

ANÁLISE DO FATOR DE COMPRESSIBILIDADE NO EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR DE FLUIDOS DE PETRÓLEO UTILIZANDO O SIMULADOR PVT_{petro}

A. M. BARBOSA NETO^{1,2}, L. A. A. P. FONSECA², E. C. RYLO² e A. C. BANNWART¹

¹ Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Departamento de Energia – Divisão de Petróleo

² SimWorx - Engenharia, Pesquisa & Desenvolvimento
E-mail para contato: aneto@dep.fem.unicamp.br

RESUMO – Na exploração de petróleo, fluidos são produzidos desde o reservatório até a planta de processamento. Ao longo deste sistema, o fluido de petróleo escoar sob diferentes condições de pressão e temperatura acarretando mudanças no comportamento de fases da mistura de hidrocarbonetos, podendo ocorrer a formação de duas ou mais fases em equilíbrio. Os métodos de cálculo para o fator de compressibilidade das fases em equilíbrio para um sistema óleo-gás, disponíveis no simulador PVT_{petro}, foram utilizados para avaliar o comportamento desta propriedade. Os resultados mostraram uma boa concordância entre os métodos de Cardano e numérico. Além disso, verificou-se que o comportamento do fator de compressibilidade das fases é fortemente dependente da pressão e temperatura do sistema.

1. INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, as descobertas de reservatórios de petróleo portadores de óleo leve, de gás e condensado têm aumentado em campos marítimos brasileiros (ANP, 2014). A predição do comportamento termodinâmico de fases é essencial para o desenvolvimento e otimização da produção de hidrocarbonetos em aplicações na engenharia de petróleo. Projetos bem sucedidos nesta área, tais como, gerenciamento da produção de um reservatório, análise de escoamento multifásico em sistemas de produção e dimensionamento de plantas de processamento de fluidos dependem da predição correta do comportamento termodinâmico de fases (Barbosa Neto et al, 2014).

Um modelo termodinâmico fornece a relação necessária entre as propriedades termodinâmicas e pode ser utilizado em combinação com relações fundamentais para gerar as propriedades requeridas para realizar os cálculos de equilíbrio de fases (Saber, 2011). Dentre estas propriedades, o fator de compressibilidade é de fundamental importância para a análise do comportamento de fases dos fluidos de petróleo. Neste sentido, as equações de estado cúbicas, tal como Peng-Robinson (1978), são possivelmente as equações mais frequentemente utilizadas para aplicações práticas na indústria de petróleo (Saber e Shaw, 2008).

Diante deste contexto, o presente trabalho teve como objetivo apresentar um estudo comparativo entre os métodos analítico e numérico da solução da Equação de Estado Cúbica

(EEC) de Peng-Robinson expresso em termos do fator de compressibilidade Z para uma mistura de hidrocarbonetos utilizando o simulador PVTpetro.

2. METODOLOGIA

A composição do fluido de petróleo utilizado para avaliar o fator de compressibilidade das fases é descrita em Barbosa Neto, (2015). A mistura de hidrocarbonetos escolhida foi caracterizada utilizando o simulador PVTpetro (Barbosa Neto, 2015). Esta ferramenta possui um módulo de cálculo *flash* (P, T) isotérmico capaz de descrever as fases em equilíbrio, inclusive o fator de compressibilidade de cada fase. Para o presente trabalho, a equação de estado de Peng-Robinson, cúbica em Z , juntamente com a regra de mistura tipo um fluido de van der Waals foi selecionada no PVTpetro. Além disso, o simulador disponibiliza dois métodos para resolução da EEC: método de Cardano e método numérico (Newton-Raphson).

2.1. Equação de Estado de Peng-Robinson

A equação de Peng-Robinson (1978) é apresentada na Equação 1.

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha(T)}{V(V+b)b(V-b)} \quad (1)$$

O parâmetro α é uma função da temperatura e do fator acêntrico (ω) de cada componente da mistura, a e b são respectivamente, parâmetro de energia e covolume das moléculas. Reescrevendo a Equação 1 em termos do fator de compressibilidade Z , tem-se (Ahmed, 2007):

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

na qual, A e B são constantes definidas para a equação de estado. Definindo os coeficientes da Equação 2:

$$C_1 = 1 \quad C_2 = B - 1 \quad C_3 = A - 3B^2 - 2B \quad C_4 = AB - B^2 - B^3 \quad (3)$$

2.2. Método Numérico

A função objetivo (f) que representa o método numérico é dada por:

$$f = C_1Z^3 + C_2Z^2 + C_3Z + C_4 \quad (4)$$

e sua derivada analítica (f') é representada pela Equação 5:

$$f' = 3C_1Z^2 + 2C_2Z + C_3 \quad (5)$$

O valor de Z igual a 0,5 foi estabelecido como chute inicial para o método de Newton-Raphson. A tolerância adotada como critério de convergência foi de 10^{-6} . Após a determinação da primeira raiz da equação cúbica (Z_1), aplica-se a abordagem analítica utilizando-se a regra de *Briot-Ruffini* para converter a Equação 4 em um polinômio de grau 2, conforme mostra a Equação 6:

$$Z^2 + (Z_1 + C_2)Z + [Z_1(Z_1 + C_2) + C_3] = 0 \quad (6)$$

A Equação 6 é resolvida pelo método convencional de *Bhaskara*. Sendo assim, o discriminante é definido por:

$$Disc = (Z_1 + C_2)^2 - 4[Z_1(Z_1 + C_2) + C_3] \quad (7)$$

As soluções da Equação 6 são da forma:

$$Z = \frac{-(Z_1 + C_2) \pm \sqrt{Disc}}{2} \quad (8)$$

Algumas considerações devem ser feitas durante a resolução para o discriminante deste método: $Disc < 0$: apenas uma raiz real que corresponde a raiz da fase analisada; $Disc = 0$: tem-se duas raízes reais iguais; $Disc > 0$: tem-se três raízes reais;

2.3. Método Analítico

No método de Cardano (Cardano, 1968), a primeira etapa consiste em substituir C_i da Equação 4 por $c_i = C_i/C_1$ com ($C_1 \neq 0$). Substituindo a variável Z conforme a Equação 9:

$$Z = z + \beta \quad (9)$$

Escolhendo-se $\beta = -c_2/3$ o termo quadrático é eliminado da equação e a função f é convertida em um polinômio da seguinte forma:

$$z^3 + pz + q = 0 \quad (10)$$

Definindo:

$$p = \frac{-1}{3}c_2^2 + c_3 \quad q = \frac{2}{27}c_2^3 - \frac{1}{3}c_2c_3 + c_4 \quad (11)$$

O discriminante é definido da seguinte forma:

$$Disc = \frac{p^3}{27} + \frac{q^2}{4} \quad (13)$$

As possíveis soluções para Z pelo método de Cardano são:

$$Disc \leq 0 \quad Z_K = \left[2 \left(-\frac{p}{3} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{-q/2}{\sqrt{-p^3/27}} \right) - \frac{c_2}{3} \right] k = 1,2,3 \quad (14)$$

$$Disc \leq 0 \quad Z = \sqrt[3]{-q/2 + \sqrt{Disc}} + \sqrt[3]{-q/2 - \sqrt{Disc}} - \frac{c_2}{3} \quad (15)$$

Por fim, as soluções obtidas em cada um dos métodos, analítico ($Z_{analítico}$) e numérico ($Z_{numérico}$), foram comparadas através do Desvio Médio Relativo (DMR %) dado por:

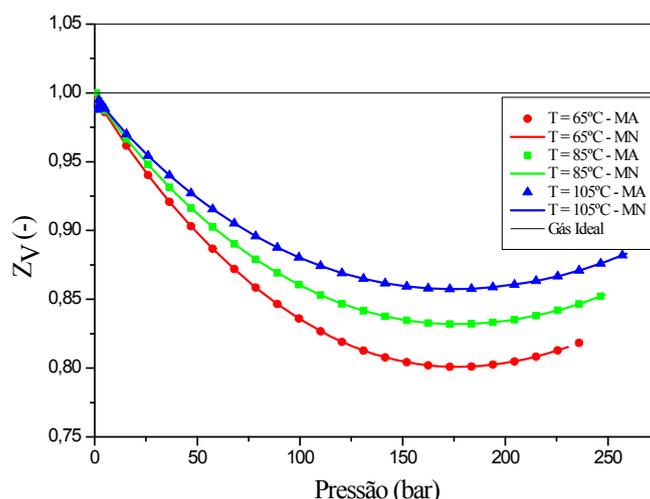
$$(DMR\%) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{Z_{analítico} - Z_{numérico}}{Z_{analítico}} \right) \quad (16)$$

em que, N é o número total de resultados.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para o fluido analisado neste trabalho, utilizando o simulador PVTpetro, verificou-se a existência de duas fases (óleo e gás) para o intervalo de pressão de 0 – 500 bar e temperatura de 30 – 120°C. A Figura 1 apresenta o comportamento do fator de compressibilidade da fase vapor (Z_v) em função da pressão, utilizando os métodos analítico (MA) e numérico (MN).

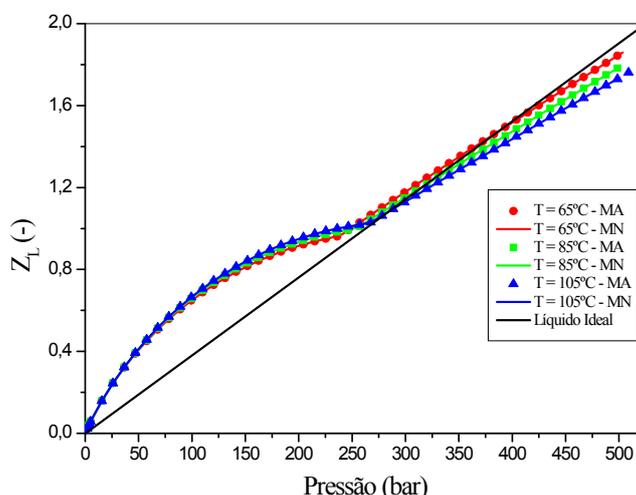
Figura 1 – Análise do fator de compressibilidade da fase vapor com a pressão, utilizando os métodos analítico (MA) e numérico (MN), parametrizado em $T = 65, 85$ e 105°C .



Analisando o comportamento das curvas do fator de compressibilidade da fase vapor (Z_v) do sistema bifásico, verifica-se uma boa concordância entre os métodos de cálculo utilizados. Conforme esperado, a temperatura influencia significativamente no comportamento de Z_v à medida que a pressão aumenta. Além disso, é possível verificar valores distintos para a pressão de bolha. Os valores observados de pressão de bolha, foram: 236 bar (65°C), 246,5 bar (85°C) e 257 bar (105°C). Do ponto de vista termodinâmico, a consideração da influência tanto da pressão como da temperatura na descrição do comportamento de fases é de fundamental importância. Pois, observa-se uma não idealidade das curvas de Z_v quando comparadas a curva do gás ideal, à medida que a pressão afasta-se da condição ambiente (1 bar).

De maneira análoga, o fator de compressibilidade da fase líquida (Z_L) do sistema óleo-gás multicomponente foi analisado em função da pressão em temperaturas distintas, conforme mostra a Figura 2. No caso do comportamento do Z_L , foi realizada uma comparação em relação ao comportamento de um fluido incompressível.

Figura 2 – Análise do fator de compressibilidade da fase líquida com a pressão, utilizando os métodos analítico (MA) e numérico (MN), parametrizado em T = 65, 85 e 105°C.



As curvas do fator de compressibilidade da fase líquida apresentadas na Figura 2 são similares para ambos os métodos de cálculo de Z utilizados. Avaliando o comportamento das curvas de Z_L no intervalo de pressão de 0 – 500 bar verifica-se a formação de duas regiões distintas. Na primeira região (0 – 260 bar) tem-se as fases óleo e gás em equilíbrio. Nesta região, o Z_L sofre forte influência da pressão devido ao processo de solubilização do gás na fase óleo ocasionando um desvio do comportamento ideal. A temperatura apresenta pouca influência no comportamento de Z_L nesta região bifásica. A segunda região (260 – 500 bar) contém apenas a fase líquida devido a total solubilização do gás no óleo. Nesta região monofásica, tanto a pressão como a temperatura apresentam pequena influência no comportamento das curvas, as quais apresentam um comportamento semelhante ao de um líquido incompressível.

Na Tabela 1, os desvios médios relativos gerados na comparação dos valores dos fatores de compressibilidades das fases em equilíbrio são apresentados para as temperaturas de 65, 85 e 105 °C.

Tabela 1 – Comparação dos métodos de cálculo do fator de compressibilidades das fases.

DMR (%)	Temperatura (°C)		
	65	85	105
Z_V	9,8708E-02	7,4990E-02	2,3123E-02
Z_L	9,3569E-01	1,5008E+00	2,4164E-01

A partir dos valores apresentados na Tabela 1, verificam-se pequenos desvios entres os resultados gerados pelos métodos analítico e numérico para o fator de compressibilidade das fases líquida e vapor.

4. CONCLUSÕES

Diante dos resultados apresentados e do objetivo proposto neste trabalho conclui-se que para o cálculo do fator de compressibilidade das fases de um sistema bifásico, o método analítico e o método numérico apresentaram resultados semelhantes com valores de DMR menor que 2%. Além disso, verificou-se que as variáveis pressão e temperatura influenciaram fortemente na determinação de Z_v , mostrando uma não idealidade no comportamento desta variável. Em relação ao Z_L , verificou-se a existência de duas regiões, para as condições investigadas, com comportamentos distintos.

5. REFERÊNCIAS

- AHMED, T. *Equations of State and PVT Analysis: Applications for Improved Reservoir Modeling*. Texas, USA: Gulf Publishing Company, 2007.
- ANP. Boletim da Produção de Petróleo e Gás Natural. *Superintendência de Desenvolvimento e Produção – SDP*, 2014.
- BARBOSA NETO, A. M. *Desenvolvimento de um simulador PVT composicional para fluidos de petróleo*. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Mecânica, Departamento de Energia – Divisão de Petróleo, Unicamp, Campinas.
- BARBOSA NETO, A. M.; RIBEIRO, J. AZNAR, M.; BANNWART, A. C. *Thermodynamic modeling of vapor-liquid Equilibrium for Petroleum fluids*. 1º CNMAI, 2014.
- CARDANO, G. *Ars Magna, The rules of Algebra*. New York : Dover Publications, 1968.
- PENG, D. Y.; ROBINSON, D. B. The characterization of the heptanes and heavier fractions for the GPA Peng-Robinson programs. *Research Report RR-28, Gas Processors Association.*, 1978.
- SABER, N. *Phase behaviour prediction for Ill-defined hydrocarbon mixtures*. 2011. 175p. Thesis (Doctorate) – Department of Chemical and Materials Engineering, University of Alberta, Edmonton.
- SABER, N.; SHAW, J. M. Rapid and robust phase behaviour stability analysis using global optimization. *Fluid Phase Equilibria*, v. 264, p.137-146, 2008.