값 추정 방법과 근 탐색 알고리듬을 제안하고, 성능비교 등을 통한 수렴도 영향인자에 대한 분석을 시도하였다. 결과적으로, 제안된 방법을 통해 포화물성 해석 수렴성을 개선하였고 GUI 기반의 새로운 다성분 다상거동해석 시뮬레이터의 개발에 적용하였다.

Abstract: Most oil and gas reservoirs, which have some light hydrocarbon components, show sensitive phase behavior in response to changes in the composition of the internal fluid. When evaluating and developing plans for oil and gas fields, flash calculation, PVT analysis, and saturation-property calculation are necessary for analyzing reservoir characteristics and pipeline flows. In general, the determination of saturation properties such as dew point and bubble point is considered a difficult task because of the poor convergence of the calculation methods. In this study, several new initial-value-guessing methods and root-finding methods are proposed; parametric analysis were carried out to verify the improvement in convergence. Finally, these new ideas and methods were successfully applied to the new GUI based multi-phase behavior simulator.

- 기호설명 -

α : 완화계수
f : 퓨개시티
f_i : i 노드의 함수값, 근
k_{ij} : 이심인자
K_i : i번째 성분의 평형비
p : 압력
R : 기체상수
T : 온도
T_r : 환산온도(T/T_c)
V : 체적
ω : 이심인자
x : 입력값, 독립변수
x_i : i번째 액상성분의 몰수
y_i : i번째 기상성분의 몰수
z_i : i번째 혼합물의 몰수
Z : 압축(성)인자
Φ : 퓨개시티 계수

첨자
b : 기포점
d : 이슬점
C : 임계점(값)

† Corresponding Author, chshin@kogas.re.kr
© 2010 The Korean Society of Mechanical Engineers

L : 액상
V : 기상

1. 서 론

지하 지층에 함유된 가스가 역응축 현상을 발생시키는 가스-컨덴세이트 저류층은 물론, 대부분의 석유·가스전은 탄화수소혼합물과 CO_2, N_2, H_2O 등 저류층 내부 유체의 성분조성에 따른 상거동 특성이 매우 민감하게 변화한다. 석유·가스전의 매장량 평가와 배관을 통한 유체의 수송 및 저류층 개발·생산의 관점에서, 이러한 저류층 유체의 성분변화와 다상거동 특성의 규명은 필수적으로, 기본적인 다성분 혼합물의 PVT 관계 해석은 물론, 온도와 압력조건의 변화에 따른 가스와 오일의 성분비 결정을 위한 Flash 계산과 각 압력과 온도조건에서의 이슬점 및 기포점을 계산하는 포화물성의 규명이 절실히 요구된다.

일반적으로 다성분 유체의 PVT 상거동 해석은, SRK(Soave-Redlich-Kwong) 방법과 Peng-Robinson 방법 등이 널리 이용되어 많은 경우에 좋은 결과를 제시하는 것으로 알려져 있다. 그러나 다상유동 해석에서 필수적으로 요구되는 다른 중요 물리량 중의 하나인 포화물성의 계산은 수렴성이 나빠, 여전히 다상유동의 해석적 연구에 많은 어려움을 초래하는 원인이 되고 있다. 이에 본 연구에서는 포화물성의 계산에 있어, 수렴도 향상을 위한 새로운 초기값 추정 방법과 근 탐색 방법을 제안하고, 각각의 성능과 특성을 비교하여 수렴도 영향인자에 대한 분석과 수렴도 향상을 달성하였다. 궁극적으로 본 연구에서 검토, 개발된 방법들은 본 연구에서 개발하고 있는 GUI 기반의 다성분 다상거동해석 통합 시뮬레이터의 개발에 적용되었다.

2. 다성분 다상해석 이론

본 연구에서는 기본적으로 다성분 혼합물의 PVT 관계해석을 위해 Peng-Robinson 모델을 적용하였고, 주어진 열역학적 상태에서 액체와 기체, 각 성분의 몰분율을 결정하기 위한 Flash 해석 루틴 및 이슬점과 기포점의 포화물성(Saturation Property) 계산을 위한 상평형도 해석모듈을 각각 독립적으로 구성하였다. 각 독립모듈들은 다성분 탄화수소혼합물의 다상거동 해석을 위해 통합되었고, 해석결과의 직관적인 관찰과 향후 사용자 편의를 위해, 별도의 그래프 출력모듈을 부가하여 통합적인 GUI(Graphic User Interface) 기반의 그래프 처리기능을 갖춘 다성분 다상거동해석 시뮬레이터로 개발되었다.

2.1 PVT 상태방정식 (EOS) 해석

주어진 열역학적 상태에서 저류층 내부 유체의 압력-부피-온도(PVT) 관계 결정을 위해 본 연구에서는 상태방정식 (Equation Of State, EOS)해석을 기본 해석방법으로 도입하였다.

상태방정식은 초기에 보일샤를의 법칙, 즉 이상기체 상태방정식을 기반으로 한 기체상에만 적용이 가능한 PVT 관계식이었다. 이후 van der Waals는 이 식에서 이상기체의 두 가정을 제거하기 위하여, 기체분자의 체적항, b(co-volume)와 분자인력을 고려하기 위한 보정항, a를 부가하여 이를 실제 기체에 적용할 수 있게 변형한 경험식을 제시하였다. 실제 van der Waals EOS는 단순히 상태방정식을 실제기체에 적용할 수 있게 한 것에 머물지 않고, 적절한 매개변수항의 선정을 통하여 상태방정식이 기체뿐만 아니라 액체의 PVT 거동을 해석하는데도 적용될 수 있게 하였다는 점에서 더 큰 의미를 가진다.(1) 이후 Redlich와 Kwong 등이 다시 van der Waals EOS의 정확도를 개선한 새로운 방정식을 제안하였으며, 이를 Soave가 보다 범용적인 형태로 발전시켜, 현재 널리 사용되는 SRK EOS로 발전시켰다.(2) 이후 Peng과 Robinson은 SRK EOS를 임계영역에서 보다 정확한 근사가 가능하도록 개선하여, 현재까지 알려진 상태방정식 중 가장 범용적이고 신뢰할 수 있는 것으로 알려진 다음 식 (1)의 Peng-Robinson EOS를 제안하고 효과를 입증하였다.(3) 이때, 순수성분의 증기압 예측의 신뢰도 향상을 위해 도입한 무차원 수정인자(Dimensionless Correction Factor) α는 다음 식 (2)의 정의를 도입하여 적용하였다.

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha}{(V+b)^2 - cb^2} \tag{1}$$

$$\alpha = (1 + m(1 - T_r^{0.5}))^2$$

$$where,\ m = m_0 + m_1(1 + T_r^{0.5})(0.7 - T_r) \tag{2}$$

$$m_0 = 0.378893 + 1.4897153\omega - 0.17131848\omega^2 + 0.0196554\omega^3$$

$$Z^3+(B-1)Z^2+(A-3B^2-2B)Z-(AB-B^2-B^3)=0 \quad (3)$$

본 연구에서는 탄화수소계 성분물질 이외에 CO_2, N_2, H_2O 등을 포함한 혼합물을 해석대상으로 하고 있어, 이러한 물질들이 포함되는 경우에 보다 좋은 결과를 얻는 것으로 알려진 Nikos et al.의 Binary Interaction Coefficient를 도입하고, 기타 계수와 해석방법은 ISO/FDIS-18453을 준용하였다.[4] 또한, 환산온도(Reduced Temperature, T_r) 0.7 이하에서 증기압 계산의 정확도 향상을 위해 Stryjek과 Vera가 제안한 조정계수를 도입하였으며, Jhaveri와 Youngren이 Peng-Robinson EOS가 저류유체에 대하여 압축인자 계산에서 기체의 경우 3~5%, 액체의 경우 6~12% 오차를 발생시킴을 밝히면서 제안한 부피보정계수를 도입, 적용하였다.[5,6] 마지막으로 분자량이 무거운 성분이나 임계점 압력이 낮은 성분들의 경우, van der Waals EOS의 임계점 거동에 대한 가정이 적용될 수 없다는 점을 보완하고자 C_{7+}의 물리적 특성들을 바탕으로 Peng-Robinson EOS의 계수들을 최적화하는 Ahmed의 방법을 도입하여 적용하였다.[1]

최종적인 상태방정식의 수치해석을 위해, 식 (1)은 압축성인자(Compressibility Factor, Z)의 함수로 표현된 식 (3)과 같은 3차방정식 형태로 변환되고, Cardano's Formulation 방법을 적용하여 EOS 해석이 수행되었다. 여기서, C_6이하의 탄화수소 성분들에 대한 S_i값과 이심인자, 임계값 등 상기 식의 계산에 요구되는 계수와 상수 값들은 ISO-18453[7]에서 제시된 것을 적용하였다.

2.2 상평형(Flash) 해석

다성분 탄화수소계 혼합물의 매장량분석과 다상유동 해석을 위해서는 주어진 열역학적 조건에서 각 성분의 액상과 기상의 몰분율(Mole Fraction)을 계산하여야 한다. 이러한 계산을 일반적으로 플래쉬(Flash) 계산이라 일컬으며, 기본적으로 식 (4)와 같은 기체와 액체의 상평형 상태에서의 평형비(Equilibrium Ratio, K) 계산과 연계된다. 본 연구에서는 고압영역에서의 상평형 계산을 위해, Peng-Robinson EOS를 기반으로, 주어진 조건에서 각 상의 퓨개시티(Fugacity, f) 평형 개념을 통해 해석을 수행하였으며, 이 때 사용된 퓨개시티 계수(Fugacity Coefficient, ϕ)의 계산식은 식 (5)와 같다.

$$K_i=\frac{y_i}{x_i}=\frac{Mole\ Fraction\ of\ Vapor\ i}{Mole\ Fraction\ of\ Liquid\ i} \quad (4)$$

$$\begin{aligned}\ln(\phi_i^L)&=\frac{b_i}{b_{mix}}(Z^L-1)-\ln(Z^L-B)-\frac{A}{2.82843B}\left(\frac{2\psi_i}{\psi}-\frac{b_i}{b_{mix}}\right)\cdot\ln\left(\frac{Z^L+2.414B}{Z^L-2.414B}\right)\\ \ln(\phi_i^V)&=\frac{b_i}{b_{mix}}(Z^V-1)-\ln(Z^V-B)-\frac{A}{2.82843B}\left(\frac{2\psi_i}{\psi}-\frac{b_i}{b_{mix}}\right)\cdot\ln\left(\frac{Z^V+2.414B}{Z^V-2.414B}\right)\end{aligned} \quad (5)$$

$$K_i=\frac{p_{ci}}{p}Exp[5.37(1+\omega_i)(1-\frac{T_{ci}}{T})] \quad (6)$$

$$f(L,V)=\sum_i^n\frac{z_i(K_i-1)}{L+VK_i}\ ,\ L+V=1 \quad (7)$$

주어진 조건하에서 임의 계의 열역학적 평형은 깁스 자유에너지(Gibb's Free Energy)가 최소로 될 때($dG=0\ \ d^2G=0$) 달성된다. 즉, 평형상태에서는 각 성분의 액상과 기상의 화학적 포텐셜(Chemical Potential) 또는 이와 등가인 퓨개시티가 같아지며, 그 때의 평형비에 따른 분율이 각 성분의 상별 분율이 된다. 따라서 평형상태가 달성되는 때의 평형비를 구하는 것이 플래쉬 계산의 일차적인 목적이다. 이를 위하여, 우선 주어진 조건하에서 액상과 기상의 초기 분율을 가정하고, 이 값을 기준으로 식 (6)의 Wilson's Correlation을 적용하여 초기 평형비를 계산한다.[1] 본 연구에서는 탄화수소계 성분외 CO_2, N_2, H_2O 등의 초기평형상수 예측을 위하여 별도로 Varotsis Correlation 방법을 적용하였다.[8] 이렇게 결정된 초기값들을 바탕으로 실제의 평형비 결정은, 다음 식 (7)의 상평형 방정식을 Newton-Raphson 방법에 기초한 연속대입법(Successive Substitution Method, SSM)을 통하여 반복 계산함으로써 달성하였다.

그러나 초기에 가정된 평형비가 물리적으로 타당하여 평형상태로 수렴되는 경우는 극히 드물며, 이때 가정된 평형비와 산출된 몰수가 타당한 것인지는 앞의 식 (5)의 퓨개시티 계수를 계산하여 퓨개시티를 비교함으로써 확인할 수 있다. 따라서 대부분의 경우 식 (4)의 평형비를 적절한 방법으로 다시 산정한 후 초기 평형비 값을 대체하여 전체 플래쉬 계산을 반복적으로 수행함으로써, 최종적인 평형비의 수렴해를 산출하여야 한다. 이때, 평형비의 재산정 방법이 해의 수렴에 매우 중요하며, 수렴해를 구하기 위해 본 연구에서는 식 (8)과 같은 SSM 방법과 식 (9)의 Newton-Raphson 반복법을 각각 전개하여 적용하였다. 결과적으로 반복 계산이 수렴하는 경우, 즉 액상과 기상의 퓨개시티가 거의 같아져서 상평형

이 이루어진 것으로 판단할 수 있는 경우, 해당 평형비는 수렴 값으로 판단될 수 있고 이때 각상의 몰수 역시 수렴 값으로 해석될 수 있어, 최종적인 상평형 해석의 결과로 산출하였다.

$$K_i = K_{i_o} \cdot \frac{f_{i_o}^L}{f_{i_o}^V} \tag{8}$$

$$K_i = K_{i_o} - \frac{f(K_{i_o})}{f'(K_{i_o})}$$

$$where\ , f(K_i) = K_i - \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V} = 0 \tag{9}$$

$$f'(K_i) = 1 - \frac{\frac{\partial \phi_i^L}{\partial K_i} \cdot \phi_i^V - \phi_i^L \cdot \frac{\partial \phi_i^V}{\partial K_i}}{(\phi_i^V)^2} = 0$$

2.3 포화물성(Saturation Property) 해석

다성분 탄화수소계 혼합물의 포화물성, 즉 이슬점 압력과 온도 및 기포점 압력과 온도의 결정은 다상유동 해석이나 천연가스와 석유의 품질조건 등에서 매우 중요하다. 이슬점과 기포점의 개념과 정의를 바탕으로 산출된 혼합물 분율과 평형비 관계 및 각 물리량을 계산하기 위한 기본방정식은 각각 다음의 식 (10), (11)과 같다. 이슬점의 경우, 기상의 분율(V)이 '1', 즉 100%이고 이때 액상(L)은 '0'인 상태이고, 기포점의 경우는 반대로 기상의 분율이 '0'이고 액상의 분율이 '1'이 된다. 각각의 조건에서 유도된 평형비식은 수렴해를 찾기 위해 식 (10), (11)과 같이 각각 평형비 해석을 위해 Newton-Raphson 반복법이 적용되었다.[1,9]

$$K_i = K_{i_o} - \frac{f(K_{i_o})}{f'(K_{i_o})}, f(K_i) = \sum_i^n \frac{z_i}{K_i} - 1 = 0, f'(K_i) = -\sum_i^n \frac{z_i}{K_i^2} \tag{10}$$

$$K_i = K_{i_o} - \frac{f(K_{i_o})}{f'(K_{i_o})}, f(K_i) = \sum_i^n z_i K_i - 1 = 0, f'(K_i) = \sum_i^n z_i \tag{11}$$

$$f(p_d) = \sum_i^n \left[\frac{f_i^V}{\phi_i^L} \right] - p_d = 0 \quad \Rightarrow \quad \therefore\ p_d = p_{d_o} - \frac{f(p_{d_o})}{\partial f(p_{d_o})/\partial p_{d_o}}$$

$$where\ , \frac{\partial f(p_d)}{\partial p_d} = \sum_i^n \left[\frac{\phi_i^L \cdot (\partial f_i^V/\partial p_d) - f_i^V \cdot (\partial \phi_i^L/\partial p_d)}{(\phi_i^L)^2} \right] - 1 \tag{12}$$

$$f(p_b) = \sum_i^n \left[\frac{f_i^L}{\phi_i^V} \right] - p_b = 0 \quad \Rightarrow \quad \therefore\ p_b = p_{b_o} - \frac{f(p_{b_o})}{\partial f(p_{b_o})/\partial p_{b_o}}$$

$$where\ , \frac{\partial f(p_b)}{\partial p_b} = \sum_i^n \left[\frac{\phi_i^V \cdot (\partial f_i^L/\partial p_b) - f_i^L \cdot (\partial \phi_i^V/\partial p_b)}{(\phi_i^V)^2} \right] - 1 \tag{13}$$

주어진 조건, 즉 혼합물의 성분조성과 온도조건을 만족하는 포화압력에 대한 수렴해를 구하기 위하여, 이슬점과 기포점에 대하여 각각 유도된 관계식과 Newton-Raphson 반복법 적용은 이슬점 압력에 대해 식 (12), 기포점압력에 대하여 식 (13)와 같다. 반복법의 적용은 우선 초기 압력을 Wilson의 관계식으로 가정하고 이를 앞의 식 (6)을 적용하여 초기 평형비를 산출한다. 각 성분에 대한 평형비가 결정되면, 이를 이용하여 각 성분의 액상과 기상의 몰분율이 결정될 수 있고, 다시 PVT 해석을 통해 산출된 퓨개시티 등의 물리량을 기준으로 식 (12)과 (13)의 각 항을 계산하고 Newton-Raphson법으로 반복 계산하여 결과적으로 새로운 포화압력을 산출한다. 이때 새롭게 산정되는 액상의 몰분율이 평형상태의 수렴 값을 가지기 위하여 내부적으로 연속대입법(SSM)을 이용한 반복계산이 수행된다. 결과적으로 포화압력에 대한 Newton-Raphson 반복계산의 잔차(Residual)가 수렴한계 이하가 되고 계산 값이 무용근(Trivial Root)이 아닌 경우, 포화물성해석은 수렴된 것으로 판단하였다.

3. 포화물성 수렴도 향상

본 연구에서는 앞에서 소개된 이론을 바탕으로 PVT 해석, Flash 해석 및 포화물성 해석이 가능한 전산해석 모듈을 각각 개발하고, 별도의 그래프 출력모듈을 부가하고 통합하여, GUI 기반의 다성분 다상거동해석 시뮬레이터로 개발하고자 하였다. 그러나 앞서 지적한 바와 같이, 이슬점과 기포점 같은 포화물성의 계산, 즉 상평형도(Phase Envelope) 해석은 수렴성의 측면에서 상당한 문제와 한계를 보인다.[10] 이에 본 연구에서는 다음에 소개하는 각 방법들을 제안하고 적용하여 수렴도 영향인자를 분석, 개선하여 수렴도 향상을 도모하였다. Fig. 1은 본 해석에 사용된 Table 1의 기준성분 유체에 대하여, 앞에서 소개한 포화물성 해석 이론을 적용, 산출한 상평형도 해석 결과이다.

3.1 Forward Guessing Method

일반적으로 포화물성 해석은 주어진 열역학적 조건에서 Wilson's Correlation 식 등을 통해 초기값을 산정하고 이를 Newton-Raphson법 등을 통해

Table 1 Basic gas composition (Mole fraction)

C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7+	CO2	N2
0.654	0.002	0.009	0.012	0.003	0.000	0.301	0.004	0.01

해를 찾는 방법을 사용한다. 이 때 포화물성의 계산은 비물리근(Non-physical Root)의 추정으로 발산되거나 무용근(Trivial Root)으로 수렴되는 문제를 발생시킨다. 이러한 문제는 근본적으로 초기값의 신뢰성이나 인접성에 크게 영향을 받으므로 초기값의 추정은 수렴도에 있어서 매우 중요한 인자이다. 특히 상평형도(Phase Envelope) 해석은 연속적으로 진행되는 특성에 따라 이전 해석 지점의 수렴 값을 참고할 수 있으므로 이에 착안하여, 이전 단계의 값들을 바탕으로 유한차분법으로 기울기를 계산하고 전진 방향으로 외삽(Extrapolation)하여 초기값을 추정할 수 있다. 식 (14)는 본 연구에서 제안하여 적용한 2차 정확도의 유한차분식을 적용한 전진추정법(Forward Guessing Method)의 계산식이다. Fig. 2는 전진추정법의 적용을 통해 산출된 상평형도로, 아무런 수렴도 향상방법이 적용되지 않는 경우의 결과인 Fig. 1에 비하여 고온영역에서의 포화물성의 근을 찾아내는 수렴도가 크게 향상되어 상평형도가 훨씬 많은 영역에서 수렴 값을 도시하고 있는 것을 확인할 수 있다.

$$f_{i+1} = f_i + (\Delta x)\frac{\partial f_i}{\partial x} + O(\Delta x^2)$$
$$where, \frac{\partial f_i}{\partial x} = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2 \bullet \Delta x} \quad (14)$$

3.2 Section Guessing Method

전진추정법의 적용에 따라 수렴도가 크게 향상됨에도 불구하고, 일부 영역에서는 여전히 무용근이나 발산의 문제가 발생되는 영역이 나타난다. 그러나 물리적으로 타당한 근은 이전의 값들을 기준으로 일정 구간범위에 존재할 것이 틀림없으므로, 이를 활용하여 반복적인 근의 추적을 수행하고자 식 (15)와 같이 특정구간 내에서 임의의 초기 값을 생성시켜 근의 탐색을 반복적으로 수행하였다.

$$f_{i+1} = f_i + random(x)$$
$$where, -500 \le random(x) \le 500 \quad (15)$$

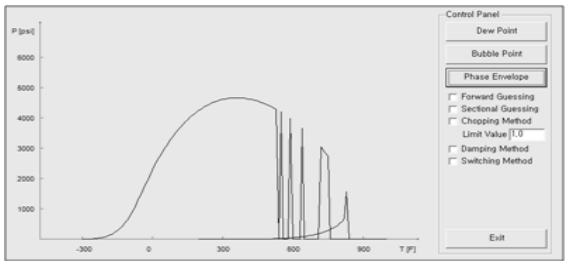


Fig. 1 Phase envelope of the basic fluid

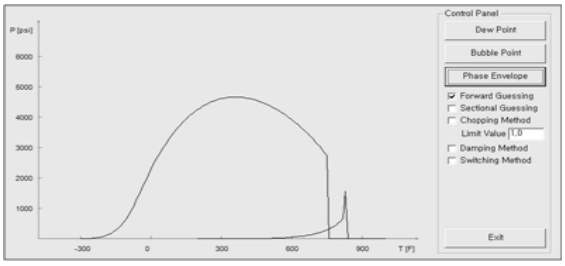


Fig. 2 Phase envelope by Forward Guessing

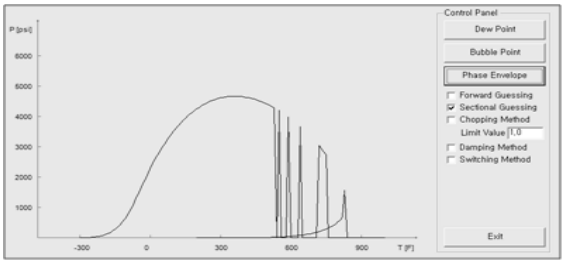


Fig. 3 Phase envelope by Sectional Guessing

Fig. 3은 본 구간탐색법(Section Guessing Method)의 해석결과를 도시한 것이다. 본 기준유체에서 이 방법의 효과는 미미한 것으로 나타났다. 그러나 이 방법은 다른 조성과 조건의 경우에 효과가 있을 수 있으며, 나중에 소개되는 복합적용의 경우에 이와 달리 의미 있는 결과를 보인다.

3.3 Chopping Method

포화물성해석의 수렴도는 앞서 소개한 초기값 추정법뿐만 아니라, 근본적인 근의 탐색방법에 따라서도 수렴 특성이 다름이 본 연구의 수행과정에서 확인되었다. 특히 임계영역이나 변곡점 근방에서 근의 탐색은 매우 민감하며, 작은 변화와 오차에도 왜곡되거나 무용근 등으로 수렴에 실패하는 경향을 보였다. 이에 따라 본 연구에서는 상평형도 해석에 있어서, 수렴에 실패하거나 문제가 확인되는 경우, 식 (16)과 같이 해석구간

을 반분하여 좁힘으로써 근의 추정 신뢰도를 일차적으로 향상하고, 이러한 반분을 반복함으로써 수렴 가능점 인근에서 값을 반복 탐색하도록 하는 썰기법(Chopping Method)를 제안하고 적용하였다.

$$x_{i+1} = x_i + \frac{\Delta x}{2} \quad (16)$$
$$where, \Delta x \geq 1.0 \ (chopping\ limit\ value)$$

Fig. 4는 본 썰기법에 의해 산출된 해석결과이다. 결과에서 나타나는 것과 같이, 기준경우의 결과인 Fig. 1에 비하여 상평형도의 완성도에 있어서 상당한 향상을 달성하였으며, 실제로 수렴도 향상에 있어 매우 유용한 방법으로 판단된다.

3.4 Damping Method

임계값이나 변곡점 부근에서 Newton법에 의해 계산되는 추정 값은 기울기가 매우 큰 특성에 따라 자칫 근의 탐색이 지나치게 크게 변화되어 수렴의 기회를 놓치게 된다. 이를 방지하기 위하여 본 연구에서는 기본적으로 Explicit Damping Coefficient를 도입하여 근 탐색의 안정성을 확보하고자 하였다. 이 때 특징적으로, 단순히 상수 완화계수를 부가하기보다는 10의 자리(Order)이하로 변화량을 제한하는 완화방법이 효과적이었다. 즉, Newton-Raphson 반복법이 적용될 때 각 반복단계에서 새로운 포화물성의 계산은 식 (17)과 같이 우변의 변화량에 완화계수를 적용하여 변화량을 완화시켜 적용하게 하였다.

$$f_{new} = f_{old} - \alpha \cdot \Delta f \quad (17)$$
$$where\ ,\ \alpha < 100$$

Fig. 5는 본 방법의 해석결과이다. 앞의 구간탐색법의 경우와 유사하게 수렴도의 개선이 크지는 않으나 상대적으로 포화선도가 안정된 모양을 나타내는 결과를 보여주고 있다.

3.5 Switching Method

본 연구의 기본 근 탐색방법은 Newton-Raphson 법이다. 이 방법은 초기값을 바탕으로 개구간에서 수렴범위의 접근이 빠르고 많은 경우에 좋은 결과를 산출하는 특성을 보이나 일부 변곡점부분 등과 변화율이나 무용근 문제가 있는 영역에서의 탐색은 상대적으로 수렴도가 좋지 않았다.

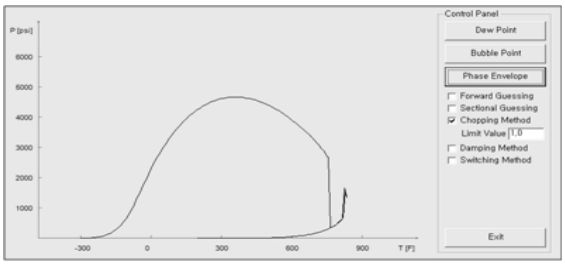


Fig. 4 Phase envelope by Chopping Method

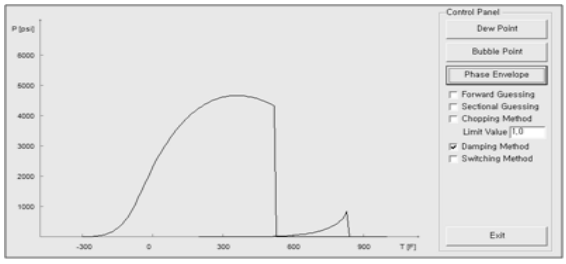


Fig. 5 Phase envelope by Damping Method

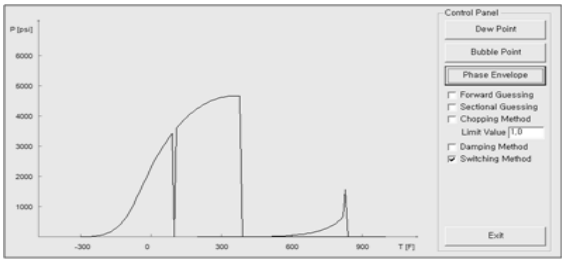


Fig. 6 Phase envelope by Switching Method

이를 개선하고자 Newton 반복법에 의해 계산된 변화량이 식 (18)의 조건과 같이 일정한 수렴범위로 근의 탐색구간이 좁혀져도 수렴되지 않으면, 폐구간법인 이분법(Bi-section Method)로 전환하여 탐색을 재시도하도록 연계하는 전환법(Switching Method)으로 수렴도 향상을 시도하였다.

$$\Delta f < 0.01 \ (\text{or } delta\ limit) \quad (18)$$
$$where\ ,\ f_{new} = f_{old} - \alpha \cdot \Delta f$$

Fig. 6에서 본 방법의 적용이 오히려 기준유체에 대하여서는 수렴도를 저하시키는 결과를 보임을 알 수 있다. 그러나 이것 역시 유체의 조성과 열역학적 조건에 따른 수렴 특성이 다르며, 다음의 복합적용의 경우 수렴도 향상에 기여하였다.

3.6 복합적용 검토

앞에서 소개한 전환법(Swithcing Method) 등에

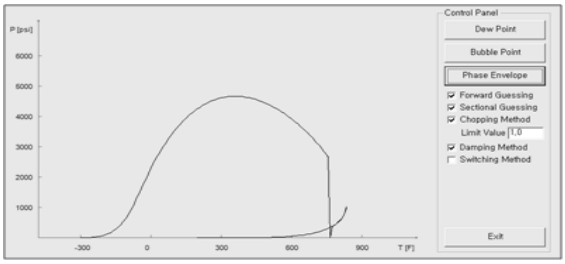


Fig. 7 Complex Method without Switching

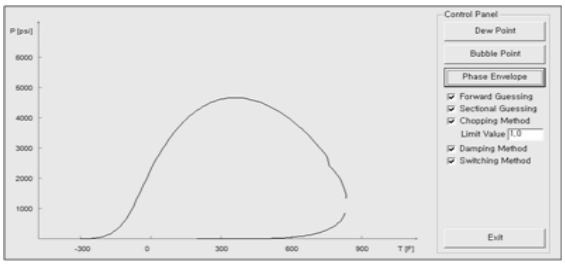


Fig. 8 Complex Method with Switching

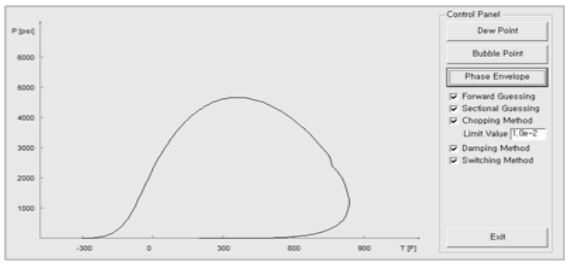
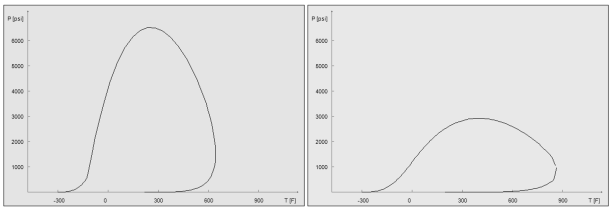


Fig. 9 Phase envelope by high order Chopping

서, 각각이 개별적으로 적용되는 경우와 여러 방법이 복합적으로 적용된 경우의 특성이 다소 상이하였다. 즉, 앞에서 이미 소개한 바와 같이 각 방법에서 나름대로 각각의 고유한 역할을 기대할 수 있을 뿐만 아니라 이러한 영향들이 복합적으로 혼합되는 경우 해의 수렴성에 비교적 긍정적인 영향을 미치는 것으로 검토되었다. 대표적인 경우로, Fig. 7은 전환법을 제외한 나머지 모든 방법을 복합 적용한 경우이고 Fig. 8은 전환법을 포함하여 복합 적용한 경우이다. 앞에서 보듯이 전환법은 당초 수렴도에 큰 영향을 주지 못하였으나, 다른방법에 복합적으로 이 방법이 적용됨으로써 결과적으로 보다 좋은 결과를 산출한 것을 확인할 수 있다. 더불어, 썰기법은 대부분의 경우에 반분구간의 한계에 따라 수렴의 한계가 결정되는 특징이 있었다. Fig. 9는 썰기법의 반분구간 한계를 기존의 1.0에서 0.01까지 낮춘 경우에 대한 해석결과로, 최종적으로 거의 완전한 상평형도를 해석, 도시하고 있음을 확인할 수 있다.

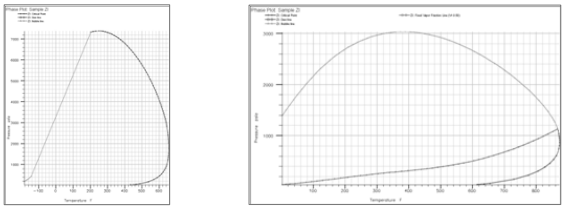
Table 2 Validation gases composition (Mole fraction)

	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7+	CO2	N2
Lean	**0.854**	0.042	0.009	0.011	0.009	0.01	**0.051**	0.004	0.01
Rich	**0.454**	0.042	0.009	0.011	0.009	0.01	**0.451**	0.004	0.01



(a) Lean gas (b) Rich gas

Fig. 10 Phase envelopes for validation compositions



(a) Lean gas (b) Rich gas

Fig. 11 Phase envelopes by Eclipse PVTi SW

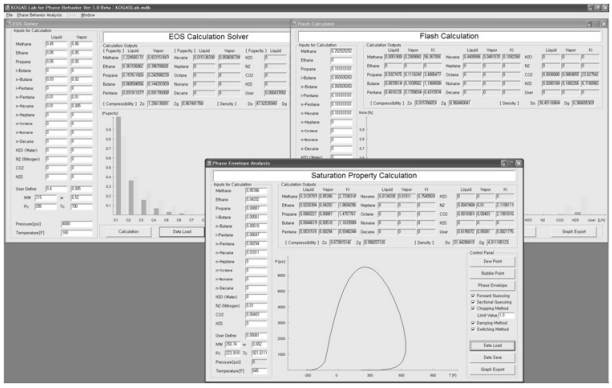


Fig. 12 Developed phase simulator with GUI

3.7 결과 고찰

제안된 수렴도 향상기법의 신뢰성 확보와 범용성 검토를 위하여, 앞에서 소개한 기준성분 유체의 해석과 결과에 부가하여 Table 2에 제시된

Lean 가스와 Rich 가스, 두 가지 유체조성에 대한 해석을 시도하였다. Fig. 10 (a)는 Lean 가스에 대하여 본 연구에서 제안된 방법을 복합 적용한 최종 상평형도 해석결과이고 (b)는 Rich 가스에 대한 상평형도 해석 결과이다. 그림에서 보듯이 두 경우 모두 상평형도 전체영역에서 우수한 수렴성을 보이고 있어 기준성분 유체는 물론 넓은 조성 영역의 해석에서 본 연구에서 제안된 방법이 수렴도 향상에 기여하고 있음을 확인할 수 있다.

마지막으로, 본 연구에서 해석된 상평형도 해석 결과의 신뢰성 검증을 위하여, 저류층 해석 분야의 표준적인 소프트웨어인 Schulumberger(사)의 Eclipse PVTi 상용 SW의 해석 결과와의 비교를 시도하였다. Fig. 11의 (a)와 (b)는 각각 Table 2의 Lean 가스와 Rich 가스 성분에 대한 Eclipse PVTi 해석 결과이다. 두 해석결과는 대략 10% 오차범위 내에서 거의 동일한 결과를 산출하고 있다. 이는 해석 루틴 내부에서 사용하고 있는 이심인자, 임계값 등의 상수와 계수가 두 해석모듈에서 다르게 적용된 것에 기인된 차이로 여겨진다. 수렴도 측면에서 상대적으로 본 연구의 해석결과가 다소 좋은 결과를 보임을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 다성분 탄화수소혼합물의 PVT 해석, Flash 해석 및 포화물성 해석을 위한 이론을 체계적으로 정리하고 효과적으로 적용하여 각각의 전산해석 모듈을 성공적으로 개발하고, 각 개발된 모듈을 통합하여, Fig. 12와 같이 GUI 기반의 그래프 처리기능을 갖춘 다성분 다상거동해석 시뮬레이터로 개발하였다.

특히, 다상거동 해석에서 수렴도의 문제를 발생시키는 포화물성의 계산과 상평형도 해석에 있어서 수렴 영향인자를 분석하고, 수렴도 향상을 위한 새로운 초기값 추정방법과 근탐색법을 제안하고 도입하였다. 결과적으로, 전진탐색법과 썰기법의 경우 수렴도 향상 및 해석 안정성 강화에 매우 효과적이었으며, 구간탐색법, 등급완화법 및 전환법 역시 복합적인 사용을 통하여 그 효용을 입증하였다. 단, 이러한 방법들이 아직까지 모든 경우에 완벽하지는 않으며, 유체 조성과 열역학적 조건에 따른 수렴성에 영향을 받으므로, 향후 이러한 부분을 체계화하고 범용적으로 적용하는 방안에 대한 추가적인 검토와 연구가 필요함 역시 확인하였다. 최종적으로 본 연구에서 검토, 개발된 방법들은 본 연구의 GUI 기반 통합 다성분 다상거동해석 시뮬레이터의 개발에 성공적으로 적용되었다.

후 기

본 연구는 2007년도 지식경제부의 재원으로 한국에너지 기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구 과제입니다.(No. 2007RER20P010000)

참고문헌

(1) Ahmed T., 1989, Hydrocarbon Phase Behavior, Gulf Publishing Company, Houston, TX.

(2) Soave, G., 1972, "Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State," *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 27, pp. 1197~1203.

(3) Peng, D. U. and Robinson, D. B., 1976, "A New two-constant equation of State," *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, Vol. 15, pp. 59~64.

(4) Nikos, V., 1986, "Phase Behavior of Systems Comprising North Sea Reservoir Fluids and Injection Gases," *JPT*, Vol 38, No. 11 pp. 1221~1233.

(5) Styjek, R. and Vera, J. H., 1986, PRSV : "An Improvement Peng-Robinson Equation of State for Pure Compounds and Mixtures," *Canadian J. Chem. Eng.*, Vol. 64, pp. 323~333.

(6) Jhaveri, B. S. and Youngren, G. K., 1988, "Three-Parameter Modification of the Peng-Robinson Equation of State to Improve Volumetric Predictions," *SPE Reservoir Engineering* 13118, Vol. 3, No. 3, pp. 1033~1040.

(7) ISO/FDIS-18453, 2004, Natural gas - Correlation Between Water Content and Water Dew Point, ISO standard.

(8) Varotsis N., 1989, "A Robust Prediction Method for Rapid Phase-Behavior Calculations,"SPERE, SPE 16943, Vol 4, No. 2, pp. 237~243.

(9) Youngcheol Ha, Seongmin Lee, Jaeyoung Her, Kangjin Lee, and Seunjun Lee, 2009, "Calculation of the Hydrocarbon and Water Dew Points of Natural Gas," *Korean Chemical*

Engineering Research, Vol. 47, No. 5, pp. 565~571.

(10) Michael L. Michelsen, 1994, "A Simple Method for Calculation of Approximate Phase Boundaries," *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 98, pp. 1~11.