

تحلیل و شبیه‌سازی فرآیند کاهش وزن مولکولی هیدروکربن‌های سنگین در شرایط عملیاتی مختلف چاه نفت مشبک شده

سپیده شمشیری^۱، بهروز میرزایی^{۱*} و هادی سید باقری^۲

۱ و ۲- گروه مهندسی شیمی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران

۳- پژوهشکده توسعه فناوری‌های پالایش و فراورش نفت، پردیس صنایع پایین دستی، پژوهشگاه صنعت نفت، تهران، ایران

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۸/۲۸ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۲/۲۱

چکیده

در این پژوهش، اثر کاتالیست بر فرآیند شکست هیدروکربن‌های سنگین در بخش مشبک چاه نفت با استفاده از روش دینامیک سیالات محاسباتی بررسی گردید. هندسه چاه نفت عمودی با نواحی مشبک شده در بخش انتهایی چاه به‌طور سه‌بعدی مش‌بندی و مدل‌سازی شد. در این مدل‌سازی سیال نیوتنی، تراکم‌ناپذیر و با جریان آرام فرض شد و روابط حاکم بر جریان سیالات، انتقال جرم و واکنش‌های شیمیایی به‌روش المان محدود حل شدند. سپس تأثیر پارامترهایی مانند نوع کاتالیست، تغییرات دما، درصد تبدیل، حضور بخار آب، تشکیل رسوب کربن و شاخص بهره‌وری چاه بر فرآیند بررسی و تحلیل گردید. نتایج نشان داد که افزایش دما در محدوده دمایی ۳۵۰ تا ۴۲۵ °C و استفاده از یک لایه کاتالیست بر روی نواحی مشبک، نرخ تبدیل از ۷٪ به ۴۵٪ افزایش می‌یابد. بررسی اثر نوع کاتالیست نشان داد که کاتالیست آلومینا-سیلیکا با انرژی فعال‌سازی پایین ($22/3 \text{ kJmol}^{-1}$) و همچنین مساحت سطح بالا ($240/553 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$)، بالاترین میزان تبدیل را ارائه می‌دهد. همچنین بررسی تأثیر بخار آب با سه نسبت حجمی مختلف بخار به نفت یعنی ۰/۱، ۰/۵ و ۰/۲ نشان داد که افزایش نسبت بخار به نفت میزان درصد تبدیل را تقریباً ۶٪ افزایش می‌دهد. افزایش قطر پرفوریشن‌ها از بازه ۴/۵ mm تا ۱۰/۵ موجب افزایش ۱۰ برابری نرخ بهره‌وری چاه شد که منجر به افزایش چشمگیر در نرخ تولید چاه می‌شود. یکی از چالش‌های اصلی در این فرآیند، تشکیل رسوب کربن بر روی سطح کاتالیست بود که منجر به کاهش تدریجی فعالیت کاتالیستی شد. در مراحل اولیه، کاتالیست عملکرد بالایی دارد، اما با گذر زمان، فعالیت آن کاهش یافته و نرخ رسوب کک افزایش می‌یابد. مقایسه نتایج مدل‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی در محدوده دمایی ۳۵۰ تا ۴۲۵ °C و فشار ۲۰ bar نشان داد که نتایج شبیه‌سازی همخوانی خوبی با داده‌های تجربی دارند.

کلمات کلیدی: وزن مولکولی، فرآیند شکست، هیدروکربن‌های سنگین، کاتالیست، نفت خام، بخش مشبک، دینامیک سیالات محاسباتی

*مسئول مکاتبات

آدرس الکترونیکی mirzayib@uma.ac.ir

شناسه دیجیتال: (DOI: 10.22078/pr.2025.5571.3475)

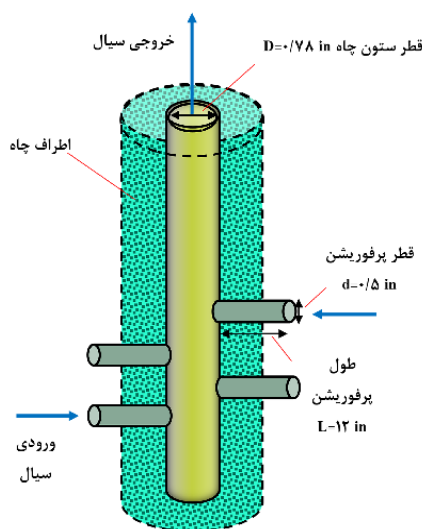
مقدمه

نفت سنگین نوعی نفت خام است که ویسکوزیته بالایی دارد و جریان آن به راحتی امکان پذیر نیست [۱، ۲]. این نوع نفت دارای درجه API^۱ بین ۱۰ تا ۲۰ و ویسکوزیته بیشتر از ۱۰۰ mPa.s است [۲]. سنگینی این نفت به نسبت پایین هیدروژن به کربن در مولکول‌ها و همچنین سایر مواد معدنی که به افزایش چگالی نفت کمک می‌کنند، نسبت داده می‌شود [۳، ۴]. اساس فرآیند بهبود نفت سنگین شکستن پیوندهای اتمی بین مولکول‌های نفت سنگین و تبدیل این ماکرومولکول‌ها به مولکول‌های کوچک است [۵]. سازوکارهای کاهش ویسکوزیته نفت سنگین شامل کاهش شیمیایی غیرقابل بازگشت ویسکوزیته پس از واکنش کاتالیستی و کاهش ویسکوزیته فیزیکی در رقیق‌سازی و حل شدن بین نفت خام ارتقا یافته و نفت سنگین می‌باشند [۶]. برای افزایش بهره‌برداری از نفت سنگین، نیاز فوری به توسعه روش‌های مؤثر برای کاهش ویسکوزیته و بهبود حمل و نقل آن وجود دارد. در فرآیند اصلاح و کاهش ویسکوزیته، ماکرومولکول‌های نفت سنگین می‌توانند توسط کاتالیزورها تجزیه شوند [۷]. تحقیقات جدید نشان می‌دهند علاوه بر روش‌های رایج مانند تزریق گازها و استفاده از کاتالیست‌های نانوساختار، می‌توان از مایعات یونی اصلاح شده که تأثیر به سزایی در کاهش وزن مولکولی هیدروکربن‌های سنگین دارند استفاده کرد. این ترکیبات با پایداری حرارتی بالا و توانایی شکستن پیوندهای مولکولی، گزینه‌ای کارآمد برای بهبود سیالیت نفت سنگین محسوب می‌شوند [۸]. به منظور مدل‌سازی دقیق تر رفتار هیدروکربن‌های سنگین و کاهش وزن مولکولی آن‌ها در شرایط عملیاتی مختلف، استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به عنوان یک ابزار پیشرفته مطرح شده است. این روش می‌تواند به تحلیل رئولوژی و جریان پذیری نفت سنگین کمک کند [۹]. سلیم و همکارانش پژوهشی با هدف بررسی پیش‌بینی

اثر قطر و طول پرفوریشن، زاویه جریان پرفوریشن، سرعت جریان و اثر شکل نواحی مشبک بر افت فشار و سپس شاخص بهره‌وری چاه عمودی با دو ناحیه مشبک انجام دادند. در این مطالعه از ابزار دینامیک سیالات محاسباتی و یک کد نرم‌افزاری محاسباتی ANSYS CFX15.0 برای شبیه‌سازی مدل جریان آشفتۀ $k-\epsilon$ سه بعدی در یک چاه عمودی مشبک شده استفاده شده است. شبیه‌سازی چاه عمودی با اعمال قوانین بقای جرم و مومنتوم انجام می‌شود. نتایج نشان می‌دهد حداکثر افت فشار اصطکاکی در محل پرفوریشن‌ها اتفاق می‌افتد که با افزایش قطر نواحی مشبک شده افزایش می‌یابد. برای تمامی قطر پرفوریشن‌ها با طول ثابت (m) ۰/۱۵) افت فشار اصطکاکی بالاتر از ۸۲٪ فشار کل است. همچنین دریافتند که افزایش جریان ورودی به نسبت نرخ جریان باعث افزایش افت فشار کل و سپس کاهش در نرخ بهره‌وری می‌شود [۱۰]. لی و همکارانش بر اساس روابط مومنتوم، روابط انتقال جرم و جریان جرمی متغیر در چاه افقی، مدل‌های محاسبه افت فشار از سیال در چاه‌های افقی مشبک شده را مورد بررسی قرار دادند. نتایج حاصل از محاسبه و تجزیه و تحلیل نشان می‌دهد که افت فشار اصطکاکی، افت فشار شتابی و افت فشار اختلاطی اثرات متفاوتی در افت فشار کلی سیال دارند. همچنین نشان دادند ویسکوزیته سیال، نرخ تولید و طول چاه افقی نیز دارای تأثیرات مختلفی بر انواع افت فشار هستند [۱۱]. وی و همکارانش با استفاده از شبیه‌سازی عددی، تأثیر پارامترهای مختلف مانند عمق و قطر مشبک، چگالی مشبک، ضخامت ناحیه آسیب‌دیده و تراوایی تونل مشبک را بر بهره‌وری چاه ارزیابی کردند. نتایج آن‌ها نشان داد که تراوایی تونل مشبک بیشترین تأثیر را بر بهره‌وری دارد و جلوگیری از انسداد آن می‌تواند بهره‌وری را بهبود بخشد.

1. American Petroleum Institute

شعاع ستون چاه، طول و شعاع پرفوریشن‌ها و سایر مشخصات هندسی به‌دقت در مدل اعمال شده است. مش‌بندی این هندسه در مختصات سه‌بعدی انجام شده و از المان‌های خیلی بزرگ برای کاهش زمان محاسباتی استفاده شده است. بررسی استقلال از مش نشان داد که استفاده از ۳۴۶۳ المان منجر به نتایج پایدار و مستقل از شبکه می‌شود. هندسه شبیه‌سازی شده در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ هندسه چاه در مختصات سه‌بعدی

روابط حاکم بر مدل

برای مدل‌سازی جریان سیال با فرض جریان آرام و تراکم‌ناپذیر، علاوه‌بر روابط پیوستگی که بقای جرم را تضمین می‌کند، روابط ناویر-استوکس نیز برای توصیف حرکت سیال در نظر گرفته می‌شود. این روابط برای جریان‌های سه‌بعدی، دائم و تراکم‌ناپذیر به‌صورت روابط ۱ و ۲ بیان می‌شوند [۱۴].

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g + S \quad (2)$$

در اینجا، زیرنویس i و j بیان‌کننده جهت در راستاهای دستگاه مختصات است.

این مدل می‌تواند به بهینه‌سازی طراحی چاه‌های مشبک و افزایش بهره‌وری تولید نفت و گاز کمک کند [۱۲]. این پژوهش قصد دارد با کمک ابزار دینامیک سیالات محاسباتی، فرآیند کاهش وزن مولکولی هیدروکربن‌های سنگین در چاه نفت مشبک شده تحت شرایط عملیاتی مختلف را مدل‌سازی کند. در این راستا این فرآیند را از جنبه‌های مختلف مانند میزان رسوب، اثر حضور بخار آب بر عملکرد فرآیند و غیره مورد بررسی قرار می‌دهد. همچنین در مدل‌سازی انجام شده، اثر پارامترهای عملیاتی نظیر دما و نوع کاتالیست بر کاهش وزن مولکولی هیدروکربن‌های سنگین مورد بررسی قرار می‌گیرد و نتایج مدل‌سازی با داده‌های موجود در مراجع مقایسه می‌گردد. نتایج این پژوهش می‌تواند به ارائه راهنمایی‌هایی برای طراحی فرآیندهای کارآمدتر در تولید نفت و کاهش چالش‌های مرتبط با انتقال هیدروکربن‌های سنگین کمک کند.

روشن‌شناسی

مدل‌سازی عددی

به‌منظور حل روابط دیفرانسیل مربوط به جریان و واکنش‌های شیمیایی از روش عددی بر پایه المان محدود استفاده شد. این روش برای حل هم‌زمان روابط حاکم شامل روابط پیوستگی، ناویر-استوکس، روابط انتقال جرم و واکنش‌های شیمیایی به‌کار گرفته شد. در این مطالعه، سیال نیوتنی، تراکم‌ناپذیر و با جریان آرام در نظر گرفته شده است [۱۲]. خواص سیال در این شبیه‌سازی دانسیته 980 kg/m^3 و ویسکوزیته دینامیکی 0.49 Pa.s انتخاب شده‌اند.

هندسه شبیه‌سازی شده برای مختصات سه‌بعدی

و مش‌بندی مدل

هندسه مورد مطالعه یک چاه نفت عمودی با پرفوریشن‌هایی در بخش انتهایی است. ابعاد و ویژگی‌های هندسی مطابق داده‌های تجربی گزارش شده در منابع معتبر انتخاب شده است [۱۳].

تولید محصولات یا تبدیل واکنش‌دهنده‌ها در هر واکنش تعیین می‌شود. رابطه استفاده شده برای تعیین درصد تبدیل، رابطه ارائه شده در مقالات مورد مطالعه بوده است [۱۸]. همچنین برای بررسی اثر کاتالیست روی فرآیند روابط ۳ و ۴ مورد استفاده قرار گرفته است.

$$N_A = K_g (C_{A_g} - C_{A_i}) \quad (3)$$

$$N_A = -R_A \quad (4)$$

در این روابط، N_A شار مولی در انتقال جرم، K_g ضریب انتقال جرم، C_{A_g} غلظت اولیه، C_{A_i} غلظت میانی، R_A همان نرخ واکنش است که در رابطه ۴ بیان گردیده است [۱۹]. در این مطالعه، ضرایب نفوذ مولکولی برای ترکیبات مختلف شبیه‌سازی شده در محدوده 10^{-10} تا 10^{-9} m²/s در نظر گرفته شده‌اند. این محدوده براساس مطالعات قبلی در مورد انتقال جرم در فرآیندهای نفت سنگین استخراج شده است [۲۰، ۲۱]. استفاده از این مقادیر به دلیل محدودیت دسترسی به داده‌های دقیق آزمایشگاهی و همچنین به‌عنوان مقادیر استاندارد برای مدل‌سازی عددی در فرآیندهای مشابه صورت گرفته است. واکنش‌های مورد استفاده در مدل‌سازی و مقادیر انرژی فعال‌سازی و ضریب فرکانس در جدول ۱ ارائه شده است. اثر نوع کاتالیست با مساحت سطح و انرژی فعال‌سازی مختلف نیز در این مدل‌سازی بررسی شده است. انواع کاتالیست با انرژی فعال‌سازی و مساحت سطح مختلف در جدول ۲ آورده شده است. بررسی اثر وجود بخار آب و ترکیب درصد هیدروکربن‌های واکنش داده

اثر وجود بخار آب برای سه مقدار مختلف نسبت حجمی بخار به نفت^۱ (۰/۵، ۰/۲ و ۰/۰۵) و تأثیر رسوب کربن روی سطح کاتالیست در دمای ۴۲۵ °C و فشار ۲۰ bar بررسی شده است. مقدار انرژی فعال‌سازی برای واکنش‌ها با حضور بخار آب برای مدل‌سازی از مقالات آزمایشگاهی استخراج شده است [۲۲].

در روابط ۲ و ۱، فشار، u سرعت μ ویسکوزیته، ρ چگالی، τ تنش برشی، S نیروی سطحی و g شتاب گرانش است.

شرایط مرزی

شرایط مرزی برای ورودی $u=2/5$ m/s و برای خروجی $p=8000$ Pa در چاه نفت مشبک در نظر گرفته شده است. همچنین در دیواره چاه فرض شده است که جریان سیال صفر باشد، به عبارتی دیگر، شرط عدم لغزش در دیواره چاه حاکم است. برای بررسی نفوذ کاتالیست در قسمت مشبک شده چاه نفت خام نیز، به ترتیب شرایط مرزی غلظت و شار خروجی برای ورودی و خروجی چاه نفت خام در نظر گرفته می‌شود.

بررسی میزان درصد تبدیل و پارامترهای موثر بر آن

برای بررسی اثر کاتالیست بر کاهش وزن مولکولی هیدروکربن‌ها، واکنش شکست در فشار ۲۰ bar و دماهای ۳۵۰، ۴۰۰ و ۴۲۵ °C مطابق با داده‌های آزمایشگاهی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی مورد بررسی قرار گرفته است [۱۵]. در واکنش‌های شکست کاتالیستی توسط شکستن پیوندهای کربن-کربن و کربن-هترواتم، هیدروکربن‌های سنگین به هیدروکربن‌های سبک تبدیل می‌شوند [۱۶]. به کمک نرم‌افزار و با استفاده از روابط موجود و تعریف فیزیک‌های جدید، اثر کاتالیست روی هر دو دیواره‌های نواحی مشبک مورد بررسی قرار گرفت. واکنش‌ها در این پژوهش با $n=5$ و $m=7$ انتخاب شده که n و m به ترتیب نشان‌دهنده تعداد اتم‌های کربن و هیدروژن در فرمول شیمیایی ترکیبات مورد بررسی هستند [۱۷]. همچنین، غلظت اولیه هیدروکربن‌ها طبق واکنش‌های مورد استفاده 10 mol/L انتخاب شده است. در این پژوهش، با فرض حاکم بودن رابطه آرنیوس و استفاده از اطلاعات اولیه واکنش‌ها (ضریب فرکانس، انرژی اکتیواسیون) که در جدول ۱ بیان شده است، تغییرات غلظت تمامی ترکیبات شیمیایی در طول زمان محاسبه شده است. بر این اساس، میزان

1. (SOR): Steam to Oil Ratio

جدول ۱ شرایط عملیاتی و واکنش‌های مورد استفاده

واکنش	ضریب فرکانس ($\text{m}^3\text{mol}^{-1}\text{s}^{-1}$)	انرژی فعال‌سازی (kcalmol^{-1})	منابع
$C_{12}H_{28} \Rightarrow C_5H_{12} + C_7H_{16}$	۶۵۰۰۰	۲۷/۸	[۲۲، ۱۷]
$C_7H_{16} \Rightarrow C_5H_{12} + C_2H_4$	۱۰۵۵۰	۲۱/۱	[۲۲، ۱۷]
$C_{12}H_{24} \Rightarrow C_5H_{10} + C_7H_{14}$	۲۰۰۰۰	۲۱	[۲۲، ۱۷]
$C_{12}H_{25} + C_7H_{14} \Rightarrow C_7H_{14} + C_5H_9 + C$	۹۰۰	۱۴	[۲۲، ۱۷]
$n-C_7H_{16} \Rightarrow C_7H_{14} + H_2$	۸۰۰۰	۲۳/۴	[۲۲، ۱۷]
$C_5H_{10} \Rightarrow C_5H_4 + 3H_2$	۸۰۰	۲۲/۷	[۲۲، ۱۷]
$3C_7H_{14} + C_5H_{10} \Rightarrow 3C_7H_{16} + C_5H_4$	۸۰۰	۱۸/۳۱	[۲۲، ۱۷]
$3C_7H_{14} + C_5H_{10} \Rightarrow 3C_7H_{16} + C_5H_4$	۹۳۰۰	۱۹/۵	[۲۲، ۱۷]
$n-C_7H_{16} \Rightarrow i-C_7H_{16}$	۵۷۰	۴	[۲۲، ۱۷]
$n-C_7H_{14} \Rightarrow i-C_7H_{14}$	۴۹۰	۱۹	[۲۲، ۱۷]
$C_7H_{14} + CH_3CH + CHC_2H_5 + CHCH_2 \Rightarrow 2C_7H_{14} + H_2$	۳۸۰	۱۸/۳	[۲۲، ۱۷]

جدول ۲ مشخصات و نوع کاتالیست مورد استفاده

انواع کاتالیست	مساحت سطح (m^2g^{-1})	انرژی اکتیواسیون (kJmol^{-1})	منابع
SiO_2	۶۰۰-۷۸۵	۶۸/۲۴۹	[۲۳]
Nano-ZSM-5	۳۹۵	۵۸	[۲۴]
$\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$	۲۴۰/۵۵۳	۲۲/۳	[۲۵]

دارند.

بررسی رسوب در فرآیند کاهش وزن مولکولی و مقدار فعالیت کاتالیست در فرآیند

رسوب کربن در سطح کاتالیست به‌طور معمول در فرآیندهای کراکینگ هیدروکربن‌ها مشاهده می‌شود که می‌تواند بر فعالیت کاتالیست‌ها تأثیر بگذارد. رسوب کربن در فرآیند کراکینگ کاتالیستی در این پژوهش، در دمای 425°C و فشار ۲۰ bar مورد بررسی قرار گرفته است. اثر حضور کاتالیست و عدم حضور کاتالیست بدون در نظر گرفتن نوع کاتالیست و میزان فعالیت کاتالیست در فرآیند طبق مقاله Zavarukhin و همکارانش مورد بررسی قرار گرفت [۲۶].

نتایج به‌دست آمده در کار شبیه‌سازی با کار آزمایشگاهی مذکور تطابق خوبی دارد. حضور بخار آب در فرآیند موجب کاهش انرژی فعال‌سازی می‌گردد. همچنین در این بررسی به کمک نرم‌افزار در ابتدا و انتهای نواحی مشبک شده ترکیب درصد تمامی هیدروکربن‌های شرکت کننده در واکنش به‌دست آمد. بررسی ترکیب درصد در این نواحی به ارتقاء فرآیند شکست کاتالیستی کمک می‌کند. هیدروکربن‌های موجود با توجه به روند واکنش و تخریب برخی پیوندها در حین واکنش در نقاط مختلف با توجه به محل ایجاد نواحی مشبک شده در هندسه شبیه‌سازی شده ترکیب درصد مختلفی

و سپس نتایج به‌دست آمده از روش حل عددی با نتایج تجربی [۲۶ و ۲۷] موجود مقایسه شود. مقایسه نتایج عددی با داده‌های آزمایشگاهی نشان داد که میانگین درصد خطا کمتر از ۵٪ است، که اعتبار مدل را تأیید می‌کند. جدول ۳ بررسی استقلال از مش را در این کار نشان می‌دهد. این بررسی برای درصد تبدیل در دمای ۴۲۵ °C انجام گردید.

نتایج و بحث

بررسی نرخ تبدیل در فرآیند

برای شبیه‌سازی واکنش مدل‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی در یک راکتور ناپیوسته با شرایط آزمایشگاهی هارت و همکارانش [۱۵] در دماهای ۳۵۰، ۴۰۰ و ۴۲۵ و فشار ۲۰ bar انجام شد.

جدول ۳ نتایج بررسی استقلال از مش

تعداد المان‌های مش‌بندی شده	% تبدیل در ۴۲۵ °C
۳۷۱۶۸	۴۴/۷
۷۰۰۲	۴۵/۲
۶۲۴۰	۴۵/۸
۳۴۶۳	۴۶/۶

درصد تبدیل کل فرآیند با استفاده از نسبت تبدیل سنگین‌ترین هیدروکربن ($C_{12}H_{28}$) به سبک‌ترین هیدروکربن ($CHCH_3$) در نظر گرفته شده در فرآیند، محاسبه گردید [۱۸]. شکل ۲ روند افزایش درصد تبدیل را در دماهای مختلف نشان می‌دهد.

وابستگی زمانی فعالیت کاتالیست با رابطه ۵ بیان شده است.

$$\frac{da}{dt} = -k_a r^2 c_c a \quad (5)$$

که k_a نیز به‌صورت رابطه ۶ قابل محاسبه خواهد بود.

$$k_a = k_{a_0} \exp\left(\frac{135600}{R_g T} - 32.007\right) \quad (6)$$

در اینجا k_a برابر با $10^6 \times 8/324$ ، نرخ واکنش، C_c غلظت رسوب کک و a فعالیت کاتالیست می‌باشد. این روابط در مدل‌سازی فرآیند از مقالات مرتبط به‌دست آمده است [۲۶].

$$PI = \frac{Q}{\Delta P_t} \quad (7)$$

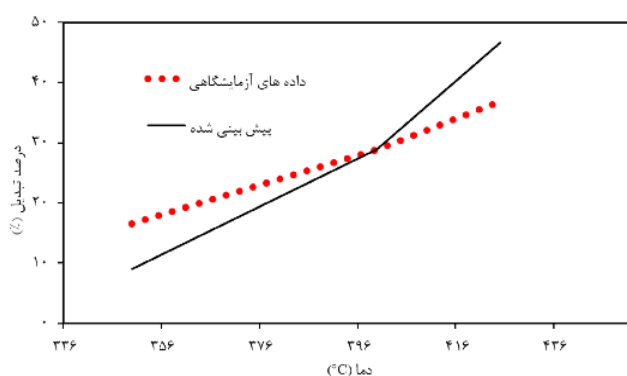
میزان دبی حجمی با استفاده از روابط ۸ به‌دست آمده است.

$$Q = NVA = NV \frac{\pi d^2}{4} \quad (8)$$

Q دبی حجمی، ΔP_t افت فشار کل، N تعداد پرفوریشن‌ها، V سرعت حرکت سیال، A مساحت و d قطر پرفوریشن‌ها می‌باشد [۲۷، ۲۸]. میزان اختلاف فشار برای محاسبه بهره‌وری از پروفایل‌های فشار به کمک مدل‌سازی محاسبه گردیده است.

استقلال از مش و اعتبارسنجی مدل

به‌منظور بررسی دقت مدل‌سازی، آزمون استقلال از مش با استفاده از چهار شبکه مختلف انجام شد. نتایج نشان داد که با افزایش تعداد المان‌ها از ۳۴۶۳ به ۷۰۰۲، تغییرات در درصد تبدیل هیدروکربن‌ها کمتر از ۲٪ بوده و در نتیجه، مدل از نظر مش‌بندی بهینه است. برای اطمینان از صحت جواب حاصل از حل روابط حاکم بر مسئله ابتدا باید استقلال از مش



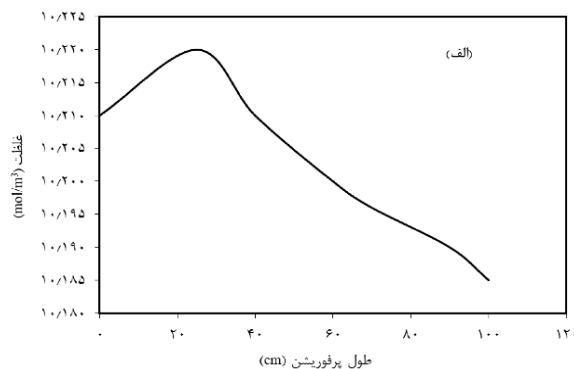
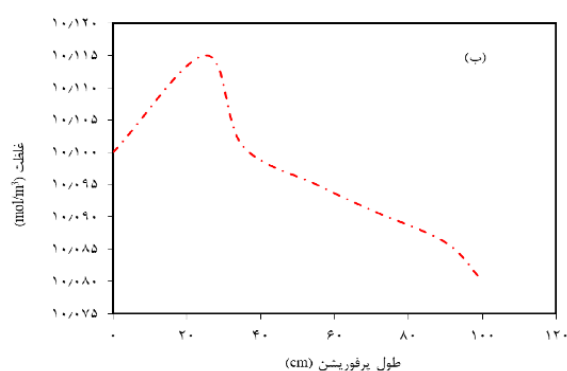
شکل ۲ تغییرات دما (°C) در مقابل درصد تبدیل (%)

سبک می‌گردد. کاتالیست بدون شرکت در خود واکنش، میزان نرخ واکنش را افزایش می‌دهد. افزایش نرخ واکنش باعث ایجاد تغییر در غلظت واکنش‌دهنده‌ها می‌شود، بنابراین می‌تواند بر میزان تبدیل آن تأثیر بگذارد [۲۹]. در این پژوهش برای بررسی میزان اثر کاتالیست بر واکنش، پروفایل غلظت مورد بررسی قرار گرفته است، کمترین غلظت در نواحی مشبک شده در دیواره کاتالیستی چاه و بیشترین غلظت در مرکز نواحی مشبک شده می‌باشد که در شکل ۴ برای نمونه در پروفایل غلظت C_7H_{14} به‌طور کامل مشخص گردیده است. این نمودار نشان می‌دهد که حضور کاتالیست موجب کاهش چشمگیر غلظت ترکیبات سنگین در دیواره نواحی مشبک چاه شده است. همچنین، بعد از غیرفعال‌سازی کاتالیست به‌دلیل رسوب کک، غلظت این ترکیبات افزایش یافته که بیانگر کاهش کارایی فرآیند شکست هیدروکربن‌ها است.

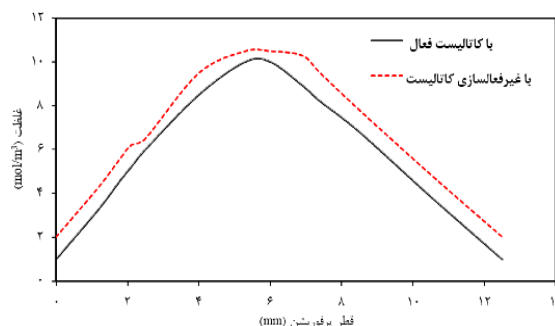
مقایسه داده‌های مدل‌سازی با نتایج آزمایشگاهی نشان می‌دهد که مدل عددی با داده‌های تجربی تطابق بالایی دارد و بالاترین میزان تبدیل در دمای $425^\circ C$ رخ داده است، که بیانگر این است که نرخ تبدیل با افزایش دمای فرآیند افزایش می‌یابد. همچنین، شکل ۳-الف و شکل ۳-ب تغییرات غلظت هیدروکربن‌ها در دمای $425^\circ C$ را در چاه مشبک شده نشان می‌دهد. این نتایج بیان می‌کنند که غلظت هیدروکربن‌های اولیه در بخش مشبک کاهش یافته و هیدروکربن‌ها در نواحی مشبک شده به‌خوبی شکسته می‌شوند.

اثر کاتالیست بر میزان تبدیل

در فرآیند شکست به‌کمک کاتالیست در بخش مشبک شده چاه نفت خام، انتقال ترکیبات سنگین از ترکیبات هیدروکربنی به‌سمت بخش مشبک شده چاه و جذب ترکیبات روی سطح کاتالیست منجر به تبدیل هیدروکربن‌های سنگین به هیدروکربن‌های



شکل ۳ تغییرات غلظت (mol/m^3) سنگین‌ترین هیدروکربن ($C_{12}H_{28}$) و سبک‌ترین هیدروکربن ($CHCH_2$) نسبت به طول پرفوریشن‌ها (الف) سنگین‌ترین هیدروکربن (ب) سبک‌ترین هیدروکربن



شکل ۴ پروفایل غلظت C_7H_{14} (mol/m^3) بعد اعمال کاتالیست و بعد از غیرفعال‌سازی کاتالیست در بخش مشبک شده چاه

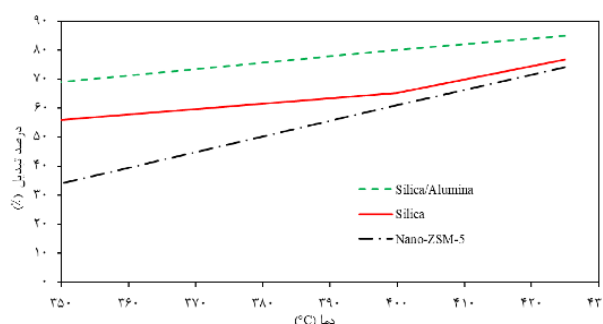
تأثیر نوع کاتالیست و تغییرات دما بر درصد تبدیل

نرخ تبدیل با استفاده از سه نوع کاتالیست با مساحت سطح و انرژی فعال‌سازی متفاوت مورد بررسی قرار گرفت. محدوده فعال‌سازی و دما به ترتیب $20-70$ kJ/mol و $300-425$ °C در نظر گرفته شد. دما بر تمامی واکنش‌های شیمیایی تأثیر دارد و باعث افزایش سرعت واکنش‌ها می‌شود. البته شدت اثر دما بر واکنش‌های شیمیایی متفاوت است و به انرژی اکتیواسیون واکنش‌ها وابسته می‌باشد یعنی هر چه انرژی اکتیواسیون یک واکنش شیمیایی بزرگ‌تر باشد، با افزایش دما سرعت واکنش افزایش بیشتری خواهد داشت و با کاهش دما نیز سرعت واکنش با شدت بیشتری کاهش می‌یابد. همچنین کاتالیست‌ها با کاهش انرژی فعال‌سازی واکنش‌ها، دمای مورد نیاز برای شکست هیدروکربن‌ها را کاهش داده و بازده تولید محصولات ارزشمند را افزایش می‌دهند. انتخاب کاتالیست مناسب با مساحت سطح بالا، می‌تواند تأثیر قابل توجهی بر کارایی فرآیند داشته باشد [۳۰]. در این پژوهش کاتالیست $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ طبق جدول ۲ با کمترین انرژی فعال‌سازی، بالاترین نرخ تبدیل را دارد، اما کاتالیست‌های Nano-ZSM-5 و SiO_2 که تقریباً انرژی فعال‌سازی یکسانی دارند با افزایش دما میزان نرخ تبدیل کمتری را نسبت به $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ نشان دادند. علاوه بر این با بررسی مساحت سطح کاتالیست مشخص شد که کاتالیست SiO_2 با مساحت سطح بالاتر نسبت به کاتالیست

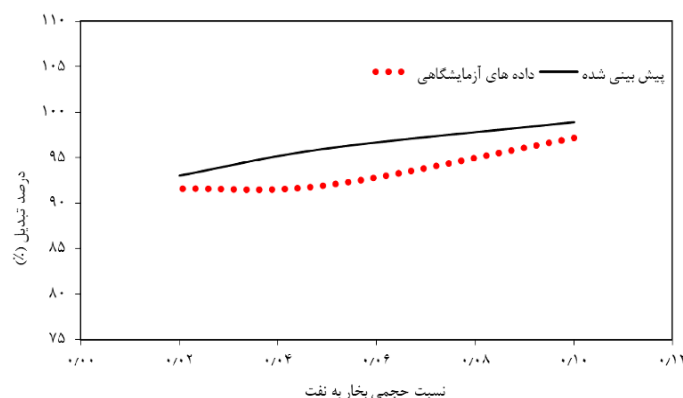
Nano-ZSM-5، نرخ تبدیل بیشتری نسبت به آن خواهد داشت. به‌طور کلی با افزایش دما، نرخ تبدیل در هر سه نوع کاتالیست افزایش می‌یابد اما نسبت اثربخشی انرژی فعال‌سازی به نسبت میزان مساحت سطح بر درصد تبدیل بیشتر است که در شکل ۵ به خوبی نشان داده شده است.

تأثیر تزریق بخار بر فرآیند و میزان ترکیب درصد هیدروکربن‌های سنگین

حضور بخار با سه نسبت حجمی بخار به نفت یعنی $0/1$ ، $0/05$ و $0/02$ در نظر گرفته شده است. نرخ تبدیل ترکیبات نفت‌خام در بخش مشبک چاه نفت با حضور بخار در دمای 425 °C بررسی شد. شکل ۶ نشان می‌دهد که افزایش نسبت بخار به نفت باعث بهبود درصد تبدیل هیدروکربن‌های سنگین می‌شود. مقایسه داده‌های تجربی و مدل‌سازی نشان می‌دهد که مدل CFD توانسته است رفتار سیستم را با دقت بالایی شبیه‌سازی کند [۳۱]. مقدار درصد خطا برای سه نسبت بخار به نفت در جدول ۴ لحاظ گردیده است. حضور بخار آب در فرآیند شکست هیدروکربن‌های سنگین، به‌عنوان یک عامل رقیق‌کننده و نیز شرکت‌کننده در واکنش‌ها، می‌تواند اثرات متفاوتی داشته باشد. بخار آب با کاهش غلظت هیدروکربن‌ها، احتمال برخورد مولکول‌ها و تشکیل محصولات ناخواسته را کاهش می‌دهد [۳۲]. همچنین، بخار آب می‌تواند با شرکت در واکنش‌های جانبی، تولید هیدروژن کرده و به بهبود کیفیت محصولات کمک کند.



شکل ۵ اثر تغییرات دما (°C) و نوع کاتالیست در میزان درصد تبدیل (%)



شکل ۶ تغییرات درصد (٪) هیدروکربن های سنگین با حضور بخار

جدول ۴ داده های تجربی و تئوری و درصد خطا در سه نسبت بخار به نفت

نسبت حجمی بخار به نفت	آزمایشگاهی	پیش بینی شده	خطا (٪)
۰/۱	۹۷/۲	۹۹	۱/۸۱
۰/۰۵	۹۲	۹۶/۱۱	۴/۲۷
۰/۰۲۰	۹۱/۶	۹۳/۳۴	۱/۸۶

نتایج حاصل از بررسی شاخص بهره‌وری نفت در چاه مشبک شده

یک پارامتر اساسی که شرکت های نفتی برای توسعه برنامه تولید یک میدان استفاده می کنند، شاخص بهره‌وری چاه های نفتی است که پتانسیل تولید را اندازه گیری می کند [۳۴]. شاخص بهره‌وری نفت براساس اختلاف فشار در طول چاه مشبک محاسبه گردیده است. شکل ۷ اثر تغییرات قطر بر شاخص بهره‌وری در مختصات سه بعدی را نشان می دهد. بر طبق شکل ۷ شاخص بهره‌وری با افزایش قطر نواحی مشبک بیش از ۱۰٪ افزایش یافته است زیرا افزایش قطر موجب افزایش زیادی در نرخ جریان و کاهش ناچیزی در اختلاف فشار می گردد که هردوی این تغییرات منجر به تغییرات در شاخص بهره‌وری گردیده است.

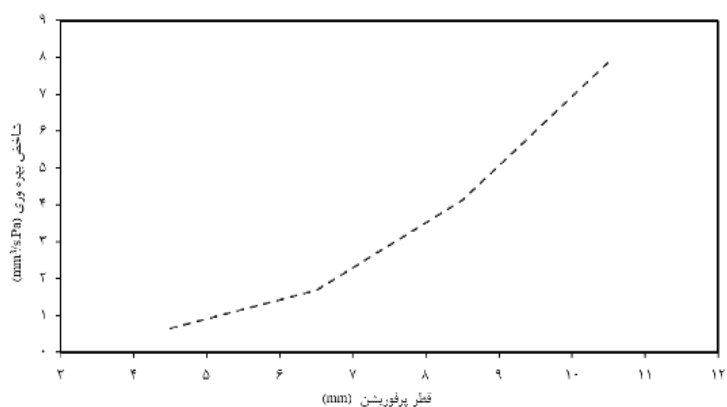
اثر رسوب کربن بر کاهش وزن مولکولی با کاتالیست

تأثیر رسوب کربن بر فعالیت کاتالیست در شکل ۸ نشان داده شده است. در این شکل، ترکیبات با و بدون فعال سازی کاتالیست نمایش داده می شوند.

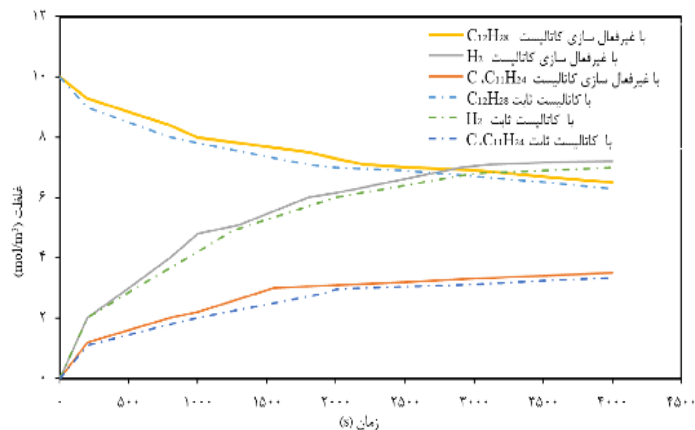
همان طور که در جدول ۵ نشان داده شده است، گاز هیدروژن بیشترین ترکیب درصد را در دو نقطه A (ورودی هیدروکربن های نفتی به بخش مشبک شده) و نقطه B (خروجی هیدروکربن های نفتی به سمت چاه) دارد. در نقطه A، ترکیبات سنگین تری مانند $C_{12}H_{25}$ و $C_{12}H_{28}$ تحت تأثیر فرآیند شکست کاتالیستی تجزیه شده و واکنش های جانبی مانند شکستن پیوندهای C-H و تولید گاز هیدروژن به میزان بیشتری رخ می دهد. در مقابل، در نقطه B که به چاه نفت نزدیک تر است، مقدار هیدروکربن های سبک افزایش می یابد که نشان دهنده تکمیل فرآیند شکست ترکیبات سنگین تر در طول مسیر جریان است. با توجه به این مقدار بالای گاز هیدروژن، می توان تولید گاز سنتز در فرآیند را از طریق مدل سازی استخراج کرد. گاز سنتز حاوی هیدروژن و مونواکسید کربن است که برای تولید سوخت و مواد شیمیایی در فشارهای بالا استفاده می شود. تولید هیدروژن برای پالایشگاه ها، مانند فرآوری هیدروژن و متانول، بسیار ارزشمند است [۳۳].

جدول ۵ ترکیب % هیدروکربن‌های سنگین در بخش مشبک شده

ترکیبات	ترکیب % در نقطه A	ترکیب % در نقطه B
CHC_2H_5	۰/۰۴۱۴۱	۰/۱۸۳۸
$\text{C}_{12}\text{H}_{24}$	۰/۰۴۰۴۱	۰/۰۳۵۱
$\text{C}_{12}\text{H}_{25}$	۰/۰۳۴۳۱	۰/۰۲۸۱
$\text{C}_{12}\text{H}_{28}$	۰/۰۵۲۵۲	۰/۰۴۲۲
C_7H_{16}	۰/۰۳۴۳۱	۰/۰۲۷۱
C_7H_{14}	۰/۰۶۱۶۲	۰/۰۵۰۳
NC_7H_{16}	۰/۰۷۳۸۲	۰/۰۶۲۳
C_5H_{10}	۰/۰۳۸۴۱	۰/۰۳۰۱
H_2	۰/۴۶۵۳۰	۰/۴۰۲۶
NC_7H_{14}	۰/۰۹۹۰۳	۰/۰۸۸۵
CHCH_2	۰/۰۱۱۲۵	۰/۰۰۹۸
CH_3CH	۰/۰۴۷۶۱	۰/۰۴۰۱

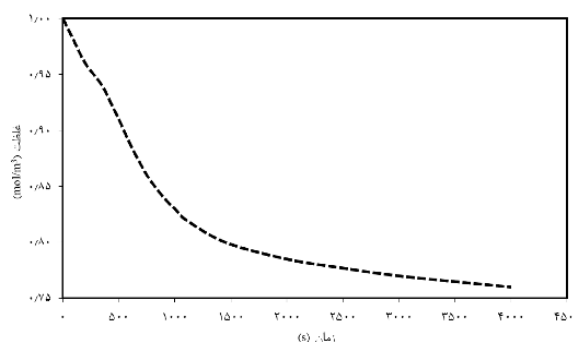


شکل ۷ شاخص بهره‌وری (mm³/s.Pa) در مقابل تغییرات قطر (mm) نواحی مشبک شده



شکل ۸ نمودار تغییرات غلظت (mol/m³) با زمان (s) در کاتالیست ثابت و با غیرفعال‌سازی کاتالیست

هیدروکربن‌ها به سطح کاتالیست برای انجام واکنش‌های شکست می‌گردد، به همین دلیل کک فعالیت کاتالیست را کاهش می‌دهد. همچنین **شکل ۹** زمانی که کاتالیست در طی فرآیند در چاه نفت خام مشبک شده فعال است را نشان می‌دهد. در طی شکستن هیدروکربن‌های سنگین، کاتالیست در ابتدای فرآیند به خوبی عمل کرده و در زمان کمتری فرآیند شکست انجام می‌شود ولی با گذشت زمان روند فعالیت کاتالیست کندتر می‌شود که موجب رسوب کک می‌گردد [۲۶].



شکل ۹ نحوه فعالیت کاتالیست در فرآیند کاهش وزن مولکولی هیدروکربن‌های سنگین نفت خام

پرفوریشن‌ها نشان داد شاخص بهره‌وری چاه تا ۱۰ برابر افزایش می‌یابد که نشان‌دهنده تأثیر طراحی مهندسی بر عملکرد چاه‌های نفتی است. علاوه بر این، در قسمت مشبک چاه نفت درصد ترکیبات سیال مورد بررسی قرار گرفت که مشخص شد بیشترین درصد مربوط به گاز هیدروژن است که منجر به تشکیل گاز سنتز در فرآیند گردید. یکی از چالش‌های مهم در این فرآیند، تشکیل رسوب کربن بر سطح کاتالیست بود که با گذشت زمان باعث کاهش فعالیت آن گردید. در مراحل اولیه، کاتالیست با بیشترین بازدهی عمل می‌کند، اما به مرور زمان با افزایش رسوب کک، از عملکرد آن کاسته می‌شود. بنابراین، استراتژی‌هایی مانند احیای دوره‌ای کاتالیست می‌تواند برای حفظ کارایی در بلندمدت ضروری باشد. در نهایت، مقایسه داده‌های مدل‌سازی با نتایج آزمایشگاهی نشان داد که

از تغییر غلظت با زمان به‌خوبی مشخص شده است که، هنگامی که کاتالیست در واکنش حضور دارد میزان نرخ واکنش ثابت نشان داده شده است. در حضور کاتالیست فعال، کاهش وزن مولکولی با سرعت بیشتری انجام می‌شود و در نتیجه غلظت کاهش می‌یابد. اما با غیرفعال شدن کاتالیست، کاهش غلظت ترکیبات سنگین کمتر شده و واکنش کندتر پیش می‌رود، که این امر تأثیر منفی بر درصد تبدیل هیدروکربن‌های سنگین دارد. رسوب کربن، سطح کاتالیست را می‌پوشاند و مانع رسیدن

نتیجه‌گیری

این پژوهش با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی تأثیر کاتالیست‌ها را بر فرآیند شکست هیدروکربن‌های سنگین در بخش مشبک چاه نفت بررسی کرده و نتایج قابل‌توجهی ارائه داده است. استفاده از کاتالیست، شکست هیدروکربن‌های سنگین را تسریع کرده و با افزایش دما، نرخ تبدیل از ۷٪ به ۴۵٪ افزایش می‌یابد که بیانگر این است درصد تبدیل بیش از ۶ برابر مقدار اولیه گردیده است. در میان انواع کاتالیست‌های مورد بررسی، آلومینا-سیلیکا به دلیل انرژی فعال‌سازی پایین، بیشترین راندمان را نشان داد. همچنین، حضور بخار آب به عنوان عاملی مؤثر در افزایش نرخ تبدیل بررسی شد و مشخص گردید که نسبت‌های بالاتر بخار به نفت 1 ml.ml^{-1} ، ۰/۵ و ۰/۲ موجب افزایش ۶٪ در میزان تبدیل می‌شود. افزایش قطر

s : تنش سطحی (N/m)
 SiO_2 : سیلیسیوم دی اکسید (کاتالیزور)
 T : دما ($^{\circ}C$)
 t : زمان (s)
 τ : تنش برشی (Pa)
 ΔP : اختلاف فشار در طول چاه (Pa)
 u : سرعت سیال (m/s)
 ρ : چگالی سیال (kg/m^3)
 $ZSM-5$: زئولیت (کاتالیزور)
 A : مساحت (m^2)
 Al_2O_3 : اکسید آلومینیوم (کاتالیزور)
 API : موسسه نفت آمریکا
 a : فعالیت کاتالیست
 C : غلظت (mol/m^3)
 CH_{14} : فرمول شیمیایی هپتان
 $C_{12}H_{28}$: فرمول شیمیایی دودکان
 C_{Ag} : غلظت اولیه (mol/m^3)
 C_{AS} : غلظت میانی (mol/m^3)
 $CAPRI$: فرآیند ارتقای کاتالیزوری در محل
 C_c : غلظت رسوب کک (mol/m^3)
 $CHCH_2$: فرمول شیمیایی اتن
 CFD : دینامیک سیالات محاسباتی
 D, d : قطر ستون چاه (mm)
 g : شتاب گرانش
 H : ارتفاع (m)
 H_2 : گاز هیدروژن
 K_m : ضریب انتقال جرم (m/s)

تطابق قابل توجهی بین نتایج عددی و تجربی وجود دارد. به‌طور کلی، بررسی اثرات دما، نوع کاتالیست، وجود بخار آب و تنظیم مناسب پارمترهای طراحی نشان داده که این عوامل تأثیر قابل توجهی بر میزان کاهش وزن مولکولی هیدروکربن‌های سنگین دارند و می‌تواند به بهینه‌سازی فرآیندهای پالایشی نفت کمک کند و منجر به بهبود بهره‌وری چاه‌های نفتی و کاهش چالش‌های مربوط به هیدروکربن‌های سنگین گردد. این یافته‌ها همچنین مبین اهمیت استفاده از مدل‌سازی CFD به‌عنوان ابزاری کارآمد برای طراحی و بهینه‌سازی فرآیندهای استخراج نفت و افزایش عملکرد سیستم‌های پالایشی است. در نتیجه، پژوهش‌های آینده می‌توانند به مطالعه جزئیات بیشتر در مورد رفتار کاتالیست‌ها، به‌ویژه در شرایط عملیاتی متغیر و همچنین بررسی روش‌های نوین برای کاهش رسوب کربن و حفظ کارایی کاتالیست‌ها متمرکز شوند.

علائم و نشانه‌ها

K_a : ثابت واکنش
 L : طول پرفوریشن (mm)
 N : تعداد پرفوریشن‌ها
 N_A : جریان مولی در انتقال جرم ($mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$)
 P_f : شاخص بهره‌وری
 Q : دبی جریان (m^3/s)
 R_A : نرخ واکنش ($mol/m^3 \cdot s$)
 R_g : ثابت جهانی گازها ($J/mol \cdot K$)
 r : شعاع چاه (mm)

مراجع

- [1]. Gomaa S., Salem K.G., & Elhoshoudy A., (2024), Gomaa, S., Salem, K. G., & El-hoshoudy, A. N. (2024). Enhanced heavy and extra heavy oil recovery: Current status and new trends. *Petroleum*, 10(3), 399-410. doi.org/10.1016/j.petlm.2023.10.001.
- [2]. Pajouhan S., Farahbakhsh A., and Dastgheib S. M. M., (2019) Formation stable heavy hydrocarbon/water emulsion by bioemulsifiers produced by bacillus licheniformis, *Journal of Petroleum Research*, 29(1-98), 146-154,. doi: 10.22078/pr.2018.3013.2399.
- [3]. Yatimi Y., Mendil J., Marafi M., Alalou, A., & Al-Dahhan, M.H., (2024), Advancement in heavy oil upgrading and sustainable exploration emerging techNologies, *Arabian Journal of Chemistry*, 105610,. doi.org/10.1016/j.arabjc.2024.105610.
- [4]. Li Y., Wang Z., Hu Z., Xu B., Li Y., Pu W., & Zhao, J, (2021), A review of in situ upgrading techNology for

- [5]. Zhao F., Liu Y., Lu N., Xu T., Zhu G., & Wang K., (2021), A review on upgrading and viscosity reduction of heavy oil and bitumen by underground catalytic cracking, *Energy Reports*, 7(4249-4272), doi.org/10.1016/j.egyr.2021.06.094.
- [6]. Wu Z., Chen H., Cai X., Gou Q., Jiang L., Chen K., Chen Z., & Jiang S., (2023), Current status and future trends of in situ catalytic upgrading of extra heavy oil, *Energies*, 16(12), 4610, doi.org/10.3390/en16124610.
- [7]. Li H., Gao H., Zhao X., Xia Z., Yu B., & Sun, D., (2022), Experimental study on viscosity reduction of heavy oil with water content by synergistic effect of microwave and NaNo-catalyst, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 208, 109271, doi.org/10.1016/j.petrol.2021.109271.
- [۸]. نجف‌پور م.، فاتحی‌فر، ا.، خوشبوی، ر. و طباطبائی‌نژاد ع. ر.، (۱۳۹۷)، ارتقای کیفیت ترکیبات سنگین نفتی با استفاده از مایعات یونی اصلاح شده توسط نمک‌های Fe^{2+} و Al^{3+} ، پژوهش نفت، (۳۰)، ۴-۹۹، ۴۷-۵۵. doi.org/10.22078/pr.2020.3691.2695
- [۹]. بوتالاری، ه.، هاشم‌آبادی، س. ح. و مرزپور، ف. (۱۳۸۹)، پیش‌بینی رفتار رئولوژیکی چند هیدروکربن خطی به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی. پژوهش نفت، ۲۰ (۶۴)، ۱۱-۳. <https://sid.ir/paper/114718/fa>.
- [10]. Salim M.K., Sultan H.S., & AL Shara A.K., (2017), Effect of shape and parameters of perforation in a vertical wellbore with two perforations (without Porous Media) on pressure drop, *Fluid Mechanics*, Open Access, 04, 2017, doi. org/10.4172/2476-2296.1000162.
- [11]. Hua L., Yan L., Xiaodong P., Xindong, L., & Laichao W. (2016), Pressure drop calculation models of wellbore fluid in perforated completion horizontal wells, *IJHT, International Journal of Heat and TechNology*, 34, (1), 65-72, doi.org/10.18280/ijht.340110.
- [12]. Wei K., Ma B., Xu J., Liu Q., & Wang, C., (2024), Study of perforated well productivity by a multi-scale coupling flow model with Darcy-brinkman-Navier/Stokes, *Geoenergy Science and Engineering*, 243, 213377, doi.org/10.1016/j.geoen.2024.213377.
- [13]. Locke, S., (1981), An advanced method for predicting the productivity ratio of a perforated well, *Journal of Petroleum Technology*, 33(12), 2481-2488, doi.org/10.2118/8804-PA.
- [۱۴]. حیاتی جعفریگی، س.، مشرف دهکردی، م. و ضیائی‌راد، م. (۱۳۹۷)، تخمین میزان شاخص چاه برداشت نفت در مخازن هیدروکربنی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی، مهندسی مکانیک مدرس، ۱۸، (۱)، ۱۷۷-۱۸۷.
- [15]. Hart A., Wood J., & Greaves M., (2017), Laboratory investigation of CAPRI catalytic THAI-add-on process for heavy oil production and in situ upgrading, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 128, 18-26, doi. org/10.1016/j.jaap.2017.11.004.
- [16]. Askarian M., Vatani A., Edalat M., (2017), Heavy oil upgrading in a hydrodynamic cavitation setup: the effect of hydrogen donor and metal nanoparticles, *Journal of Petroleum Research*, 27(4-96), 4-17. doi: 10.22078/pr.2017.2076.1981.
- [17]. Pashikanti K., & Liu Y., (2011), Predictive modeling of large-scale integrated refinery reaction and fractionation systems from plant data. Part 2: Fluid catalytic cracking (FCC) process, *Energy & fuels*, 25(11), 5298-5319, doi.org/10.1021/ef200750x.
- [18]. Ortiz-MoreNo H., Ramírez J., Cuevas R., Marroquín G., & Ancheyta J., (2012), Heavy oil upgrading at moderate pressure using dispersed catalysts: Effects of temperature, pressure and catalytic precursor, *Fuel*, 100, 186-192, doi.org/10.1016/j.fuel.2012.08.005.
- [19]. Arastoopour H., Gidaspow D., & Lyczkowski R.W., (2022), *Transport phenomena in multiphase systems*. Springer.
- [20]. Tharanivasan A.K., Yang C., & Gu, Y., (2006), Measurements of molecular diffusion coefficients of carbon dioxide, methane, and propane in heavy oil under reservoir conditions, *Energy & Fuels*, 20(6), 2509-2517, doi. org/10.1021/ef060080d.
- [21]. Wang x., Li j., (2020), Numerical simulation of mass transfer in porous Media for Heavy oil upgrading *Journal of Petroleum Science and Engineering*.
- [22]. Corma A., Mengual J., & Miguel P.J., (2012), Steam catalytic cracking of naphtha over ZSM-5 zeolite for production of propene and ethene: Micro and macroscopic implications of the presence of steam, *Applied Catalysis A: General*, 417, 220-235, doi.org/10.1016/j.apcata.2011.12.044.
- [23]. Dehkordi, J. A., Jafari, A., Sabet, S. A., & Karami, F. (2018). Kinetic studies on extra heavy crude oil upgrading using nanocatalysts by applying CFD techniques. *Chinese journal of chemical engineering*, 26(2), 343-355. doi.org/10.1016/j.cjche.2017.07.001.

- [24]. Konno, H., Ohnaka, R., Nishimura, J. I., Tago, T., Nakasaka, Y., & Masuda, T. (2014). Kinetics of the catalytic cracking of naphtha over ZSM-5 zeolite: effect of reduced crystal size on the reaction of naphthenes. *Catalysis science & technology*, 4(12), 4265-4273. doi.org/10.1039/C4CY00733F.
- [25]. Rochmadi S., MulyoNo P., Aziz M., & Budiman A., (2018), Kinetic study of catalytic cracking of bio-oil over silica-alumina catalyst. doi.org/10.15376/biores.13.1.1917-1929.
- [26]. Zavarukhin, S. G., & Kuvshinov, G. G. (2004). The kinetic model of formation of nanofibrous carbon from $\text{CH}_4\text{-H}_2$ mixture over a high-loaded nickel catalyst with consideration for the catalyst deactivation. *Applied Catalysis A: General*, 272(1-2), 219-227. doi.org/10.1016/j.apcata.2004.05.044.
- [27]. Mohammed, H. S., Khazal, E. A., & Sultan, H. S. (2020). Studying the effect of perforation parameters on vertical well performance. *Basrah Journal for Engineering Sciences*, 20(2), 48-59.
- [28]. Mohammed, H. S., Sultan, H. S., & Khazal, E. A. (2022). Simulation of a perforated vertical wellbore with near wall porous media effect. *Journal of Petroleum Research and Studies*, 12(1), 85-104. doi.org/10.52716/jprs.v12i1.592.
- [29]. AlHumaidan, F., Lababidi, H. M., & Al-Rabiah, H. (2013). Thermal cracking kinetics of Kuwaiti vacuum residues in Eureka process. *Fuel*, 103, 923-931. dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2012.08.005.
- [30]. Marchetti, J. (2021). *Reaction engineering, catalyst preparation, and kinetics*. CRC Press. doi.org/10.1201/9780429466847.
- [31]. Hart, A., Leeke, G., Greaves, M., & Wood, J. (2014). Downhole heavy crude oil upgrading using CA-PRI: Effect of steam upon upgrading and coke formation. *Energy & fuels*, 28(3), 1811-1819. doi.org/10.1021/ef402300k.
- [32]. Bitarafan, M., BAHRAMI, B. M., & MOTAMED, H. M. (2012). Investigating the Possibility of Coke Formation in Midrex Reformer. sid.ir/paper/114970/en.
- [33]. Padasa E., & Saenz G., (2019), Syngas Production, Properties, and Its Importance, Sustainable Alternative Syngas Fuel, i, 9. http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.89379.
- [34]. Nwonodi, R. I. (2024). A novel model for predicting the productivity index of horizontal/vertical wells based on Darcy's law, drainage radius, and flow convergence. *Heliyon*, 10(3). doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e25073.



Analysis and Simulation of the Molecular Weight Reduction Process of Heavy Hydrocarbons Under Different Operating Conditions of a Perforated Oil Well

Sepideh Shamshiri¹, Behruz Mirzayi^{1*} and Hadi Seyyedbagheri²

1 Department of Chemical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran

2 Downstream Campus, Research Institute for the Development of Oil Refining and Processing Technologies, Research

Institute of Petroleum Industry (RIPI), Tehran, Iran

mirzayib@uma.ac.ir

DOI: 10.22078/pr.2025.5571.3475

Received: November 18, 2024

Accepted: March 11, 2025

Introduction

Heavy crude oil is a type of crude oil with high viscosity, making its flow difficult [1,2]. This oil has an API gravity between 10 and 20 and a viscosity greater than 100 mPa·s [2]. The heaviness of this oil is attributed to the low ratio of hydrogen to carbon in the molecules, as well as other minerals that help increase the density of the oil [3]. The basis of the heavy oil upgrading process is to break the atomic bonds between heavy oil molecules and convert these macromolecules into small molecules [4]. Moreover, the mechanisms of viscosity reduction of heavy oil include irreversible chemical viscosity reduction after catalytic reaction and physical viscosity reduction in dilution and dissolution between upgraded crude oil and heavy oil [5]. Furthermore, to increase the utilization of heavy oil, there is an urgent need to develop effective methods to reduce viscosity and improve its transportation. In the process of modification and viscosity reduction, macromolecules of heavy oil can be decomposed by catalysts [6].

This research uses computational fluid dynamics to model heavy hydrocarbon molecular weight reduction in a latticed oil well, examining factors such as sediment formation, the effect of water vapor, temperature, and catalyst type. The modeling results were compared with reference data, providing insights for designing more efficient oil production processes and mitigating challenges with heavy hydrocarbon handling.

Materials and Methods

A finite element numerical method was used to solve the differential equations related to flow and chemical reactions. Furthermore, this method was used to simultaneously solve the governing equations including continuity equations, Navier-Stokes equations, mass transfer equations, and chemical reactions. In this study, a Newtonian, incompressible, laminar fluid was considered [7]. In addition, the fluid properties in this simulation were selected as density 980 kg/m³ and 0.49 dynamic viscosity.

The geometry studied is a vertical oil well with perforations in the end section. Moreover, the dimensions and geometric features have been selected according to experimental data reported in reliable sources [8]. Also, the wellbore radius, the length and radius of the perforations, and other geometric features have been accurately applied to the model. Furthermore, the meshing of this geometry is done in 3D coordinates, and very large elements have been used to reduce the computational time. The mesh independence study showed that the use of 3463 elements leads to stable and grid-independent results.

Governing Equations

To model fluid flow assuming laminar and incompressible flow, in addition to the continuity equation that ensures mass conservation, the Navier-Stokes equation is also considered to describe the fluid

motion. These equations are expressed as Equations 1 and 2 for three-dimensional, steady, and incompressible flows.

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g + S \quad (2)$$

Here, the subscript and denote the direction in the coordinate system. In Equations 1 and 2, P is the pressure, velocity is the viscosity, ρ is density and τ is shear stress, S is the surface force, and g is the acceleration of gravity.

Results and Discussion

Checking Conversion Rates in the Process

CFD simulations of the reaction in a batch reactor were performed under the experimental conditions of Hart et al. [9] at temperatures of 350, 400, and 425 °C and a pressure of 20 bar. The conversion was calculated based on the ratio of the heaviest hydrocarbon ($C_{12}H_{28}$) to the lightest hydrocarbon (CH_4). The results indicated good agreement between the numerical model and the experimental data, with the highest conversion achieved at 425 °C, confirming that the conversion rate increases with temperature. Fig. 1 illustrates the increasing trend of conversion percentage at different temperatures.

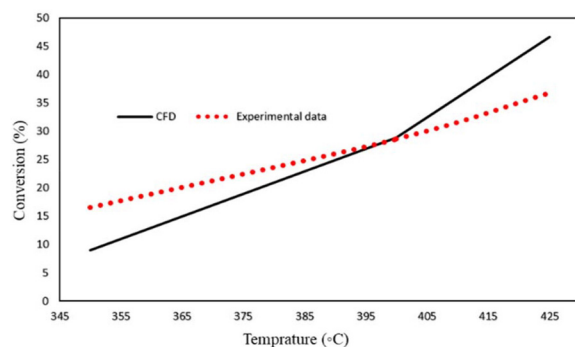


Fig. 1 Temperature changes (°C) versus percent conversion (%).

Furthermore, Figs. 2a and 2b depict the variations in hydrocarbon concentrations at 425 °C in the perforated well. These results indicate that the concentration of primary hydrocarbons decreases in the perforated section, and hydrocarbons are effectively cracked in the perforated regions.

Effect of Catalyst on Conversion Rate

In the catalytic cracking process within the perforated section of the oil well, heavy hydrocarbons are adsorbed onto the catalyst surface and converted into lighter compounds [10]. The catalyst, without being consumed in the reaction, increases the reaction rate

and thus enhances the conversion. Concentration profile analysis in Fig. 3 showed that in the presence of the catalyst, the concentration of heavy compounds significantly decreases along the perforated walls. However, after catalyst deactivation due to coke deposition, the concentration of these compounds increases again, indicating a reduction in the efficiency of the cracking process.

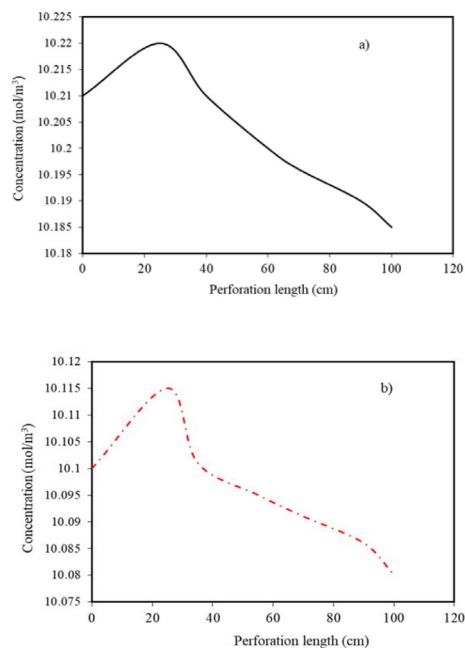


Fig. 2 Concentration changes (mol/m³) of the heaviest hydrocarbon ($C_{12}H_{28}$) and the lightest hydrocarbon (CH_4) relative to the length of the perforations (cm) a) Heaviest hydrocarbon b) Lightest hydrocarbon.

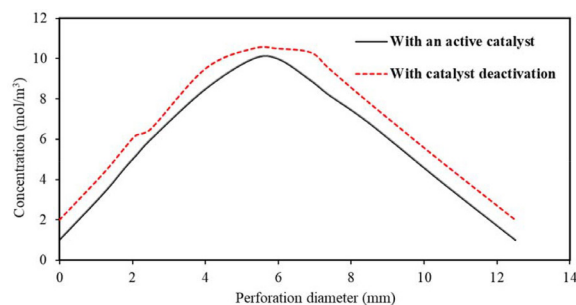


Fig. 3 Concentration profile (mol/m³) of $C_{7}H_{14}$ after catalyst application and after catalyst deactivation in the meshed section of the well.

The Effect of Carbon Deposition on Molecular Weight Reduction with a Catalyst

The conversion rate was investigated using three catalysts with different surface areas and activation energies, within a temperature range of 300–425 °C and activation energies of 20–70 kJ/mol. Temperature affects all chemical reactions, with higher activation energy reactions being more sensitive to temperature changes. Catalysts reduce activation energy, lowering the temperature required for hydrocarbon cracking and

increasing valuable product yield. Among the tested catalysts, $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ showed the highest conversion due to its lowest activation energy, while Nano-ZSM-5 and SiO_2 exhibited lower conversion despite similar activation energies. Surface area also influenced performance, with SiO_2 outperforming Nano-ZSM-5. Overall, conversion increased with temperature for all catalysts, but activation energy had a stronger effect than surface area [11].

The Effect of Steam Injection on the Process and the Fraction of Heavy Hydrocarbons

Steam was injected at three steam-to-oil ratios (0.02, 0.05, and 0.1) to study its effect on heavy hydrocarbon cracking in the perforated section of the well at 425°C. Results showed that increasing the steam ratio improved the conversion of heavy hydrocarbons. CFD simulations closely matched experimental data. Steam acted as both a diluent and a reactant, reducing hydrocarbon concentration and minimizing unwanted byproducts while participating in side reactions to produce hydrogen. Heavier hydrocarbons ($\text{C}_{12}\text{H}_{28}$, $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$) were decomposed, while lighter hydrocarbons increased along the flow path, indicating completion of cracking. The high hydrogen content suggests potential syngas production, which is valuable for fuel and chemical synthesis, including hydrogen and methanol production.

Conclusions

This study employed computational fluid dynamics (CFD) to investigate the effect of catalysts on heavy hydrocarbon cracking in the perforated section of an oil well, yielding significant results. The use of catalysts accelerated the cracking process, and increasing the temperature raised the conversion rate from 7% to 45%, indicating more than a sixfold increase. Moreover, among the tested catalysts, alumina-silica showed the highest efficiency due to its low activation energy. Also, the presence of steam was examined, and higher steam-to-oil ratios (0.02, 0.05, and 0.1 $\text{ml}\cdot\text{ml}^{-1}$) increased conversion by approximately 6%. Enlarging the perforation diameter enhanced well productivity up to tenfold, highlighting the impact of engineering design on well performance. Moreover, analysis of fluid composition revealed that hydrogen gas had the highest fraction, contributing to syngas formation. A major challenge was carbon deposition on the catalyst surface, which gradually reduced its activity over time. Initially, the catalyst operated at maximum performance, suggesting that periodic regeneration is necessary for long-term operation. Overall, CFD results closely matched experimental data, demonstrating that temperature, catalyst type, steam presence, and proper design parameters significantly influence the reduction of heavy hydrocarbon molecular weight, improving refinery processes, well productivity, and

mitigating heavy hydrocarbon challenges. Ultimately, these findings emphasize the value of CFD modeling as an effective tool for designing and optimizing oil extraction and refining systems, while future research can focus on detailed catalyst behavior under variable conditions and novel strategies to minimize carbon deposition and maintain catalyst efficiency.

References

1. Gomaa, S., Salem, K. G., & El-hoshoudy, A. N. (2024). Enhanced heavy and extra heavy oil recovery: Current status and new trends. *Petroleum*, 10(3), 399-410. doi.org/10.1016/j.petlm.2023.10.001.
2. Pajouhan, S., Farahbakhsh, A., & Dastgheib, S. M. M. (2019). Formation Stable Heavy Hydrocarbon/Water Emulsion by Bioemulsifiers Produced by *Bacillus Licheniformis*. *Journal of Petroleum Research*, 29(1-98), 146-154.
3. Yatimi, Y., Mendil, J., Marafi, M., Alalou, A., & Al-Dahhan, M. H. (2024). Advancement in heavy oil upgrading and sustainable exploration emerging technologies. *Arabian Journal of Chemistry*, 17(3), 105610. doi.org/10.1016/j.arabjc.2024.105610.
4. Zhao, F., Liu, Y., Lu, N., Xu, T., Zhu, G., & Wang, K. (2021). A review on upgrading and viscosity reduction of heavy oil and bitumen by underground catalytic cracking. *Energy Reports*, 7, 4249-4272. doi.org/10.1016/j.egy.2021.06.094.
5. Wu, Z., Chen, H., Cai, X., Gou, Q., Jiang, L., Chen, K., ... & Jiang, S. (2023). Current status and future trends of in situ catalytic upgrading of extra heavy oil. *Energies*, 16(12), 4610. doi.org/10.3390/en16124610.
6. Li, H., Gao, H., Zhao, X., Xia, Z., Yu, B., & Sun, D. (2022). Experimental study on viscosity reduction of heavy oil with water content by synergistic effect of microwave and nano-catalyst. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 208, 109271. doi.org/10.1016/j.petrol.2021.109271.
7. Wei, K., Ma, B., Xu, J., Liu, Q., & Wang, C. (2024). Study of perforated well productivity by a multi-scale coupling flow model with Darcy-Brinkman-Navier-Stokes. *Geoenergy Science and Engineering*, 243, 213377. doi.org/10.1016/j.geoen.2024.213377.
8. Locke, S. (1981). An advanced method for predicting the productivity ratio of a perforated well. *Journal of Petroleum Technology*, 33(12), 2481-2488. doi.org/10.2118/8804-PA.
9. Abarasi H., Gary L., Malcolm G., & Joseph W., (2014), Downhole heavy crude oil upgrading using CAPRI: Effect of steam upon upgrading and coke formation, *Energy & fuels*, 28, (3): 1811-1819.
10. Mohammed, H. S., Sultan, H. S., & Khazal, E.

A. (2022). Simulation of a perforated vertical wellbore with near wall porous media effect. *Journal of Petroleum Research and Studies*, 12(1), 85-104. doi.org/10.52716/jprs.v12i1.592 .

11. Marchetti, J. (2021). *Reaction engineering, catalyst preparation, and kinetics*. CRC Press. doi.org/10.1201/9780429466847 .