

ÉDITORIAL

La thermodynamique appliquée constitue une discipline scientifique dont l'objectif essentiel est de générer les propriétés de systèmes, afin d'optimiser (entre autres) :

- soit les conditions d'exploitation d'un gisement de pétrole brut ou de gaz naturel ;
- soit le rendement d'un procédé de séparation puis de purification d'un produit ;
- soit le rendement d'un procédé de production d'énergie.

Ce premier numéro de l'année 1998 de la *Revue de l'Institut français du pétrole* rassemble certaines des communications présentées au cours du XVI^e Séminaire européen de thermodynamique appliquée qui a eu lieu du 19 au 22 juin 1997 à Pont-à-Mousson. Ces communications ont été présentées au cours de deux des neuf sessions de ce séminaire : la session sur la « Thermodynamique des procédés pétroliers » et celle sur l' « Optimisation des procédés thermiques et de séparation ».

La présentation qui a ouvert la première de ces sessions soulignait le nombre croissant de défis posés aux spécialistes de la thermodynamique des fluides par les projets récents d'exploration et de production de gisements de pétrole brut et de gaz naturel. Il s'agit tout d'abord de l'élargissement considérable des domaines de température et de pression pour lesquels il est nécessaire d'estimer les propriétés des fluides. D'autre part, le métier de l'exploration nécessite en particulier d'effectuer de telles estimations à partir d'un nombre de données extrêmement faible, tout en étant néanmoins capable d'évaluer de manière précise les incertitudes affectant la composition du fluide au sein du gisement à développer (éventuellement).

La communication qui suit est relative à l'importance d'une représentation analytique correcte d'un pétrole brut pour le calcul de la pression minimale de miscibilité, lors de l'optimisation d'un procédé de récupération améliorée par injection de gaz. En particulier, il apparaît que la représentation traditionnelle à l'aide d'un diagramme (pseudo-) ternaire conduit à des erreurs, aussi bien lors de la description du mécanisme de récupération mis en œuvre que lors de l'estimation de la pression minimale de miscibilité.

L'accumulation progressive de dépôts dans les conduites de transport des bruts paraffiniques est un des problèmes majeurs rencontrés lors de l'exploitation de gisements contenant ces huiles. Des modèles thermodynamiques compositionnels peuvent être utilisés pour calculer la température de cristallisation commençante, ainsi que la quantité de dépôts solides aux températures inférieures à celle-ci. Pour décrire le diagramme des phases de ces mélanges, il est nécessaire de disposer de données sur des systèmes contenant des n -paraffines lourdes. Les deux articles qui suivent présentent de telles données, ainsi que des informations structurales sur les dépôts qui se forment. Leurs auteurs proposent également des modèles relativement simples pour le calcul de la solubilité de mélanges de n -paraffines lourdes dans une n -paraffine légère. De tels modèles pourraient être « extrapolables » assez facilement aux mélanges complexes que sont les bruts paraffiniques.

L'un des problèmes essentiels de l'ensemble des métiers pétroliers (exploration, exploitation, transport, raffinage et pétrochimie) est la connaissance des propriétés thermodynamiques et thermophysiques des coupes (résidus des distillations atmosphérique et sous vide) contenant des asphaltènes, ainsi que des bruts dont elles sont issues. En effet, ces asphaltènes peuvent obstruer les gisements d'huile, en particulier au voisinage des puits de production, les installations de traitement en surface et les conduites de transport, et/ou « empoisonner » les catalyseurs de pétrochimie par l'intermédiaire de certains hétéroatomes métalliques qu'ils renferment (nickel et vanadium). La viscosité très élevée des coupes qui les contiennent pose également des problèmes aux ingénieurs chargés de la conception des unités de conversion dans les raffineries.

Les deux publications suivantes apportent des éclairages complémentaires quant à la structure probable des asphaltènes agrégés, ainsi que sur les mécanismes d'agrégation, en partant de solutions d'asphaltènes dissociés dans de bons solvants.

L'article qui suit propose enfin un modèle thermodynamique compositionnel permettant le calcul des propriétés volumétriques et de floculation des bruts contenant des asphaltènes.

Compte tenu des grandes profondeurs auxquelles les sociétés opératrices effectuent des forages actuellement, les fluides hydrocarbonés contenus dans les gisements rencontrés sont soumis à des pressions et des températures élevées (1000-1200 bar et 200 °C). Il est alors important de disposer de modèles capables de calculer les propriétés thermodynamiques de ces fluides dans de telles conditions opératoires.

La communication suivante étudie les performances dans ces conditions d'une des équations d'état les plus couramment utilisées par les ingénieurs de l'industrie. Les auteurs indiquent également les domaines d'application optimaux pour certains modèles récents, couplant une équation d'état avec une expression de l'énergie d'excès de Gibbs en vue de décrire la non-idéalité des phases liquides considérées.

L'une des utilisations essentielles du pétrole et du gaz naturel consiste en la production d'énergie. L'évaluation globale d'un procédé peut être faite en déterminant le meilleur compromis entre son bilan énergétique et son bilan économique. La publication qui suit présente un cas d'application simple, celui d'un échangeur de chaleur, et propose des extensions à un grand nombre de procédés industriels de séparation. Il est indiqué que le critère thermodynamique d'optimisation des unités élémentaires consiste à en minimiser toutes les irréversibilités, telles que : chaleur, dispersion et coalescence des phases, etc.

Enfin, la dernière communication présentée ici analyse l'impact des irréversibilités associées aux transferts de matière dans un moteur solaire sur l'optimisation de la puissance produite. Il apparaît que les conductances massiques et thermiques sont interdépendantes. Par conséquent, l'étude des cycles thermodynamiques envisageables pour l'obtention de la puissance maximale avec ce type de moteur devrait prendre en compte l'ensemble des transferts de matière et de chaleur.

Emmanuel BÉHAR

Institut français du pétrole

EDITORIAL

The essential aim of applied thermodynamics is the generation of properties for systems, in order to optimize (amongst others):

- the production conditions of reservoirs containing either crude oil or natural gas;
- the yield of a process for the separation and further the purification of a product;
- the yield of a process for energy production.

This first 1998 issue of the *Revue de l'Institut français du pétrole* gathers some of the lectures presented during the XVIth European Seminar of Applied Thermodynamics held from June 19 to 22, 1997, in Pont-à-Mousson (France). These lectures were presented in two of the nine sessions of this seminar: the one on "Petroleum Process Thermodynamics" and the one on "Optimization of Thermal and Separation Processes".

The opening lecture of the first of these sessions emphasized the increasing number of challenges faced by fluid thermodynamics experts, in relation with recent reservoir exploration and production projects. At first, there is a large extension of the pressure and temperature domains in which it is necessary to estimate the fluid properties. On the other hand, exploration projects induce the necessity of performing such estimates on the basis of very scarce data. It is however important to be able to precisely evaluate the uncertainties on the composition of the fluid contained inside the reservoir to be (eventually) developed.

The next communication underlines the fact that a correct analytical representation of a crude oil is needed for the computation of the minimal miscibility pressure, while optimizing an improved recovery process by gas injection. In particular, it is shown that the traditional representation by (pseudo-) ternary diagrams leads to errors, both in the description of the recovery mechanism involved as well as in the evaluation of the minimal miscibility pressure.

The gradual build-up of deposits in the flow- and pipe-lines carrying waxy crudes is one of the major problems met during the production of reservoirs containing these oils. Compositional thermodynamic models can be used for computing the wax onset temperature, as well as the amount of solid deposits at lower temperature levels. In order to describe the phase diagram of such mixtures, it is necessary to have data available for systems containing heavy *n*-paraffins. The following two articles present such data, as well as structural information on the deposits which are formed. Their authors also propose relatively simple models for the computation of the solubility of mixtures of heavy *n*-paraffins in a light *n*-paraffin. Such models could be quite easily "extrapolated" to complex mixtures such as waxy crudes.

One of the essential problems for all oil engineers (dealing with exploration, production, transport, refining and petrochemistry) is the knowledge of thermodynamic and thermophysical properties of cuts (residues of atmospheric and vacuum distillations) containing asphaltenes, as well as of the crudes they are coming from. Indeed, these asphaltenes can plug the oil reservoirs, particularly near the production wells, the surface treatment facilities and the transport lines, and "poison" petrochemistry catalysts through some metallic heteroatoms they include (nickel and vanadium). The (very) high viscosity of cuts which contain them sets equally problems to engineers having to design conversion units in refineries.

The two next publications bring complementary insights regarding the probable structure of asphaltene aggregates, as well as on the aggregation mechanisms, when starting with solutions of dissociated asphaltenes in good solvents.

At last, the following article proposes a compositional thermodynamic model allowing the computation of volumetric and flocculation properties for crudes containing asphaltenes.

Considering the high depths reached presently by operating companies when drilling, the hydrocarbon fluids contained in the contacted reservoirs are under elevated pressures and temperatures (up to 1000-1200 bar and 200°C). It is then important to have available models qualified for the computation of the thermodynamic properties of these fluids in such operating conditions. The following communication studies the performance in these conditions of one of the equations of state most frequently used by industry engineers. The authors also indicate the optimal regions in which to use some recent models, coupling an Equation of State with an expression for the Gibbs excess energy which describes the non-ideality of the considered liquid phases.

One of the main uses of both oil and natural gas is energy production. The global evaluation of a process can be performed by looking for the best compromise between its energetic balance and its economic balance. The next publication shows a simple application example (a heat exchanger), and proposes further extensions to a great number of industrial separation processes. It is indicated that the optimization thermodynamic criterion for elementary units consists in minimizing all irreversibilities such as: heat, dispersion and coalescence of phases, etc.

Finally, the last communication presented here analyzes the influence of irreversibilities associated with mass transfer on the optimization of the power produced by a solar engine. It appears that heat and mass transfer conductances are interdependent. Consequently, the study of the possible thermodynamic cycles which could be considered in order to reach the maximum power with such an engine should take into account all mass and heat transfers.

Emmanuel BÉHAR

Institut français du pétrole