



SPE 231401

Apresentando uma ferramenta de próxima geração para modelagem da precipitação de asfaltenos, visando aprimorar a simulação de reservatórios e a garantia de escoamento da produção

Rahman Ashena¹, Siroos Azizmohammadi²

1 Smart Energy Data Analytics (SEDA) Group, Houston, USA

2 Montanuniversität Leoben, Austria

Copyright 2026, Society of Petroleum Engineers

Este artigo foi preparado para apresentação na Conferência e Exposição Internacional da SPE sobre Controle de Danos à Formação 2026, EUA, 18–20 de fevereiro de 2026.

Este artigo foi selecionado para apresentação por um comitê de programa da SPE após a revisão das informações contidas em um resumo submetido pelo(s) autor(es). O conteúdo deste artigo não foi revisado pela Society of Petroleum Engineers (SPE) e está sujeito a correções pelo(s) autor(es). O material não reflete necessariamente qualquer posição da Society of Petroleum Engineers, de seus dirigentes ou membros. A reprodução, distribuição ou armazenamento eletrônico de qualquer parte deste artigo sem o consentimento por escrito da Society of Petroleum Engineers é proibido. A permissão para reprodução impressa é restrita a um resumo de no máximo 300 palavras; ilustrações não podem ser copiadas. O resumo deve conter um reconhecimento claro dos direitos autorais da SPE.

Resumo

Este estudo apresenta o desenvolvimento de um módulo de modelagem de precipitação de asfaltenos de próxima geração, integrado a um novo software de análise PVT, especificamente projetado para a previsão precisa de danos à formação induzidos por asfaltenos. O objetivo é fornecer uma ferramenta confiável e aplicável em campo que supere os simuladores comerciais existentes em termos de precisão e desempenho computacional. O módulo é baseado em uma implementação otimizada da equação de estado PC-SAFT e foi concebido para apoiar engenheiros de reservatórios e de produção na avaliação dos riscos de deposição de sólidos sob condições variáveis de pressão e temperatura.

A estrutura de modelagem emprega uma formulação termodinâmica rigorosa utilizando PC-SAFT, combinada com um fluxo de trabalho inteligente de calibração baseado em pressões de saturação experimentais, pressões de início de precipitação de asfaltenos e dados de massa precipitada. Uma vez ajustado, o modelo prevê o comportamento de fases e a precipitação de asfaltenos com alta fidelidade em condições operacionais relevantes para depleção, injeção de gás e mudanças composicionais. A validação foi realizada utilizando dois sistemas de óleos brutos asfaltenicos e comparada com dois simuladores PVT padrão da indústria.

A avaliação comparativa demonstra que a ferramenta desenvolvida alcança consistentemente a maior precisão.

Para o primeiro óleo bruto, o módulo atingiu desvios relativos absolutos médios (AARD) de 2,13% para a pressão de início de precipitação de asfaltenos e 1,32% para a pressão de bolha, superando significativamente os simuladores comerciais, que apresentaram AARDs de 6,73% e 5,07%, e de 10,11% e 10,93%, respectivamente. Para o segundo óleo bruto, o novo módulo forneceu o melhor ajuste aos dados experimentais de massa de asfaltenos precipitados e previu a pressão de bolha com um ARD de 3,1%, em comparação com 7,46% e 13,51% dos dois simuladores de referência.

Essas melhorias resultam de um algoritmo otimizado de estimação de parâmetros e de uma implementação numérica eficiente da PC-SAFT. Ao vincular diretamente a modelagem termodinâmica avançada aos fluxos de trabalho práticos da engenharia de reservatórios, o software permite a avaliação rápida da severidade da deposição e apoia decisões proativas no projeto de poços, no gerenciamento da produção e na mitigação química. Em geral, os resultados confirmam que o módulo proposto é a ferramenta mais precisa, robusta e operacionalmente relevante atualmente disponível para o gerenciamento de riscos relacionados aos asfaltenos em reservatórios de petróleo.

Palavras-chave: Analisador PVT Inovador; Comportamento de Fases de Asfaltenos; PC-SAFT; Pressões de Início; Precipitação de Asfaltenos; Produção Sustentável.

1. Introdução

A produção sustentável pode ser alcançada por meio de uma combinação de estratégias, incluindo otimização da produção, estimulação direcionada do reservatório e gestão eficaz da garantia de escoamento (Ashena et al., 2021). A precipitação de asfaltenos continua sendo um desafio persistente e oneroso na produção de petróleo, representando riscos significativos à produtividade dos poços, à garantia de escoamento e à integridade do reservatório. Esses constituintes poliaromáticos de alto peso molecular do óleo bruto permanecem solubilizados nas condições nativas do reservatório, mas podem se desestabilizar durante a depleção de pressão, alterações composicionais (por exemplo, injeção de gás) ou mudanças de temperatura (Speight, 1991; Kord et al., 2019; Dakhelpour-Ghoveifel et al., 2024). Uma vez precipitados, os asfaltenos podem se depositar nos gargalos dos poros próximos ao poço, reduzindo drasticamente a permeabilidade efetiva, às vezes em mais de 70%, e desencadeando severos danos à formação que são difíceis e caros de remediar (Mousavi Dehghani, 2007; Mohammed et al., 2021). Em casos extremos, já foram relatados bloqueios completos do poço, levando ao abandono prematuro (Daryasafar et al., 2025).

De forma crítica, a capacidade de mitigar tais danos depende da precisão e da rapidez da previsão da precipitação de asfaltenos. O dano à formação não é causado apenas pela precipitação, mas pelo transporte, deposição e retenção de partículas sólidas no meio poroso, processos fortemente influenciados pela quantidade, pelo momento e pelo local da precipitação em relação ao poço (Kontogeorgis e Folas, 2009). Um modelo impreciso pode subestimar a precipitação (levando a danos inesperados) ou superestimá-la (levando a inibição química desnecessária ou restrições de produção). Assim, a previsão de alta fidelidade das condições de início e dos perfis

quantitativos de precipitação ao longo da trajetória pressão–temperatura da produção é essencial para: (i) identificar limiares críticos de pressão abaixo dos quais o dano se inicia; (ii) estimar a extensão espacial da zona danificada; e (iii) projetar estratégias de mitigação direcionadas, como tratamentos com solventes, taxas de injeção de inibidores ou cronogramas de depleção controlada antes que o dano ocorra (Doryani et al., 2018; Huang et al., 2022). Nesse contexto, a modelagem termodinâmica transcende o exercício acadêmico; ela se torna uma ferramenta de suporte à decisão para preservar a capacidade produtiva do reservatório.

Diante dessas exigências operacionais, a modelagem termodinâmica emergiu como o pilar da avaliação de riscos de asfaltenos. Entre os modelos disponíveis, a equação de estado PC-SAFT (Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory) ganhou amplo reconhecimento por seu tratamento rigoroso das interações moleculares, efeitos associativos e flexibilidade de cadeias em misturas complexas de hidrocarbonetos (Daryasafar et al., 2020; AlHammadi et al., 2015; Panuganti et al., 2012). A PC-SAFT permite a previsão quantitativa do equilíbrio de fases sem depender de correlações empíricas, tornando-a particularmente adequada para sistemas asfaltenicos, nos quais a complexidade composicional desafia abordagens de modelagem simplificadas.

Apesar de suas vantagens teóricas, a aplicação prática da PC-SAFT em softwares comerciais de PVT frequentemente encontra limitações que dificultam sua integração em fluxos de trabalho de reservatórios em tempo real. Estas incluem: (i) calibração de parâmetros trabalhosa e não única, muitas vezes exigindo intervenção especializada; e (ii) alto custo computacional durante regressões e análises de estabilidade de fases (AlHammadi et al., 2015; Panuganti et al., 2012). Como resultado, os engenheiros frequentemente enfrentam atrasos na tomada de decisão ou recorrem a envelopes operacionais conservadores que limitam o potencial de produção.

Para superar essas lacunas, apresentamos uma plataforma de análise PVT de próxima geração, com um módulo de precipitação de asfaltenos totalmente integrado, baseado em uma implementação otimizada da PC-SAFT. A ferramenta combina calibração automatizada (utilizando pressões de saturação, dados de início de precipitação ou massa precipitada) com cálculos acelerados de estabilidade de fases, fornecendo perfis de precipitação precisos que podem ser prontamente utilizados por engenheiros de reservatórios para avaliar o risco de deposição próximo ao poço e o potencial de dano à formação. Ao traduzir previsões termodinâmicas em riscos de deposição espacial e temporalmente resolvidos, o software permite antecipar a perda de permeabilidade e otimizar proativamente as medidas de mitigação.

Este artigo apresenta o desenvolvimento, a validação e a avaliação de desempenho do módulo de asfaltenos desenvolvido no novo analisador PVT. Utilizando dois óleos brutos reais contendo asfaltenos — um sob injeção de nitrogênio e outro sob condições de depleção de pressão —, avaliamos sua precisão e eficiência em comparação com dois simuladores comerciais líderes. As métricas-chave incluem a previsão das pressões de início e de saturação, bem como da massa de asfaltenos precipitados. Além disso, discutimos como os perfis de precipitação gerados pelo analisador projetado fornecem uma base confiável para avaliar o potencial de dano à formação e identificar condições operacionais que apresentam alto risco de comprometimento da permeabilidade. Os

resultados confirmam que esta nova ferramenta oferece uma solução mais precisa e operacionalmente relevante para o gerenciamento de desafios relacionados aos asfaltenos no desenvolvimento de campos e nas operações modernas de produção.

2. Fundamentação da Teoria dos Fluidos Associativos Estatísticos de Cadeias Perturbadas (PC-SAFT)

A previsão precisa do comportamento de fases dos asfaltenos em misturas complexas de petróleo requer um modelo termodinâmico capaz de capturar interações não ideais, associação molecular e a influência das frações pesadas. Entre as equações de estado (EOS) avançadas, a Teoria dos Fluidos Associativos Estatísticos de Cadeias Perturbadas (PC-SAFT) emergiu como uma estrutura robusta para a modelagem de sistemas asfaltenicos, devido à sua representação fisicamente fundamentada da arquitetura molecular e das forças intermoleculares (Gross e Sadowski, 2001).

A PC-SAFT estende a teoria SAFT original ao levar em conta a forma não esférica (em cadeia) das moléculas de hidrocarbonetos, tornando-a particularmente adequada para alcanos de cadeia longa, aromáticos e resinas — componentes-chave do óleo bruto. A energia livre de Helmholtz residual na PC-SAFT é expressa como a soma de três contribuições (Gross e Sadowski, 2001):

$$\tilde{a}^{res} = \tilde{a}^{hc} + \tilde{a}^{disp} + \tilde{a}^{assoc} \quad (1)$$

Each term is expressed in terms of three pure-component parameters:

onde $\tilde{a}^{res}$ é a energia livre de Helmholtz residual reduzida. O termo $\tilde{a}^{hc}$ representa a contribuição de **cadeia dura (hard-chain)**, que captura os efeitos entrópicos decorrentes da formação de cadeias flexíveis de esferas rígidas tangentes; $\tilde{a}^{disp}$ denota o termo de **dispersão**, que contabiliza as forças atrativas de van der Waals entre os segmentos moleculares; e $\tilde{a}^{assoc}$ corresponde à contribuição de **associação**, que modela interações específicas e direcionais, como ligações de hidrogênio ou interações ácido-base, por meio da incorporação de sítios de associação nas moléculas.

Cada termo é expresso em função de três parâmetros de componente puro:

m_i : número de segmentos (relacionado ao tamanho molecular)

σ_i : diâmetro do segmento [Å],

ε_i/k : parâmetro de energia do segmento [K], onde k é a constante de Boltzmann.

Para misturas, aplicam-se regras de combinação (tipicamente Lorentz–Berthelot), e parâmetros binários de interação (BIPs) podem ser introduzidos para interações cruzadas não ideais.

A contribuição de cadeia dura (hard-chain) é derivada da equação de Carnahan–Starling para esferas rígidas, estendida para cadeias por meio da teoria de perturbação termodinâmica de primeira ordem de Wertheim:

$$\tilde{a}^{hc} = \bar{m}\tilde{a}^{hs} - \sum_i x_i (m_i - 1) \ln g_{ii}^{hs}(\sigma_{ii}) \quad (2)$$

Onde x , m , g_{ii} e σ representam, respectivamente, fração molar, número de segmentos, função de distribuição radial e diâmetro do segmento. a^{hs} é o termo de esferas rígidas da energia livre de Helmholtz (Daryasafar et al., 2020).

O termo de dispersão é então adicionado como uma perturbação:

$$\tilde{a}^{disp} = -2\pi\rho I_1 \left(\overline{m^2 \varepsilon \sigma^3} \right) - \pi\rho\bar{m}C_1 I_2 \left(\overline{m^2 \varepsilon^2 \sigma^3} \right) \quad (3)$$

I_1 e I_2 são integrais dependentes da temperatura, e C_1 é o termo de compressibilidade definido como:

$$C_1 = \left(1 + \bar{m} \frac{8\eta - 2\eta^2}{(1-\eta)^4} + (1-\bar{m}) \frac{20\eta - 27\eta^2 + 12\eta^3 - 2\eta^4}{[(1-\eta)(2-\eta)]^2} \right)^{-1} \quad (4)$$

Na equação acima,

η é a fração de empacotamento.

O termo de associação é formulado utilizando o formalismo de multi-densidade de Wertheim e requer a especificação de sítios de associação (por exemplo, um sítio doador de próton e um sítio aceitador por molécula). Para os asfaltenos, que contêm heteroátomos (N, O, S) e apresentam forte auto-associação, este termo é essencial para capturar os limites de solubilidade e o início da precipitação. $\tilde{a}^{assoc}$ é determinado por:

$$\tilde{a}^{assoc} = \sum_i x_i \left[\sum_{A_i} \left(\ln X^{A_i} - \frac{X^{A_i}}{2} \right) + \frac{M_i}{2} \right] \quad (5)$$

Onde M_i é o peso molecular do componente i , and X^{A_i} é a fração molar do componente i que não está ligada no sítio A (Daryasafar et al., 2024).

Os asfaltenos são tipicamente modelados como um único pseudo-componente (ou algumas frações) com parâmetros PC-SAFT ajustados ou derivados por contribuição de grupos. Sua forte auto-associação e interação com resinas são capturadas através de:

Sítios de associação explícitos (por exemplo, um ou dois sítios doador/aceptor de elétrons por molécula)

Parâmetros de dispersão efetivos, que contabilizam implicitamente interações polares quando a associação não é modelada explicitamente

O equilíbrio de fases é determinado pela minimização da energia livre de Gibbs total, impondo igualdade do potencial químico entre as fases. Para a precipitação de asfaltenos, isso envolve resolver um problema de equilíbrio líquido-sólido (ou líquido-líquido rico em asfaltenos). A fase de asfaltenos é frequentemente tratada como um sólido incompressível ou um pseudo-líquido denso, com sua fugacidade definida em relação a um estado de referência.

Uma vantagem chave do PC-SAFT em relação às EOS cúbicas (por exemplo, Peng–Robinson) é a sua menor dependência de parâmetros binários de interação (BIPs) e a capacidade de prever o comportamento de fases a partir de características moleculares. No entanto, a calibração com dados experimentais, como pressão de saturação, pressão de início de precipitação de asfaltenos e rendimento de precipitação, continua sendo essencial para restringir os parâmetros das frações mais pesadas, que não são diretamente mensuráveis.

Neste trabalho, o PC-SAFT é implementado em uma nova ferramenta de análise PVT, com um algoritmo numericamente eficiente de estabilidade de fases e flash, e seus parâmetros são ajustados utilizando dados experimentais de PVT e precipitação de asfaltenos. O modelo resultante permite a previsão confiável da queda de asfaltenos sob condições variáveis de pressão e temperatura, formando a base termodinâmica para a avaliação do risco de danos à formação em operações de reservatórios.

1. Metodologia

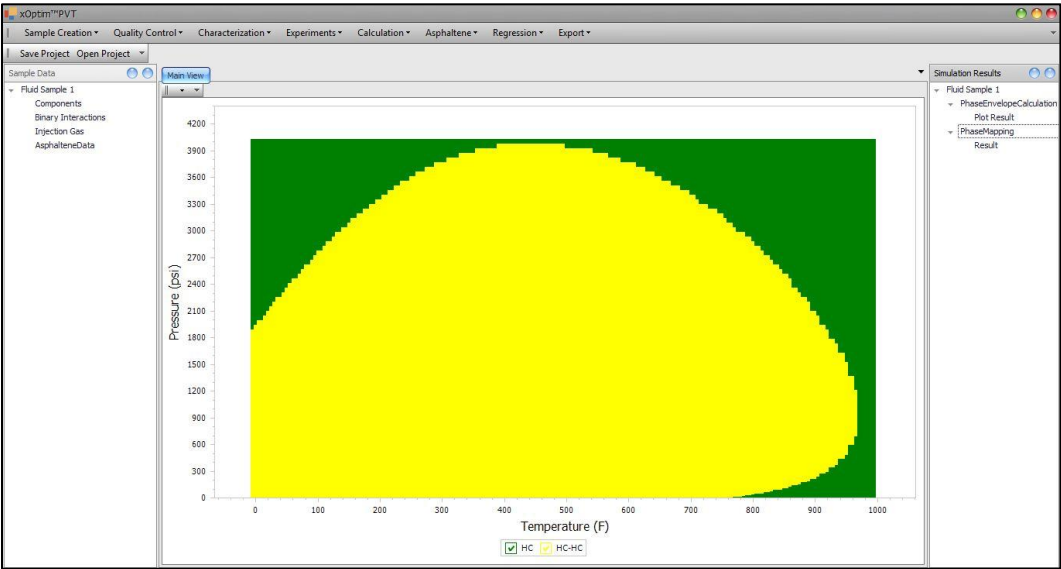
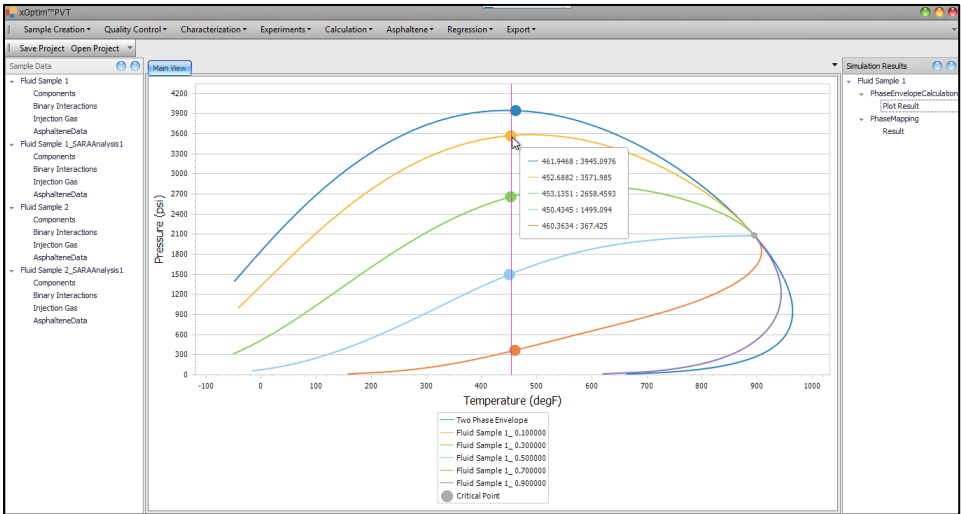
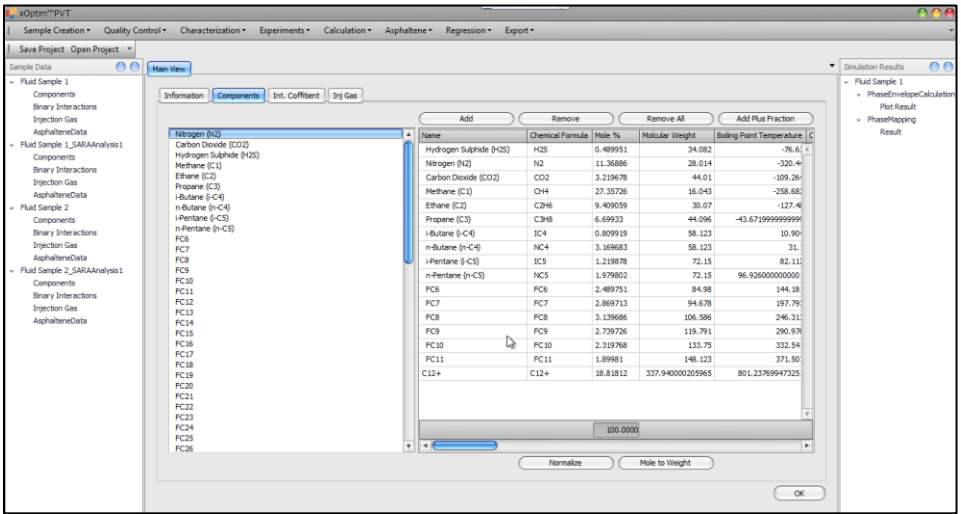
3.1 Plataforma da Nova Ferramenta Projetada para Modelagem do Comportamento de Fases de Asfaltenos

Um software integrado de análise PVT de próxima geração foi projetado para unificar o gerenciamento de dados experimentais, caracterização de fluidos, modelagem termodinâmica e previsão de garantia de escoamento em um único ambiente.

A plataforma suporta todo o espectro de análises PVT convencionais, incluindo expansão de composição constante (CCE), vaporização diferencial (DVF), testes em separadores, testes de inchamento e medições de viscosidade, bem como modelagem avançada de comportamento de fases para sistemas complexos, como condensados de gás, óleos voláteis e óleos brutos asfaltenicos.

O software apresenta uma interface amigável para importação de dados, controle de qualidade automatizado, ajuste de modelos e visualização de envelopes de fase, fatores de inchamento e perfis de precipitação. De forma crítica, todos os fluxos de trabalho de modelagem, desde a definição do fluido até a previsão, são rastreáveis, reproduzíveis e exportáveis para integração em simuladores de reservatório ou de produção.

A Fig. 1 apresenta uma captura de tela da interface principal da plataforma.



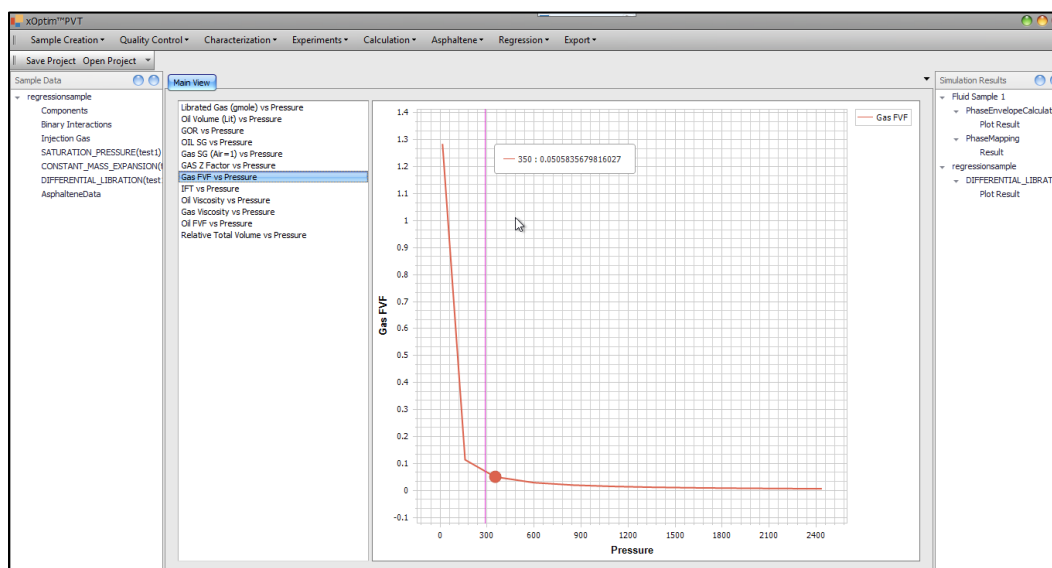


Fig.1— Plataforma do novo analisador PVT projetado

O módulo de comportamento de fases de asfaltenos na ferramenta projetada segue um fluxo de trabalho sistemático e passo a passo, que se inicia com a definição da amostra de fluido e culmina na previsão quantitativa. O processo está totalmente integrado na estrutura de análise PVT do software e requer apenas dados laboratoriais padrão como entrada. O software suporta tanto o modelo sólido quanto a EOS PC-SAFT para modelagem e simulação do comportamento de fases de asfaltenos.

A modelagem precisa do comportamento de fases de asfaltenos exige que cada óleo bruto seja primeiramente caracterizado em termos de um conjunto finito de componentes ou pseudo-componentes. Dois esquemas de caracterização são considerados no software: um baseado apenas no conteúdo de asfaltenos da amostra, e outro baseado na análise Saturados, Aromáticos, Resinas e Asfaltenos (SARA), conforme mostrado na Fig. 2.

No primeiro esquema de caracterização do fluido, proposto por Arya et al. (2016), a amostra é dividida em CO₂, H₂S, N₂, C1, C2, C3, iC4, nC4, iC5, nC5, C6, componente pesado (HC) e asfalteno. A separação e agrupamento dos componentes mais pesados que C₆ em pseudo-componentes hidrocarbonetos (HC) e asfaltenos são baseados nas massas molares das frações pesadas individuais, bem como na massa molar determinada da fração de asfaltenos.

No segundo esquema, proposto por Panuganti et al. (2013) e Tavakkoli et al. (2014), a composição do óleo bruto consiste em CO₂, H₂S, N₂, C1 e quatro pseudo-componentes: gás pesado, saturados, aromáticos + resinas e asfaltenos. Neste estudo, o segundo esquema foi utilizado para a modelagem do comportamento de fases de asfaltenos e para a avaliação do desempenho de diversos softwares.

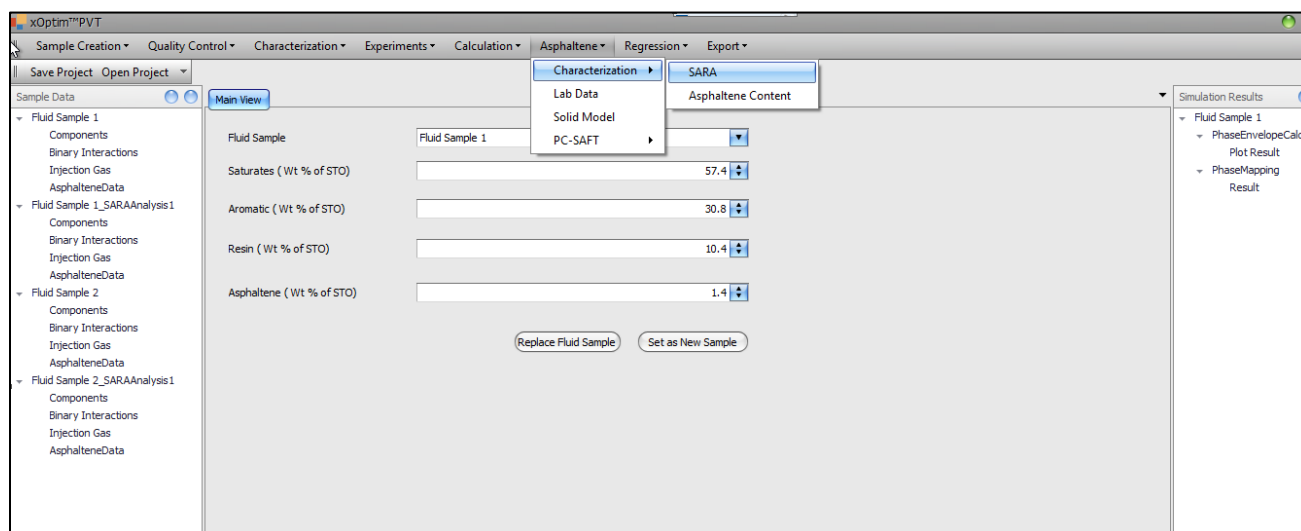
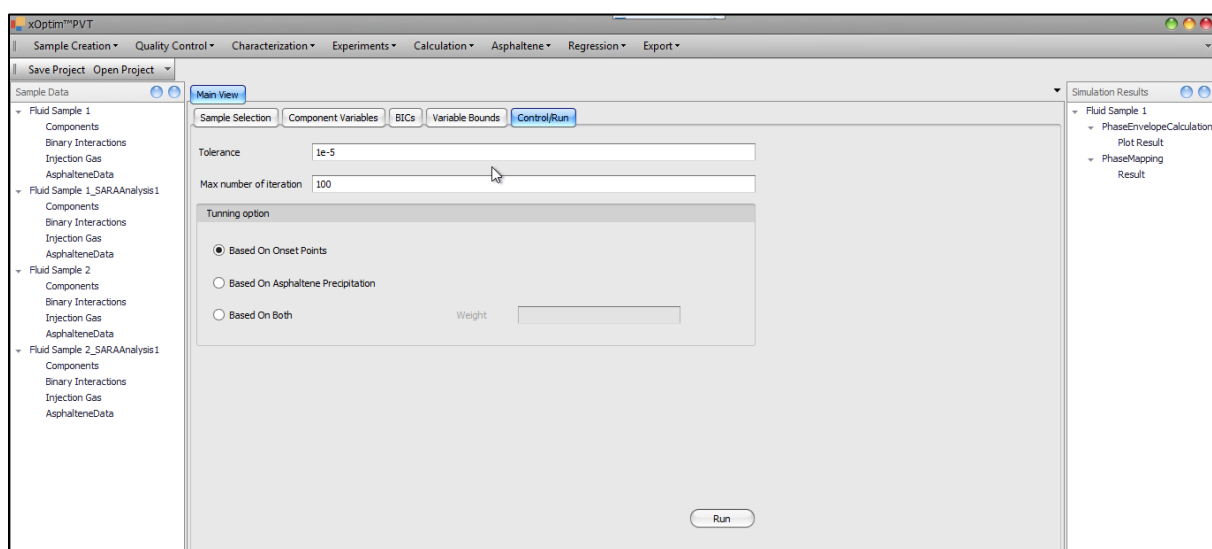


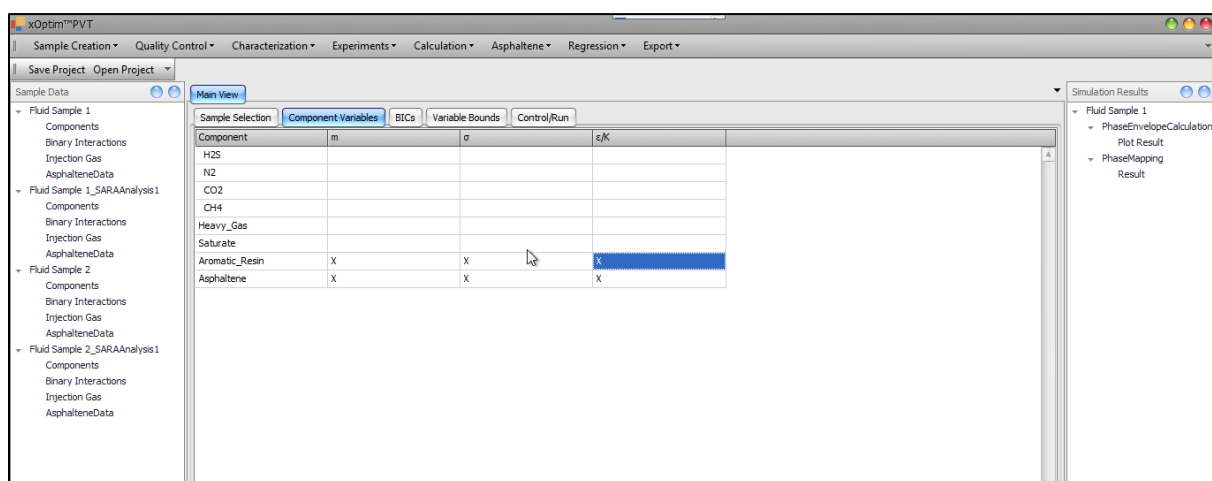
Fig.2—Módulo de caracterização de fluidos e asfaltenos

Parâmetros PC-SAFT de componente puro (m , σ , ϵ/k) para C_1 – C_6 e gases inorgânicos, os parâmetros são atribuídos a partir do banco de dados interno do software (validado com NIST e DIPPR). Para os pseudo-componentes, utilizam-se as correlações propostas (Tavakkoli et al., 2014; Gonzalez et al., 2007). Essas estimativas iniciais são então refinadas durante a regressão.

A ferramenta desenvolvida utiliza um motor de regressão automatizado para calibrar os parâmetros PC-SAFT com base em dados experimentais. O usuário seleciona os dados-alvo a partir do banco de dados PVT integrado, incluindo pressão de bolha, pressões de início de precipitação de asfaltenos superior e inferior, ou massa de asfaltenos precipitados, Fig. 3. O processo de regressão otimiza (m , σ , ϵ/k) para os componentes definidos, e/ou os parâmetros binários de interação (BIPs) entre diferentes componentes, Fig. 3. O algoritmo de otimização minimiza uma função objetivo ponderada, combinando os desvios relativos absolutos em P_b , início P_{onset} e massa de precipitação. Uma vez calibrado, o modelo pode simular o comportamento dos asfaltenos sob trajetórias arbitrárias de pressão–temperatura (P – T), incluindo depleção isotérmica, injeção de gás, etc. Os resultados de saída incluem: pressões de início (Onset pressures), massa de asfaltenos precipitados em função da pressão, envelope de fase com a fronteira de queda de asfaltenos, e perfis de potencial químico e fugacidade para análise de estabilidade.



a)



b)

Fig.3— Módulo de regressão do modelo PC-SAFT: a) Tipo de dados experimentais para seleção na calibração do modelo, b) Seleção de parâmetros de regressão

Embora o analisador projetado não calcule internamente a redução de permeabilidade, o perfil de massa de precipitação serve como um input quantitativo direto para modelos externos de dano à formação. Este fluxo de trabalho completo, totalmente incorporado em uma plataforma PVT abrangente, permite que os engenheiros avancem de forma contínua dos dados laboratoriais para insights acionáveis sobre garantia de escoamento, reduzindo significativamente o tempo de resposta e a incerteza na modelagem.

3.2 Dados Experimentais

A disponibilidade de dados experimentais em alta pressão e alta temperatura (HPHT) que especifiquem simultaneamente a composição do óleo bruto, a pressão de início de precipitação de asfaltenos (AOP) e a precipitação de asfaltenos determinada gravimetricamente é limitada na literatura publicada.

As seguintes duas amostras de óleo bruto asfaltenico, designadas Crudeoil-1 e Crudeoil-2, foram selecionadas para avaliar o desempenho do módulo de precipitação de asfaltenos desenvolvido, bem como de outros softwares comerciais bem estabelecidos.

As propriedades do Fluido de Reservatório de Óleo Pesado 1 estão resumidas na Tabela 1. Jamaluddin et al. (2002) investigaram o trade-off entre aumento da recuperação de óleo e instabilidade de asfaltenos agravada pela injeção de nitrogênio.

Os dados composicionais do Óleo 1 são fornecidos na Tabela 2.

Table 1— Características do óleo bruto-1

Parameter	Value
Pressão de bolha a 255°F [psia]	3045
Pressão do reservatório [psia]	3256
Temperatura do reservatório [°F]	296
Relação gás-óleo (GOR) [SCF/STB]	900
API [deg]	32
Análise SARA [%, w/w of STO]	
Saturados	57.4
Aromáticos	30.8
Resinas	10.4
Asfaltenos	1.4

Table 2— Composição do óleo bruto-1

Component	Reservoir Fluid [mole %]
N ₂	0.49
CO ₂	11.33
H ₂ S	3.20
C1	27.23
C2	9.37
C3	6.68
iC4	0.81
nC4	3.17
iC5	1.23
nC5	1.98
C6	2.50

C7	2.89
C8	3.16
C9	2.77
C10	2.34
C11	1.91
C12+	18.96
Massa molecular / MW (g/mol)	102.04
MW of C12+ (g/mol)	337.94
Densidade de C12+ (g/cm ³)	0.906

A Tabela 3 mostra a composição do óleo bruto-2. Para esta amostra de fluido, apenas a massa de asfaltenos precipitados e a pressão de bolha estão disponíveis, conforme mostrado na Tabela 4. Portanto, neste caso, os modelos são ajustados com base na massa precipitada e, em seguida, testados para a previsão da pressão de bolha.

Table 3— Composição do óleo bruto-2

Component	Reservoir Fluid [mole %]
H ₂ S	1.87
N ₂	0.31
CO ₂	3.37
C1	43.586
C2	8.579
C3	6.269
iC4	1.64
nC4	4.89
iC5	2.2
nC5	2.49
C6	1.91
C7	0.89
C8	3.01
C9	2.05
C10	1.84
C11	1.39
C12+	13.709
MW of C12+ [g/mol]	355.452

Densidade de C12+ [g/cm ³]	0.874
--	-------

Table 4— Características do óleo bruto-2

Pressão de bolha (Pb) à temperatura de 400 °F [psia]	3997
SARA Analysis (% w/w of STO)	
Saturados	52.49
Aromáticos	41.04
Resinas	5.48
Asfaltenos	0.99
Asphaltene Precipitation Data	
Pressão [psia)	Massa observada [wt.%)
5000	0.379668
4500	0.454697
4000	0.492078
3000	0.342419
2000	0.240119

4. Resultados e Discussão

O óleo bruto-1 foi caracterizado utilizando a análise SARA para suportar a definição de pseudo-componentes na estrutura PC-SAFT. A amostra caracterizada, bem como os parâmetros PC-SAFT após a caracterização, estão apresentados na Tabela 5.

Tabela 5 – Óleo bruto-1 caracterizado para modelagem do comportamento de fases de asfaltenos usando PC-SAFT

Componente	Fração molar [%]	m	σ [°A]	ε/k [K]
N2	0.4712	1.694	3.021	227
CO2	11.3300	1.205	3.313	91
H2S	3.1606	2.073	2.785	169
CH4	27.2000	1.000	3.704	150.03
Gás pesado	20.8635	1.980	3.636	213.0485
Saturado	28.1525	5.167	3.901	249.7054
Aromático+Resina	8.7579	8.234	4.174	367.6121
Asfalteno	0.0642	33.507	4.296	383.8957

Os modelos PC-SAFT implementados no software desenvolvido, no software comercial-1 e no software comercial-2 foram calibrados de forma independente utilizando o mesmo conjunto de dados experimentais para

o óleo bruto-1: especificamente, a pressão de bolha (P_b) e a pressão de início de precipitação de asfaltenos superior (Ponset) medidas em uma faixa de temperaturas (190–300 °F). Essa calibração em múltiplas temperaturas garante que os modelos ajustados capturem não apenas os efeitos dependentes da pressão, mas também os efeitos térmicos sobre a estabilidade dos asfaltenos, o que é crítico para aplicações de campo envolvendo variações de temperatura do reservatório ou de injeção. Os parâmetros (m , σ , ε/k) de aromáticos + resina e asfaltenos foram usados como parâmetros de regressão para ajuste do modelo PC-SAFT em todos os softwares. Após o ajuste, o desempenho preditivo de cada modelo foi avaliado calculando-se o desvio relativo absoluto médio (AARD, %) entre os valores previstos e experimentais tanto para P_b quanto para Ponset.

Os resultados dos valores obtidos de P_b e Ponset pelos diferentes softwares estão indicados na Tabela 6 e Tabela 7, respectivamente.

Table 6— Comparação entre os resultados de correspondência (pressão de bolha) dos softwares comerciais (óleo bruto-1)

Temperatura (°F)	Pressão de bolha observada (psia)	Pressão de bolha – Novo Software (psia)	Pressão de bolha – Software-1 (psia)	Pressão de bolha – Software-2 (psia)
190	2500	2595	2556	2604
230	2700	2773	2738	2775
260	2900	2890.3	2834	2888.4
300	3000	3005.59	2961	3066

Table 7-- Comparação entre os resultados de correspondência (pressão de início superior) dos softwares comerciais (óleo bruto-1)

Temperatura [°F]	Pressão de início superior observada [psia]	Pressão de início superior – Novo Software [psia]	Pressão de início superior – Software-1 [psia]	Pressão de início superior – Software-2 [psia]
190	5400	5479.99	5208.4	5401.3
230	4050	3908.2	3915.67	3913.57
260	3650	3732.47	3795.4	3787
300	3800	3885.73	3932.17	3893

A nova ferramenta projetada alcança o menor erro geral, com AARDs de 2,37% e 1,76% para as pressões de início e de bolha, respectivamente. Notavelmente, enquanto o Software-2 apresenta resultados próximos ao analisador desenvolvido na previsão do início de precipitação (2,39% vs. 2,37%), seu erro na pressão de bolha é 35% maior (2,38% vs. 1,76%). O Software-1, embora ligeiramente melhor que o Software-2 na previsão da pressão de bolha (1,81%), apresenta o maior desvio na pressão de início (3,58%).

A Fig. 4 ilustra os modelos calibrados de comportamento de fases, mostrando as curvas previstas de início de precipitação de asfaltenos (pressão de início vs. temperatura) e as curvas de pressão de bolha juntamente com os pontos experimentais. Os modelos ajustados representam os melhores modelos correspondentes encontrados para cada software. Todos os três modelos capturam a tendência geral das pressões de início e de bolha com o aumento da temperatura. No entanto, as curvas da ferramenta projetada exibem o envelope mais próximo em torno dos marcadores experimentais.

O estreito acordo entre o software desenvolvido e os experimentos, consistentemente abaixo de 2,5% de AARD em todas as temperaturas, confirma que a implementação PC-SAFT, aliada a um fluxo de calibração inteligente, fornece previsões termodinamicamente consistentes e confiáveis para aplicações de campo.

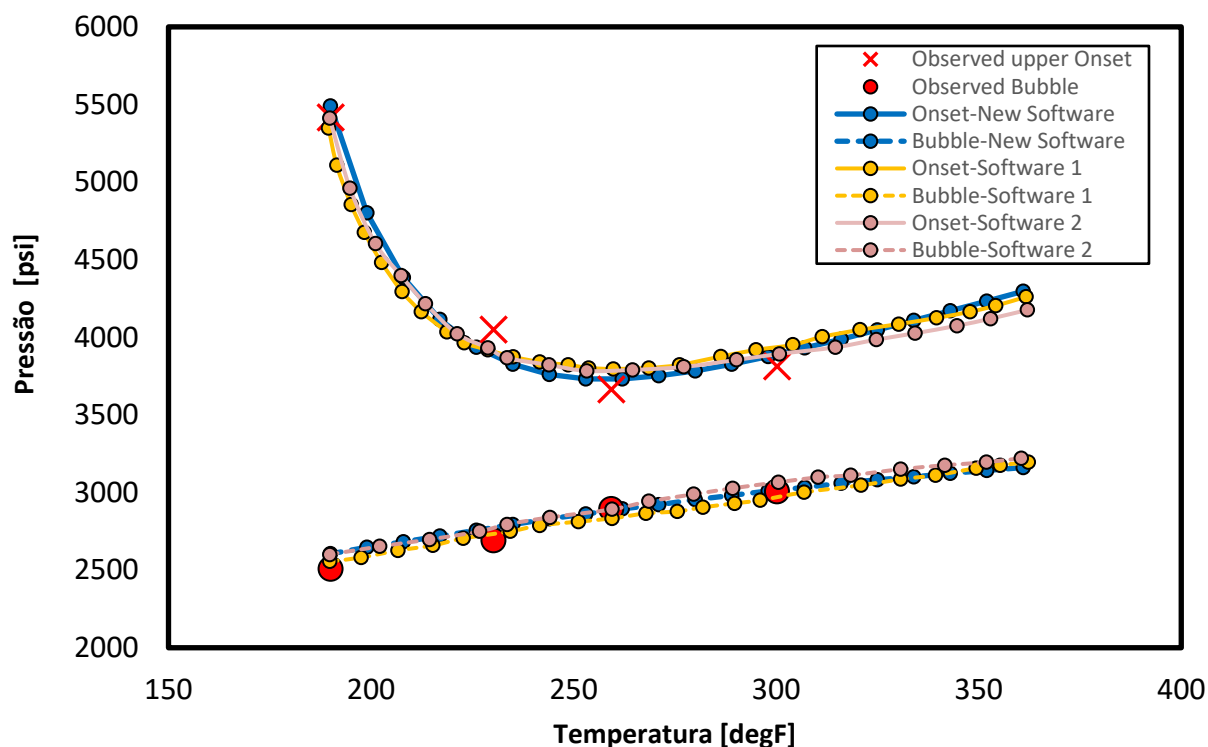


Fig.4— Resultados dos modelos PC-SAFT ajustados obtidos pelos diferentes softwares (óleo bruto-1)

Após a calibração do modelo, os modelos PC-SAFT ajustados no novo software, no software comercial-1 e no software comercial-2 foram utilizados para prever o impacto da injeção de nitrogênio (N_2) no comportamento de fases do óleo bruto-1. Especificamente, os modelos simularam como o aumento da fração molar de N_2 (0–20 mol%) afeta tanto a pressão de início de precipitação de asfaltenos quanto a pressão de bolha à temperatura de 180 °F. Essas previsões são críticas para a avaliação de riscos de garantia de escoamento durante processos de EOR com injeção de gás.

A precisão de cada simulador foi quantificada usando o desvio relativo absoluto médio (AARD%) entre as

pressões previstas e experimentais ao longo da faixa de concentração de N_2 . Como mostrado na Fig. 5, a estratégia desenvolvida e implementada na nova ferramenta de análise apresentou concordância excepcional com os dados laboratoriais, com AARDs de 2,13% para Ponset e 1,32% para Pb. Em contraste, o software comercial-1 apresentou desvios significativamente maiores, de 6,73% e 5,07%, respectivamente, enquanto o software comercial-2 exibiu os maiores erros, com AARDs de 10,11% para a pressão de início e 10,93% para a pressão de bolha.

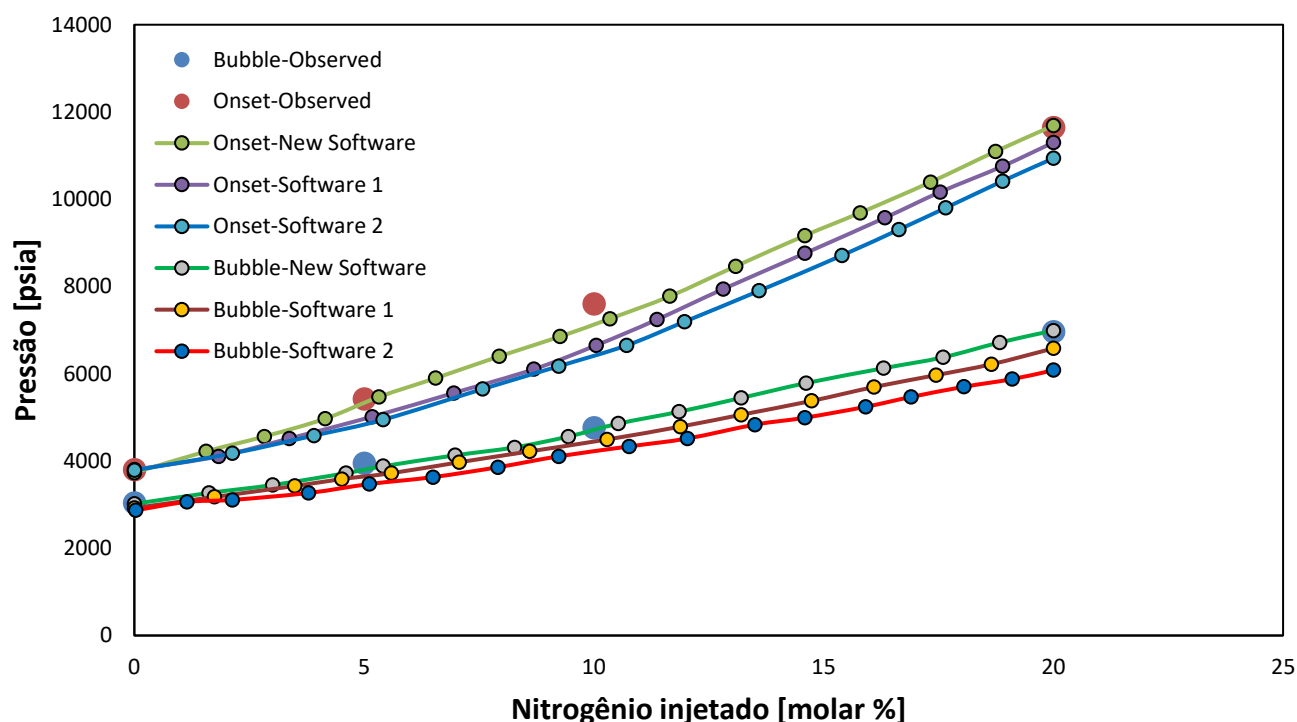


Fig.5— Comparação entre diferentes softwares comerciais na previsão do efeito da injeção de N_2 sobre a pressão de bolha e a pressão de início superior de asfaltenos para o óleo bruto-1

Uma observação importante da Fig. 5 é que ambos os simuladores comerciais (software-1 e 2) subestimam sistematicamente as pressões de início de precipitação de asfaltenos e de bolha à medida que a concentração de N_2 aumenta. Esse viés negativo consistente indica que essas ferramentas subestimam o efeito destabilizador do nitrogênio no óleo bruto, prevendo que a precipitação de asfaltenos e a evolução do gás ocorram a pressões menores do que as observadas experimentalmente.

Essa subestimação da instabilidade de fase representa um risco operacional significativo: pode levar os engenheiros a assumir que existem condições de produção seguras abaixo do verdadeiro limiar de início, resultando em deposição inesperada de asfaltenos na região próxima ao poço. Contrariamente ao design conservador, esse erro não conservador pode causar danos graves à formação, perda de produtividade e custos elevados de remediação, destacando a necessidade crítica de ferramentas de modelagem de alta fidelidade, como o novo analisador desenvolvido, que captura com precisão o deslocamento do comportamento de fases induzido

pelo N₂.

O óleo bruto-2 também foi caracterizado usando a análise SARA. A amostra caracterizada, assim como os parâmetros iniciais PC-SAFT após a caracterização, estão apresentados na Tabela 8.

Table 8— Óleo bruto-2 caracterizado para modelagem do comportamento de fases de asfaltenos usando PC-SAFT

Componente	Molar [%]	m	σ [°A]	ε/k [K]
N2	1.8233	1.694	3.021	227
CO2	0.3091	1.205	3.313	91
H2S	3.3274	2.073	2.785	169
CH4	43.3904	1.000	3.704	150.03
Gás pesado	23.5155	2.066	3.657	216.2812
Saturado	20.5261	4.989	3.896	249.1007
Aromático+Resina	7.0734	8.712	4.184	369.2721
Asfalteno	0.0347	33.507	4.296	383.8957

Para o óleo bruto-2, os modelos PC-SAFT no software projetado, no software comercial-1 e no software comercial-2 foram calibrados com base na massa de asfaltenos precipitados experimentalmente durante a depleção isotérmica de pressão a 400 °F. Os parâmetros (m, σ , ε/k) de aromáticos + resina e asfaltenos foram usados como parâmetros de regressão para ajuste do modelo PC-SAFT em todos os softwares.

Diferentemente do óleo bruto-1 (calibrado com base nas pressões de início e de bolha), este caso representa um cenário mais desafiador, no qual o modelo deve reproduzir todo o perfil quantitativo de precipitação, e não apenas o limiar de início. O ajuste preciso da massa precipitada é essencial para uma avaliação confiável do dano à formação, pois a magnitude da deposição sólida influencia diretamente a redução de permeabilidade.

Como mostrado na Fig. 6, o modelo ajustado pelo módulo desenvolvido alcança excelente concordância com os dados experimentais de precipitação ao longo de toda a faixa de pressão. A curva prevista segue de perto a tendência medida. Além disso, os outros softwares comerciais (software-1 e 2) também conseguiram capturar com sucesso a tendência das quantidades de precipitação em diferentes pressões. Os modelos obtidos representam os melhores modelos PC-SAFT ajustados encontrados para cada software.

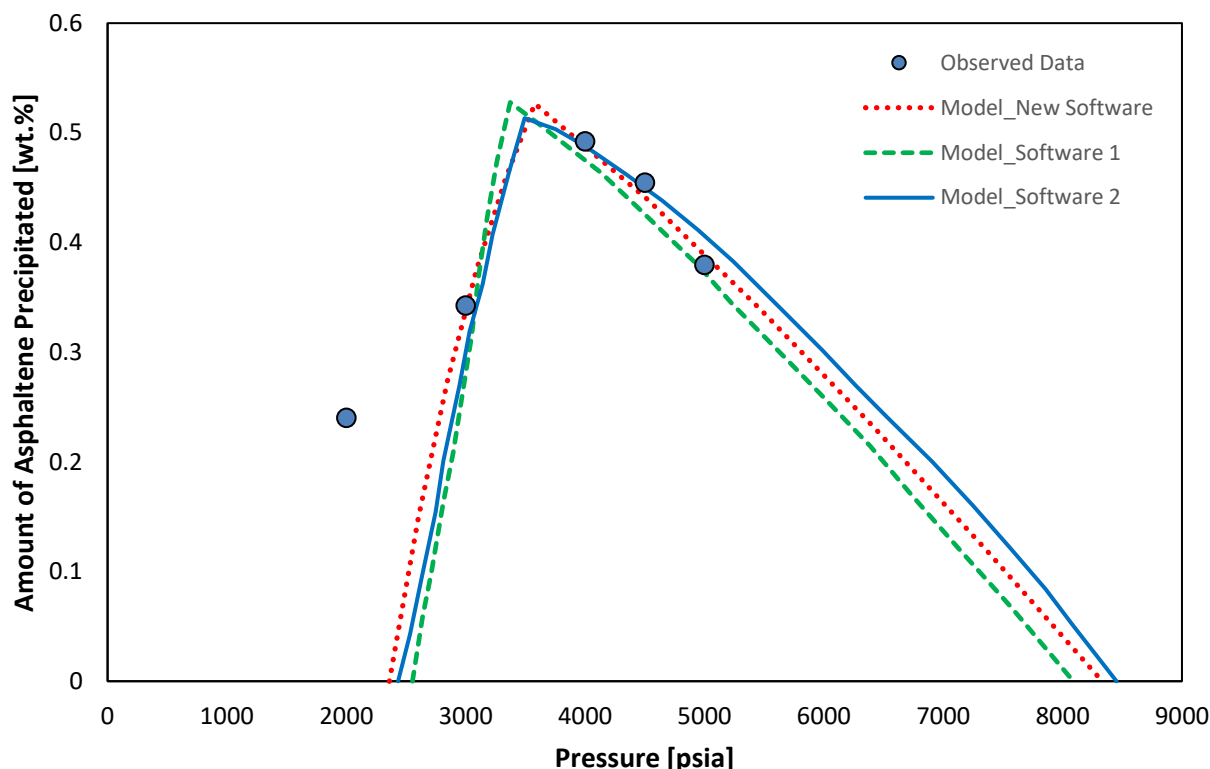


Fig.6— Comparação entre a nova ferramenta e os simuladores comerciais na correspondência com os dados experimentais de precipitação de asfaltenos para o óleo bruto-2

Após a calibração, todos os três modelos foram utilizados para prever a pressão de bolha à temperatura de 400 °F, uma condição relevante para reservatórios de alta temperatura ou cenários de recuperação térmica. Trata-se de um verdadeiro teste preditivo, pois nenhum dado de pressão de bolha a 400 °F foi utilizado na regressão. Os resultados, resumidos na Tabela 9, demonstram uma vantagem clara para a ferramenta desenvolvida..

Table 9— Comparação de desempenho dos modelos PC-SAFT (ajustados em diferentes softwares) na previsão da pressão de bolha (óleo bruto-2)

	Observada	Novo Software	Software-1	Software-2
Pressão de bolha (psia)	3997	3873	3699	3457
AARD [%]	-	3.10	7.46	13.51

Essa degradação progressiva na precisão, do software desenvolvido até o Software-2, destaca uma limitação importante das abordagens convencionais de ajuste. Quando os modelos são otimizados exclusivamente com base no comportamento das frações pesadas (precipitação), eles frequentemente perdem fidelidade nas previsões das frações leves ou do equilíbrio vapor-líquido (VLE), especialmente sob condições extrapoladas, como altas temperaturas. O analisador proposto evita essa armadilha por meio de seu fluxo de regressão equilibrado, que garante consistência termodinâmica entre a fase sólida/líquida de asfaltenos e o equilíbrio óleo-gás da fase principal.

Além disso, a Fig. 7 apresenta o envelope completo de fases gerado pelo modelo PC-SAFT calibrado no módulo apresentado, incluindo:

- A curva de saturação vapor–líquido,
- A curva superior de início de precipitação de asfaltenos (onset de precipitação durante a depleção de pressão),
- A curva inferior de início de precipitação de asfaltenos (limite de re-dissolução durante a pressurização).

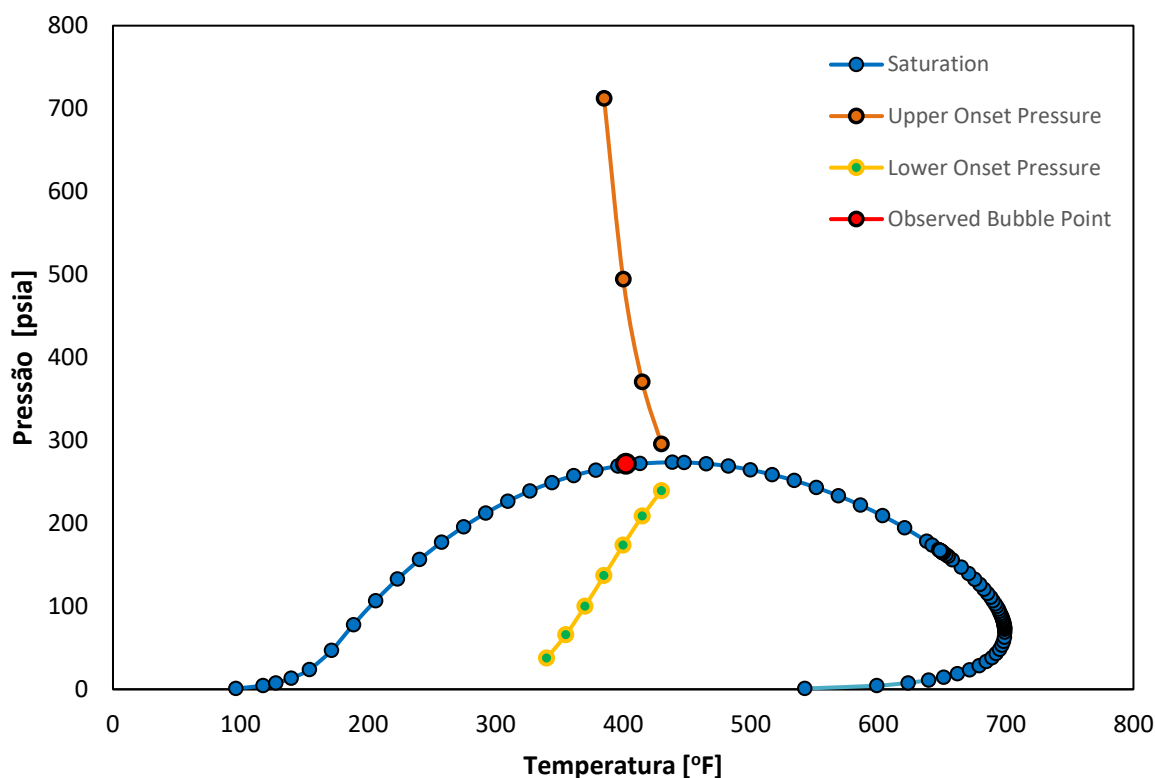


Fig.7— Envelope de fase do óleo bruto-2 gerado usando o modelo PC-SAFT calibrado pela nova ferramenta de software desenvolvida

A capacidade da ferramenta desenvolvida de respeitar simultaneamente os dados quantitativos de precipitação e prever com precisão o equilíbrio vapor–líquido (VLE) em altas temperaturas ressalta sua dupla função como ferramenta de garantia de escoamento e simulador PVT geral. Em aplicações de campo, isso significa que os engenheiros podem confiar em um único modelo de fluido consistente para:

1. Projetar estratégias de produção que evitem a zona de instabilidade de asfaltenos;
2. Prever o desempenho do poço sob mudanças térmicas ou composicionais;
3. Estimar o risco de deposição sem alternar entre softwares especializados.

Em contraste, os maiores erros de ferramentas comerciais podem levar a cálculos incorretos significativos em simulação de reservatório, projeto de separadores ou capacidade de manuseio de gás, aumentando os riscos

operacionais em desenvolvimentos de alta temperatura.

Predições da Nova Ferramenta para Identificação de Dano à Formação

Embora o módulo desenvolvido não calcule internamente a redução de permeabilidade ou a cinética de deposição, sua predição de alta fidelidade do comportamento de fase de asfaltenos fornece a base termodinâmica essencial para análise quantitativa de dano à formação. O dano à formação devido à deposição de asfaltenos não depende apenas da ocorrência de precipitação, mas criticamente da quantidade de sólido formado, pressão/temperatura e proximidade ao poço durante a produção. O analisador projetado aborda diretamente esses fatores por meio de três capacidades-chave:

1. Predição precisa da pressão de início (detecção precoce de risco)

Como demonstrado para o óleo bruto-1, a ferramenta prevê a pressão de início de asfaltenos com AARD de 2,13% sob injeção de N₂, superando significativamente ferramentas comerciais.

Essa precisão permite que os engenheiros definam um envelope de estabilidade confiável e identifiquem a pressão crítica de drawdown abaixo da qual ocorre a precipitação. Operar acima desse limiar, especialmente na região próxima ao poço, previne danos antes que ocorram.

2. Perfis quantitativos de precipitação (avaliação da severidade)

Para o óleo bruto-2, a ferramenta correspondeu com precisão à massa de asfaltenos precipitados experimentalmente ao longo de toda a trajetória de depleção.

A magnitude dos sólidos precipitados é entrada primária para modelos empíricos ou mecanicistas de dano à formação. Superestimação pode gerar inibição química desnecessária, enquanto subestimação aumenta o risco de deposição não mitigada. A fidelidade do software garante que a severidade do dano não seja exagerada nem negligenciada.

3. Extrapolação robusta para condições de campo (mitigação proativa)

A predição precisa da pressão de bolha e envelopes de fase confiáveis, incluindo limites superior e inferior de asfaltenos, demonstram a capacidade da ferramenta de operar sob condições realistas de reservatório, incluindo EOR térmico ou reservatórios profundos e quentes.

Isso permite que os engenheiros mapeiem a extensão espacial da zona de instabilidade de asfaltenos usando perfis de pressão do reservatório, projetem tratamentos de inibidor direcionados a intervalos de alto risco e otimizem taxas de injeção de gás para equilibrar recuperação e estabilidade.

Portanto, embora o módulo desenvolvido foque no motor termodinâmico do dano, ele fornece os dados quantitativos de alta resolução necessários para que modelos de engenharia a jusante identifiquem, quantifiquem e mitiguem o risco de dano à formação, transformando a gestão de asfaltenos de uma abordagem reativa em uma

disciplina proativa e orientada por dados.

Conclusões

1. Um novo módulo de precipitação de asfaltenos foi desenvolvido e validado dentro de um software PVT de próxima geração, usando uma EOS PC-SAFT otimizada e algoritmos numéricos eficientes.
2. A precisão superou significativamente dois simuladores comerciais, com menores valores de AARD/ARD para predição de pressão de início, pressão de bolha e massa de precipitação para dois óleos brutos asfaltenicos:
 - Óleo bruto-1: A ferramenta previu pressões de início e bolha com AARDs de 2,13% e 1,32%, superando amplamente o Software Comercial-1 (6,73% e 5,07%) e o Software-2 (10,11% e 10,93%).
 - Óleo bruto-2: O módulo correspondeu à massa de precipitação e previu a pressão de bolha a 400 °F com 3,1% de ARD, novamente superior às alternativas comerciais (7,46% e 13,51%).
3. Os ganhos de desempenho resultam de parametrização fisicamente consistente, análise robusta de estabilidade de fases e regressão equilibrada, reduzindo ruído numérico e overfitting.
4. O software fornece perfis de precipitação de alta fidelidade e envelopes de fase, permitindo entradas termodinâmicas confiáveis para avaliação de dano à formação.
5. Embora não calcule internamente a redução de permeabilidade, suas predições podem ser diretamente integradas a modelos empíricos ou mecanicistas de dano à formação para apoiar avaliação e mitigação de risco.
6. De modo geral, a ferramenta oferece uma solução rápida, precisa e aplicável em campo, ligando análise PVT à engenharia de garantia de escoamento. O módulo transforma a modelagem de asfaltenos em uma ferramenta de projeto proativa, ajudando operadores a prevenir danos à formação, aumentar produtividade, reduzir riscos e melhorar a economia do projeto.

Referências

- AlHammadi, A.A., Vargas, F.M., Chapman, W.G. (2015) Comparison of cubic-plus-association and perturbed-chain statistical associating fluid theory methods for modeling asphaltene phase behavior and pressure–volume–temperature properties, *Energy & Fuels*, **29**, 2864-2875.
- Arya, A., Liang, X., Von Solms, N., Kontogeorgis, G.M. (2016) Modeling of asphaltene onset precipitation conditions with cubic plus association (CPA) and perturbed chain statistical associating fluid theory (PC-SAFT) equations of state, *Energy & Fuels*, **30**, 6835-6852.

Ashena, R., Bataee, M., Jafarpour, H. *et al.* Significant production improvement using optimization of completion and artificial lift: case studies from South-West Iran (2021). *J Petrol Explor Prod Technol* **11**, 359–384. <https://doi.org/10.1007/s13202-020-01053-6>.

Dakhelpour-Ghoveifel, J., Naser Khanabadi, P., Rafiei, S., Daryasafar, A. (2024) Phase equilibria calculations of a hydrocarbon system consisting water and asphaltene using association equation of state: A generalized auto-tune procedure, *Fluid Phase Equilibria*, **580**, 114062.

Daryasafar, A., Helalizadeh, A., Shahbazi, K. (2024) Investigation of nano-confinement effects on asphaltenic crude oil phase behavior in tight and shale reservoirs: Modeling using CPA-EOS, *Fluid Phase Equilibria*, **586**, 114181.

Daryasafar, A., Masoudi, M., Kord, S., Madani, M. (2020) Evaluation of different thermodynamic models in predicting asphaltene precipitation: A comparative study, *Fluid Phase Equilibria*, **514**, 112557.

Daryasafar, A., Shahbazi, K., Helalizadeh, A. (2025) Development of a CPA EOS model for studying confinement effects on two- and three-phase behavior of asphaltenic crude oil: Verification and validation, *Chemical Engineering Science*, **304**, 120981.

Doryani H., Malayeri M.R., Riazi M. (2018) Precipitation and deposition of asphaltene in porous media: Impact of various connate water types, *Journal of Molecular Liquids*, **258**, 124-132.

Gonzalez, D. L., Hirasaki, G. J., Chapman, W. G. (2007) Modeling of asphaltene precipitation due to changes in composition using the perturbed chain statistical associating fluid theory equation of state. *Energy & Fuels*, **21**, 1231–1242.

Gross, J., & Sadowski, G. (2001) Perturbed-Chain SAFT: An Equation of State Based on a Perturbation Theory for Chain Molecules. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **40**, 1244–1260.

Huang, X., Zhang, Y., He, M., Li, X., Yang, W., Lu, J. (2022) Asphaltene precipitation and reservoir damage characteristics of CO₂ flooding in different microscopic structure types in tight light oil reservoirs, *Fuel*, **312**, 122943.

Jamaluddin, A. K. M., Joshi, N., Iwere, F., Gurbinar, O. (2002) Proceedings of the SPE International Petroleum Conference and Exhibition in Mexico; Villahermosa, Mexico, Feb 10–12, SPE 74393.

Kontogeorgis, G.M., Folas, G.K. (2009) Thermodynamic Models for Industrial Applications: from Classical and Advanced Mixing Rules to Association Theories John Wiley & Sons.

- Kord, S., Soleymanzadeh, A., Miri, R. (2019) A generalized scaling equation to predict asphaltene precipitation during precipitant dilution, natural depletion, water injection and gas injection, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **182**, 106320.
- Mohammed I., Mahmoud M., Al Shehri D., El-Husseiny A., Alade O. (2021) Asphaltene precipitation and deposition: A critical review, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **197**, 107956.
- Mousavi Dehghani S.A., Vafaie Sefti M., Mirzayi B., Fasih M. (2007) Experimental investigation on asphaltene deposition in porous media during miscible gas injection, *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, **26**, 39-48.
- Panuganti, S. R., Tavakkoli, M., Vargas, F. M., Gonzalez, D. L., Chapman, W. G. (2013) SAFT model for upstream asphaltene applications, *Fluid Phase Equilibria*, **359**, 2–16.
- Panuganti, S.R., Vargas, F.M., Gonzalez, D.L., Kurup, A.S., Chapman, W.G. (2012) PC-SAFT characterization of crude oils and modeling of asphaltene phase behavior, *Fuel*, **93**, 658-669.
- Speight, J. (1991) *The Chemistry and Technology of Petroleum* (2nd Edition), Marcel Dekker Inc, New York, 760.
- Tavakkoli, M., Panuganti, S.R., Taghikhani, V., Pishvaie, M.R., Chapman, W.G. (2014) Precipitated Asphaltene Amount at High-Pressure and High-Temperature Conditions, *Energy & Fuels*, **28**, 1596–1610.