

Cálculo de Isotermas de Misturas de Hidrocarbonetos em Condições de Reservatório

Paloma J. Oliveira¹, Fellipe C. de Oliveira², Rodrigo Zanette³
IFSUL, Campus Charqueadas, RS

Este estudo prevê a determinação de uma metodologia computacional eficiente para a análise do comportamento *PVT* de óleos reais, com foco nos fluidos do pré-sal. Um código foi implementado em C++ para o cálculo de isotermas de misturas de hidrocarbonetos. Duas composições de óleos reais do pré-sal foram analisadas: Mistura 1 com 1,54% de componentes pesados (C_{7+}) em base molar, e Mistura 2 com 6,70% de pesados [1]. Utilizou-se equações de estado cúbicas, como Van der Waals(VDW), Peng-Robinson(PR) e Soave-Redlich-Kwong(SRK). Estas equações permitem avaliar a influência de Pressão (P), Temperatura (T) e composição da mistura nas propriedades termodinâmicas do fluido. O objetivo principal deste trabalho é avaliar a influência da temperatura no cálculo de isotermas de misturas de hidrocarbonetos. Tais métodos são amplamente utilizados na indústria [1]. O cálculo é feito a partir da Equação 1:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{(V + \epsilon b)(V + \sigma b)}, \quad (1)$$

em que R é a constante dos gases ideais e V é o volume molar. Os termos b , σ , ϵ e $a(T)$ são obtidos a partir das propriedades críticas do fluido [4]. Testes iniciais com CO_2 validaram os modelos implementados a partir de dados da literatura [3]. Para misturas, o código implementado foi comparado com o *software* Thermopack [5]. A Figura 1 mostra a comparação da isotermas obtidas pelo código autoral e o Thermopack para um sistema CO_2+CH_4 com 50% de cada componente a uma temperatura de 250 K. O gráfico mostra que há uma concordância entre as duas estratégias, o que valida o código implementado.

A Figura 2 mostra as isotermas obtidas para a Mistura 2 utilizando a equação de Peng-Robinson. Três temperaturas foram testadas: ponto crítico ($T_C \sim 320$ K), 380 K e 270 K. Proporcionando uma visão detalhada do comportamento da mistura sob diferentes condições termodinâmicas.

O código-fonte do projeto está disponível no repositório GitHub [2]. Os próximos passos incluem a análise do comportamento de fases de misturas representativas dos reservatórios do pré-sal e a recaracterização de fluidos de reservatórios de petróleo por meio da alteração do número de pseudocomponentes pesados, sem comprometer a precisão do comportamento de fases.

Agradecimentos

OLIVEIRA, P. J. agradece o apoio do EDITAL PROPESP – Nº 06/2024, contemplado pela FAPERGS, que viabilizou a bolsa de pesquisa para o desenvolvimento deste projeto.

¹palomaoliveira.ch006@academico.ifsul.edu.br

²fellipeoliveira@ifsul.edu.br

³rodrigozanette@ifsul.edu.br

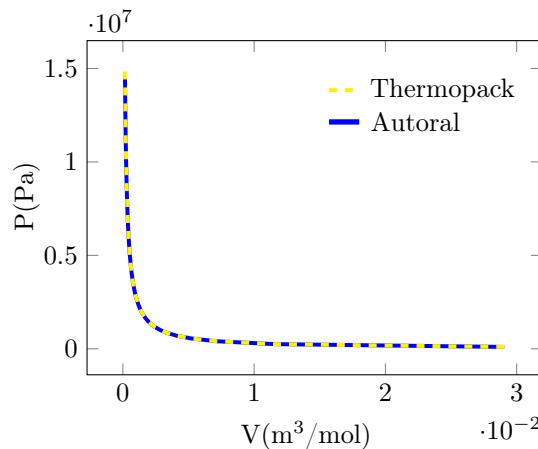


Figura 1: Comparação entre metodologias. Fonte: Autoral.

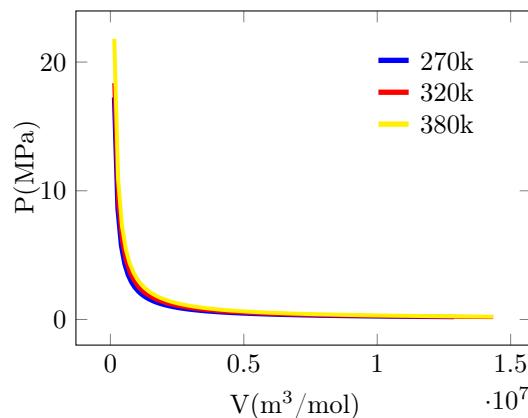


Figura 2: Mistura 2 usando PR. Fonte: Autoral.

Referências

- [1] F. C. de Oliveira, P. Lage e P. Couto. “Comparison of lumping methods to adaptive characterization in representing phase equilibria of hydrocarbon mixtures using PC-SAFT EOS”. Em: **Chemical Engineering Science** 281 (jul. de 2023), p. 119066. DOI: 10.1016/j.ces.2023.119066.
- [2] Github. **Repositório ThermoPropCubicEos**. Online. Acessado em 08/03/2025, <https://github.com/oliverPaloma/ThermoPropCubicEos>.
- [3] N. H. T. Lemes, J. M. Oliveira e J. P. Braga. “Cálculo do Volume na Equação de van der Waals pelo Método de Cardano”. Em: **Química Nova** 33 (2010), pp. 1325–1329. DOI: 10.1590/S0100-40422010000600020.
- [4] H. C. Van Ness, J. M. Smith e M. M. Abbott. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. 2007. ISBN: 978-85-216-1553-8.
- [5] Ø. Wilhelmsen, A. Aasen, G. Skaugen, P. Aursand, A. Austegard, E. Aursand, M. A. Gjennestad, H. Lund, G. Linga e M. Hammer. “Thermodynamic Modeling with Equations of State: Present Challenges with Established Methods”. Em: **Industrial & Engineering Chemistry Research** 56.13 (2017), pp. 3503–3515. DOI: 10.1021/acs.iecr.7b00317.