Simulações Computacionais de interfaces óleo/fluidos em nanoescala

Danilo Vantroba dos Santos (PIBIC/ FA), Lucas Stori de Lara (Orientador), e-mail: lslara@uepg.br
Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Física.

Física/ Física da Matéria Condensada.

Palavras-chave: extração, óleo, penetração.

Resumo

Utilizando-se de um modelo de dinâmica molecular clássica e simulações computacionais, o trabalho em questão contou com dois objetivos: (1) Modelagem molecular e estabilização de moléculas de óleo e (2) utilização das moléculas de óleo na modelagem de sistemas maiores contendo Benzeno+CO_2+H_2O, Heptano+CO_2+H_2O e Ciclo-Heptano+CO_2+H_2O. Dentre os sistemas estudados, uma difusão maior de CO_2 ocorreu no sistema Ciclo-Heptano+CO_2+H_2O, e uma menor no sistema Benzeno+CO_2+H_2O. Diante do exposto, há ganhos de tempo e rendimento em sistemas com grandes quantidades de Benzeno e Heptano se aplicado o fluído de injeção CO_2 e H_2O.

Introdução

O processo de extração avançada de petróleo é um procedimento muito delicado que requer um alto nível de tecnologia e conhecimentos de engenharia. Isso, pois a extração convencionalmente utilizada atualmente não consegue extrair todo petróleo presente em reservatórios, apenas 1/3 é extraído, enquanto os outros 2/3 ficam ainda retidos dentro dos reservatórios [1].

Devido à grande demanda por combustíveis que vivemos atualmente, novos processos de extração de petróleo estão sendo desenvolvidos, justamente para atender melhor a demanda global, um desses novos processos é chamado de recuperação melhorada de petróleo (EOR), que leva em consideração fatores como a recuperação térmica, métodos de injeção de gás e água e a utilização de polímeros e nanopartículas [2,3].

Um fluido comumente utilizado nos processos de EOR é o Dióxido de Carbono (CO_2), especialmente pelo seu valor ambiental. A injeção de CO_2 causa uma queda tanto na viscosidade do petróleo quando na tensão interfacial entre o petróleo e a parede do reservatório, levando a uma ganha na mobilidade do mesmo a uma maior facilidade no processo de extração [4].

Entretanto, a melhoria destes diferentes métodos de extração possuem um custo muito elevado se empregados experimentalmente, dentro deste contexto, métodos computacionais de simulação estão cada vez mais sendo utilizados ao redor do mundo por diversos fatores, como a drástica redução dos custos de pesquisa, bem como uma maneira de analisar as propriedades termodinâmicas, obtendo informações de diversos sistemas físicos em escala nanométrica, de modo que a Dinâmica Molecular acaba sendo uma ferramenta de valor cada vez maior nas pesquisas de diferentes ramos da ciência e da indústria [5].

É com este intuito que o projeto foi realizado, tendo como objetivo descrever a estabilidade e a mobilidade de fluidos de injeção CO_2 e salmoura em conjunto ou separados com um modelo de óleo leve contendo oito hidrocarbonetos simples separados em: 4 hidrocarbonetos da classe dos alcanos, 2 da classe de cicloalcanos e 2 da classe de aromáticos, bem como a utilização de um modelo de Dinâmica

Molecular clássica (MD) para a modelagem de três sistemas óleo/fluido (Benzeno+CO_2+H_2O, Heptano+CO_2+H_2O e Ciclo-Heptano+CO_2+H_2O), e a determinação propriedades termodinâmicas como o perfil de densidade e coeficiente de difusão, com o intuito de entender os efeitos da molhabilidade e tensão superficial destes sistemas em condições encontradas em reservatórios de petróleo [6].

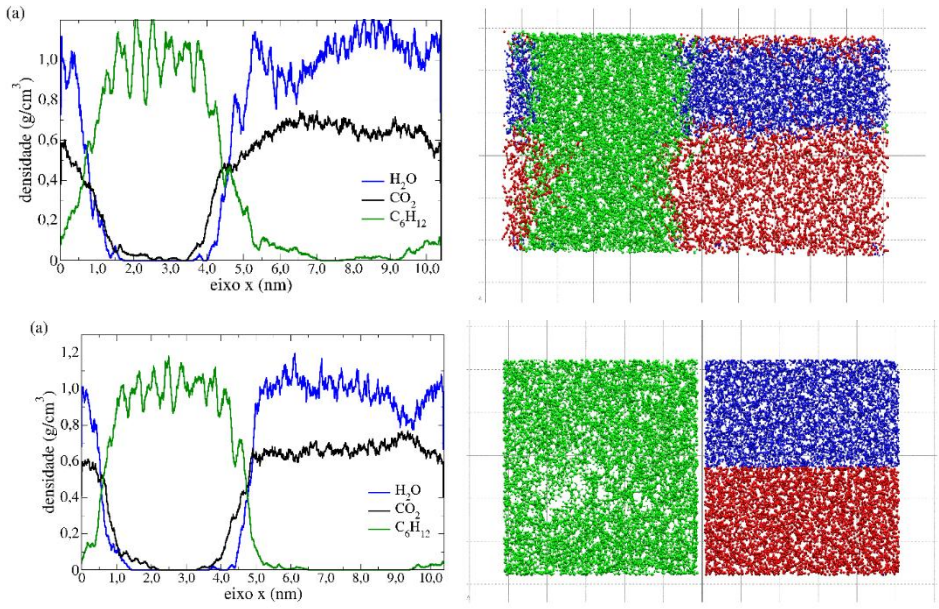
Material e Métodos

Utilizando de um programa de criação de moléculas, “Materials Studios”, as moléculas de Benzeno (C_6H_6), Hexano (C_6H_{14}), Heptano (C_7H_{16}), Octano (C_8H_{18}),Nonano (C_9H_{20}) , Tolueno (C_7H_8), Ciclo-Heptano (C_7H_{14}) e Ciclo-Hexano (C_6H_{12}) foram modeladas individualmente e submetidas a diversas etapas de simulações diferentes utilizando dos ensembles NVT e NPT, a fim de estabilizar-las e prepará-las para a modelagem dos sistemas maiores. A estabilização é vista pelas curvas de convergências de gráficos de energia, pressão, temperatura e volume de cada molécula. Uma vez confirmadas as convergências destas curvas, as modelagens dos sistemas foram feitas utilizando um programa desenvolvido em Fortran. Foram modelados três sistemas de interações óleo/fluido: Benzeno+CO_2+H_2O, Heptano+CO_2+H_2O e Ciclo-Heptano+CO_2+H_2O. As simulações destes sistemas foram feitas por aproximadamente 2 (ns), também passando por etapas de estabilização e minimização de energias nos ensembles NVT e NPT. As interações de penetração de C_2O foram observadas utilizando gráficos gerados por uma análise de Perfil de Densidade, utilizado na distinção de fases líquido-líquido ou líquido-sólido em uma dada simulação, como também a visualização 3D do sistema em si.

Resultados e Discussão

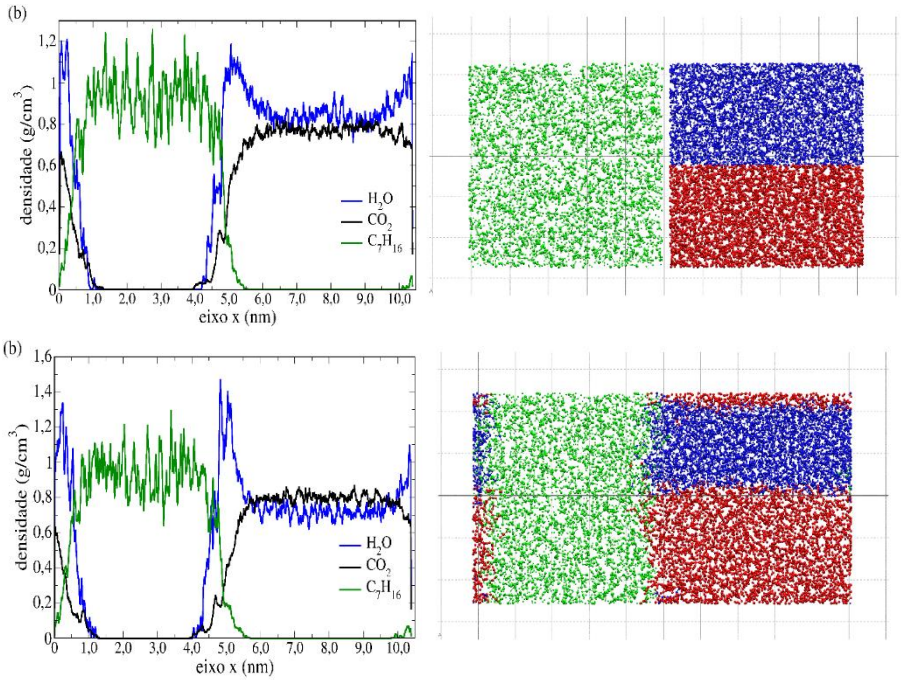
Analisando os gráficos do perfil de densidade (inicial e final) da figura 1 acima, não se pode confirmar que houve uma pequena penetração do fluido de injeção no benzeno, porém analisando a figura ao lado do gráfico, pode-se ter noção que, apesar de ser pequena, houve uma penetração de CO_2 no Benzeno.

FIGURA 1 – Estado inicial (acima) e final (abaixo) da simulação do sistema Benzeno (verde)+CO_2 (vermelho)+H_2O (azul).



Fonte: O autor. Utilização dos programas “XMGrace” para a análise gráfica (direita) e “Visual Molecular Dynamics (VMD)” para a análise visual 3D do sistema (esquerda).

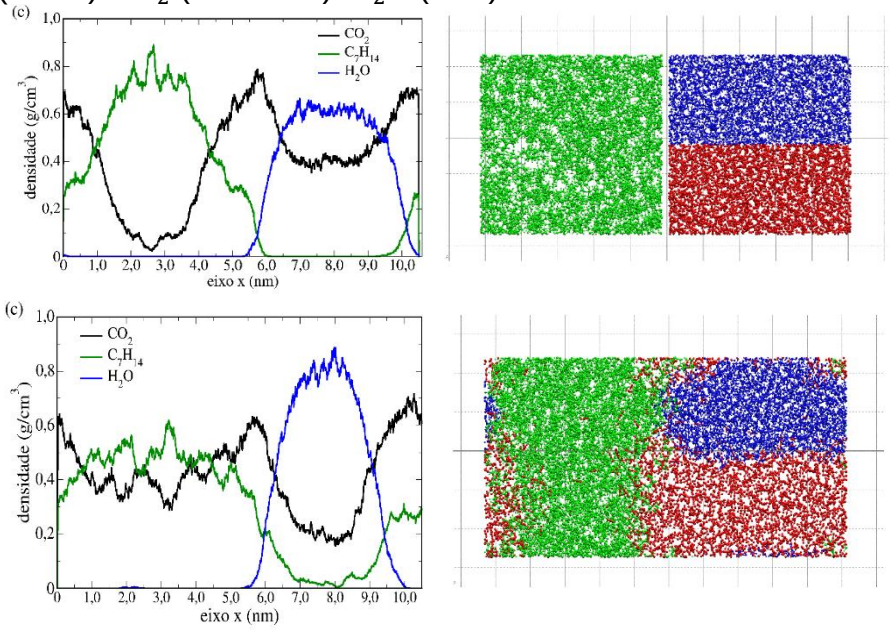
FIGURA 2 – Estado inicial (acima) e final (abaixo) da simulação do sistema Heptano (verde)+CO_2 (vermelho)+H_2O (azul).



Fonte: O autor. Utilização dos programas “XMGrace” para a análise gráfica (direita) e “Visual Molecular Dynamics (VMD)” para a análise visual 3D do sistema (esquerda).

O sistema Heptano CO_2+H_2O, mostrado na figura 2 acima, tanto pelo gráfico quanto pela figura de visualização molecular é possível notar que não houve penetração, é possível afirmar que o uso de CO_2 e H_2O como fuido de injeção para reservatórios com grandes quantidades de heptano é ineficiente, não gerando nenhum ganho ou facilidade no processo de extração.

FIGURA 3 – Estado inicial (acima) e final (abaixo) da simulação do sistema Ciclo Heptano (verde)+CO_2 (vermelho)+H_2O (azul).



Fonte: O autor. Utilização dos programas “XMGrace” para a análise gráfica (direita) e “Visual Molecular Dynamics (VMD)” para a análise visual 3D do sistema (esquerda).

O sistema Ciclo-Heptano+CO_2+H_2O foi o único sistema em que houve a penetração de CO_2 realmente notável, como visto na figura 3 acima. O que pode ser constatado comparando o centro das figuras a direita, a penetração ocorreu através da interação CO_2 e do ciclo heptano, logo, pode-se afirmar que a utilização do flui de injeção CO_2 e H_2O é eficiente na penetração de poços com grandes quantidades de Ciclo Heptano.

A partir destes resultados, é possível obter uma melhor referência nos estudos de sistemas de extração de petróleo, servindo como base para a criação de um sistema maior e mais condizente com os sistemas reais encontrados na realidade.

Conclusão

Com a conclusão do trabalho, tem-se que, apesar de ainda ser um projeto teórico montado em um sistema isolado, os resultados obtidos foram condizentes com a literatura encontrada e poderão ser utilizados como base estrutural para a criação e aperfeiçoamento de sistemas maiores e mais próximos a realidade.

Agradecimentos

Agradecimentos a Fundação Araucária, a UEPG e ao CENAPAD-SP.

Referências

[1] Lara, L.S, “Estudo de nanopartículas em interfaces fluido/fluido via dinâmica molecular: aplicações às tecnologias do petróleo”, **Universidade Federal do ABC**, (2013).
[2] Fang, T, Wang, M, Yang, G, Yingnan, Z, Youguo, ,Y, Zhang, J, “Enhanced oil recovery with CO2/N2 slug in low permeability reservoir: Molecular dynamics simulation”, **J.CES**, 2018.12.016 (2018).
[3]Lara, L.S, Michelon, M. F, Miranda, C. R, “Molecular dynamics studies of fluid/oil interfaces for Improved Oil Recovery processes.” **J. Phys. Chem**. B., 116, 14667-14676 (2012).
[4] Allen, M. P. e Tildesley, D. J. Computer Simulation of Liquids. **Oxford Science Publications**, Oxford, (1987).
[5] Hillie, T. and Hlophe, M., “Nanotechnology and the challenge of clean water.”, **Nature Nanotechnology**, 2 (11), 663-664 (2007).
[6] Frenkel, D. and Smit, B., “Understanding Molecular Simulation”, **Academic Press**, San Diego (1996).