



**CENTRO UNIVERSITÁRIO TIRADENTES-UNIT/AL**

**REITORIA**

**COORDENAÇÃO DE PESQUISA, PÓS-GRADUAÇÃO E EXTENSÃO (COPPE)**

## **UTILIZAÇÃO DO MAPLE PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DAS RELAÇÕES DE MAXWELL-STEFAN**

Adryelle Francisca da Silva<sup>1</sup> (Graduanda em engenharia de petróleo), e-mail:  
aadryelle@gotmail.com;

Iara Maria Veloso Duda<sup>1</sup> (Graduanda em engenharia de petróleo), e-mail:  
iara\_veloso@hotmail.com;

Dheiver Francisco Santos<sup>1</sup> (Orientador), e-mail: dheiver.santos@gmail.com

Centro Universitário Tiradentes<sup>1</sup>/Engenharia de Petróleo/Alagoas, AL.

### **1.00.00.00-3 - Ciências Exatas 3.05.02.01-2- Termodinâmica**

Hidrato é uma solução sólida, visualmente similar ao gelo, de composição mal definida entre moléculas de hidrocarbonetos de baixo peso molecular e água, trata-se de cristais formados pelos componentes do gás natural em presença de água (ALMEIDA, 2015). É considerado um dos maiores inimigos da indústria no processo de exploração de petróleo, por causar problemas tais como erosão e/ou corrosão em tubulações, bloqueio em linhas de transferência, danos ao compressor e outros problemas industriais. Uma vez que o hidrato esteja formado, é necessário que sejam tomadas medidas cabíveis como a injeção de inibidores para sua dissociação e recuperação do escoamento normal na planta, visando a continuidade das operações e garantindo a qualidade de escoamento, dentre elas o emprego de inibidores termodinâmicos. Inibidores de formação de hidratos são substâncias solúveis em água, geralmente sais ou álcoois. Essas substâncias têm por objetivo diminuir a quantidade de água livre do sistema, dificultando assim a formação do retículo cristalino. Os álcoois são ótimos inibidores, pois promovem a remoção dos envelopes de hidrato de forma permanente além de manter uma boa faixa de sub-resfriamento. Porém se utilizado em grande quantidade pode ter os seus inconvenientes. Segundo SOBRINHO (2013), o MEG (monoetilenoglicol) é um álcool com dois grupos-OH (um diol), um composto químico, o monoetilenoglicol é um produto estável que pode reagir quando em contato com oxidantes, ácidos e álcalis, é muito utilizado como anticongelante. O uso do MEG como inibidor de hidratos apresenta algumas vantagens, como por exemplo, menor viscosidade proporcionando maior facilidade de escoamento, uma melhor recuperação em relação à outros glicóis, menor solubilidade em hidrocarbonetos líquidos e redução de temperatura na formação de hidratos. Para a utilização de inibidores faz-se necessário quantificar uma dosagem adequada para cada caso específico. Em contrapartida, esta atividade tem representado uma grande dificuldade para a indústria, pois em muitos casos ocorre desperdício de material e/ou formação de sistemas sub-inibidos. A abordagem de Maxwell-Stefan é capaz de representar as possíveis interações e a taxa de difusão entre as substâncias da mistura. Para a solução de um modelo que incorpore simultaneamente equações de momento e transferência de massa para fluidos multicomponentes, faz-se necessário o uso de esquemas matemáticos para o cálculo das variáveis predominantes para o equilíbrio termodinâmico. É necessário expressá-lo em termos de alguma função auxiliar que possa ser facilmente identificada com a realidade física. Desta forma, para obtenção da solução de tais equações será utilizado o software Maple que é um sistema algébrico computacional comercial de uso genérico avançado. Constitui um ambiente informático para a computação de expressões algébricas, simbólicas, permitindo o desenho de gráficos a duas ou a três dimensões, assim, espera-se apresentar um diferencial, pois serão abordados parâmetros desafiadores e bastante relevantes para as empresas de exploração e produção de petróleo e gás natural, tendo em vista que a utilização do maple aborda fatores importantes não só para o problema de hidratos em tubulações, mas qualquer outro sistema que envolve

misturas multicomponentes. Desta forma, surge a possibilidade de dar um auxílio evolutivo para diversas áreas da indústria do petróleo.

**Palavras-chave:** Hidratos, Inibidores, Multicomponentes.

## **ABSTRACT:**

Hydrate is a solid solution, visually similar to ice, of ill-defined composition between molecules of hydrocarbons of low molecular weight and water, they are crystals formed by the components of the natural gas in the presence of water (ALMEIDA, 2015). It is considered one of the industry's biggest enemies in the oil exploration process, because it causes problems such as erosion and / or corrosion in pipes, blockage in transfer lines, compressor damage and other industrial problems. Once the hydrate is formed, it is necessary to take measures such as the injection of inhibitors to dissociate and recover the normal flow in the plant, aiming at the continuity of operations and ensuring the quality of flow, among them the use of thermodynamic inhibitors . Hydrate formation inhibitors are water-soluble substances, usually salts or alcohols. These substances aim to decrease the amount of free water in the system, thus hindering the formation of the crystalline reticulum. Alcohols are excellent inhibitors, since they promote the removal of the hydrate envelopes permanently besides maintaining a good subcooling range. But if used in large quantity can have its drawbacks. According to SOBRINHO (2013), MEG (monoethylene glycol) is an alcohol with two OH-groups (a diol), a chemical compound, monoethylene glycol is a stable product that can react when in contact with oxidants, acids and alkalis, is widely used as antifreeze. The use of MEG as a hydrate inhibitor has some advantages, such as lower viscosity, greater ease of flow, better recovery compared to other glycols, lower solubility in liquid hydrocarbons and reduction of temperature in hydrate formation. For the use of inhibitors it is necessary to quantify a dosage suitable for each specific case. On the other hand, this activity has presented a great difficulty to the industry, since in many cases material waste and / or formation of sub-inhibited systems occurs. The Maxwell-Stefan approach is capable of representing the possible interactions and the rate of diffusion between the substances in the mixture. For the solution of a model that simultaneously incorporates moment equations and mass transfer for multicomponent fluids, it is necessary to use mathematical schemes to calculate the predominant variables for the thermodynamic equilibrium. It is necessary to express it in terms of some auxiliary function that can be easily identified with physical reality. Thus, to obtain the solution of such equations will be used the software Maple which is a commercial computational algebraic system of advanced generic use. It is a computer environment for the computation of algebraic, symbolic expressions, allowing the drawing of graphs in two or three dimensions, thus, it is expected to present a differential, since it will be approached parameters that are challenging and very relevant for the companies of exploration and production of oil and natural gas, considering that the use of the maple addresses important factors not only for the problem of hydrates in pipes, but any other system that involves multicomponent mixtures. In this way, the possibility of giving evolutionary assistance to various areas of the oil industry arises.

**Keywords:** Hydrates, Inhibitors, Multicomponents..

## **Referências/references:**

CONSTANTINO, Pedro. Aplicação da Abordagem de Maxwell-Stefan na Modelagem e Simulação Dinâmica do Fenômeno de Mistura entre Água, MEG e Etanol. Monografia em Engenharia Química, Escola de Química UFRJ, Rio de Janeiro/RJ, 2014.

SOBRINHO, Patrícia. Estudos Termodinâmicos do Processo de Regeneração de Monoetilenoglicol (MEG). Monografia de Graduação, UFRN, Natal/RN, 2013.

ALMEIDA, Lara Maria. Prevenção de Hidrato com Adição de Inibidores. Trabalho de Conclusão de Curso (Engenharia de petróleo), Universidade Federal de Fluminense, Niteroi/RJ, 2015.