



MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO DE ÓLEO EM SISTEMAS BIFÁSICOS COM A PRESENÇA DE PARAFINAS

A. S. X. Stragevitch¹, A. K. D. Souto Jr.², S. Lucena³

- 1- Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal de Pernambuco.
Av. Prof. Artur de Sá, s/n – Cidade Universitária – Recife – PE – CEP: 50740-521 – Recife – PE – Brasil
Telefone: (0-xx-81)3274-7272 – Fax: (0-xx-81)2126-7289 – Email: selene@ufpe.br
- 2- Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal de Pernambuco.
Av. Prof. Artur de Sá, s/n – Cidade Universitária – Recife – PE – CEP: 50740-521 – Recife – PE – Brasil
Telefone: (0-xx-81)3274-7274 – Fax: (0-xx-81)2126-7289 – Email: karlosduarte@hotmail.com
- 3- Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal de Pernambuco.
Av. Prof. Artur de Sá, s/n – Cidade Universitária – Recife – PE – CEP: 50740-521 – Recife – PE – Brasil
Telefone: (0-xx-81)3274-7274 – Fax: (0-xx-81)2126-7289 – Email: lucena@ufpe.br

RESUMO – Um modelo bifásico para a predição da deposição de parafinas no escoamento de petróleo no interior de dutos é apresentado. A descrição matemática considera os modos de operação hidrodinâmica e térmica no estado estacionário. As variações de entalpia devido à mudança de fase são levadas em consideração no balanço de calor. A transferência de massa ocorre principalmente através de difusão molecular e convecção cisalhante. As equações de balanço de massa e de energia são resolvidas simultaneamente com o equilíbrio termodinâmico, usando um algoritmo de flash pressão-entalpia, o qual foi devidamente modificado para considerar a formação de precipitados de parafinas com equilíbrio sólido-líquido na interface. O modelo despreza a formação de camada limite para a transferência de massa. O objetivo do trabalho é determinar a influência da variação da temperatura e da composição no fluido sobre os depósitos de parafinas ao longo dos dutos.

PALAVRAS-CHAVE: precipitação de parafinas; fluidodinâmica; fenômenos de transporte, modelagem, simulação computacional, escoamento não-newtoniano.

ABSTRACT – A two-phase model for the prediction of wax deposition in the petroleum flow in pipelines is presented. The mathematical description considers the steady state thermal and hydrodynamic operation modes. The phase change enthalpies are taken into consideration in the energy balance. The mass transfer takes place mainly by molecular diffusion and shear convection. Mass and energy balance equations are simultaneously solved with the thermodynamic equilibrium, the latter being calculated by a pressure-enthalpy flash algorithm, properly modified to account for wax formation with solid-liquid equilibrium at the interface. The model neglects the formation of a mass transfer boundary layer. The objective of the work is to determine the effect of fluid temperature and composition changes on wax deposition along pipelines.

1. INTRODUÇÃO

O comportamento não-newtoniano do escoamento de óleos em dutos é estudado no

presente trabalho, visando prever a segurança do transporte do material através de



modelagem e simulações numéricas. Particularmente, o escoamento do óleo parafínico em dutos de transferência, onde são permanentes a possibilidade de congelamento e suas conseqüências imprevisíveis, impõe um problema adicional pela exposição de grandes áreas aos riscos ambientais. Estes riscos são extremamente ampliados quando da parada não programada da transferência. Os riscos estão diretamente associados às propriedades do óleo. Estas propriedades são funções da composição do óleo, em particular do teor de parafinas presentes, do comportamento reológico, da temperatura, da pressão e das velocidades de escoamento. Ao longo dos dutos, estas propriedades apresentam variações, podendo causar problemas técnicos de vazamento, rompimento de tubulação, congelamento e depósito de materiais sólidos nos dutos e, conseqüentemente, elevação dos custos para as indústrias do petróleo. Portanto, para garantir as operações envolvidas no transporte deste fluido, torna-se necessário modelar este escoamento e construir um simulador específico para este problema.

Fenômenos tais como o congelamento do petróleo e a variação de volume com a temperatura acarretam dificuldades operacionais para garantir o escoamento nos dutos. A grande maioria dos trabalhos neste campo despreza o mecanismo de difusão multicomponente de parafinas no meio líquido, através de simplificações na elaboração da modelagem, principalmente devido à carência de parâmetros de transferência de massa para este sistema. Entretanto, desenvolver o balanço de massa atrelado ao mecanismo de transporte, define um modelo mais adequado para a representação do fenômeno. Em conseqüência, existe a expectativa de gerar simulações numéricas com um melhor desempenho e fidelidade do sistema físico em estudo. Outra motivação na abordagem proposta neste trabalho, aplica-se à versatilidade no ganho de parâmetros disponíveis para o controle deste tipo de problema em particular, como por

exemplo, os gradientes de concentração e de temperatura ao longo dos dutos de escoamento. Os parâmetros reológicos também podem ser utilizados para o controle de deposição de parafinas através da instalação de reômetros “on line”. Além disso, o modelo apresentado é consistente no sentido que prevê a formação de outra fase e a força motriz do processo de difusão mássica não-isotérmico.

A deposição de parafinas é um dos maiores problemas enfrentados nas operações de produção de óleo. As mudanças no equilíbrio físico-químico devido à diminuição da temperatura para abaixo do ponto de fusão, causam a cristalização, e por conseqüência, a perda na solubilidade dos componentes. Na maioria dos casos, a parafina precipitada tem causado entupimento dos reservatórios durante o tratamento de estimulação e interferido no bombeamento do óleo a baixas temperaturas. As causas mais significantes para a cristalização de parafinas incluem o resfriamento devido à expansão gasosa, perda de calor para a vizinhança e a intrusão de água quente, a qual produz a evaporação de componentes voláteis.

Por enquanto no presente estudo, os resultados apresentados das simulações numéricas compreendem o modelo termodinâmico para a previsão do equilíbrio sólido-líquido (Duarte et al., 2003). Este cálculo é necessário pois o modelo considera que a deposição de parafinas é rápida o suficiente para que os precipitados existentes nas paredes dos dutos, provenientes do óleo bruto, apresentem uma supersaturação das espécies no fluido na interface líquido-sólido. Considerou-se, portanto, a fase sólida como ideal e descrita como componentes puros distintos que não se misturam entre si, e a fase líquida, como não ideal, quantificando essa não idealidade pelo modelo UNIFAC. Existe uma ampla investigação na literatura com o objetivo principal de conhecer a composição nas fases líquida e sólida após o aparecimento e deposição da parafina, observando-se a

influência da temperatura. O aparecimento pode ser explicado através da própria redissolução de algumas parafinas precipitadas. Com o objetivo de validar as simulações concluídas até o momento, uma comparação entre os resultados fornecidos pelo modelo e dados da literatura se faz presente, considerando-se apenas o equilíbrio termodinâmico.

Convém salientar que foi desprezada a formação do filme de transferência de massa nas vizinhanças da interface líquido-sólido. De certa forma, o modelo pode ser simplificado com esta hipótese, através do regime de escoamento adotado. Entretanto, numa etapa próxima do presente trabalho, objetivamos ampliar as condições de aplicação das simulações para qualquer faixa do regime de escoamento.

2. MODELAGEM

A modelagem foi desenvolvida de acordo com as considerações simplificadoras e definição do sistema de equações de balanços de momento, massa e de energia simultâneos.

2.1 Considerações sobre o Escoamento

A modelagem é baseada na hipótese em que o problema matemático é discretizado através da divisão do duto em células. A Figura 1 apresenta a ilustração do problema físico em uma única célula. O objetivo é determinar a taxa de cristalização de parafinas nas paredes dos dutos, considerando-se equilíbrio termodinâmico na interface líquido-sólido.

As considerações sobre o modelo matemático são as seguintes:

- Escoamento permanente não-isotérmico;
- Regime de transição laminar-turbulento;
- Fluxo de calor na parede do tubo constante;

- Difusão mássica radial e axial;
- Dispersão axial;
- Condução térmica radial e axial;
- Convecção de calor;
- Escoamento de fluido de Power-Law;
- Despreza-se a dissipação viscosa.

Considera-se que na interface as fases se encontram em equilíbrio, ou seja, os potenciais químicos de todas as espécies de parafinas presentes são contínuos através do contorno da fase. O equilíbrio local é estabelecido no contorno de fase.

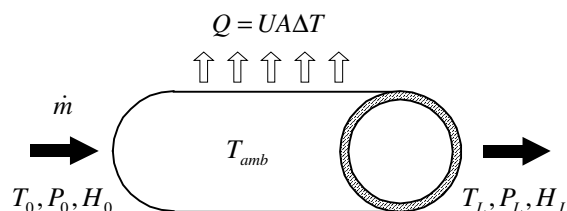


Figura 1 - Elemento de volume no duto de escoamento onde se aplica o modelo matemático.

2.2 Balanços de Massa e Energia Simultâneos

O processo de deposição de parafinas a partir do escoamento de óleos pesados em dutos deve ser estudado com a finalidade de se obter a influência dos efeitos térmicos sobre a taxa de transferência de massa da cristalização das espécies. No desenvolvimento do modelo é assumida a variação da entalpia devido à mudança de fase.

Os tamanhos das células que dividem o duto são diferenciados entre si e crescentes, conforme mostra a Figura 2. Este critério é utilizado com base no cálculo adaptativo para a divisão das células, considerando-se como uma função do fluxo de calor que deve ser o mesmo em cada uma. Portanto, segundo à natureza iterativa do problema, cada célula terá suas próprias condições iniciais, proporcionando tamanhos diferentes entre si. A vantagem consiste em permitir uma otimização na discretização do problema,

considerando-se um declínio de temperatura pré-determinado para cada elemento de volume.

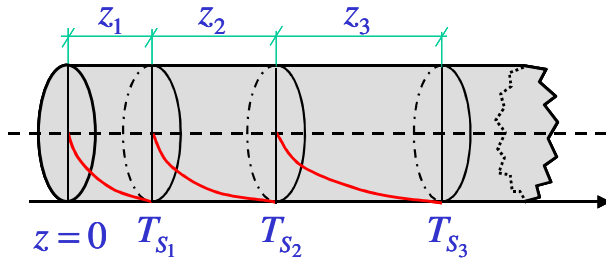


Figura 2 – Perfis de temperatura nas células.

O balanço de massa de uma espécie de parafina dissolvida no óleo é dado por

$$\rho \left(\frac{\partial c_A^*}{\partial t} + v_r \frac{\partial c_A^*}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial c_A^*}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A^*}{\partial z} \right) = \rho D_{AB} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A^*}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A^*}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A^*}{\partial z^2} \right] + R_A \quad (1)$$

onde

$$c_A^* = c_A - c_{Ae} \quad (2)$$

onde c_{Ae} é a concentração de equilíbrio do componente A (parafina) na temperatura da interface T_S , ou seja,

$$c_{Ae} = c_{Ae}(T_S) \quad (3)$$

Na Equação (1), ρ é a massa específica do fluido, v_r , v_θ e v_z são as componentes da velocidade, r , θ e z são as coordenadas do elemento de volume, D_{AB} é o coeficiente de difusão mássico para espécie A em uma mistura líquida binária, e R_A é a taxa de reação química do componente A.

Considerando o escoamento em regime permanente,

$$\frac{\partial c_A^*}{\partial t} = 0 \quad (4)$$

pela simetria do sistema,

$$\frac{\partial c_A^*}{\partial \theta} = 0 \quad (5)$$

$$v_r = v_\theta = 0 \quad (6)$$

e que não há reação química,

$$R_A = 0 \quad (7)$$

de modo que o balanço de massa final é dado por

$$v_z \frac{\partial c_A^*}{\partial z} - D_{AB} \frac{\partial^2 c_A^*}{\partial z^2} = D_{AB} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A^*}{\partial r} \right) \quad (8)$$

As seguintes condições de contorno são consideradas:

$$\text{C.C.1: } z=0, c_A = c_{A0}, c_{Ae} = 0 \quad (9)$$

$$\text{C.C.2: } r=R, c_A = c_{ASL}(R, z) \quad (10)$$

$$\text{C.C.3: } r=0, c_A \text{ é finito} \quad (11)$$

em que c_{ASL} é a concentração de A na interface da fase líquida e R é o raio do tubo.

Sendo ρ_m a massa específica da mistura da fase líquida e x_A a fração mássica do componente A na mistura, a condição de contorno da Equação (10) pode ser escrita como

$$r=R, c_A = c_{ASL}(R, z) = x_{ASL}(R, z) \rho_m \quad (12)$$

Na interface líquido-sólido, considera-se a relação para o fluxo de massa dada por

$$-D_{AB} \frac{\partial c_A^*}{\partial r} \Big|_{r=R} = -D_m \rho_m \frac{\partial (x_A - x_{Ae})}{\partial r} \Big|_{r=R} = 0 \quad (13)$$

Para o caso em estudo, como se trata de uma solução multicomponente de parafinas dissolvidas em óleo, o coeficiente de difusão na mistura D_m pode ser aproximado pelo binário, considerando-se que a solução é

suficientemente diluída. Integrando-se a Equação (13), obtém-se a taxa de fluxo de massa na interface, \dot{m} .

Considerando-se as variáveis adimensionais,

$$\xi = \frac{r}{R} \quad (14)$$

$$\zeta = \frac{z}{L} \quad (15)$$

$$\phi = \frac{v_z}{v_{m\acute{a}x}} \quad (16)$$

$$\Xi = \frac{c_{A0} - c_A^*(r, z)}{c_{A0}} \quad (17)$$

o balanço de massa pode ser adimensionalizado para

$$-P\acute{e}_{AB}\phi \frac{\partial \Xi}{\partial \zeta} + \frac{\partial^2 \Xi}{\partial \zeta^2} = -\frac{1}{\Lambda^2} \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \Xi}{\partial \xi} \right) \quad (18)$$

em que $P\acute{e}_{AB}$ é o número de Peclet mássico e Λ é uma relação raio/comprimento do duto.

As Condições de Contorno (9), (10) e (11), adimensionalizadas, são dadas por

$$\zeta = 0, \quad \Xi = 0 \quad (19)$$

$$\xi = 1, \quad \Xi = \Xi_{SL}(\zeta) \quad (20)$$

$$\xi = 0, \quad \Xi \text{ é finito} \quad (21)$$

A transferência de calor no escoamento de um fluido Power-Law com o fluxo de calor na parede constante é dada pela seguinte equação de balanço,

$$\rho c_p v_{m\acute{a}x} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^{\frac{1}{n}+1} \right] \frac{\partial T}{\partial z} = k \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (22)$$

sendo que c_p é capacidade calorífica do líquido, k é a condutividade térmica do líquido, n é o índice de potência do modelo de Power-Law, T é a temperatura, e $v_{m\acute{a}x}$ é o ponto máximo do perfil de velocidades. A velocidade máxima $v_{m\acute{a}x}$ para um fluido de Power-Law escoando em dutos pode ser obtida em Bird et al. (1987).

As condições de contorno, associadas ao balanço térmico, são dadas por

$$\text{C.C.1: } r = 0, \quad T = \text{finito} \quad (23)$$

$$\text{C.C.2: } r = R, \quad T = T_s(R, z) \quad (24)$$

$$\text{C.C.3: } z = 0, \quad T = T_0 \quad (25)$$

onde T_{amb} é a temperatura ambiente e T_0 é a temperatura na entrada do duto.

O fluxo de calor \dot{Q} , constante na interface líquido-sólido, é dado por

$$\dot{Q} \Big|_{r=R} = h_{in} A [T_{bulk} - T_s(R, z)] \quad (26)$$

em que A é a superfície de troca térmica e h_{in} é o coeficiente de transferência de calor no interior do filme, o qual pode ser determinado através do número de Nusselt. O valor médio para a temperatura do fluido T_{bulk} é expressa por

$$T_{bulk} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^L v_z(r) T(r, z) r dr dz d\theta}{\int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^L v_z(r) r dr dz d\theta} \quad (27)$$

O fluxo de calor é constante, portanto, o fluxo que atravessa o filme será o mesmo

que atravessa todas as camadas do fluido, considerando-se também a variação de entalpia na interface devido à mudança de fase, ou seja, a cristalização de parafinas. Dessa forma, a relação de fluxo de calor na interface é a seguinte:

$$\dot{Q}\Big|_{r=R} = \int_A k \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=R} dA - \dot{m}\Delta H \quad (28)$$

onde ΔH é a variação de entalpia de cristalização.

Como pode ser verificado na Equação (28), tem-se uma influência mútua entre os fenômenos de transferência de massa e de calor. As equações de ambos fenômenos se correlacionam implicitamente.

Os efeitos térmicos sobre as taxas de transferência de massa são uma consequência da variação de entalpia devido à mudança de fase. Existe um fator de diminuição na taxa de transferência de massa devido ao fluxo de calor. Isto quer dizer que a taxa predita para a análise isotérmica é maior do que a taxa predita para a análise não-isotérmica nas mesmas condições de escoamento. Se na análise isotérmica, há uma determinada resistência à transferência de massa, na análise não-isotérmica há uma resistência adicional devido à troca de calor com o ambiente.

Definindo-se uma variável adimensional para o balanço de energia,

$$\Theta = \frac{T(r, z) - T_s(R, z)}{T_0 - T_s(R, z)} \quad (29)$$

a Equação (22) pode ser escrita adimensionalizada como

$$-Pé\phi \frac{\partial \Theta}{\partial \zeta} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \zeta^2} = -\frac{1}{\Lambda^2} \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} \right) \quad (30)$$

em que $Pé$ é o número de Peclet para o transporte de calor.

As Condições de Contorno (23), (24), e (25) adimensionalizadas são as seguintes:

$$\xi = 0, \Theta \text{ é finito} \quad (31)$$

$$\xi = 1, \Theta = 0 \quad (32)$$

$$\zeta = 0, \Theta = 1 \quad (33)$$

3.RESULTADOS

Os resultados contemplam as simulações desenvolvidas sobre a modelagem termodinâmica por Duarte et al., 2003. Foi considerada que a temperatura de cada fase, líquida e sólida, é idêntica. O balanço de calor não foi desenvolvido pois o único objetivo nesta etapa, consistiu em avaliar a consistência dos resultados de equilíbrio sob o efeito da deposição de parafinas para uma dada temperatura e pressão.

Os resultados teóricos do presente trabalho foram comparados com os resultados experimentais de Dauphin et al. (1999). As simulações geradas estão representadas pelos gráficos das Figuras 4-7, com as variações das frações mássicas nas fases líquida e sólida em relação a cada componente após a precipitação.

A Tabela 1 apresenta a composição do fluido de alimentação do sistema que foi utilizada nos cálculos.

Tabela 1 – Composição de alimentação do sistema.

Parafina	% massa
<i>n</i> -C10	66,65
<i>n</i> -C18	10,57
<i>n</i> -C19	9,571
<i>n</i> -C20	8,641
<i>n</i> -C34	1,716
<i>n</i> -C35	1,546
<i>n</i> -C36	1,337

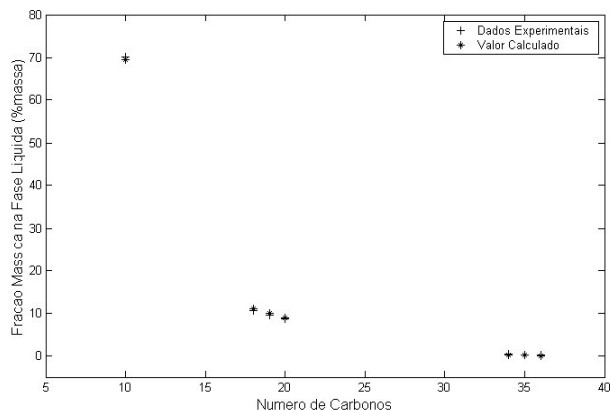


Figura 4 - Simulação referente à fase líquida realizada a pressão de 101,3 kPa e temperatura de 299,15 K.

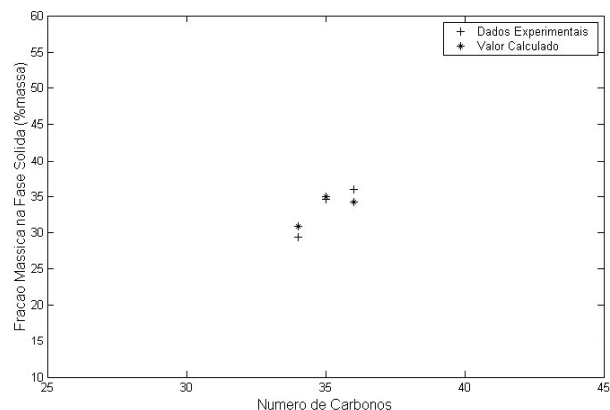


Figura 7 - Simulação referente à fase sólida realizada a pressão de 101,3 kPa e temperatura de 308,15 K.

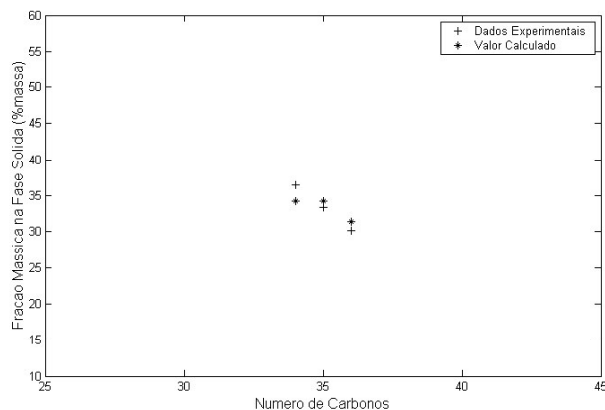


Figura 5 - Simulação referente à fase sólida realizada a pressão de 101,3 kPa e temperatura de 299,15 K.

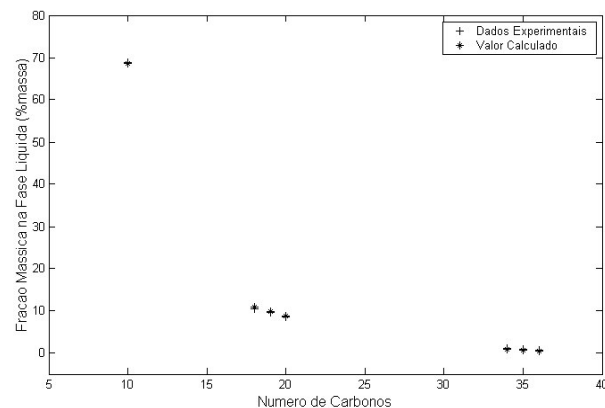


Figura 6 - Simulação referente à fase líquida realizada a pressão de 101,3 kPa e temperatura de 308,15 K.

Como se pode observar, os resultados teóricos tiveram uma concordância bastante satisfatória com as informações experimentais da literatura, principalmente para a fase líquida. Através da configuração do algoritmo construído aqui, baseado na teoria PT-flash, podemos disponibilizá-lo com confiança para determinar a concentração de equilíbrio das parafinas na interface líquido-sólido, apresentada na modelagem descrita no item 2 do presente.

4. CONCLUSÕES

A proposta é uma solução simultânea das equações de balanço de massa, para cada espécie de parafinas presentes na mistura, das equações diferenciais de momentum e das equações diferenciais de energia, juntamente com as equações constitutivas para o fluxo de massa. Para isto, envolve também a influência dos tensores de tensão, do vetor de fluxo de energia e da massa de parafinas precipitadas sobre os parâmetros reológicos.

A maioria dos trabalhos, como por exemplo, Creek et al. (1999), consideram apenas a difusão mássica como parâmetro controlador do processo de deposição de parafinas. O presente trabalho também está direcionado para determinar a taxa na qual a interface sólido-líquida se move através do fluido, considerando-se que a cristalização é



controlada tanto pela taxa de difusão mássica como pela taxa de transferência de calor, considerando-se o sistema bifásico.

Neste trabalho, é considerada a divisão do duto em determinado número de células de comprimentos distintos, utilizando-se uma metodologia de cálculo em que a temperatura declina somente uma quantidade pré-definida em cada célula. Isto implica em dizer que o perfil de temperatura, de forma exponencial, irá atender à condição de uma mesma quantidade de calor transferida para cada célula. Evidentemente, para que se complete todo o transporte de calor necessário para satisfazer esta condição, os tamanhos entre elas devem ser distintos e crescentes ao longo do duto, em consequência do resfriamento do fluido e das diferentes condições iniciais para cada célula. Garantindo-se esses cálculos, será permitida uma otimização na resolução numérica com uma diminuição do tempo de processamento.

A aproximação do regime estacionário é condizente, pois, o comprimento das células proporciona um tempo de residência muito inferior ao tempo do processo de deposição de parafinas. Além disso, não iremos representar as partidas do processo ou transições para outros modos de operação. Portanto, as variações locais com tempo dos parâmetros não serão relevantes na descrição dos fenômenos de transporte.

Todo o sistema das equações de conservação será aplicado a cada célula individualmente, utilizando-se funções de interpolação adequadas para os termos difusivos e convectivos nas interfaces das células, e que produzam um bom desempenho no avanço do cálculo iterativo.

Numa próxima etapa de avanço do presente trabalho, será considerado o modelo do filme de transferência de massa aplicado a qualquer regime de escoamento. Teremos como base o trabalho de Shagapov et al.

(2004) que define adequadamente o número de Sherwood para o cálculo da espessura do filme.

O sistema físico será discretizado, utilizando-se a técnica da colocação ortogonal e o sistema de equações será resolvido numericamente para cada célula. O programa computacional está sendo implementado com auxílio do software Matlab.

5. AGRADECIMENTOS

Agradecemos à FINEP, o suporte financeiro concedido para a realização deste trabalho, dentro do desenvolvimento do projeto de pesquisa 08 da rede cooperativa 06, edital CTpetro/CNPq-FINEP 03/2001 – fase 2.

6. BIBLIOGRAFIA

- BIRD, R. B., ARMSTRONG, R. C., HASSAGER, O. Dynamics of polymeric liquids. New York: Editora John Wiley & Sons, 1987.
- CREEK, J. L., LUND, H. J., BRILL, J. P., VOLK, M. Wax deposition in single phase flow. *Fluid Phase Equilibria*, v. 158-160, p. 801-811, 1999.
- DAUPHIN, C., DARIDON, J. L., COUTINHO, J., BAYLERE, P., POTIN-GAUTIER, M. Wax content measurements in partially frozen paraffinic systems. *Fluid Phase Equilibria*, v. 161 (1), p. 135-151, 1999.
- DUARTE, A. K., STRAGEVITCH, A. S. E. X., LUCENA, S. Modelo termodinâmico para deposição de parafina. *Anais do I Congresso Pesquisa & Desenvolvimento para o setor Petróleo e Gás da UFPE*, v. 1, p. 194-201, 2003.
- SHAGAPOV, V. SH., MUSAKAEV, N. G., KHABEEV, N. S., BAILEY, S. S. Mathematical modelling of two-phase flow in a vertical well considering paraffin deposits and external heat exchange. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 47, p. 843-851, 2004.