

[Desenvolvimento de código para simulador de formulação de sistemas para produção de emulsões com HLD conhecido, para duas variáveis desconhecidas e desenvolvimento de interface gráfica]

Palavras-Chave: [PROGRAMA], [FORMULAÇÃO DE EMULSÕES], [EQUAÇÃO HLD]

AUTORES/AS:

RODRIGO BERINI TAMAKI [FAPESP]

DR. CARLOS EDUARDO PERLES

JULIANA MAYUMI MILLANI DOI [FAPESP]

DRA. VANESSA CRISTINA BIZOTTO GUERSONI

PROF. DR. ANTONIO CARLOS BANNWART (ORIENTADOR) [FAPESP]

INTRODUÇÃO:

Esse projeto de pesquisa tem como objetivo apresentar um programa desenvolvido em Python, nomeado “HLDEquationProgram”, capaz de auxiliar na formulação de emulsões petróleo/água com as propriedades físico-químicas do sistema descritas pela teoria do HLD (hydrophilic/ lipophilic difference), a qual leva em consideração a composição do sistema água e óleo, como também o surfactante e outros parâmetros físico-químicos, como a temperatura e salinidade. As equações gerais de HLD para surfactantes aniônicos e não iônicos são, respectivamente:

$$HLD = \ln S - kEACN + Cc + f(A) - c_T(T - T_{ref})$$

$$HLD = bS - kEACN + Cc + f(A) + c_T(T - T_{ref})$$

Nestas expressões, S representa a porcentagem da fração mássica de sal na fase aquosa; EACN é o número efetivo de carbono; Cc são os parâmetros característicos da estrutura do surfactante; C_T são os coeficientes de temperatura e f(A) é uma função que depende do tipo e da concentração do álcool (% em peso), geralmente descrito por f(A)=a*A, em que A é a concentração. (SALAGER, 2006)

Destarte, a formulação de emulsões com valores de HLD definidos constituem uma etapa essencial na investigação da influência da composição das fases aquosa e óleo no fenômeno de coalescência de emulsões do tipo água em óleo ou óleo em água. Este projeto de pesquisa está incluído em um dos temas de Pesquisa do Energy Production Innovation Center (EPIC; UNICAMP/ EQUINOR/ FAPESP) cujo objetivo é estudar o fenômeno de inversão de fases de emulsõesde

petróleo com base no valor de HLD do sistema. Essas emulsões ocorrem durante o fluxo multifásico de petróleo e água nas bombas e podem causar grandes problemas por esse processo de inversão, devido ao aumento de viscosidade. Assim, prever esse fenômeno garante o escoamento adequado e preserva a eficiência das bombas. Os estudos geralmente são realizados com a formulação de várias emulsões com uma ampla faixa de HLD para a obtenção desses dados. (BENTO, 2016)

Dessa forma, a presente pesquisa tem como objetivo apresentar um código em Python capaz de calcular até duas variáveis desconhecidas da equação de HLD juntamente com sua interface gráfica, visando facilitar o desenvolvimento de formulações com os valores de HLD definidos e, assim, ser uma alternativa de ferramenta para os trabalhos em andamento dos integrantes do grupo de pesquisa, alunos de mestrado e doutorado. O programa consta de algumas alternativas para facilitar a utilização por parte dos usuários, entre elas estão a presença de tabelas de consultas de constantes, listas para seleção dos tipos mais utilizados de álcool e sal, rápida seleção das variáveis e visualização gráfica das soluções.

METODOLOGIA:

Inicialmente, a escolha do Python para o desenvolvimento do programa foi devido à sua ampla disponibilidade de bibliotecas de fácil instalação que auxiliam no desenvolvimento da parte gráfica e matemática, contribuindo assim para que o simulador seja mais intuitivo e com menor grau de complexidade.

Em relação a parte matemática, como a equação do HLD apresenta várias constantes, neste projeto utilizou-se uma base de dados de constantes k , C_T , C_c e $EACN$ de diferentes óleos para a confecção das tabelas de consultas com esses parâmetros, sendo estes disponibilizados por Salager (2001).

Em consequente, partiu-se para o desenvolvimento da interface gráfica. A construção das informações dispostas na tela ao abrir o programa, como textos dispostos, espaços para inputs de usuários, listas, menu e outras opções foram criados pela biblioteca PyQt5 do Python. Entre as ferramentas dessa biblioteca está o aplicativo Qt designer, o qual permite uma modelagem e disposição livre desses elementos na tela, que podem ser integrados posteriormente ao código principal. Um exemplo do programa Qt designer é visto pela figura 1, no qual o espaço da esquerda contém uma série de elementos (listas, botões, textos) que podem ser arrastados para a tela "Main Window". Com isso,

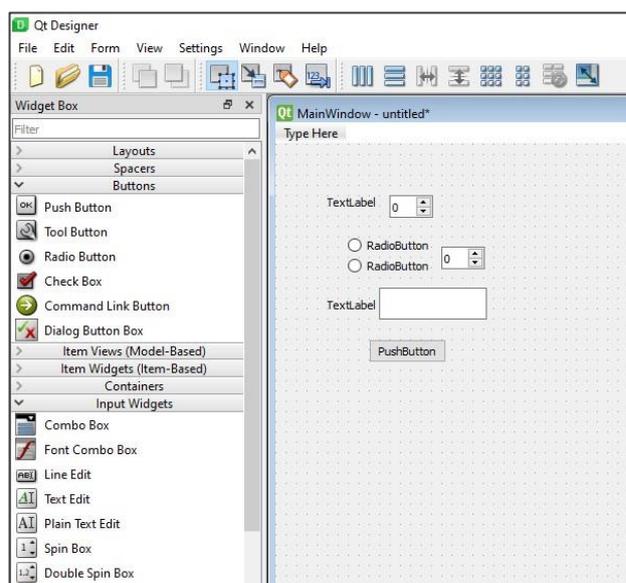


Figura 1 - Exemplo de aplicação da interface Qt

ao salvar o arquivo há a geração de um arquivo “.ui” que pode ser acessada pela biblioteca do PyQt5.

Ainda, o desenvolvimento do programa consistiu no uso de outra biblioteca do Python para obter-se uma melhor visualização das soluções quando selecionada a opção de calcular duas variáveis em um intervalo definido pelo usuário. Assim, a biblioteca “matplotlib” (pyplot) foi escolhida para a construção de gráficos das duas variáveis.

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Inicialmente, é necessário apresentar a disposição geral do programa junto com a lógica de sua organização. Um dos principais desafios iniciais enfrentados no cálculo programacional do HLD se deu pelo amplo número de variáveis que a equação possui. Não somente é necessário escolher qual variável se deseja calcular, como temperatura e salinidade por exemplo, mas também deve-se informar a presença ou não de álcool, se existe uma mistura ou não de surfactantes, se são iônicos ou não-iônicos e os valores de cada uma dessas variáveis. Assim, devido a ampla ramificação de inputs geradas por essas opções surgiu o problema de como organizá-los para permitir que o usuário preencha somente as informações necessárias e como essas ramificações de cálculo devem ser tratadas propriamente no Python.

Dessa forma, a solução encontrada consistiu em dividir as informações de preenchimento do usuário em duas telas separadas, de forma que a segunda atualizasse de acordo com as opções selecionadas na tela inicial. Então, as telas foram desenvolvidas separadamente através do aplicativo Qt, sendo que a figura 2 apresenta a primeira tela do programa. Nela, há o espaço para o input do valor conhecido de HLD a ser atingido, a seleção da(s) variável(is) principais, do número de óleos e surfactantes no sistema (mistura ou sistema simples), listas para definir o tipo/presença de sal e álcool no sistema e as opções do surfactantes para definir as constantes k e C_T e o tipo da equação HLD (surfactantes iônicos ou aniônicos), assim como tabelas para consultas.

Figura 2 - Tela inicial do programa

Destaca-se que as informações coletadas são os parâmetros necessários para orientar a segunda tela. Esta, por sua vez, é visualizada pela figura 3 e apresenta caixas de input para informar os demais valores numéricos utilizados para os cálculos. As caixas mais claras são as que devem ser preenchidas e

Figura 3 – Inputs dos parâmetros na segunda tela

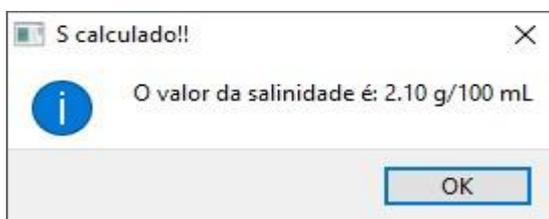


Figura 4 - MessageBox da solução de uma variável

as mais cinzas não permitem o preenchimento e não são utilizadas, sendo essa definição garantida pelo programa propriamente através de um conjunto de funções e "if".

Em sequência, a etapa primordial para o desenvolvimento do programa consistiu no cálculo das variáveis que levavam ao valor desejado de HLD. Conforme mencionado anteriormente, a(s) variável(eis) foram isoladas da equação. Para uma variável existe

apenas uma solução, logo adotou-se uma "MessageBox" (exemplo na figura 4) para fácil visualização do resultado, sendo que ela aparece após o preenchimento de todos os inputs da segunda tela.

Para duas variáveis, existe uma extensa combinação de soluções possíveis em que uma variável está em função da outra. Assim, definiu-se intervalos mínimos e máximos para serem percorridos por uma variável, levando a determinação da outra.

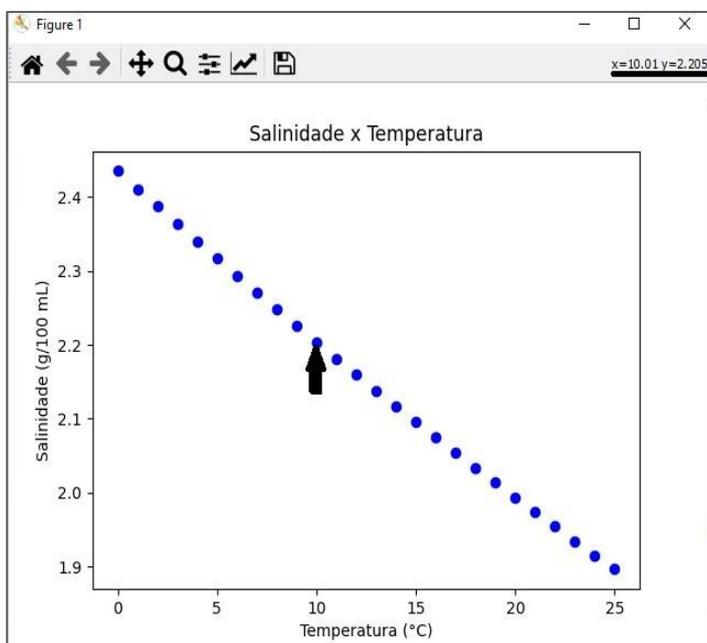


Figura 5 - Exemplo solução gráfica para duas variáveis

Definiu-se também um critério para quais parâmetros teriam preferência de ser percorridos nesse intervalo em detrimento da outra. Parâmetros como temperatura, salinidade, porcentagem de álcool são valores que podem ser mais facilmente controlados por números inteiros ou com uma casa decimal e, assim, são melhores para percorrer intervalos com passos definidos. Entretanto, parâmetros como o número de carbono efetivo, curvatura característica de surfactantes e fração molar podem ter mais casas decimais e ser calculadas a partir de outras variáveis sem

que o resultado seja um valor difícil de controlar/ medir, como por exemplo uma salinidade de 3,56 g/mL.

Destarte, a representação das soluções possíveis foi realizada com o gráfico do modelo Pyplot, no qual apresenta-se um exemplo da determinação de salinidade e temperatura na figura 5.

A opção gráfica foi utilizada para facilitar a visualização numérica e escolha da melhor combinação, já que a tabela, antes considerada como alternativa, iria ter muitos dados (mais de 10 combinações), o que iria dificultar a visualização. Entretanto, uma das limitações da opção gráfica adotada está na exatidão das coordenadas da solução (entre a segunda e terceira casa decimal), já que se faz necessário aplicar zoom em um ponto para uma melhor precisão.

Ademais, outro desafio que foi percebido durante a construção do código refere-se à possibilidade de esquecimento do usuário em informar todos os valores, ou seja, deixar uma caixa vazia por engano. Esse deslizava gerava um erro de execução e conseqüente fechamento no programa. Dessa forma, incluiu-se uma caixa de aviso para informar ao usuário da falta de dados, porém, ela evita o fechamento apenas da primeira tela. Caso algum valor não for colocado na segunda tela ocorre o fechamento do programa, sendo que a causa desse *bug* (problema) não foi identificado.

Por fim, fez-se a passagem do arquivo Python final para o arquivo executável. Tal procedimento foi realizado através do PyInstaller e o executável foi disponibilizado na pasta do Google Drive do grupo de pesquisa. Salienta-se que o programa foi instalado com sucesso nos computadores do laboratório e que está disponível para os testes.

CONCLUSÕES:

Em virtude das considerações expostas, como o programa tem o intuito de auxiliar no desenvolvimento de formulações de HLD conhecidos, o código tem um potencial para facilitar a determinação das variáveis. A interface do programa foi concluída e possui muitas opções automatizadas que o destacam de alternativas comumente usadas, como o Excel. Ademais, melhorias futuras podem ser trabalhadas para torná-lo mais completo, como a integração das tabelas das constantes com as caixas de seleção e exatidão nos valores de variáveis pelo gráfico. Devido a pandemia, o tema do projeto foi modificado e, com isso, houve um tempo reduzido para o desenvolvimento do programa. Porém, ressalta-se que os principais objetivos foram atingidos.

BIBLIOGRAFIA

BENTO, J. & GUTH, M. & WEINSCHUTZ, R. & YAMAMOTO, CARLOS & LUZ, LUIZ. (2015). **Estudo da inversão catastrófica em emulsões de petróleo-sistema modelo**. 5266-5273. 10.5151/chemeng-cobeq2014-0120-26939-157556.

ANDREOLLI, I. **Introdução à Elevação e Escoamento Monofásico e Multifásico de Petróleo**. Rio de Janeiro, 1st Editio ed. [s.l.] Editora Interciência, 2016.

SALAGER, JEAN-LOUIS & ANTÓN, R.E. & ANDÉREZ, J.M. & AUBRY, JEAN-MARIE. **Formulation des micro-émulsions par la méthode HLD**. Techniques de l'Ingénieur. 1-20. 2001

SALAGER, J. L. **Emulsion Phase Inversion Phenomena**. In: SJÖBLOM, J. Emulsion and Emulsion Stability. 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2006.