

ESTUDO DO EQUILÍBRIO DE FASES A ALTAS PRESSÕES DO DIÓXIDO DE CARBONO E HIDROCARBONETOS PRESENTES NO PETRÓLEO DO PRÉ-SAL, COM USO DE FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.

Leonardo Silva de Souza, Fernando Luiz Pellegrini Pessoa¹, Ricardo de Andrade Medronho¹

Bolsista PRH-ANP 13, leosilvasouza2001@gmail.com, ¹Escola de Química, Centro de Tecnologia, Universidade Federal do Rio de Janeiro,

RESUMO

MOTIVAÇÃO: A necessidade de modelar alguns sistemas que fogem da idealidade leva a estudar novos modelos termodinâmicos que possam prever as propriedades termodinâmicas longe das condições ideais. Uma das linhas de estudos nessa área é o desenvolvimento de novas regras de misturas que representem melhor as propriedades de tais misturas. Emerge da mecânica estatística não extensiva, algumas operações algébricas que vem sendo bem aplicada a sistemas com comportamento anômalo e que distanciam da normalidade. Com base nessa nova álgebra, conhecida como q-álgebra, propomos uma regra de mistura para ser usadas nos sistemas em gerais, mas principalmente nos sistemas onde os modelos atuais não fornecem bons resultados, como é o caso de sistemas em regiões supercríticas. Esses modelos alimentará uma simulação fluidodinâmica computacional de um célula de equilíbrio termodinâmico.

OBJETIVO: Desenvolver uma regra de mistura para ser usada no cálculo das propriedades termodinâmicas de uma simulação fluidodinâmica computacional.

APLICAÇÃO NA INDÚSTRIA DO PETRÓLEO: Esses resultados são de grandes utilidades na indústria petrolífera, principalmente no que tange a exploração de petróleo a altas profundidades, pois nessa região temos elevadas pressões, o que dificulta a previsibilidade das propriedades termodinâmicas com modelos atuais. Essa proposta de regra de mistura contribui nas novas possibilidades de se prever o equilíbrio líquido-vapor em regiões supercríticas.

RESULTADOS OBTIDOS: Uma nova forma de representar a regra de mistura utilizando a q-álgebra foi testada. Com essa proposta foi calculado o equilíbrio líquido-vapor para o sistema metanol + metil-laurate, obtendo-se uma melhor previsão dos dados quando comparada com as previsões usando-se a regra convencional baseada na equação de van der Waals. Também desenvolveu-se um programa que estima os parâmetros de interação binária das regras de mistura através do método da máxima verossimilhança.