

DINÂMICA MOLECULAR EM MESOESCALA DA FORMAÇÃO DE EMULSÃO EM PETRÓLEO ESTABILIZADA POR ASFALTENO

Carlos Henrique Linhares de Souza, Victor Freire Sydrião de Alencar, Pedro Felipe Gadelha Silvino

A presença de asfalteno encarece custos de elevação, produção, tratamento e transporte de petróleo. Tal fato se deve principalmente à precipitação de asfalteno nos dutos e equipamentos e à formação de emulsão água/óleo. Não se sabe ao certo os mecanismos envolvidos neste fenômeno e uma investigação detalhada a respeito do comportamento molecular do asfalteno em diferentes condições deve ser realizada. O presente projeto utilizou uma abordagem baseada em dinâmica molecular em mesoescala para avaliar o papel das moléculas de asfalteno e como as condições operacionais como composição da fase óleo e concentração de asfalteno interferem na dinâmica da formação e estabilização de emulsões em petróleo. Para isto foram utilizados modelos em escala coarse-grain para água, óleo e asfalteno. Com esta abordagem, é possível representar moléculas complexas, como as de asfalteno, através de modelos simplificados, permitindo simulações com quantidade de moléculas representativa, tamanhos de caixas de simulação e duração condizentes com os fenômenos avaliados. Foram calculadas tensões interfaciais de sistemas contendo água e hidrocarbonetos e suas respectivas distribuições de densidade ao longo da interface, obtendo boa concordância com dados da literatura. Sistemas contendo água, hidrocarbonetos e asfalteno, inicialmente distribuídos aleatoriamente na caixa de simulação foram simulados e o grau de agregação da água foi avaliado para sistemas contendo diferentes composições de fase óleo. Com estes resultados foi possível fazer uma avaliação preliminar do efeito da composição da fase óleo sobre a coalescência de gotas de água.

Palavras-chave: Petróleo. Asfalteno. Simulação Molecular. coarse-grain.