

MODELAGEM TERMODINÂMICA DE FLUIDOS HIDROCARBONETOS USANDO ABORDAGEM COMPOSICIONAL

Vanessa P. M. Martins*, Antonio M. Barbosa Neto, Antonio C. Bannwart

Resumo

Uma ferramenta computacional foi desenvolvida no software Mathematica® para o cálculo do fator de compressibilidade e da fugacidade de fluidos de petróleo em equilíbrio líquido-vapor. Para tanto, foi utilizada uma abordagem composicional com a aplicação de equações de estado cúbicas (Soave-Redlich-Kong, Peng-Robinson). Diante dos resultados, erros inferiores a 2% foram observados em comparação com o simulador Wimprop®.

Palavras-chave:

Equilíbrio de Fases; Equações de Estado Cúbicas; Petróleo

Introdução

Modelos termodinâmicos computacionais capazes de prever o equilíbrio de fases em sistemas multifásicos de petróleo apresentam diversas aplicações na indústria de óleo e gás, como por exemplo, avaliar a precipitação de parafinas em sistemas submarinos de escoamento, tal como encontrado no pré-sal brasileiro.

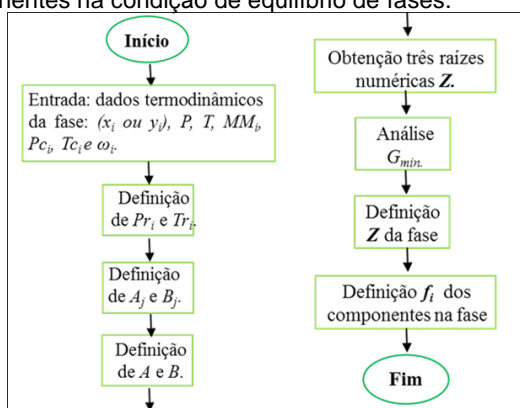
Nesse sentido, um código computacional, em linguagem do programa Mathematica®, foi desenvolvido para o cálculo composicional do fator Z e da fugacidade em sistemas de hidrocarbonetos em equilíbrio líquido-vapor (ELV). Para tanto, as equações de estado cúbicas (EEC) de Soave-Redlich-Kong (SRK) (1972) e Peng-Robinson (PR) (1976) foram implementadas.

Resultados e Discussão

A equação abaixo, na forma geral, apresenta o modelo de coeficiente de fugacidade adotado. Os parâmetros δ_1 e δ_2 são dependentes da EEC utilizada (SRK ou PR). Por outro lado, a **Figura 1** apresenta a metodologia de cálculo implementada no programa. Primeiramente o coeficiente de compressibilidade (Z) é determinado para cada fase em equilíbrio e então, o valor da fugacidade de cada componente em cada fase é calculado.

$$\ln \phi_i = \frac{(Z - 1) B_i}{B} - \ln(Z - B) - \frac{A}{\Delta B} \left(\frac{2\psi_i}{A} - \frac{B_i}{B} \right) \ln \left(\frac{Z + \delta_1 B}{Z + \delta_2 B} \right)$$

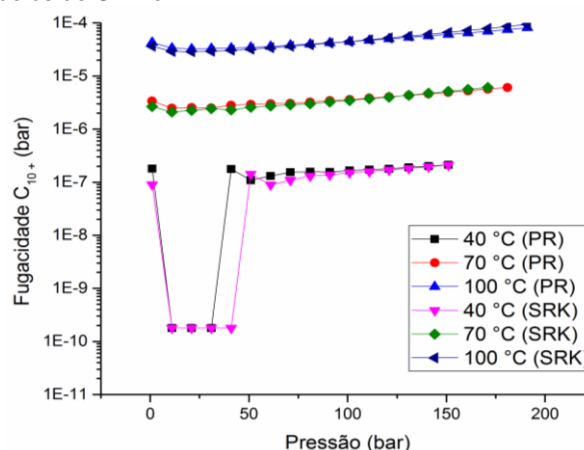
Figura 1. Metodologia de cálculo da fugacidade dos componentes na condição de equilíbrio de fases.



A validação do código foi realizada para a cromatografia de uma amostra de petróleo do Mar do Norte (Di Primio et. al, 1998), rica em metano (36.8%) e fração de parafínicos C₁₀₊ (23.2%) – porcentagem definida em

base molar. Os resultados obtidos foram comparados com o simulador comercial Wimprop® e apresentaram erros inferiores a 2% em todas as condições analisadas. Finalmente, a **Figura 2** apresenta o comportamento da fugacidade da fração de parafínicos C₁₀₊ para diferentes valores de temperatura, pressão e EEC avaliada. Observa-se uma boa concordância entre os resultados para os modelos de SRK e PR. Por outro lado, a influência da temperatura se mostra predominante em relação às mudanças de pressão no comportamento do sistema quanto à fugacidade da fração estudada.

Figura 2. Valores calculados de Fugacidade (bar) para fração C₁₀₊ da mistura em equilíbrio de fases (L-V), usando os modelos de SRK e PR.



Conclusões

Os resultados obtidos foram comparados com o simulador comercial Wimprop®, mostrando boa concordância. Devido aos bons resultados alcançados no estudo do ELV, a próxima etapa do trabalho será estudar o equilíbrio sólido-líquido-vapor para aplicações de precipitação de parafina.

Agradecimentos

Agradecimentos à Faculdade de Engenharia Mecânica pelo suporte material e técnico e ao SAE-UNICAMP por fomentar financeiramente essa pesquisa.

- Barbosa Neto, A. M., et. al. Thermodynamic modeling of vapor-liquid equilibrium for petroleum fluids, Congresso Nacional de Matemática Aplicada a Indústria. Caldas Novas, GO. **2014**.
- Nichita, D. V.; Broseta D.; Hemptinne, J. C. Multiphase equilibrium calculation using reduced variables. Fluid Phase Equilibria, v. 246, 15–27, **2006**.