

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

Arthur Besen Soprano

**ESTUDO E IMPLEMENTAÇÃO DE UM MODELO COMPOSICIONAL
PARA A SIMULAÇÃO DE RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO**

Florianópolis

2013

Arthur Besen Soprano

**ESTUDO E IMPLEMENTAÇÃO DE UM MODELO COMPOSICIONAL
PARA A SIMULAÇÃO DE RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. António Fábio Carvalho da Silva

Florianópolis

2013

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Soprano, Arthur

Estudo e implementação de um modelo composicional para a
simulação de reservatórios de petróleo / Arthur Soprano ;
orientador, Antônio Fábio Carvalho da Silva - Florianópolis,
SC, 2013.

144 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica.

Inclui referências

1. Engenharia Mecânica. 2. Simulação de reservatórios de
petróleo. 3. Modelo composicional. 4. Método de newton. 5.
Equilíbrio de fases. I. Carvalho da Silva, Antônio Fábio.
II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

Arthur Besen Soprano

**ESTUDO E IMPLEMENTAÇÃO DE UM MODELO COMPOSICIONAL
PARA A SIMULAÇÃO DE RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO**

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de “Mestre em Engenharia Mecânica”, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis, 16 de Agosto 2013.

Prof. Armando Albertazzi Gonçalves Júnior, Dr. Eng.
Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA

Prof. António Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.
Orientador

Prof.^a Selene Maria de Arruda Guelli Ulson de Souza, Dr.^a Eng.

Prof. Celso Peres Fernandes, Dr. Eng.

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph.D.

Agradecimentos

Agradeço ao professor António Fábio Carvalho da Silva, orientador, pela confiança na realização deste trabalho e que, além da amizade e de conselhos preciosos, ajudou imensamente na elaboração e orientação desta dissertação desde seu início.

Também gostaria de agradecer muito ao professor Clovis R. Maliska, pelos conselhos, amizade e por me permitir fazer parte do laboratório SINMEC, um ambiente de pesquisa com uma equipe de altíssima qualidade e características únicas, que são difíceis de ser encontradas em qualquer lugar.

Gostaria de agradecer muito à minha companheira, Nayara Santos Pinto Pauperio, pelo apoio e parceria em todos os momentos desta trajetória. Os momentos que passamos juntos serviram como uma forma de recuperar as energias e forças para dar continuidade ao trabalho.

Eu estou demasiadamente grato à minha família, meus pais, Eliseo Soprano e Arlete Terezinha Besen Soprano, pelo apoio, educação e carinho que sempre me deram ao longo de minha vida, resultando na pessoa que sou hoje. Ao meu irmão, Pedro Besen Soprano, pela companhia e amizade durante todos estes anos.

Minha imensa gratidão é dada aos colegas de trabalho do laboratório SINMEC, onde passei a maioria do tempo durante este percurso, com momentos de descontração e amizade de todos, sempre dispostos a ajudar e que são os responsáveis pelo ótimo ambiente de pesquisa e desenvolvimento que o SINMEC possui.

À empresa Engineering Simulation and Scientific Software - ESSS, por fornecer licenças para a utilização do aplicativo Kraken, que permitiu o pós-processamento e visualização de resultados.

Finalmente, gostaria de agradecer à Petrobras, CNPq e ANP pela ajuda financeira durante boa parte de minha formação e ao longo do curso de mestrado.

Resumo

Este trabalho apresenta o estudo e a implementação de um modelo composicional para a simulação do escoamento isotérmico em reservatórios de petróleo com malhas não-estruturadas e utilizando o método dos volumes finitos baseado em elementos (EbFVM). O modelo utilizado consiste em uma formulação totalmente implícita com a solução simultânea das equações de conservação e das equações de equilíbrio químico pelo método de *Newton-Raphson*. O modelo considera reservatórios com propriedades heterogêneas e anisotrópicas, efeitos da pressão capilar e gravitacionais, entre outros fatores físicos relevantes. A formulação assume um número arbitrário de componentes, distribuídos nas fases óleo e gás, além do componente água presente apenas na fase água. Trata-se portanto de um modelo trifásico, mas com solução do equilíbrio químico apenas nas fases óleo e gás. No modelo, são feitos cálculos de *flash* e teste de estabilidade baseado na minimização da energia livre de *Gibbs* utilizando métodos de solução mais avançados e robustos, combinando o método de *Newton-Raphson* com o procedimento de substituições sucessivas. Para validação do modelo, os resultados são comparados com os de simuladores composicional e *black oil* comerciais apresentando boa concordância. A implementação do modelo e de todos os módulos numéricos utilizados no trabalho foi feita através de uma programação avançada em C^{++} , permitindo a reutilização do código para solução de problemas termodinâmicos multicomponentes, que exigem a utilização de uma equação de estado cúbica. Para exemplificar esta característica do código, um procedimento para calcular propriedades do modelo *black oil* a partir de uma análise composicional também é apresentada.

Palavras-chave: modelo composicional, simulação de reservatórios, equilíbrio de fases, malhas não-estruturadas, método de *Newton-Raphson*.

Abstract

This dissertation presents the study and implementation of a compositional model for the simulation of the isothermal flow in oil reservoirs with unstructured meshes using the element-based finite volume method (EbFVM). The model consists of a fully implicit formulation with a fully coupled solution of mass balance and chemical equilibrium equations using the *Newton-Raphson* method. The model considers reservoirs with heterogeneous and anisotropic properties, effects of capillary pressure and gravity, among other relevant physical factors. The formulation assumes an arbitrary number of components distributed in the oil and gas phases, and the component water is present only in the water phase. It is therefore a three-phase model but with the chemical equilibrium being solved only in oil and gas phases. In the model, flash calculations and the stability test based on the minimization of Gibbs free energy are solved using a more advanced and robust procedure, combining the *Newton-Raphson* method with a successive substitution procedure. To validate the model, comparisons are made with the results obtained with commercial compositional and black oil simulators and the results showed good agreement. The implementation of the model and all the numerical modules used in this work were done with advanced programming techniques in C⁺⁺, allowing code reuse for solving multicomponent thermodynamic problems, which require the use of a cubic equation of state. To illustrate this feature of the code, a procedure for calculating black oil model properties from a compositional analysis is also presented.

Keywords: compositional model, reservoir simulation, phase equilibria, unstructured meshes, *Newton-Raphson* method.

Lista de Figuras

Figura 1	Comportamento de fases de um componente puro.	34
Figura 2	Diagrama de fases pressão-composição para uma mistura binária.	34
Figura 3	Diagrama de fases pressão-composição para uma mistura binária com $T > T_{c1}$	35
Figura 4	Diagrama pressão-temperatura de uma mistura multicomponentes de composição fixa.	36
Figura 5	Energia de <i>Gibbs</i> da mistura de CO_2 /tolueno a 38, 1 °C e 1379 kPa.	45
Figura 6	Conjunto de equações do problema.	48
Figura 7	Esquema de um separador de 3 estágios.	56
Figura 8	Representação gráfica da energia de <i>Gibbs</i> e da função F com seus pontos estacionários.	64
Figura 9	Construção do volume de controle a partir de uma malha não-estruturada e suas respectivas entidades.	68
Figura 10	Nós à frente e atrás de uma face f do elemento.	71
Figura 11	Estrutura da matriz Jacobiana para uma geometria simples com 2 poços.	74
Figura 12	Diagrama computacional do algoritmo utilizado neste trabalho.	77
Figura 13	Diagrama P-T para o fluido com composição dada pela tabela 7.	83

Figura 14	Comparação dos resultados para a fração molar de cada fase.	85
Figura 15	Comparação dos resultados para o fator de compressibilidade.	86
Figura 16	Geometria e características do reservatório.	88
Figura 17	Diagrama P-T para o fluido com composição dada pela tabela 12, mostrando curvas de fração volumétrica de gás constante.	88
Figura 18	Volumes de controle utilizados para o EbFVM e para o GEM com base na geometria da figura 16.	89
Figura 19	Propriedades médias no reservatório.	90
Figura 20	Propriedades médias no reservatório.	91
Figura 21	Campo de pressão no reservatório para $t = 2500$ dias. ...	92
Figura 22	Campo de saturação de gás e saturação de gás no plano $z = -5\text{m}$ para $t = 2500$ dias.	92
Figura 23	Curva razão gás-óleo.	93
Figura 24	Geometria e características do reservatório.	95
Figura 25	Comparação dos resultados de produção instantânea para o processo de injeção de água.	96
Figura 26	Comparação dos resultados de produção acumulada para o processo de injeção de água.	97
Figura 27	Comparação dos resultados de produção para o processo de injeção de CO_2	99
Figura 28	Malha não-estruturada utilizada no problema.	100
Figura 29	Campo de saturação de gás em quatro instantes de tempo.	101
Figura 30	Campo de fração molar de CO_2 na fase óleo (x_{CO_2o}) em quatro instantes de tempo.	102
Figura 31	Campo de fração molar de CO_2 na fase gás (x_{CO_2g}) em quatro instantes de tempo.	103
Figura 32	Campo de fração molar global de CO_2 (z_{CO_2}) em quatro instantes de tempo.	104

Figura 33	Pressão média no reservatório ao longo do tempo.	104
Figura 34	Pressão no calcanhar e pressão do volume de controle do reservatório.	105
Figura 35	Volume total de cada fase nas condições de reservatório.	106
Figura 36	Taxa de produção de gás nos poços produtores.	106
Figura 37	Esquema para determinação das propriedades do modelo <i>black oil</i>	109
Figura 38	Curva razão de solubilidade R_s	112
Figura 39	Fator volume de formação de cada fase.	113
Figura 40	Viscosidades de cada fase.	114
Figura 41	Razão de solubilidade em função da pressão e temperatura.	115
Figura 42	Fator volume de formação de cada fase em função da pressão e temperatura.	116
Figura 43	Viscosidade de cada fase em função da pressão e temperatura.	117
Figura 44	Classes e estruturas principais implementadas neste trabalho.	132
Figura 45	Estrutura dos separadores.	132
Figura 46	Classes relacionadas à equação de estado.	132
Figura 47	Dois agrupamentos diferentes em subconjuntos estruturalmente ortogonais para a matriz \mathbf{J}	139
Figura 48	Estrutura da matriz Jacobiana e seu formato agrupado através do <i>matrix coloring</i>	140

Lista de Tabelas

Tabela 1	Tipos de variáveis para o modelo composicional.	28
Tabela 2	Conjunto de equações e incógnitas do problema.	52
Tabela 3	Condições para determinação de estabilidade.	66
Tabela 4	Tabelas de permeabilidade relativa.	80
Tabela 5	Propriedades dos componentes.	81
Tabela 6	Matriz de interação binária.	82
Tabela 7	Composição molar do fluido.	82
Tabela 8	Comparações entre as frações molares do componente na fase líquido (x_{iL}) para $P = 15000$ kPa.	82
Tabela 9	Comparações entre as frações molares do componente na fase vapor (x_{iV}) para $P = 15000$ kPa.	83
Tabela 10	Comparações entre os coeficientes de equilíbrio (K_i) para $P = 15000$ kPa.	84
Tabela 11	Propriedades dos componentes.	87
Tabela 12	Composição molar global do fluido.	87
Tabela 13	Propriedades dos componentes.	94
Tabela 14	Matriz de interação binária.	94
Tabela 15	Dados referentes à malha não-estruturada.	100
Tabela 16	Propriedades dos componentes.	110
Tabela 17	Matriz de interação binária.	111
Tabela 18	Composição molar do fluido.	111

Nomenclatura

Símbolos Romanos

D	matriz de derivadas parciais das funções de forma	
J_t	matriz Jacobiana da transformação de coordenadas	
J	matriz Jacobiana do método de <i>Newton-Raphson</i>	
K	tensor permeabilidade absoluta	[mD]
T	transmissibilidade	[m]
\vec{A}	vetor área da face	[m ²]
\vec{u}_p	velocidade da fase p	[m/s]
B_g	fator volume de formação do gás	
B_o	fator volume de formação do óleo	
c_R	compressibilidade da rocha	[Pa ⁻¹]
c_w	compressibilidade da água	[Pa ⁻¹]
F_p	fração molar da fase p	
f_{ip}	fugacidade do componente i na fase p	[Pa]
g	aceleração da gravidade	[m/s ²]
g^*	energia de gibbs normalizada	
K_i	coeficiente de equilíbrio	
k_{rp}	permeabilidade relativa da fase p	
M_p	massa molar da fase p	[kg/mol]
N	número de nós da malha	
n	número de mols	[mol]
N_c	número de componentes	

N_p	número de fases	
N_s	número de segmentos	
P	pressão	[Pa]
P_b	pressão no ponto de bolha	[Pa]
P_c	pressão crítica	[Pa]
$P_{c_{pq}}$	pressão capilar entre as fases p e q	[Pa]
Q_i	vazão do componente i	[m ³ /s]
q_i	taxa de geração molar do componente i	[mol/(m ³ s)]
q_i	vazão molar do componente i	[mol/s]
R	constante universal dos gases	[J/(molK)]
R_s	razão de solubilidade	
S_p	saturação da fase p	
T	temperatura	[K]
T_c	temperatura crítica	[K]
V	volume	[m ³]
ν	volume molar	[m ³ /mol]
x, y, z	coordenadas cartesianas globais	[m]
x_{ip}	fração molar do componente i na fase p	
Z	fator de compressibilidade	
z_i	fração molar global do componente i	
n_p	número de mols da fase p	[mol]
n_{ip}	número de mols do componente i na fase p	[mol]
WI	<i>well index</i>	[m ³]

Abreviações

EbFVM	Element-based Finite Volume Method
GI	gás ideal
inj	injetor
mix	<i>mixture</i> ou mistura

ref	referência
rel	relativo
res	reservatório
std, STD	<i>standard</i> ou padrão
VC	volume de controle
VPI	volume poroso injetado

Símbolos Gregos

α_p	fração volumétrica da fase p	
Δt	passo de tempo	[s]
γ_p	peso específico da fase p	[N/m ³]
κ_{ij}	componente da matriz interação binária	
λ_p	mobilidade da fase p	[1/(Pa s)]
μ_p	viscosidade da fase p	[Pa s]
μ_{ip}	potencial químico do componente i na fase p	
ω	fator acêntrico	
ϕ	porosidade	
ϕ_i	coeficiente de fugacidade do componente i	
Φ_p	potencial da fase p	[Pa]
ρ_p	densidade da fase p	[kg/m ³]
$\vec{\Phi}_p^e$	vetor do potencial da fase p para o elemento e	
ξ, η, ζ	coordenadas locais do elemento	
ξ_p	densidade molar da fase p	[mol/m ³]

Sobrescritos e Subscritos

e	elemento
f	face
g	gás
L	líquido

<i>o</i>	óleo
<i>R</i>	reservatório
<i>s</i>	segmento
<i>V</i>	vapor
<i>W</i>	poço
<i>w</i>	água

Sumário

1	Introdução	23
1.1	O meio poroso	25
1.2	Equilíbrio de fases	26
1.3	O modelo composicional	27
1.4	O método dos volumes finitos baseado em elementos	29
1.5	Organização do trabalho	29
2	Noções de Termodinâmica de Misturas	31
2.1	Definições preliminares	32
2.2	Diagrama de fases	33
2.2.1	Diagramas de fluidos de reservatório	36
2.3	Equações de estado	37
2.4	Equilíbrio de fases	41
2.4.1	Rotina de flash	42
2.4.2	Cálculo de estabilidade	44
3	Modelo Composicional	47
3.1	Equações governantes	47
3.2	Condições de contorno	53
3.2.1	Separadores com múltiplos estágios	56
4	Formulação Numérica	59
4.1	Rotina de flash	61
4.1.1	Substituições sucessivas	61
4.1.2	Método de Newton	62
4.2	Teste de estabilidade	63
4.2.1	Substituições sucessivas	66
4.2.2	Método de Newton	67
4.3	Discretização das equações de conservação	68

4.4	Método de solução das equações	72
4.5	Inicialização	74
4.6	Controle do passo de tempo	75
4.7	Algoritmo geral	76
5	Resultados	79
5.1	Validação da rotina de flash	81
5.2	Validação com o GEM	87
5.3	Simulação de um processo de injeção de água	94
5.4	Simulação de um processo de injeção de CO_2	98
5.5	Simulação composicional com malha híbrida	100
5.6	Cálculo das propriedades para o modelo black oil	107
5.6.1	Propriedades do modelo <i>black oil</i> em função da pressão e temperatura	111
6	Conclusões	119
6.1	Sugestões para trabalhos futuros	121
	Referências	123
Apêndice A	Visão geral do código	129
A.1	Arquivos de configuração, entrada e saída de dados	129
A.2	Arquivos de definição das entidades do modelo	130
A.3	Arquivos de definição das entidades do equilíbrio de fases	130
A.4	Arquivos com o simulador e solver não-linear	131
A.5	Arquivos de definição da entidades com as variáveis do problema	131
A.6	Arquivo de testes	131
Apêndice B	Determinação das raízes da equação de estado	133
Apêndice C	”Matrix Coloring”	137
Apêndice D	Cálculo das viscosidades	143

Introdução

O Brasil hoje se encontra em uma posição privilegiada na área de petróleo. Após a descoberta das reservas gigantes do pré-sal, o país se tornou o foco das atenções em âmbito mundial. Os reservatórios do pré-sal mostram-se extremamente desafiadores, pois estão localizados em águas ultra-profundas e apresentam características físicas que requerem novos desenvolvimentos tecnológicos.

Durante o processo de recuperação de óleo, a despressurização do reservatório faz com que a produção se torne cada vez mais difícil. Para manter a produção, são necessários processos tecnológicos de recuperação cada vez mais avançados ao longo do tempo. A *recuperação primária*, que é a forma inicial e mais fácil de produção, é feita através do uso da energia armazenada no reservatório, ou seja, a alta pressão sob a qual os fluidos estão inicialmente. Quando esta pressão diminui, dá-se início ao processo de *recuperação secundária*, que consiste em injetar água em pontos específicos do reservatório, tentando "varrer" o óleo do mesmo.

Segundo Rosa *et al.* (2006), todos os campos em que a injeção de água foi iniciada há algum tempo acabam atingindo estágios avançados de recuperação, podendo chegar a um limite econômico onde os poços precisam ser tamponados e abandonados. Neste contexto, a fim de aumentar o aproveitamento destes poços antes de seu abandono, métodos mais avançados de recuperação também devem ser levados em conta, já

que todas as instalações estão prontas e os custos associados à perfuração de poços, especialmente em águas ultra-profundas, é bastante alto.

A recuperação dos hidrocarbonetos que não podem mais ser extraídos através dos métodos convencionais de recuperação primária ou secundária é feita através dos chamados métodos de *recuperação terciária* ou *recuperação avançada*. Estes métodos podem apresentar reações químicas e térmicas complexas dentro do reservatório. Um dos objetivos dessas técnicas é conseguir miscibilidade do fluido injetado com o óleo residual e assim recuperar o óleo que não pôde ser recuperado através dos métodos convencionais. Existem várias formas de alcançar a miscibilidade, dentre elas podem-se destacar o aumento de temperatura no reservatório (e.g., combustão *in situ*) ou a injeção de outras espécies químicas, como o CO_2 , por exemplo.

Para modelar o escoamento que ocorre em processos de recuperação avançada, utiliza-se o *modelo composicional* (AZIZ, 1993), em que apenas o número de espécies químicas é dado *a priori*. O número de fases (água, óleo, gás) e a composição de cada uma destas fases são determinados a partir de condições termodinâmicas e da concentração total de cada espécie.

Há muitos anos o Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor - SINMEC - desenvolve metodologias numéricas aplicadas à simulação numérica de reservatórios. Dentre os modelos existentes, alguns trabalhos foram feitos utilizando escoamentos monofásicos, escoamentos bifásicos imiscíveis (HURTADO, 2005, 2011) e também o modelo *black oil* (DA CUNHA, 1996; CORDAZZO, 2006; MALISKA *et al.*, 2012).

O presente trabalho tem como objetivo promover um avanço nas técnicas de modelagem do escoamento em meios porosos dominadas pelo SINMEC, a partir do estudo do modelo composicional e seus conceitos aplicados à simulação de reservatórios de petróleo. Já com uma fundamentação numérica bastante forte, através do domínio da tecnologia de malhas não-estruturadas, o conhecimento de modelos mais avançados no SINMEC irá possibilitar uma abrangência muito maior de processos ou fenômenos que poderão ser estudados e resolvidos na área de engenharia de petróleo. A recuperação avançada é um dos processos que merece destaque e, portanto, justifica a importância do modelo composicional.

Para modelar o escoamento composicional em reservatórios de petróleo, alguns conceitos devem ser introduzidos. Primeiramente, o escoamento ocorre em um meio poroso, o que resulta em uma forma não convencional de escoamento e suas características devem ser apresentadas. Além disso, no modelo será necessário compreender alguns fenômenos relacionados ao equilíbrio de fases, tais como reaparecimento e desaparecimento das fases óleo e gás. Portanto, é importante o conhecimento dos princípios termodinâmicos envolvidos no equilíbrio de fases. Finalmente, como o tratamento numérico das equações será feito utilizando malhas não-estruturadas, o *Método dos Volumes Finitos baseado em Elementos* será utilizado e apresentado.

1.1 O meio poroso

A modelagem matemática de reservatórios de petróleo tem sido realizada desde o final do século XIX. Esta consiste em um conjunto de equações que representam o comportamento dos fluidos que escoam através de uma rocha porosa, com condições de contorno e iniciais apropriadas. A principal diferença que existe no escoamento em um *meio poroso* é devido ao comportamento físico que, quando visto de forma macroscópica, é bastante diferente dos escoamentos comumente encontrados em outras áreas (e.g., aeronáutica, escoamentos em dutos, etc.). É claro que, em princípio, qualquer processo envolvendo o escoamento de fluidos pode ser modelado a partir das equações de *Navier-Stokes*, juntamente com a equação da conservação da massa e outras equações de conservação. Entretanto, no reservatório, o fluido está escoando através de poros com tamanhos de ordem muito menor do que o tamanho do próprio volume de controle que é utilizado para discretizar o domínio do problema de interesse. Sendo assim, é fácil ver que se algum método de discretização das equações de *Navier-Stokes* for empregado, malhas suficientemente pequenas (refinadas) deverão ser utilizadas para que o problema seja representado de forma correta. Isso faz com que a obtenção de uma solução do escoamento em meio poroso utilizando as equações de *Navier-Stokes* seja inviável devido ao tamanho do domínio em relação ao tamanho da malha, mesmo com a capacidade computacional que existe atualmente.

Para resolver o escoamento em um meio poroso em escala macroscópica, a equação da conservação da quantidade de movimento é repre-

sentada pela *Lei de Darcy* (DARCY, 1856). Esta é uma equação derivada empiricamente, a qual considera uma relação linear entre a velocidade relativa do fluido e o gradiente de pressões. Essa hipótese simplifica consideravelmente o problema do acoplamento pressão-velocidade (MALISKA, 2004). Todavia, o escoamento em meio poroso geralmente possui outras complicações, associadas às propriedades físicas do reservatório, que são altamente heterogêneas e anisotrópicas. Isso implica na necessidade de técnicas diferentes e avançadas para a solução do problema.

1.2 Equilíbrio de fases

Para compreender como as fases de um fluido se comportam, é necessário um estudo termodinâmico, ou seja, o estudo da energia e suas transformações. Um grande avanço na termodinâmica foi feito por *J. W. Gibbs* entre a metade e o fim do século XIX. A termodinâmica permite descrever as variações de energia que ocorrem em mudanças de fase e pode ser usada para prever separação de fases (JOHNS, 2004).

Estudar o comportamento e o equilíbrio de fases tem um papel importante em uma variedade de problemas de engenharia, desde manutenção da pressão em um separador, até processos de recuperação avançada de petróleo.

O processo de extração de petróleo nunca ocorre em equilíbrio, já que os poços injetores e produtores são os agentes que alteram as condições de pressão e temperatura nos reservatórios. Isso faz com que a hipótese de equilíbrio termodinâmico não seja válida para o reservatório como um todo. Entretanto, o conceito de *equilíbrio termodinâmico local* é utilizado para contrapor esse problema. Este conceito é razoável se for levado em consideração que, em um ponto no reservatório, as mudanças internas entre os fluidos confinados nos poros da rocha são rápidas quando comparadas à velocidade com que as condições de contorno (e.g., poços injetores e produtores) afetam o sistema. Desta forma, pode-se assumir *equilíbrio termodinâmico local* em volumes menores do reservatório que, para a área de simulação de reservatórios, são essencialmente os volumes de controle. A validade desta hipótese estará diretamente relacionada ao tamanho dos volumes de controle empregados na simulação.

Para a determinação do equilíbrio de fases, a rotina de *flash* e o teste de estabilidade têm papel importante para o cálculo das variáveis

envolvidas no problema. O termo *flash* é decorrente da língua inglesa a partir do fato de que um líquido, estando a uma pressão igual ou maior que a pressão do ponto de bolha, sofre uma rápida evaporação parcial quando a sua pressão é reduzida abaixo da pressão do ponto de bolha (i.e. *flash-vaporize*), produzindo um sistema bifásico de vapor e líquido em equilíbrio (SMITH *et al.*, 1996; SANDLER, 2006).

1.3 O modelo composicional

Em geral, o estudo de processos de recuperação de hidrocarbonetos em reservatórios de petróleo exige que o escoamento multifásico de vários componentes em um meio poroso e heterogêneo seja levado em conta. Os processos físicos envolvidos são de transferência de calor e massa por advecção e difusão. Além disso, também é possível que ocorram reações químicas durante o processo. Devido à complexidade dos fenômenos, a simplificação do modelo sempre deve ser feita com o intuito de atender a um conjunto de problemas específicos, com características semelhantes.

De um modo geral, existem basicamente dois grandes grupos de modelos para representar os vários tipos de petróleo existentes: o modelo *black oil* e o modelo *composicional*, sendo outros modelos derivados de um destes. A escolha do modelo é geralmente baseada na volatilidade do óleo (AZIZ, 1993). Um óleo com razão de solubilidade de gás, representado por R_s , menor que 750 scf/stb (pés cúbicos nas condições padrão por barril nas condições padrão), fator volume de formação (B_o) menor que 1.4 bbl/stb e grau API menor que 30 é usualmente definido como *black oil*. Neste caso, o comportamento de cada fase é simplificado. Existem apenas dois pseudocomponentes: óleo (de estocagem) e gás (de superfície), com propriedades físicas em função do fator volume de formação do óleo e do gás (B_o e B_g), e da razão de solubilidade (R_s). Essas propriedades dependem apenas da pressão e não é necessário executar a rotina de *flash*, ou melhor, ela se reduz a um simples cálculo de propriedades físicas para cada fase. No modelo *black oil*, está implícita a hipótese de que a composição dos dois pseudocomponentes (óleo e gás) permanece constante durante todo o processo de depleção do reservatório. Isso raramente ocorre na prática, portanto, o modelo *black oil* deve ser utilizado com cautela.

A variedade de reservatórios que existem no mundo é tão grande que inúmeros modelos foram sendo desenvolvidos ao longo do tempo. Segundo Chen *et al.* (2006a), dentre os modelos para simulação em reservatórios de petróleo, tem-se:

- Escoamento monofásico;
- Escoamento bifásico imiscível;
- Modelo *black oil*;
- Modelo de óleo volátil;
- Modelo composicional;
- Escoamento não-isotérmico;
- Modelo composicional com reações químicas.

Cada um dos modelos citados acima possui características diferentes em sua modelagem, permitindo resolver problemas específicos da forma mais eficiente possível. Em geral, a generalidade do modelo está diretamente relacionada com a complexidade da solução numérica do problema. O detalhamento dos modelos citados acima pode ser encontrado em Chen *et al.* (2006a).

É bastante extensa a variação de formulações para o modelo composicional. Segundo Aziz (1993), dois tipos de formulações utilizadas na indústria são baseadas na escolha das variáveis primárias (tabela 1). Modelos do *tipo 1* são normalmente (mas não sempre) empregados em

Tabela 1 – Tipos de variáveis para o modelo composicional.

Modelos do tipo 1:	P (pressão de uma das fases) z_i ($N_c - 1$ frações globais molares ou mássicas)
Modelos do tipo 2:	P (pressão de uma das fases) S_p ($N_p - 1$ saturações) x_{ip} ($N_c - N_p$ frações molares ou mássicas de cada fase)

formulações do tipo IMPES (*implicit pressure, explicit saturation*) que, para o caso de modelos composicionais, são chamadas de IMPEC (*implicit pressure, explicit compositions*), i.e., são formulações implícitas na pressão e explícitas na composição. Este tipo de formulação trata o cálculo das

composições de cada fase de maneira explícita e requer a execução da rotina de *flash* durante cada iteração de *Newton-Raphson* para determinação das composições. Já os modelos do *tipo 2* são normalmente empregados em formulações totalmente implícitas. Neste caso, um número maior de equações é necessário para cada volume de controle, mas a rotina de *flash* só é necessária para a determinação do desaparecimento ou reaparecimento de fases, já que as equações de equilíbrio fazem parte do sistema linear resultante do método de *Newton-Raphson*.

1.4 O método dos volumes finitos baseado em elementos

O Método dos Volumes Finitos baseado em Elementos, ou *Element based Finite Volume Method - EbfVM*, foi um método que surgiu inicialmente a partir do trabalho de Baliga & Patankar (1983), aplicado para a solução das equações de *Navier-Stokes*. Um grande avanço ocorreu ao longo de décadas pelo fato deste ser um método bastante versátil, consistente e, o mais importante, que satisfaz a característica fundamental do Método dos Volumes Finitos: *a conservação em cada volume de controle*. A aplicação deste método na área de simulação de reservatórios de petróleo ocorreu mais tarde, porém não se conhece os simuladores comerciais que utilizam esta metodologia atualmente.

A generalidade do EbfVM, através do uso de malhas não-estruturadas, permite a solução em geometrias complexas, podendo representar o problema real da forma mais fiel possível. Os avanços do método nos últimos anos fizeram com que o mesmo tenha se tornado uma referência na área de mecânica dos fluidos computacional. Neste trabalho, será feita apenas uma revisão geral do método. Para uma referência completa e detalhada, sugere-se ao leitor uma consulta ao trabalho de Hurtado (2011).

1.5 Organização do trabalho

A organização deste trabalho foi feita de forma a apresentar, no capítulo 2, os conceitos termodinâmicos para sistemas multifásicos e multicomponentes, além de mostrar os critérios necessários para estabelecer

o equilíbrio de fases. Esta parte é a base requerida para começar a compreender o modelo composicional. Apenas uma revisão geral e os conceitos básicos são apresentados neste capítulo. Portanto, para um maior detalhamento dos conceitos que serão apresentados, aconselha-se uma consulta a Sandler (2006) e Smith *et al.* (1996).

No capítulo 3, todas as equações que governam o problema são apresentadas, desde as relações constitutivas até as equações diferenciais parciais governantes. Nesta etapa faz-se o fechamento do problema, comparando o número de incógnitas com o número de equações existentes.

O capítulo 4 apresenta os algoritmos utilizados para resolver os três problemas fundamentais: a rotina de *flash*, o teste de estabilidade e a solução do sistema de equações diferenciais parciais do modelo composicional. Todos os problemas possuem características fortemente não-lineares, portanto serão apresentadas alternativas numéricas para resolver tais questões, utilizando ou o princípio de *substituições sucessivas* ou o método de *Newton-Raphson*. No mesmo capítulo, o processo de discretização das equações por meio do EbFVM também é apresentado.

No capítulo 5 os resultados são apresentados, desde a validação do cálculo de equilíbrio de fases, até os resultados de simulação de processos de recuperação avançada. Todos os resultados são comparados com simuladores comerciais, que são amplamente utilizados na indústria e considerados como referências na área de simulação de reservatórios de petróleo. Finalmente, no capítulo 6, são feitas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Noções de Termodinâmica de Misturas

Fluidos de reservatórios são misturas complexas de milhares de componentes sob condições de pressão e temperatura bastante elevadas e que sofrem grandes variações no processo de extração desde a formação até a superfície. Portanto, torna-se fundamental compreender as interações físicas e químicas entre componentes e fases que possam existir neste sistema.

Uma *fase* pode ser definida como uma porção homogênea de um sistema, delimitada por uma superfície e fisicamente separável das outras fases presentes. Em uma mistura água-óleo, existirão duas fases, pois existe uma superfície física que as separa. Os *componentes* são as espécies químicas que compõem as fases e, dependendo das características destes componentes, as propriedades (densidade, viscosidade, etc.) das fases terão comportamentos diferentes. Uma mistura multicomponente em equilíbrio à pressão e temperatura fixas irá formar um sistema de uma ou mais fases, com componentes distribuídos de acordo com suas características moleculares.

2.1 Definições preliminares

Considere um sistema contendo uma mistura de N_c componentes que, no equilíbrio, estão distribuídos em alguma proporção nas fases óleo ou gás. Supondo, por hipótese neste trabalho, que o componente água está presente apenas em uma fase aquosa e não participa dos processos de equilíbrio químico pode-se, sem perda de generalidade, trabalhar apenas com conceitos aplicados ao sistema gás-óleo. A fração molar global do componente i para este sistema é expressa por

$$z_i = \frac{n_i}{n}, \quad (1)$$

onde n_i é o número total de mols do componente i e n o número de mols total do sistema. De uma forma similar, a fração molar do componente i na fase p é

$$x_{ip} = \frac{n_{ip}}{n_p}, \quad (2)$$

onde,

n_{ip} : número de mols do componente i presente na fase p ,

n_p : número de mols total da fase p .

Como $n = \sum n_i$ e $n_p = \sum n_{ip}$, então

$$\sum_{i=1}^{N_c} z_i = 1, \quad (3)$$

e

$$\sum_{i=1}^{N_c} x_{ip} = 1. \quad (4)$$

Define-se a fração molar da fase como

$$F_p = \frac{n_p}{n}, \quad (5)$$

e

$$\sum_{p=1}^{N_p} F_p = 1. \quad (6)$$

A saturação da fase é a razão entre o volume ocupado pela fase e o volume poroso disponível,

$$S_p = \frac{V_p}{V}, \quad (7)$$

com

$$\sum_{p=1}^{N_p+1} S_p = 1, \quad (8)$$

onde o somatório estende-se até $N_p = 2$ (óleo e gás) mais a fase água. O volume molar é definido como

$$v = \frac{V}{n}, \quad (9)$$

o qual está diretamente relacionado à densidade molar ξ ,

$$\xi = \frac{1}{v}. \quad (10)$$

2.2 Diagrama de fases

Para compreender as interações entre componentes em função da composição, pressão e temperatura do sistema, faz-se uso de diagramas de fases, os quais permitem determinar o estado de alguns sistemas particulares. A figura 1 mostra um exemplo do comportamento de fases de um componente puro.

As curvas de sublimação, fusão e vaporização correspondem às regiões na qual o fluido encontra-se em um estado com mais de uma fase. A fase é chamada de sólido, líquido ou vapor caso ela esteja em alguma das regiões delimitadas pelas curvas de transição indicadas na figura 1. Em temperaturas acima da *temperatura crítica*, T_c , existe apenas uma única fase para qualquer que seja a pressão do sistema. Desta forma, para um único componente, a *temperatura crítica* é a maior temperatura na qual duas fases podem existir. Além disso, no ponto crítico, as fases possuem propriedades idênticas.

Para sistemas de dois componentes ou misturas binárias, a figura 2 mostra as regiões de líquido, vapor e regiões bifásicas em função da pressão e composição. Este diagrama é um exemplo no caso em que a temperatura do sistema está abaixo da temperatura crítica de ambos os

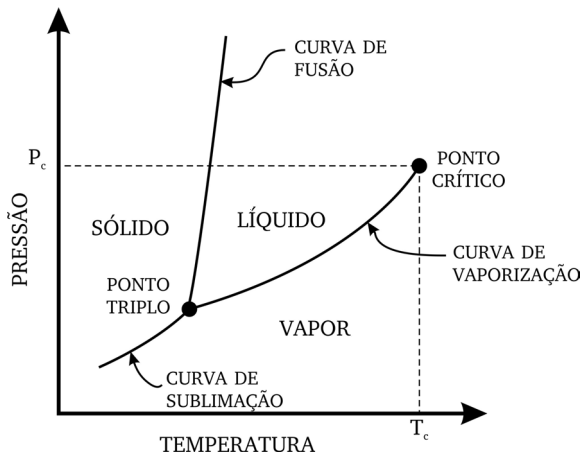


Figura 1 – Comportamento de fases de um componente puro.

componentes. Nos extremos do gráfico ($z = 0$ e $z = 1$) estão as pressões de vapor dos componentes puros (P_{v2} e P_{v1}).

Para explicar os fenômenos físicos que estão representados no diagrama da figura 2, realiza-se um experimento em um recipiente fechado contendo uma mistura binária com composição z do componente 1. Este

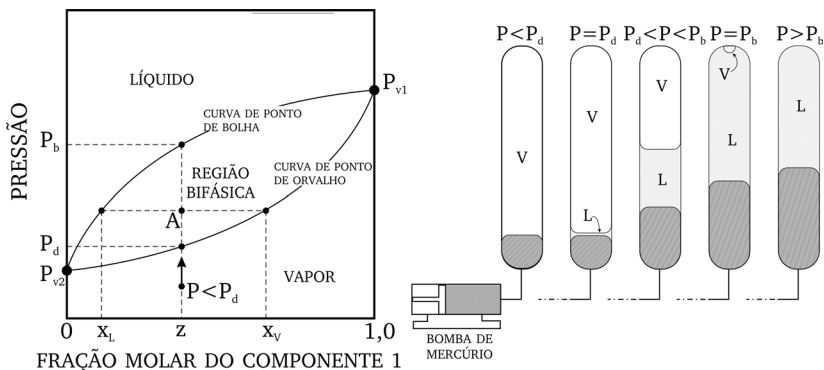


Figura 2 – Diagrama de fases pressão-composição para uma mistura binária.

recipiente está acoplado a uma bomba de mercúrio, a qual permite variar o volume do mesmo sem interferir na composição original do sistema. O processo consiste em comprimir o fluido a partir de uma pressão abaixo

do ponto de orvalho ($P < P_d$, figura 2), na qual o fluido está na fase vapor, até ultrapassar a pressão do ponto de bolha (fase líquida). Quando a pressão ultrapassa a pressão do ponto de bolha ($P > P_d$), a fração de vapor do sistema vai diminuindo. No ponto A indicado na figura 2, a fração do componente 1 no líquido é x_L e x_V na fase vapor. Quando a pressão atinge $P = P_b$, a fase vapor desaparece. Este é um comportamento típico que ocorre na maioria das situações.

Nos casos em que a temperatura do sistema é maior do que a temperatura crítica de um dos componentes, o comportamento é diferente. A figura 3 mostra como é o diagrama pressão-composição neste caso. Note que a região bifásica não existe para todos os valores de z , pois a temperatura do sistema está acima da temperatura crítica do componente 1. Como é esperado, se $z = 1$, o sistema possui apenas uma fase, em condições supercríticas. O ponto crítico da figura 3 é o ponto na qual as fases vapor e líquido são idênticas, ou seja, ambas as fases possuem a mesma composição e as mesmas propriedades. Para frações molares acima do valor do ponto crítico na figura 3, existem duas pressões de orvalho para cada composição.

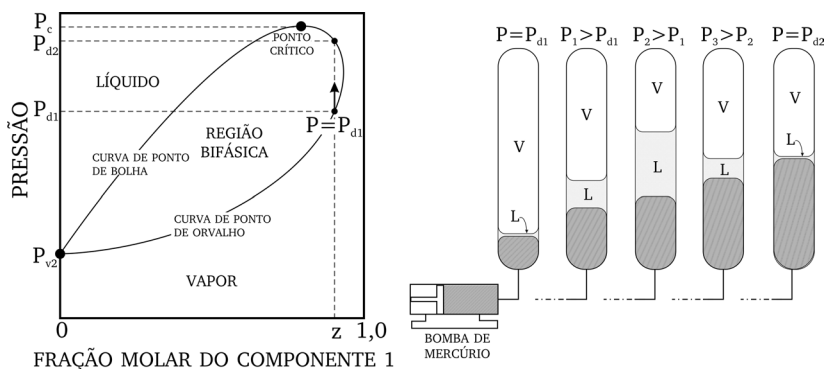


Figura 3 – Diagrama de fases pressão-composição para uma mistura binária com $T > T_{c1}$.

Através de um procedimento experimental semelhante, porém com o sistema a uma temperatura acima da temperatura crítica do componente 1, é possível observar o seguinte. Em $P = P_{d1}$, a primeira gota de líquido se forma. Com o aumento da pressão do sistema, aumenta a fração de líquido, porém ao aumentar mais a pressão, atinge-se um ponto no

qual a fração de líquido começa a diminuir até que o líquido desaparece na pressão P_{d2} . Como foi realizado um processo de compressão, esse fenômeno é conhecido como *vaporização retrógrada*. Para o caso em que a pressão é reduzida, ele é chamado de *condensação retrógrada* (ORR & TABER, 1987). Por ser um problema em condições acima das condições críticas, raramente tal fenômeno é observado. Porém ele pode ocorrer em alguns reservatórios de petróleo, que podem estar sob condições acima das condições críticas de alguns hidrocarbonetos e esses fenômenos precisam ser previstos durante o processo de extração.

2.2.1 Diagramas de fluidos de reservatório

Um exemplo de diagrama de fases utilizado em fluidos de reservatório é mostrado na figura 4, que corresponde a um diagrama pressão vs temperatura do sistema fluido. Nesta figura, existem dois pontos limites

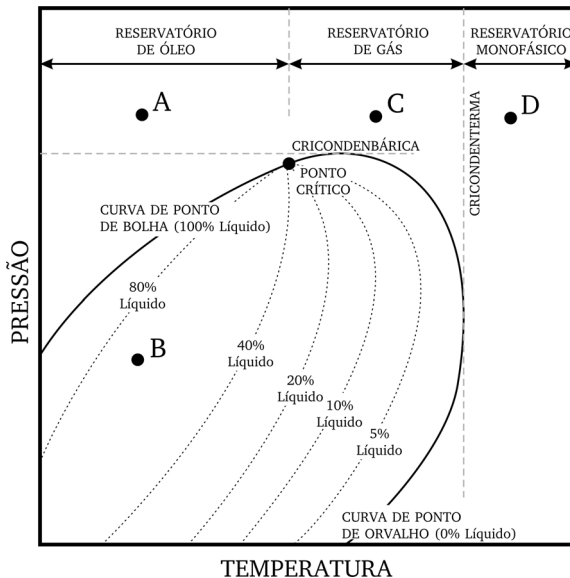


Figura 4 – Diagrama pressão-temperatura de uma mistura multicomponentes de composição fixa.

de pressão e temperatura, a *cricondenbárica* e a *cricondenterma*, respectivamente. Para temperaturas acima da *cricondenterma*, existe apenas

uma fase para qualquer valor de pressão. Analogamente, para pressões acima da *cricondenbárica*, existe apenas uma fase para qualquer valor de temperatura.

Os reservatórios são classificados de forma diferente de acordo com suas condições iniciais. Reservatórios sob temperaturas abaixo da temperatura crítica são classificados como *reservatórios de óleo*. Para esse tipo de reservatório, ainda é possível classificá-lo dependendo da pressão inicial. Ele é chamado de *subsaturado*, quando a pressão inicial está acima da curva de ponto de bolha (ponto A da figura 4) e de *saturado*, para pressões abaixo da região de pressão de bolha (região bifásica, ponto B). Reservatórios com temperatura acima da crítica são chamados de *reservatórios de gás*. Se a temperatura está abaixo da *cricondenterma* (ponto C), este é um reservatório com *condensação retrógrada*, já que a condensação retrógrada de óleo irá ocorrer a medida que a pressão da formação vai diminuindo devido a extração dos fluidos. Se a temperatura estiver acima da *cricondenterma* (ponto D), o reservatório é *monofásico* para qualquer pressão.

É importante ressaltar que as definições apresentadas são baseadas nas condições iniciais da formação. À medida que os fluidos de reservatórios são extraídos, a composição do reservatório se altera e, conseqüentemente, o diagrama da figura 4 muda. Considere um reservatório de gás com temperatura abaixo da *cricondenterma*. Com a remoção do gás da formação, óleo vai se formando no reservatório com maiores concentrações dos componentes mais pesados. Quanto mais gás é removido, mais a concentração de componentes leves no reservatório diminui, já que estes estão preferencialmente na fase gás e, portanto, o reservatório fica com uma maior concentração de componentes mais pesados, fazendo com que a região bifásica da figura 4 se desloque para temperaturas mais altas. Isso resulta em uma maior condensação de óleo no reservatório. Este tipo de reservatório é um forte candidato a processos de manutenção de pressão por injeção de gás ou gás ciclado a fim de aumentar a recuperação dos hidrocarbonetos (BRADLEY, 1987).

2.3 Equações de estado

As equações de estado relacionam de forma relativamente simples pressão, volume e temperatura. A partir de propriedades críticas e fator

acêntrico de cada componente, é possível prever de maneira razoável o comportamento de misturas e componentes puros. A precisão de cada equação de estado está associada à capacidade da mesma em representar de forma correta as forças de atração e repulsão das moléculas de cada componente do sistema.

A equação de estado mais simples conhecida é a equação dos gases perfeitos, a qual estabelece

$$PV = nRT, \quad (11)$$

onde n é o número de mols, P , V e T são pressão, volume e temperatura, respectivamente. A variável R é a constante universal dos gases, com

$$R \approx 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}.$$

Esta equação não é adequada para representar os fluidos de reservatório, já que estes possuem moléculas e interações intermoleculares mais complexas.

Idealmente, procura-se representar as fases líquido e vapor de uma forma contínua, com uma única equação. Portanto, torna-se necessário o uso de equações mais avançadas, como as equações cúbicas. A primeira equação cúbica desenvolvida foi a equação de *van der Waals*, mas sua aplicação é restrita a problemas teóricos, pelo fato de não representar tão bem os fluidos existentes na natureza. Isso não diminui a importância desta equação pois, de fato, as equações de estado mais utilizadas são equações cúbicas derivadas da equação de *van der Waals*. Algumas das equações de estado mais utilizadas na área de petróleo são (WHITSON & BRULÉ, 2000):

- Equação de estado de *Redlich e Kwong*;
- Equação de estado de *Peng e Robinson*;
- Equação de estado de *Soave, Redlich e Kwong*.

A equação de estado que será adotada para representar o comportamento de fases do presente trabalho será a equação de *Peng-Robinson*, dada por

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a\alpha}{v(v + b) + b(v - b)}, \quad (12)$$

onde v é o volume molar e os parâmetros a e b são dados em função da temperatura e pressão crítica do componente,

$$a = \frac{\Omega_a (RT_c)^2}{P_c} \alpha, \quad (13)$$

onde $\Omega_a = 0,45724$ e,

$$b = \frac{\Omega_b RT_c}{P_c}, \quad (14)$$

com $\Omega_b = 0,07780$. O coeficiente α é função da temperatura,

$$\alpha = \left[1 + m \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right], \quad (15)$$

e

$$m = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2, \quad (16)$$

quando $\omega < 0,49$ e, para componentes mais pesados ($\omega > 0,49$), m é dado por

$$m = 0,3796 + 1,485\omega - 0,1644\omega^2 - 0,01667\omega^3. \quad (17)$$

As propriedades críticas de componentes puros utilizadas nas definições acima são: pressão crítica (P_c), temperatura crítica (T_c) e fator acêntrico (ω). No caso de uma fase com vários componentes, utiliza-se a regra de mistura quadrática para a e linear para b ,

$$a = a_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{j=1}^{N_c} x_i x_j a_{ij}, \quad (18)$$

$$b = b_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^{N_c} x_i b_i = 1, \quad (19)$$

$$a_{ij} = a_{ji} = \sqrt{a_i a_j} (1 - \kappa_{ij}), \quad (20)$$

onde a_i e b_i são parâmetros para o componente puro e κ_{ij} é o coeficiente de interação binária, que são as componentes da matriz de interação binária. Esta é uma matriz simétrica com $\kappa_{ij} = \kappa_{ji}$ e, além disso, $\kappa_{ii} = 0$. Os parâmetros Ω_a e Ω_b das equações (13) e (14) possuem os valores padrão indicados, mas podem variar para cada componente em casos onde o

ajuste da equação de estado a dados experimentais é necessário. Isso ocorre principalmente quando se faz o agrupamento de componentes em pseudocomponentes, com o intuito de reduzir o número de incógnitas do problema.

Definindo,

$$A = \frac{aP}{(RT)^2}, \quad (21)$$

$$B = \frac{bP}{RT}, \quad (22)$$

$$Z = \frac{Pv}{RT}, \quad (23)$$

a eq. (12) resulta em

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0, \quad (24)$$

que é uma equação cúbica na qual suas raízes podem ser facilmente encontradas. Um procedimento analítico e numericamente robusto para obtenção das raízes é mostrado no apêndice B.

A fugacidade, f_i , é uma medida da quantidade que um fluido desvia-se do comportamento de gás ideal e pode ser calculada através de

$$\ln \left(\frac{f_i}{x_i P} \right) = \frac{1}{RT} \int_{V \rightarrow \infty}^{V=ZnRT/P} \left(\frac{RT}{V} - \left(\frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,V,n_{j \neq i}} \right) dV - \ln Z, \quad (25)$$

A partir do uso da equação de estado, pode-se calcular a integral associada à eq. (25). Para a equação de estado de *Peng-Robinson*, a expressão é dada por

$$\begin{aligned} \ln \phi_i = \ln \left(\frac{f_i}{x_i P} \right) &= \frac{B_i}{B} (Z - 1) - \ln(Z - B) \\ &+ \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left(\frac{B_i}{B} - \frac{2}{A} \sum_j A_{ij} x_j \right) \ln \left(\frac{Z + (1 + \sqrt{2})B}{Z + (1 - \sqrt{2})B} \right). \end{aligned} \quad (26)$$

Na equação acima, ϕ_i é chamado de *coeficiente de fugacidade*. É importante salientar que a eq. (26) depende fundamentalmente da escolha correta do fator de compressibilidade Z , raiz da eq. (24). Como esta é

uma equação cúbica, pode-se ter até três raízes, mas a solução correta é aquela em que a energia livre de *Gibbs* é mínima. A energia de *Gibbs normalizada* (JOHNS, 2004) pode ser calculada através de

$$g^* = \sum_{i=1}^{n_c} x_i \ln f_i. \quad (27)$$

Caso a eq. (24) possua três raízes reais, a raiz do meio é descartada e calcula-se f_i com as raízes restantes. A raiz que resultar no menor valor para g^* é a raiz correta. Em geral, quando o sistema está na fase líquida, $Z = Z_{\min}$, e quando o sistema estiver na fase vapor, $Z = Z_{\max}$. Este princípio é válido para a maioria dos casos, porém a garantia da escolha correta é obtida apenas quando calculada a energia de *Gibbs*. Neste trabalho, o fator de compressibilidade escolhido é sempre aquele que resulta no menor valor de g^* .

2.4 Equilíbrio de fases

Resolver o equilíbrio de fases significa determinar o estado de um sistema sob dadas condições de pressão e temperatura. Como o modelo composicional trata de sistemas multicomponentes, nesta etapa serão apresentadas as metodologias para resolver o equilíbrio de fases nesse tipo de sistema.

Uma das principais contribuições de *Gibbs* foi a introdução do conceito de potencial químico. A partir deste conceito determinou-se que, no equilíbrio, o potencial químico de cada componente deve ser o mesmo para todas as fases, ou seja, para um sistema líquido/vapor tem-se

$$\mu_{iL} = \mu_{iV}. \quad (28)$$

A demonstração deste critério pode ser vista em Sandler (2006) ou em Gomes (1990). O conceito de potencial químico está diretamente relacionado com o conceito de fugacidade apresentado na seção anterior. A relação entre fugacidade e potencial químico pode ser expressa por

$$\mu_i = RT \ln f_i + \Theta_i(T), \quad (29)$$

onde Θ_i é função apenas da temperatura. Combinando as equações (28)

e (29), chega-se a

$$f_{iL} = f_{iV}. \quad (30)$$

A expressão acima é uma condição necessária para que o sistema esteja em equilíbrio. Entretanto, não é uma condição suficiente, pois também é necessário que a energia livre de Gibbs seja mínima, o que implica na escolha correta dos fatores de compressibilidade para cada fase, Z_L e Z_V .

2.4.1 Rotina de flash

A rotina de *flash* isotérmica é parte principal da maioria das aplicações que envolvem cálculos com equação de estado. Ela é a base para resolver o problema fundamental da modelagem composicional de reservatórios de petróleo:

Dados valores constantes de pressão, temperatura e frações molares (ou mássicas) globais de cada componente, determinar as frações molares dos componentes para cada fase (x_{ip}), além das frações molares de cada fase (F_p), i.e., a quantidade que cada fase ocupa no sistema.

O balanço molar de um sistema bifásico pode ser escrito como,

$$n = n_V + n_L, \quad (31)$$

e,

$$nz_i = n_V x_{iV} + n_L x_{iL}. \quad (32)$$

De acordo com a eq. (5), a fração molar de vapor é

$$F_V = \frac{n_V}{n}. \quad (33)$$

Logo,

$$z_i = F_V x_{iV} + (1 - F_V) x_{iL}. \quad (34)$$

Como as somas das frações molares globais e de cada fase para cada componente deve ser igual à unidade tem-se,

$$\sum_{i=1}^{N_c} x_{iV} = \sum_{i=1}^{N_c} x_{iL} = \sum_{i=1}^{N_c} z_i = 1. \quad (35)$$

Então,

$$\sum_{i=1}^{N_c} (x_{iV} - x_{iL}) = 0. \quad (36)$$

O coeficiente de equilíbrio, K_i , é definido como

$$K_i = \frac{x_{iV}}{x_{iL}}. \quad (37)$$

De acordo com Smith *et al.* (1996), o coeficiente de equilíbrio serve como uma medida de "leveza" de um componente, i.e., a sua tendência de se concentrar na fase vapor. Quando $K_i > 1$, o componente i está mais concentrado na fase vapor, se $K_i < 1$, então ele está mais concentrado na fase líquido e é considerado um componente pesado. Este coeficiente é computacionalmente conveniente pelo fato de eliminar um conjunto de frações molares de uma das fases, já que as frações podem ser calculadas a partir de K_i . Com este novo conceito, é possível obter uma equação que depende apenas de F_V e K_i a partir das equações (34) e (36). Se K_i é conhecido, pode-se definir uma função $h = h(F_V)$ tal que

$$h(F_V) = \sum_{i=1}^{N_c} (x_{iV} - x_{iL}) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i(K_i - 1)}{1 + F_V(K_i - 1)} = 0. \quad (38)$$

Resolvendo a equação acima a partir de algum método iterativo de obtenção das raízes (e.g., Método da Bissecção, *Newton-Raphson*, etc.), as composições de cada fase podem ser calculadas por

$$x_{iL} = \frac{z_i}{F_V(K_i - 1) + 1} \quad \text{e} \quad x_{iV} = \frac{z_i K_i}{F_V(K_i - 1) + 1} = K_i x_{iL}. \quad (39)$$

As equações (38) e (39) fornecem uma maneira de calcular a distribuição de um sistema bifásico quando as constantes de equilíbrio são conhecidas. O processo de solução destas equações é conhecido como procedimento de *Rachford-Rice* (RACHFORD & RICE, 1952).

A rotina de *flash* requer a solução da eq. (30), para $i = 1, \dots, N_c$ e da eq. (38), tendo como incógnitas K_i e F_V . Quando o problema envolve apenas uma fase líquida e a fase vapor, o processo também é conhecido como *flash* bifásico.

A solução da rotina de *flash* pode ser obtida a partir de um procedimento iterativo de substituições sucessivas ou utilizando o método de *Newton-Raphson*. Assume-se que a solução matemática deste problema existe, sendo ela uma solução que representa as composições de equilíbrio de cada fase ou a solução trivial. Note que, quando $K_i = 1$, a eq. (38) é satisfeita e resulta em $x_{iL} = x_{iV} = z_i$, a qual é chamada de solução trivial.

Uma estimativa comumente utilizada para o valor de K_i é obtida a partir da equação de Wilson (1969),

$$K_i = \frac{P_{ci}}{P} \exp \left[5,37 \left(1 + \omega_i \left(1 - \frac{T_{ci}}{T} \right) \right) \right]. \quad (40)$$

As estimativas dos coeficientes de equilíbrio obtidos a partir desta equação não são boas em pressões muito altas, o que pode levar a rotina de *flash* a convergir para uma solução trivial. A forma mais adequada para determinar estimativas para os valores de K_i é a partir de um cálculo de estabilidade antes de inicializar a rotina de *flash*. No presente trabalho, a solução da rotina de *flash* é feita por meio de uma combinação do método de substituições sucessivas proposto em Michelsen (1982b) e uma solução totalmente acoplada utilizando o método de *Newton-Raphson*. Este algoritmo será mostrado no capítulo 4.

2.4.2 Cálculo de estabilidade

Mesmo que o resultado obtido pela rotina de *flash* aparente ser fisicamente consistente, deve-se fazer uma verificação cuidadosa da solução através de um teste de estabilidade. Alternativamente, pode-se realizar o cálculo de estabilidade antes de resolver a rotina de *flash*. Este procedimento requer mais cálculos, porém a solução do teste de estabilidade fornece boas estimativas dos coeficientes de equilíbrio para a rotina de *flash*.

O teste de estabilidade consiste em determinar se um sistema monofásico a uma dada pressão e temperatura irá se separar em duas fases. Esta é uma tarefa muito importante e até mais complexa que a solução de *flash*. Os trabalhos de Michelsen (1982a) e Baker *et al.* (1982) apresentaram uma maneira de determinar a estabilidade termodinâmica de uma mistura a partir do critério do plano tangente de *Gibbs*. O objetivo é determinar se uma mistura possui uma energia de *Gibbs* menor permanecendo monofá-

sica ou se ela será menor caso a mistura se separe em duas fases ou mais (JOHNS, 2004).

Para ilustrar o critério do plano tangente, considere um dos casos exemplificados em Baker *et al.* (1982), no qual calcula-se a energia de Gibbs da mistura de CO_2 e tolueno a $38,1\text{ °C}$ e 1379 kPa . A figura 5 mostra a energia de Gibbs da mistura em função da fração molar de CO_2 .

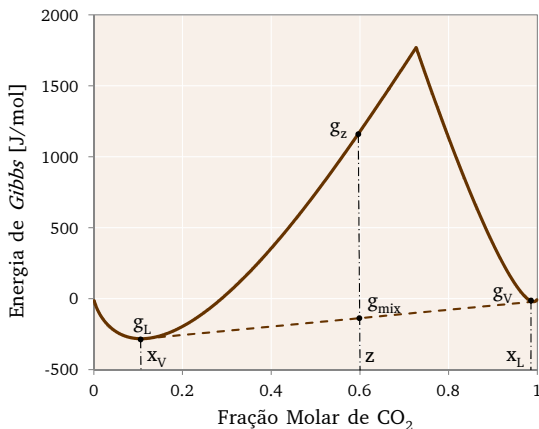


Figura 5 – Energia de Gibbs da mistura de CO_2 /tolueno a $38,1\text{ °C}$ e 1379 kPa .

Essa curva é calculada assumindo que a mistura seja sempre monofásica, mesmo que este não seja o estado real da mistura. Na região entre x_V e x_L , a linha sólida não é a energia de Gibbs de equilíbrio, mas sim a linha tracejada e a mistura é dividida em duas fases. Se a composição global de CO_2 é z , então a energia de Gibbs de equilíbrio será g_{mix} e a fração molar de vapor deste novo sistema será dada por

$$F_V = \frac{z - x_V}{x_L - x_V}, \quad (41)$$

com uma composição de CO_2 igual a x_V na fase vapor e x_L na fase líquido. Note que a partir da reta tangente aos dois mínimos da energia de Gibbs para a mistura monofásica, pode-se concluir quais são as regiões nas quais a mistura é estável ou não. Para casos com mais de 2 componentes, tem-se planos tangentes aos mínimos da função energia de Gibbs.

Na prática, um algoritmo para este método do plano tangente é de difícil implementação. Portanto, no capítulo 4 será apresentado um método prático proposto por Michelsen (1982a), que foi utilizado neste trabalho.

Modelo Composicional

Reservatórios de petróleo possuem propriedades físicas bastante heterogêneas e anisotrópicas e os fluidos são compostos por milhares de hidrocarbonetos. Portanto, um grande número de relações constitutivas é necessário para a modelagem matemática representar o fenômeno físico da melhor forma possível. Um esquema geral do conjunto de equações que permite representar o escoamento em reservatórios de petróleo é dado na figura 6.

3.1 Equações governantes

As equações de conservação que são utilizadas para modelar o problema são as equações de conservação da massa de cada componente. Assume-se que o componente água está presente apenas na fase aquosa, enquanto que os componentes de hidrocarbonetos estão presentes apenas nas fases óleo e gás, distribuídos em função das condições de pressão, temperatura e composição global. Nas fases óleo e gás, também podem existir outros componentes que não são hidrocarbonetos, tais como N_2 , CO_2 , etc.

Nas equações que seguem, serão assumidas as seguintes hipóteses:

- O escoamento é trifásico (água, óleo e gás), isotérmico e descrito pela lei de *Darcy*;

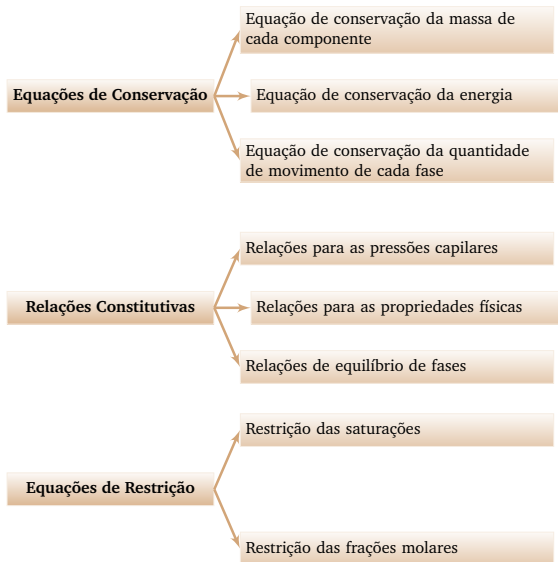


Figura 6 – Conjunto de equações do problema.

- A rocha é levemente compressível;
- As fases óleo e gás são compostas de N_c componentes, podendo conter componentes que não são hidrocarbonetos, e.g., N_2 , CO_2 , etc;
- A fase água é composta apenas pelo componente água;
- Existe equilíbrio termodinâmico local entre as fases.

As equações governantes são dadas por

$$\frac{\partial}{\partial t} (\xi_w S_w) + \vec{\nabla} \cdot (\xi_w \vec{u}_w) = \tilde{q}_w, \quad (42)$$

para o componente água e, para os componentes hidrocarbonetos,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi [x_{io} \xi_o S_o + x_{ig} \xi_g S_g]) + \vec{\nabla} \cdot (x_{io} \xi_o \vec{u}_o + x_{ig} \xi_g \vec{u}_g) \\ - \vec{\nabla} \cdot (\xi_o \mathbf{D}_{io} \vec{\nabla} x_{io} + \xi_g \mathbf{D}_{ig} \vec{\nabla} x_{ig}) = \tilde{q}_i, \end{aligned} \quad (43)$$

onde ξ_p é a densidade molar da fase p , \vec{u}_p a velocidade da fase p , \mathbf{D}_{ip} é o tensor de dispersão e difusão efetiva do componente i na fase p e

\tilde{q}_i é o termo fonte. A primeira parcela do termo de fluxo está associada ao transporte advectivo do fluido através do meio poroso e a segunda é uma combinação dos efeitos de dispersão e difusão molecular. O tensor \mathbf{D}_{ip} depende da porosidade do meio, da tortuosidade, da distribuição dos tamanhos de poro, da heterogeneidade da rocha e da velocidade do fluido. Embora o termo de dispersão e difusão tenha efeito significativo em casos de reinjeção de gás em reservatórios de gás condensado e em processos envolvendo deslocamento miscível, a maioria dos simuladores comerciais não o considera. Isso é feito pelo fato de que a inclusão do tensor \mathbf{D}_{ip} faz com que o *stencil* da matriz Jacobiana seja muito maior quando comparado aos modelos sem este termo. Um estudo sobre a influência do tensor de dispersão em modelos composicionais pode ser encontrado em dos Santos (2013). No presente trabalho, esta parcela não será considerada. Portanto, a equação simplificada torna-se,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \left[x_{io} \xi_o S_o + x_{ig} \xi_g S_g \right] \right) + \vec{\nabla} \cdot \left(x_{io} \xi_o \vec{u}_o + x_{ig} \xi_g \vec{u}_g \right) = \tilde{q}_i, \quad (44)$$

A velocidade \vec{u}_p é obtida pela *lei de Darcy*

$$\vec{u}_p = -\mathbf{K} \frac{k_{rp}}{\mu_p} \left(\vec{\nabla} P_p - \gamma_p \vec{\nabla} z \right), \quad (45)$$

onde \mathbf{K} é o tensor permeabilidade absoluta, k_{rp} a permeabilidade relativa da fase p , γ_p é o peso específico e z é a profundidade medida em relação a uma dada referência.

O problema acima forma um sistema de $N_c + 1$ equações. Substituindo a eq. (45) nas eqs. (42) e (44), obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} (\xi_w S_w) - \vec{\nabla} \cdot (\xi_w \lambda_w \mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_w) = \tilde{q}_w, \quad (46)$$

e

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \left[x_{io} \xi_o S_o + x_{ig} \xi_g S_g \right] \right) \\ & - \vec{\nabla} \cdot \left(x_{io} \xi_o \lambda_o \mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_o + x_{ig} \xi_g \lambda_g \mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_g \right) = \tilde{q}_i, \end{aligned} \quad (47)$$

onde λ é a mobilidade, dada por

$$\lambda_p = \frac{k_{rp}}{\mu_p}, \quad (48)$$

e Φ é o potencial e está relacionado com a pressão através da expressão

$$\vec{\nabla}\Phi_p = \vec{\nabla}P_p - \gamma_p \vec{\nabla}z. \quad (49)$$

Em geral, as propriedades físicas das fases óleo e gás são função da pressão, temperatura e composição, ou seja,

$$\rho_p = \rho_p(P, T, x_{1p}, x_{2p}, \dots, x_{N_c p}), \quad (50)$$

$$\xi_p = \xi_p(P, T, x_{1p}, x_{2p}, \dots, x_{N_c p}), \quad (51)$$

$$\mu_p = \mu_p(P, T, x_{1p}, x_{2p}, \dots, x_{N_c p}). \quad (52)$$

A densidade molar ξ_p e a densidade ρ_p podem ser obtidas por meio de

$$\xi_p = \frac{1}{v_p} = \frac{P}{Z_p RT}, \quad (53)$$

e

$$\rho_p = M_p \xi_p, \quad (54)$$

onde Z_p e M_p são o fator de compressibilidade e a massa molar da fase p , respectivamente. M_p é calculado em função da massa molar de cada componente (M_i),

$$M_p = \sum_i^{N_c} x_{ip} M_i. \quad (55)$$

Para o cálculo da viscosidade da fase, μ_p , existem vários modelos. Este trabalho empregará o modelo proposto por Lohrenz *et al.* (1964), que está descrito no apêndice D.

Para a determinação das propriedades da fase água, expressões relativamente mais simples podem ser utilizadas, já que neste modelo ela é composta de apenas um componente com composição constante. As

propriedades da água são obtidas através das seguintes expressões,

$$\rho_w = \rho_w^{\text{ref}} \left[1 + c_w (P - P^{\text{ref}}) \right], \quad (56)$$

$$\xi_w = \frac{\rho_w}{M_w}, \quad (57)$$

$$\mu_w = \mu_w^{\text{ref}} \left[1 + c_{\mu_w} (P - P^{\text{ref}}) \right], \quad (58)$$

onde ρ^{ref} e μ^{ref} são os valores na pressão de referência P^{ref} , c_w é a compressibilidade da água e c_{μ_w} a viscosibilidade da água.

A porosidade é, em geral, apenas função da pressão e, para uma rocha levemente compressível, pode ser aproximada por

$$\phi = \phi(P) \approx \phi^{\text{ref}} \left[1 + c_R (P - P^{\text{ref}}) \right], \quad (59)$$

onde ϕ^{ref} é a porosidade na pressão de referência P^{ref} e c_R é a compressibilidade da rocha.

A permeabilidade relativa da fase p depende das saturações das fases

$$k_{rp} = k_{rp}(S_q), \quad (60)$$

onde p e q podem ser fases diferentes. As pressões das fases estão relacionadas por meio da pressão capilar $P_{c_{pq}}$. Esta é função da saturação da fase molhante

$$P_{c_{pq}}(S_q) = P_p - P_q. \quad (61)$$

Com a equação de conservação de mols (massa) de cada componente mais o componente água, tem-se $N_c + 1$ equações. Utilizando a eq. (4), tem-se

$$\sum_{i=1}^{N_c} x_{io} = 1, \quad (62)$$

$$\sum_{i=1}^{N_c} x_{ig} = 1, \quad (63)$$

e a condição de restrição volumétrica resulta em

$$S_o + S_g + S_w = 1. \quad (64)$$

Desta forma, o problema precisa de N_c equações adicionais. A condição

de equilíbrio termodinâmico local estabelece que a eq. (28) deve ser satisfeita. Isso tem como consequência a eq. (30), i.e., a fugacidade de cada componente deve ser igual para todas as fases que, por hipótese, trocam componentes. Reescrevendo a expressão

$$f_{ip}(P, x_{1p}, x_{2p}, \dots, x_{N_c p}) = f_{iq}(P, x_{1q}, x_{2q}, \dots, x_{N_c q}), \quad (65)$$

pode-se perceber que a fugacidade é função das variáveis principais do problema. Para resolver a eq. (65), utiliza-se a equação de *Peng-Robinson*, eq. (12), para cada fase e a fugacidade, f_{ip} , é calculada através da eq. (26). Para $N_p = 2$, o sistema acima fornece N_c equações de equilíbrio adicionais.

Em resumo, se o sistema é composto por N_c componentes mais um componente água, com até N_p fases de hidrocarbonetos mais uma fase água ($N_p + 1$ fases no total), a tabela 2 mostra o conjunto de todas as variáveis que são diretamente dependentes das variáveis espaciais e temporais (x, y, z e t), bem como o conjunto de equações para o fechamento do problema. Todos os outros parâmetros constitutivos, tais como densidade, viscosidade, etc., são funções explícitas ou implícitas das variáveis dependentes.

Tabela 2 – Conjunto de equações e incógnitas do problema.

Incógnita		nº de incógnitas
pressão	$P_p = P_p(x, y, z, t)$	$N_p + 1$
saturação	$S_p = S_p(x, y, z, t)$	$N_p + 1$
fração molar da fase	$x_{ip} = x_{ip}(x, y, z, t)$	$N_c N_p$
TOTAL		$(N_c + 2)N_p + 2$

Equação		nº de equações
balanço de massa	eq. (46) e (47)	$N_c + 1$
relações de capilaridade	eq. (61)	N_p
equilíbrio de fases	eq. (65)	$N_c(N_p - 1)$
restrição das saturações	eq. (64)	1
restrição das frações molares	eq. (62) e (63)	N_p
TOTAL		$(N_c + 2)N_p + 2$

3.2 Condições de contorno

As equações (46) e (47) necessitam de condições de contorno para serem propriamente resolvidas. Em simulação de reservatórios, é geralmente assumido que as fronteiras do reservatório possuem fluxo nulo. Isto significa que é necessária a discretização dos fluxos apenas nas faces internas.

Embora não sejam propriamente condições de contorno, os termos fonte \tilde{q}_i e \tilde{q}_w das equações de conservação incorporam as condições de contorno associadas aos poços injetores e produtores. São estes termos que perturbam as condições iniciais do sistema e fazem com que a modelagem seja necessária. Poços injetores têm como objetivo aumentar a pressão através da injeção de um fluido (água ou gás, em geral) para dentro do reservatório. O objetivo é sempre a maximização da produção, que se dá a partir dos poços produtores.

O escoamento no interior dos poços é modelado de forma diferente do escoamento no reservatório, utilizando as equações de *Navier-Stokes* para a conservação da quantidade de movimento. É um escoamento no qual as mudanças ocorrem em uma ordem de tempo muito menor do que o escoamento no reservatório. Neste trabalho o escoamento no interior dos poços não será resolvido, sendo considerada apenas a variação de pressão no poço devido ao campo gravitacional. A solução do escoamento multifásico em poços de petróleo pode ser encontrada em Soprano (2010) e Soprano *et al.* (2012).

Os poços podem possuir condições de pressão prescrita, na qual a pressão em um ponto do poço é fixada (em geral no calcanhar) ao longo de toda a simulação. Se a pressão fixada for maior que a pressão inicial do reservatório, este será um poço injetor, caso contrário, ele será um poço produtor. Também existem os poços de vazão prescrita. Para este tipo de poço, a vazão de alguma das fases é fixada e, dependendo do sinal desta vazão, o poço será injetor ou produtor. Isso tem como resultado uma pressão no poço que irá variar ao longo do tempo, de acordo com as saturações de cada fase no reservatório. As seguintes condições de vazão prescrita são possíveis: vazão total (água + óleo + gás), vazão de líquido (água + óleo), vazão de gás, vazão de óleo e vazão de água.

Também é comum a utilização da combinação de ambas as condições como, por exemplo, prescrever a vazão de água de um poço injetor com

limitação na pressão. Sendo assim, o poço possui inicialmente a condição de vazão de água prescrita e, caso a pressão deste poço ultrapasse a pressão máxima, ele passa a operar com pressão prescrita.

Em geral as equações para $q_i = \tilde{q}_i \Delta V$ e $q_w = \tilde{q}_w \Delta V$ são escritas como

$$q_i = WI \cdot \sum_{p=1}^{N_p} \lambda_p \xi_p x_{ip} (P_p^R - P^W), \quad (66)$$

$$q_w = WI \cdot \lambda_w \xi_w (P_w^R - P^W), \quad (67)$$

onde WI é o *well index*, P_p^R e P_w^R são as pressões de cada fase do volume de controle atravessado pelo poço e P^W é a pressão do poço. Caso o poço seja completado em várias camadas, a pressão P_w do poço em uma camada mais profunda s pode ser calculada a partir da pressão da camada anterior $s - 1$ considerando a variação hidrostática da pressão, isto é,

$$P_s^W = P_{s-1}^W + \frac{(\rho_s^W + \rho_{s-1}^W)}{2} g(z_s - z_{s-1}), \quad (68)$$

com,

$$\rho_s^W = \frac{\sum_{p=1}^{N_p+1} \rho_{p,s} \lambda_{p,s}}{\sum_{p=1}^{N_p+1} \lambda_{p,s}}. \quad (69)$$

O *well index* (WI), presente nas equações (66) e (67), também conhecido como índice de poço, é um coeficiente que tem como objetivo melhor descrever a grande variação de pressão que ocorre quando os fluidos se deslocam do reservatório para o poço, ou vice-versa. O gradiente que surge geralmente não é captado devido ao tamanho das malhas que são utilizadas para a discretização do reservatório em relação ao tamanho do poço. Existem inúmeros modelos que permitem calcular o índice de poço em situações diferentes. Provavelmente, o mais conhecido e utilizado é o modelo de Peaceman (1983), desenvolvido a partir de uma solução analítica de um poço totalmente penetrante. Para as malhas não-estruturadas com formato cartesiano e poços verticais consideradas neste trabalho, utilizou-se o modelo de Peaceman (1983), enquanto que para as malhas não-estruturadas mais complexas, com poços de trajetória arbitrária, fez-se uso do modelo apresentado no trabalho de Hurtado (2011). Este modelo é baseado no trabalho de Aavatsmark & Klausen (2003), o qual apresenta uma forma de calcular o índice de poço independente do

tipo de malha.

Quando os poços estão operando sob a condição de pressão prescrita, tem-se $P_{s=0}^W = \text{cte}$. Se o poço estiver operando a uma condição de vazão prescrita, é necessária a utilização de mais uma equação no sistema para determinar o valor de $P_{s=0}^W$, que agora é uma incógnita do problema. Esta nova equação resulta da condição de conservação da massa ao longo do poço, a qual estabelece que a vazão prescrita na cabeça do poço deve ser igual à soma das vazões ao longo do mesmo. Suponha que a condição de um poço produtor com N_s completações seja de vazão de óleo prescrita nas condições de superfície Q_o^{std} . Então a equação de restrição será dada por

$$Q_o^{\text{std}} = \frac{F_o^{\text{std}}}{\xi_o^{\text{std}}} \sum_{s=0}^{N_s} \left[WI_s \cdot \sum_{p=1}^{N_p} \lambda_{p,s} \xi_{p,s} (P_p^R - P^W)_s \right], \quad (70)$$

onde F_o^{std} e ξ_o^{std} são obtidos a partir de um cálculo de equilíbrio de fases na superfície, com uma composição molar global calculada por

$$z_i = \frac{q_i}{\sum_{j=1}^{N_c} q_j}. \quad (71)$$

A condição de superfície utilizada neste trabalho é de $P = 1 \text{ atm}$ e $T = 15^\circ\text{C}$. Como não existe mistura entre água e as outras fases, para condição de vazão de água prescrita a equação é simplesmente

$$Q_w^{\text{std}} = \frac{1}{\xi_w^{\text{std}}} \sum_{s=0}^{N_s} WI_s \cdot \lambda_{w,s} \xi_{w,s} (P_w^R - P^W)_s. \quad (72)$$

Para o caso de poços injetores, outro detalhe está associado aos termos λ_p e ξ_p . Como será visto mais adiante, a partir do princípio de interpolação *upwind*, ξ_p deve ser calculado com as propriedades do fluido injetado. Já a mobilidade (λ_p) possui algumas formas diferentes para seu cálculo. Uma delas, como apresentado em Cao (2002) e Almehaideb *et al.* (1989), consiste em considerar a mobilidade injetada como o produto da fração volumétrica do fluido injetado (α_p) e a mobilidade total, $\lambda_T = \sum_{p=1}^{N_p+1} \lambda_p$,

$$\lambda_p^{\text{inj}} = \alpha_p \lambda_T. \quad (73)$$

3.2.1 Separadores com múltiplos estágios

Muitas vezes a mistura de fluidos produzida é tratada por meio de um separador com vários estágios, como mostra a figura 7. Neste caso, o fluido produzido é levado a estágios graduais de pressão e temperatura até as condições de estocagem, i.e., condições atmosféricas. Com isso, gás desprende-se da fase óleo e é separado gravitacionalmente a cada estágio. A água também é separada, mas em geral é descartada. O objetivo deste processo é minimizar a quantidade de gás que se desprende do óleo até o processo de armazenamento.

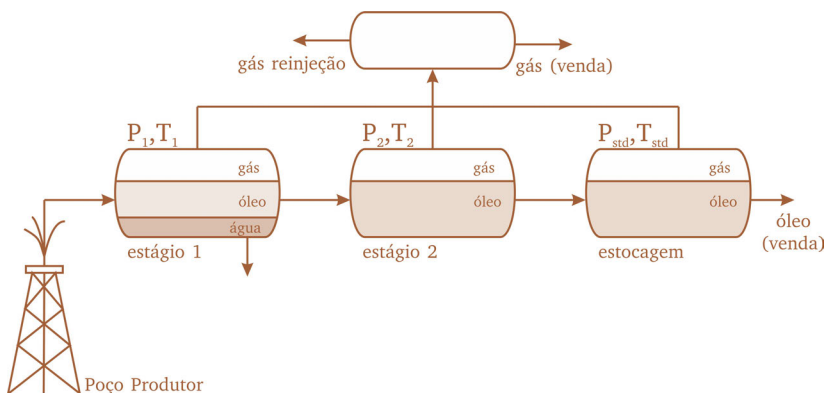


Figura 7 – Esquema de um separador de 3 estágios.

Na simulação de um separador, as frações de gás e óleo que surgem a cada estágio são resultantes dos cálculos de *flash*, sempre assumindo uma composição global do sistema conhecida na entrada do separador. Para o caso da figura 7, tem-se um separador de 3 estágios. O fluido produzido entra no estágio 1, no qual uma parcela de gás irá se desprender do óleo. O óleo remanescente é levado ao segundo estágio, a uma pressão e temperatura menores que as anteriores e, novamente, o gás irá se desprender. Após o estágio 2, o óleo é levado às condições de estocagem e a última separação é feita. Apenas no primeiro estágio, a composição global é calculada através da eq. (71). Nos estágios subsequentes, a composição global de entrada é, na verdade, a composição do óleo. Esta composição é resultado da rotina de *flash* feita no estágio anterior.

No separador da figura 7, tem-se

$$P_1 \geq P_2 \geq P_{\text{std}},$$

$$T_1 \geq T_2 \geq T_{\text{std}},$$

sendo que a condição acima também é válida para os casos de separadores com múltiplos estágios. O gás separado é armazenado e, dependendo das condições do reservatório, pode ser vendido ou reinjetado. Se a vazão prescrita for ao final do separador ($Q_o = 50 \text{ m}^3/\text{d}$, por exemplo) deve-se resolver cada estágio através da rotina de *flash* e fazer com que a vazão calculada na saída do separador seja igual à vazão prescrita. A vazão calculada irá depender diretamente da pressão do calcanhar, $P_{s=0}^W$, que é uma das incógnitas para o caso de poços de vazão prescrita.

Formulação Numérica

Neste capítulo serão apresentados todos os procedimentos numéricos utilizados para resolver desde a solução do equilíbrio de fases até a solução das equações de conservação. Devido à característica fortemente não-linear da maioria das equações, o método de *Newton-Raphson* (EDWARDS, 1994) foi amplamente utilizado para linearização do problema. O método de *Newton-Raphson* foi inicialmente desenvolvido para o caso de funções escalares de apenas uma variável, mas foi estendido para casos mais gerais com funções vetoriais de várias variáveis. Dada uma função $\vec{f} : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ não linear, sua expansão em Série de Taylor em um ponto \vec{x}_0 é

$$\vec{f}(\vec{x}_0 + \Delta\vec{x}) = \vec{f}(\vec{x}_0) + \mathbf{J}(\vec{x}_0) \cdot \Delta\vec{x} + o(\|\Delta\vec{x}\|^2), \quad (74)$$

em que $\mathbf{J}(\vec{x}_0)$ é a matriz Jacobiana da função no ponto \vec{x}_0 . Desprezando os termos de ordem superior ($o(\|\Delta\vec{x}\|^2)$) a equação torna-se

$$\vec{f}(\vec{x}_0 + \Delta\vec{x}) = \vec{f}(\vec{x}_0) + \mathbf{J}(\vec{x}_0) \cdot \Delta\vec{x}. \quad (75)$$

Como o objetivo é obter a solução de $\vec{f}(\vec{x}) = 0$, então deve ser estabelecido que,

$$\begin{aligned} \vec{f}(\vec{x}_0 + \Delta\vec{x}) &= 0, \\ \mathbf{J}(\vec{x}_0) \cdot \Delta\vec{x} &= -\vec{f}(\vec{x}_0). \end{aligned} \quad (76)$$

Desta forma, em princípio, é possível obter uma solução para a equação vetorial $\vec{f}(\vec{x}) = 0$ resolvendo o sistema linear da eq. (76). Contudo, sabe-se que, com a eliminação dos termos de ordem superior da expansão em Série de Taylor, o ponto $\vec{x} = \vec{x}_0 + \Delta\vec{x}$ não é necessariamente a raiz da equação. Mas empregando um processo iterativo em que

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k - \mathbf{J}^{-1}(\vec{x}_k)\vec{f}(\vec{x}_k), \quad (77)$$

é possível mostrar que, sob certas condições, a sequência de pontos \vec{x}_k converge para a raiz do sistema (LUCIANETTI, 2000). Portanto a eq. (77) fornece um algoritmo de solução para o problema. A grande dificuldade deste método está associada ao cálculo da matriz Jacobiana (\mathbf{J}), também chamada de matriz tangente, pois ela é composta por derivadas das incógnitas do problema. Além do método não garantir convergência para todos os casos, qualquer erro nestas derivadas pode acarretar em divergência do método.

A fim de evitar erros com cálculos analíticos, foi utilizado um procedimento de aproximação numérica das derivadas. A coluna i da matriz Jacobiana (\vec{J}_i) é aproximada pela seguinte fórmula (BALAY *et al.*, 2008),

$$\vec{J}_i \approx \frac{\vec{f}(\vec{x} + h\Delta\vec{x}_i) - \vec{f}(\vec{x})}{h}, \quad (78)$$

onde,

$$h = \begin{cases} \epsilon_{\text{rel}}x_i, & \text{se } |x_i| > x_{\text{min}}, \\ \epsilon_{\text{rel}}x_{\text{min}} \frac{x_i}{|x_i|}, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

O vetor $\Delta\vec{x}_i$ é o vetor com componentes iguais a 1 onde a coluna da matriz possui valor, ϵ_{rel} é o valor relativo do incremento. Desta forma, a matriz Jacobiana é calculada numericamente apenas informando a função resíduo \vec{f} . Este procedimento torna o cálculo da matriz Jacobiana bastante lento, sendo um gargalo em problemas com muitas incógnitas. Para aumentar a eficiência do cálculo, um procedimento conhecido como *matrix coloring* (GEBREMEDHIN *et al.*, 2005) é utilizado. Ele consiste em um agrupamento de colunas mutuamente ortogonais da matriz, reduzindo o número de cálculos da função resíduo. Este procedimento é descrito no apêndice C.

Com o problema do cálculo da matriz Jacobiana, para os fins deste

trabalho, resolvido, torna-se necessário apenas estudar e modelar a função \vec{f} , composta pelas equações que governam o problema no formato residual. Para as equações de conservação, a função resíduo aparece após a discretização das equações. A discretização é feita utilizando o Método dos Volumes Finitos baseado em Elementos (EbFVM).

O sistema linear da eq. (76) é resolvido através do método GMRES com condicionamento por fatoração LU incompleta (ILU). Os procedimentos de solução dos sistemas lineares estão implementados na biblioteca PETSc (BALAY *et al.*, 2009), enquanto que a descrição dos métodos de condicionamento e solução de sistemas lineares pode ser encontrada em Saad (2000).

4.1 Rotina de flash

Como apresentado no capítulo 2, a rotina de *flash* consiste na solução de um conjunto de equações não-lineares, a eq. (30) para $i = 1, \dots, N_c$ e a eq. (38). Existem dois procedimentos tradicionais para a solução destas equações, utilizando o método de *substituições sucessivas* ou através do método de *Newton-Raphson*.

4.1.1 Substituições sucessivas

O procedimento para o método de *substituições sucessivas* é baseado nas relações para o coeficiente de fugacidade $\phi_{iL} = \frac{f_{iL}}{x_{iL}P}$ e $\phi_{iV} = \frac{f_{iV}}{x_{iV}P}$. A razão entre eles é dada por

$$\frac{\phi_{iL}}{\phi_{iV}} = \frac{f_{iL}}{f_{iV}} \frac{x_{iV}}{x_{iL}}. \quad (79)$$

Como $K_i = \frac{x_{iV}}{x_{iL}}$ e no equilíbrio, $f_{iL} = f_{iV}$, então

$$\frac{\phi_{iL}}{\phi_{iV}} = \frac{x_{iV}}{x_{iL}} = K_i,$$

portanto a eq. (79) define a seguinte relação iterativa

$$K_i^{n+1} = K_i^n \frac{f_{iL}^n}{f_{iV}^n}. \quad (80)$$

Desta forma, o cálculo de *flash* bifásico pode ser resolvido pelo seguinte procedimento:

1. Estimar os valores para K_i , utilizando a eq. (40) ou a estimativa resultante do cálculo de estabilidade;
2. Resolver a eq. (38), através do método de *Newton-Raphson* unidimensional, considerando F_V como incógnita;
3. Calcular x_{iL} e x_{iV} através das expressões da eq. (39);
4. Calcular as fugacidades de cada fase para cada componente, f_{iL} e f_{iV} , eq. (26);
5. Verificar se a solução está convergida, i.e., $|f_{iL} - f_{iV}| < \epsilon$. Em caso positivo, finalizar o procedimento;
6. Atualizar os valores de K_i com a eq. (80);
7. Retornar ao passo 2, até atingir convergência.

4.1.2 Método de Newton

A solução da rotina de *flash* através do método de *Newton* consiste em resolver as equações (30) e (38) apresentadas anteriormente que serão repetidas aqui no formato residual,

$$R_{f_i} = f_{iL} - f_{iV}, \text{ para } i = 1 \dots N_c, \quad (81)$$

$$R_m = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i(K_i - 1)}{1 + F_V(K_i - 1)}. \quad (82)$$

As incógnitas deste problema são os coeficientes de equilíbrio K_i e a fração molar de vapor F_V . O objetivo é determinar a solução de

$$\vec{R} = \begin{bmatrix} R_{f_i} \\ R_m \end{bmatrix} = 0,$$

para $\vec{x} = [K_i \ F_V]^T$. Este é um sistema de $N_c + 1$ variáveis que pode ser resolvido rapidamente através da aproximação da matriz Jacobiana apresentada anteriormente, eq. (78). Depois de obtida a solução, as

saturações de óleo e de gás podem ser obtidas a partir de

$$S_o = \frac{1 - S_w}{1 + \frac{Z_V}{Z_L} \left(\frac{1}{F_L} - 1 \right)}, \quad (83)$$

$$S_g = 1 - S_o - S_w, \quad (84)$$

onde $F_L = 1 - F_V$, para $0 < F_V < 1$. Se $F_V < 0$ ou $F_V > 1$, então os hidrocarbonetos estão apenas em uma fase e as saturações são calculadas diretamente por $S_o = 1 - S_w$, caso exista apenas óleo ou $S_g = 1 - S_w$, caso exista apenas gás.

Como levantado por Chen *et al.* (2006a), o método de substituições sucessivas é mais fácil de implementar e é mais confiável, até mesmo próximo de pontos críticos. Entretanto, sua convergência é mais lenta em geral e podem ser necessárias muitas iterações até alcançar a precisão desejada. Já o método de *Newton-Raphson* é mais rápido, porém é necessário uma boa estimativa inicial das incógnitas a fim de evitar divergência. Mesmo assim, o método pode divergir próximo a pontos críticos.

No presente trabalho, a rotina de *flash* é resolvida através de um procedimento misto entre substituições sucessivas e método de *Newton-Raphson*. Inicialmente, o método de substituições sucessivas é utilizado fazendo apenas algumas iterações. O objetivo é obter uma melhor aproximação das incógnitas que serão utilizadas no método de *Newton-Raphson*, já que este depende fortemente da solução inicial. Este procedimento garante maior robustez ao método de *Newton-Raphson* para a solução da rotina de *flash*. Além disso, caso o método de *Newton-Raphson* não consiga convergir, o problema é reiniciado e resolvido através de substituições sucessivas.

4.2 Teste de estabilidade

Uma das maiores dificuldades nos cálculos de equilíbrio de fases é determinar se uma mistura irá de fato formar duas ou mais fases a uma dada pressão e temperatura. A metodologia vista no capítulo 2, em que o teste de estabilidade é interpretado graficamente a partir do plano tangente sobre a função energia de *Gibbs*, não é um procedimento de fácil implementação computacional. Em Michelsen (1982a) é apresentado um critério prático que determina se a mistura irá ou não permanecer

monofásica ou se separar em mais de uma fase. O algoritmo resultante é similar a um cálculo de *flash*, porém é mais rápido e robusto (JOHNS, 2004), já que boas estimativas para K_i não são necessárias. A eq. (40), por exemplo, já é suficiente para calcular os valores iniciais de K_i .

Em resumo, o critério consiste em avaliar os valores da função definida por

$$F(x_1, \dots, x_{N_c}) = \sum_{i=1}^{N_c} x_i [\mu_i(x_1, \dots, x_{N_c}) - \mu_i(z_1, \dots, z_{N_c})],$$

a qual mede a diferença entre o plano tangente de energia de *Gibbs* a uma composição original z_i com relação à energia de *Gibbs* em uma nova composição x_i (figura 8). O objetivo é determinar se a mistura com composição z_i é estável. O sistema será estável se $F(x_1, \dots, x_{N_c}) \geq 0$ para todas as composições x_i .

Considere uma mistura binária com energia de *Gibbs* representada pelo gráfico da figura 8. Para não ter que varrer todos os valores de x a fim de determinar se $F(x) \geq 0$ para alguma nova composição x , pode-se utilizar um procedimento gráfico. Ele consiste em "passar uma régua" no gráfico para determinar a tangente da curva $G - G_{\text{ref}}$ no ponto z (figura 8). Em seguida, procura-se encontrar outros pontos no gráfico

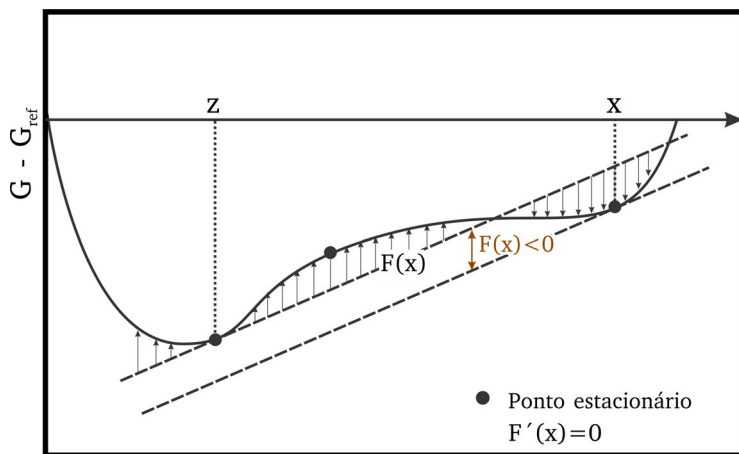


Figura 8 – Representação gráfica da energia de *Gibbs* e da função F com seus pontos estacionários.

no qual a "régua" tangencia a curva e é, ao mesmo tempo, paralela à tangente em z . Se existir um ponto com estas propriedades e a distância entre essas retas for menor que zero, então $F(x) < 0$ e o sistema é instável. Este procedimento gráfico é equivalente a avaliar a distância dos planos tangentes entre a composição inicial z e uma nova composição x nos pontos estacionários¹. A explicação detalhada e dedução teórica do método pode ser encontrada em Michelsen (1982a).

O problema também pode ser escrito em função do cálculo de fugacidades. Desta forma, o algoritmo tem como objetivo encontrar a composição de uma fase secundária com fugacidade igual à fugacidade de mistura, $f_{i,z}$, vezes uma constante. O procedimento é realizado em duas etapas. Primeiro assumindo que a segunda fase possui características de vapor e, em seguida, realizando outro teste assumindo uma segunda fase com características de líquido. Após obter esta solução, os resultados são avaliados para determinar se o sistema é estável ou não.

De forma mais detalhada, o objetivo é resolver a seguinte equação

$$f_{i,z} - f_{i,x_p} S_P = 0, \quad (85)$$

com $f_{i,z} = f_i(P, z_1, z_2, \dots, z_{N_c})$ e $f_{i,x_p} = f_i(P, x_{1P}, x_{2P}, \dots, x_{N_cP})$ avaliados através da eq. (26) e $P = L, V$. Para o caso de uma fase secundária vapor V , x_{iV} é dado por

$$x_{iV} = \frac{1}{S_V} (K_{iV} z_i), \quad (86)$$

com,

$$S_V = \sum_i^{N_c} K_{iV} z_i, \quad (87)$$

e, quando a fase secundária for líquida ($P = L$),

$$x_{iL} = \frac{1}{S_L} \left(\frac{z_i}{K_{iL}} \right), \quad (88)$$

¹Em matemática, um *ponto estacionário*, também chamado de *ponto crítico* é um ponto no domínio de uma função onde a primeira derivada é nula. Os pontos estacionários serão sempre pontos de máximos ou mínimos relativos ou pontos de inflexão, podendo-se descobrir em que categoria o ponto cai analisando a sua segunda derivada (a curvatura) da função.

com,

$$S_L = \sum_i^{N_c} \frac{z_i}{K_{iL}}. \quad (89)$$

O problema tem como incógnitas K_{iV} e K_{iL} para as fases vapor e líquido, respectivamente. A estimativa inicial destas incógnitas é obtida através da eq. (40). Com a solução do problema para as fases líquido e vapor, o sistema é instável se $S_V > 1$ ou $S_L > 1$. Em caso de um sistema instável, a estimativa de K_i é calculada por

$$K_i = K_{iV}K_{iL}, \quad (90)$$

o qual é um bom valor inicial para a rotina de *flash*. Na tabela 3 são mostradas as situações em que o sistema é instável ou estável, de acordo com os valores de S_V e S_L . Os casos de obtenção da solução trivial ($K_{iV} \rightarrow 1$ ou $K_{iL} \rightarrow 1$) também são mostrados nesta tabela.

Tabela 3 – Condições para determinação de estabilidade

Sistema	Vapor (K_{iV}, S_V)	Líquido (K_{iL}, S_L)
Estável	Sol. trivial	Sol. trivial
	$S_V \leq 1$	Sol. trivial
	Sol. trivial $S_V \leq 1$	$S_L \leq 1$ $S_L \leq 1$
Instável	$S_V > 1$	Sol. trivial
	Sol. trivial	$S_L > 1$
	$S_V > 1$	$S_L > 1$
	$S_V > 1$	$S_L \leq 1$
	$S_V \leq 1$	$S_L > 1$

Nas subseções seguintes serão expostos os algoritmos que permitem resolver a eq. (85).

4.2.1 Substituições sucessivas

O teste de estabilidade é resolvido em duas etapas, mudando apenas as equações que são utilizadas ($P = V$ e $P = L$). O procedimento é:

1. Calcular a fugacidade f_{z_i} , eq. (26);
2. Estimar os valores para K_{iV} ou K_{iL} , utilizando a eq. (40);
3. Calcular S_V pela eq. (87) ou S_L pela eq. (89);
4. Calcular x_{iV} pela eq. (86) ou x_{iL} pela eq. (88);
5. Calcular a fugacidade f_{i,x_p} , eq. (26);
6. Verificar se a solução está convergida, i.e., $|f_{i,z} - f_{i,x_p} S_P| < \epsilon$, para $P = V$ ou $P = L$. Em caso positivo, finalizar o procedimento.
7. Atualizar os valores de K_i através da expressão

$$K_{iV}^{n+1} = K_{iV}^n \left(\frac{f_{i,z}}{f_{i,x_V} S_V} \right), \quad (91)$$

se a fase secundária for vapor e,

$$K_{iL}^{n+1} = K_{iL}^n \left(\frac{f_{i,x_L} S_L}{f_{i,z}} \right), \quad (92)$$

quando a fase secundária for líquido;

8. Retornar ao passo 3, até atingir convergência;
9. Após os testes para vapor (V) e líquido (L) terem sido feitos, verificar estabilidade a partir da tabela 3.

4.2.2 Método de Newton

A solução através do método de *Newton-Raphson* consiste em resolver a eq. (85), considerando como incógnitas os coeficientes de equilíbrio K_{iP} . A matriz Jacobiana é calculada pelo procedimento visto anteriormente, a partir da eq. (78). O processo é bastante parecido com a solução da rotina de *flash*, mas o sistema possui uma incógnita e uma equação a menos, pois resolve-se apenas as equações para a fugacidade de cada componente. Neste caso, a função resíduo é

$$\vec{R} = [R_{f_iP}] = 0,$$

onde $R_{f_iP} = f_{i,z} - f_{i,x_p} S_P$, para $i = 1, \dots, N_c$, e o vetor de incógnitas é, por sua vez,

$$\vec{x} = [K_{iP}],$$

No presente trabalho, o teste de estabilidade também é resolvido através de um procedimento misto entre substituições sucessivas e método de *Newton-Raphson* por um procedimento análogo ao processo de solução da rotina de *flash*.

4.3 Discretização das equações de conservação

Para discretizar as equações (46) e (47), fez-se uso de um método de volumes finitos com formulação para malhas não-estruturadas, conhecido como Método dos Volumes Finitos baseado em Elementos (*Element-based Finite Volume Method - Ebfvm*). Conforme já comentado, os detalhes do método não serão descritos neste trabalho, que procurou apenas fazer uso da biblioteca EFVLib (MALISKA *et al.*, 2008, 2009, 2010, 2011) desenvolvida no laboratório SINMEC. Esta biblioteca fornece todas as ferramentas necessárias para trabalhar com o Ebfvm em malhas 2D e 3D. Para uma revisão detalhada do Ebfvm, sugere-se uma consulta ao trabalho de Hurtado (2011).

O Ebfvm é um método *cell-vertex* que utiliza o conceito de elementos para construir os volumes de controle. Para a malha de elementos da figura 9, as faces de cada volume de controle são construídas através da

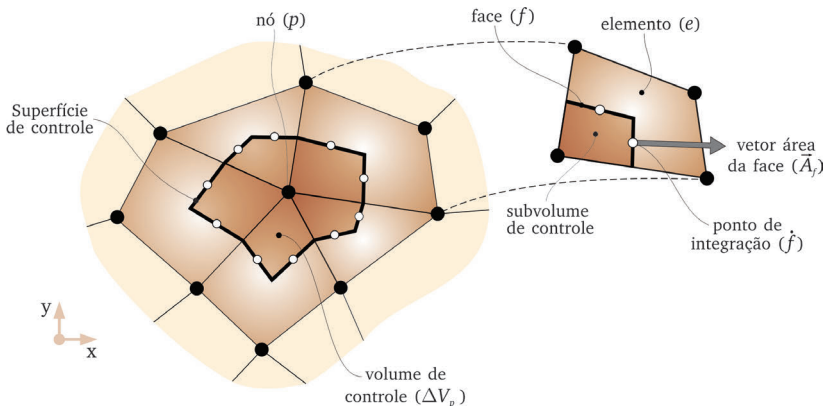


Figura 9 – Construção do volume de controle a partir de uma malha não-estruturada e suas respectivas entidades.

união dos pontos definidos pelo centro de cada elemento e pelo centro de cada uma das faces deste elemento. Portanto, em cada elemento existirão

subvolumes de controle que irão formar um volume de controle para cada nó da malha.

A construção dos volumes de controle a partir dos elementos possibilita que propriedades físicas sejam armazenadas para cada elemento. Sendo assim, para estas propriedades não é necessário o uso de técnicas de interpolação para avaliar o valor da propriedade na face do volume de controle (MALISKA, 2004), já que o valor da propriedade será o mesmo em qualquer ponto do elemento.

Considerando o volume de controle mostrado na figura 9, as equações (46) e (47) podem ser discretizadas, respectivamente, como

$$\frac{V\phi\xi_w S_w - (V\phi\xi_w S_w)^{\text{old}}}{\Delta t} - \sum_f (\xi_w \lambda_w \mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_w \cdot \vec{A})_f - \xi_w Q_w = 0, \quad (93)$$

$$\begin{aligned} & \frac{V\phi(x_{io}\xi_o S_o + x_{ig}\xi_g S_g) - [V\phi(x_{io}\xi_o S_o + x_{ig}\xi_g S_g)]^{\text{old}}}{\Delta t} \\ & - \sum_f (x_{io}\xi_o \lambda_o \mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_o \cdot \vec{A} + x_{ig}\xi_g \lambda_g \mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_g \cdot \vec{A})_f \\ & - (x_{io}\xi_o Q_o + x_{ig}\xi_g Q_g) = 0. \end{aligned} \quad (94)$$

Embora a figura 9 se refira a um problema 2D, as equações discretizadas tem a mesma forma para um problema 3D. O somatório que aparece nas equações está associado ao cálculo dos fluxos nas faces do volume de controle.

O termo

$$\mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_p \cdot \vec{A}$$

precisa ser aproximado numericamente. Esta aproximação é feita a partir do uso de funções de forma, que dependem de cada tipo de elemento. A explicação dos tipos de funções de formas e suas derivadas podem ser vistas em Hurtado (2011). De maneira geral, o termo $\mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_p \cdot \vec{A}$ é aproximado por

$$\mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_p \cdot \vec{A} \Big|_f = \mathbf{K} \mathbf{J}_t^{-T} \mathbf{D}^T \vec{\Phi}_p^e \cdot \vec{A} \Big|_f. \quad (95)$$

A eq. (95) resulta em um valor escalar que corresponde ao termo de fluxo na face do volume de controle. A matriz \mathbf{J}_t é a matriz Jacobiana da trans-

formação de coordenadas e \mathbf{D} é a matriz derivada das funções de forma em relação às coordenadas locais (ξ, η, ζ) . Estas duas matrizes dependem apenas da geometria e dos elementos da malha, portanto são calculadas apenas uma única vez e armazenadas no início de cada simulação. O vetor $\vec{\Phi}_p^e$ é o vetor cujas componentes são os valores de Φ_p nos nós do elemento que contém a face f ,

$$\vec{\Phi}_p^e = \begin{bmatrix} \Phi_{1p} \\ \vdots \\ \Phi_{N_n p} \end{bmatrix}, \quad (96)$$

onde N_n é o número de nós do elemento. O vetor \vec{A} é o vetor área da face, i.e., o vetor normal à face do volume de controle (figura 9). A matriz \mathbf{K} é o tensor permeabilidade absoluta,

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{pmatrix}, \quad (97)$$

podendo ser um tensor cheio em problemas anisotrópicos. Note que ele pode ser diferente para cada elemento, possibilitando desta forma, a solução em um meio heterogêneo.

Como todas as variáveis do problema são armazenadas nos nós dos elementos, torna-se necessário definir uma forma de interpolar as variáveis avaliadas nas faces do volume de controle, mais precisamente os termos $\xi_w \lambda_w$, $x_{io} \xi_o \lambda_o$ e $x_{ig} \xi_g \lambda_g$. A interpolação é feita através de um esquema *upwind* (PATANKAR, 1980). Considerando uma propriedade de uma fase p avaliada na face de um volume de controle $(\beta_p|_f)$, a interpolação *upwind* é dada por

$$\beta_p|_f = \begin{cases} \beta_{nB(f)p}, & \text{se } \mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_p \cdot \vec{A}|_f > 0, \\ \beta_{nF(f)p}, & \text{se } \mathbf{K} \vec{\nabla} \Phi_p \cdot \vec{A}|_f \leq 0, \end{cases} \quad (98)$$

onde o subíndice $nB(f)$ representa o nó do elemento que está atrás da face e $nF(f)$ que está a frente da face, utilizando como referência o vetor área da face (\vec{A}_f) , como mostrado na figura 10. Esta interpolação evita problemas com soluções não físicas que podem surgir com o refino de malha em certos casos (AZIZ & SETTARI, 1979). Por ser um esquema

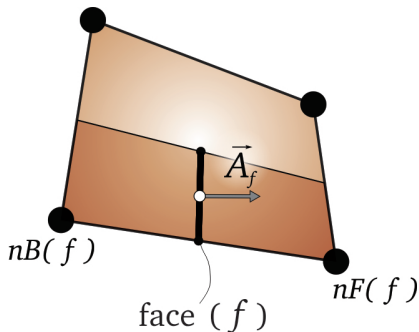


Figura 10 – Nós à frente e atrás de uma face f do elemento.

baseado na física do escoamento, é bastante robusto e adequado para simulação em reservatórios. Todavia, um dos pontos negativos deste método de interpolação está relacionado ao efeito de orientação da malha (HURTADO *et al.*, 2007; HURTADO, 2005).

Os termos fonte das equações, $(x_{io}\xi_oQ_o + x_{ig}\xi_gQ_g)$ e (ξ_wQ_w) , quando comparados com as equações (66) e (67), estão relacionados por

$$q_i = x_{io}\xi_oQ_o + x_{ig}\xi_gQ_g, \quad (99)$$

$$q_w = \xi_wQ_w. \quad (100)$$

Definindo $n_w = V\phi\xi_wS_w$ e $n_i = V\phi(x_{io}\xi_oS_o + x_{ig}\xi_gS_g)$, note que estes termos correspondem ao número de mols dos componentes água e hidrocarboneto i , respectivamente. Utilizando o conceito de transmissibilidade $\mathbf{T} = \mathbf{K}\mathbf{J}_t^{-\mathbf{T}}\mathbf{D}^{\mathbf{T}}$, as equações (93) e (94) podem ser reescritas como

$$R_w = \frac{n_w - n_w^{\text{old}}}{\Delta t} - \sum_f (\xi_w\lambda_w\mathbf{T}\vec{\Phi}_w^e \cdot \vec{A})_f - q_w = 0, \quad (101)$$

$$R_i = \frac{n_i - n_i^{\text{old}}}{\Delta t} - \sum_f \sum_p (x_{ip}\xi_p\lambda_p\mathbf{T}\vec{\Phi}_p^e \cdot \vec{A})_f - q_i = 0. \quad (102)$$

Também é possível utilizar, ao invés de R_w , o somatório das equações de resíduo da conservação do número de mols

$$R_T = R_w + \sum_{i=1}^{N_c} R_i. \quad (103)$$

Reescrevendo a equação de restrição das fugacidades na forma residual, eq. (65), tem-se

$$R_{f_i} = f_{i_o} - f_{i_g} = 0. \quad (104)$$

No EbFVM, uma das formas de construir os termos de fluxo das equações consiste em visitar todos elementos da malha, percorrer cada face deste elemento e adicionar os fluxos na equação de cada nó associado a esta face. Isso evita cálculos redundantes dos termos de fluxo, já que o fluxo que entra em um volume de controle é o mesmo fluxo que sai do volume de controle adjacente. Para os termos fonte e de acumulação isso não ocorre já que estes termos dependem apenas das variáveis do próprio nó (com exceção da porosidade).

O procedimento ilustrado abaixo mostra a sequência de iterações que são realizadas para o cálculo dos termos de fluxo das equações de conservação:

1. Percorrer todos os elementos da malha;
2. Percorrer todas as faces do elemento e ;
3. Avaliar o termo de fluxo na face f , eq. (95);
4. Avaliar as propriedades através da interpolação *upwind*, eq. (98);
5. Avaliar o fluxo na face;
6. Adicionar o fluxo nos respectivos volumes de controle, i.e., em $nB(f)$ e $nF(f)$;

4.4 Método de solução das equações

As equações (101) e (102) são construídas para cada um dos nós da malha, com $i = 1, \dots, N_c$. Se o número de nós da malha é N , essas equações formam um conjunto de $(N_c + 1)N$ equações e, juntamente com a eq. (104), tem-se mais $N_c N$ equações. A escolha das incógnitas para o modelo composicional deste trabalho é baseada no trabalho de Coats (1980), também conhecida como escolha das variáveis naturais do problema (modelo do *tipo 2*, de acordo com a tabela 1), já que são as variáveis que surgem explicitamente nas equações de conservação. Para um volume de controle que possua todas as fases (água, óleo e gás) as

incógnitas são

$$P, S_o, S_g, x_{1o}, \dots, x_{(N_c-1)o}, x_{1g}, \dots, x_{(N_c-1)g},$$

e o tamanho do sistema não-linear é $(2N_c + 1)N$. Se o volume de controle possuir apenas óleo (e água, possivelmente), as incógnitas são

$$P, S_o, x_{1o}, \dots, x_{(N_c-1)o},$$

e, se for apenas gás tem-se

$$P, S_g, x_{1g}, \dots, x_{(N_c-1)g},$$

como incógnitas.

Para um volume de controle, os resíduos e incógnitas foram ordenados como mostra a equação abaixo

$$\vec{R} = \begin{bmatrix} R_w \text{ ou } R_T \\ R_{N_c} \\ R_{f_{N_c}} \\ R_1 \\ \vdots \\ R_{N_c-1} \\ R_{f_1} \\ \vdots \\ R_{f_{N_c-1}} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \vec{x} = \begin{bmatrix} P \\ S_o \\ S_g \\ x_{1o} \\ \vdots \\ x_{(N_c-1)o} \\ x_{1g} \\ \vdots \\ x_{(N_c-1)g} \end{bmatrix}. \quad (105)$$

A matriz Jacobiana pode ser construída a partir da eq. (78), porém deve-se aproveitar a esparsidade do problema a fim de aumentar a eficiência do processo. Portanto, é fundamental realizar o agrupamento (*matrix coloring*) citado anteriormente e descrito no apêndice C. A figura 11 mostra um reservatório com dois poços e a estrutura da matriz Jacobiana resultante. Este problema possui $4 \times 4 \times 4$ elementos hexaédricos regulares e 125 nós, mas mesmo assim possui uma quantidade significativa de elementos na matriz, já que existe um grande número de incógnitas por nó.

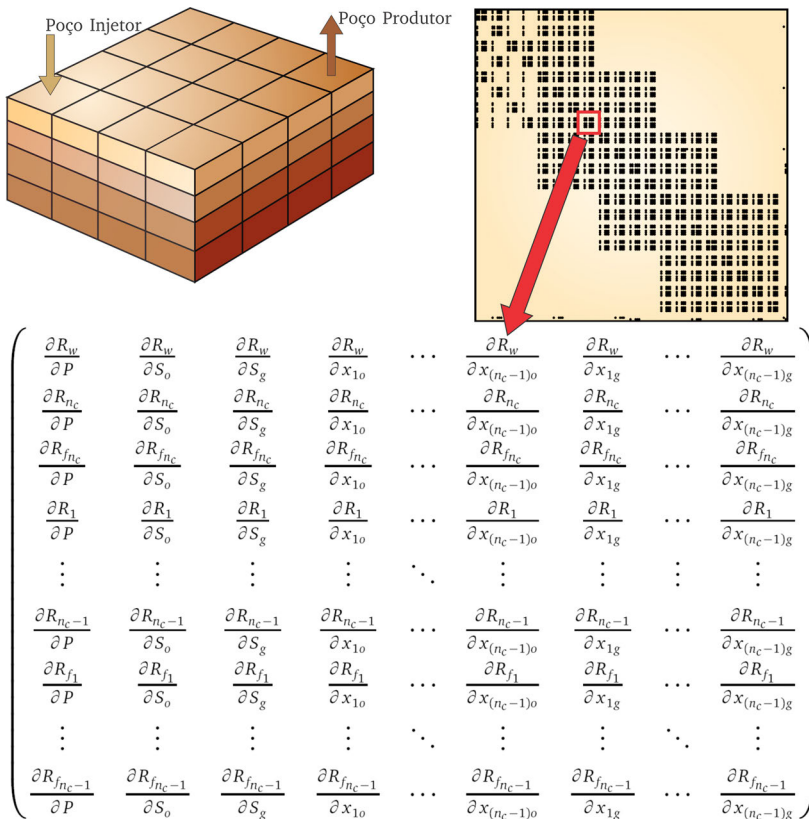


Figura 11 – Estrutura da matriz Jacobiana para uma geometria simples com 2 poços.

4.5 Inicialização

Para a inicialização do reservatório, além de informar a localização e condição de operação dos poços injetores e produtores, também é necessário caracterizar inicialmente os fluidos de reservatório. Para isso, deve-se informar a pressão, temperatura e saturação de água inicial, além da composição global em cada volume de controle. Tendo estabelecido tais condições, torna-se possível determinar as saturações iniciais de óleo e gás. Isso pode ser feito a partir da realização, em cada volume de controle, de um teste de estabilidade seguido de uma rotina de *flash* (caso o resultado do teste seja de um sistema instável). Desta forma,

determinam-se as frações molares de cada componente nas fases óleo e gás, além das saturações de óleo e gás através das equações (83) e (84).

4.6 Controle do passo de tempo

Para o processo de simulação de reservatórios, é importante utilizar alguma forma de controle do passo de tempo a fim de acelerar o processo de solução do problema sem comprometer os resultados.

Neste trabalho, fez-se uso de duas formas de controle do passo de tempo. Primeiramente, caso o método de *Newton-Raphson* não atinja a convergência para um número máximo de iterações, o passo de tempo é reduzido a metade e o processo de solução para o presente passo de tempo é reiniciado. Caso o processo convirja, a solução é aceita, mas faz-se uma verificação da solução para atualizar o passo de tempo. O procedimento é baseado em um controle empírico proposto por Aziz & Settari (1979). Definem-se valores desejados para a variação de pressão e saturação, $\Delta P_{\text{desejado}}$ e $\Delta S_{\text{desejado}}$. Desta forma, novos passos de tempo são calculados para a pressão e saturação

$$\Delta t_P = \Delta t_{\text{old}} \frac{\Delta P_{\text{desejado}}}{\Delta P_{\text{max}}}, \quad (106)$$

$$\Delta t_S = \Delta t_{\text{old}} \frac{\Delta S_{\text{desejado}}}{\Delta S_{\text{max}}}, \quad (107)$$

onde ΔP_{max} é a máxima variação de pressão em todos os volumes de controle e ΔS_{max} é a máxima variação de saturação de todas as fases em todos os volumes de controle. Portanto, o novo passo de tempo é avaliado através de

$$\Delta t = \min(\Delta t_{\text{max}}, \max(\Delta t_{\text{min}}, \min(\Delta t_S, \Delta t_P, 5\Delta t_{\text{old}}))), \quad (108)$$

em que Δt_{max} é o passo de tempo máximo permitido e Δt_{min} é o passo de tempo mínimo permitido durante a simulação. O controle do passo de tempo também poderia ser feito sobre as variáveis de fração molar de cada fase. Todavia, neste trabalho optou-se por não considerar a influência já que sua variação foi menor que as outras variáveis nos casos testados. A inclusão da fração molar no controle do passo de tempo é direta e segue

o mesmo procedimento aqui apresentado. Na eq. (108), está prevista a possibilidade que o intervalo de tempo aumente no máximo 5 vezes em relação ao passo de tempo anterior.

4.7 Algoritmo geral

Todos os procedimentos apresentados anteriormente devem ser conectados de maneira adequada a fim de produzir resultados consistentes e físicos. Uma das questões fundamentais está relacionada à verificação do desaparecimento ou reaparecimento das fases óleo ou gás, pois isso influencia diretamente nas equações e incógnitas que serão resolvidas.

Suponha um problema que inicialmente contenha apenas a fase óleo. É possível que, durante as iterações de *Newton-Raphson*, em algum volume de controle sejam alcançadas condições em que o fluido se separe em duas fases. Isso faria com que a estrutura da matriz Jacobiana mudasse durante as iterações de *Newton-Raphson*, o que poderia causar vários problemas de convergência. Para evitar essa dificuldade, a verificação do desaparecimento ou reaparecimento de uma fase é feita apenas após ter sido obtida a solução convergida. Caso tenha ocorrido uma mudança de condição, o passo de tempo é reiniciado sob essa nova condição. A figura 12 mostra o diagrama do algoritmo utilizado para a simulação composicional deste trabalho. Neste diagrama estão mostrados os passos para solução do método de *Newton-Raphson*, o procedimento para determinar o desaparecimento/reaparecimento de fases e solução ao longo do tempo.

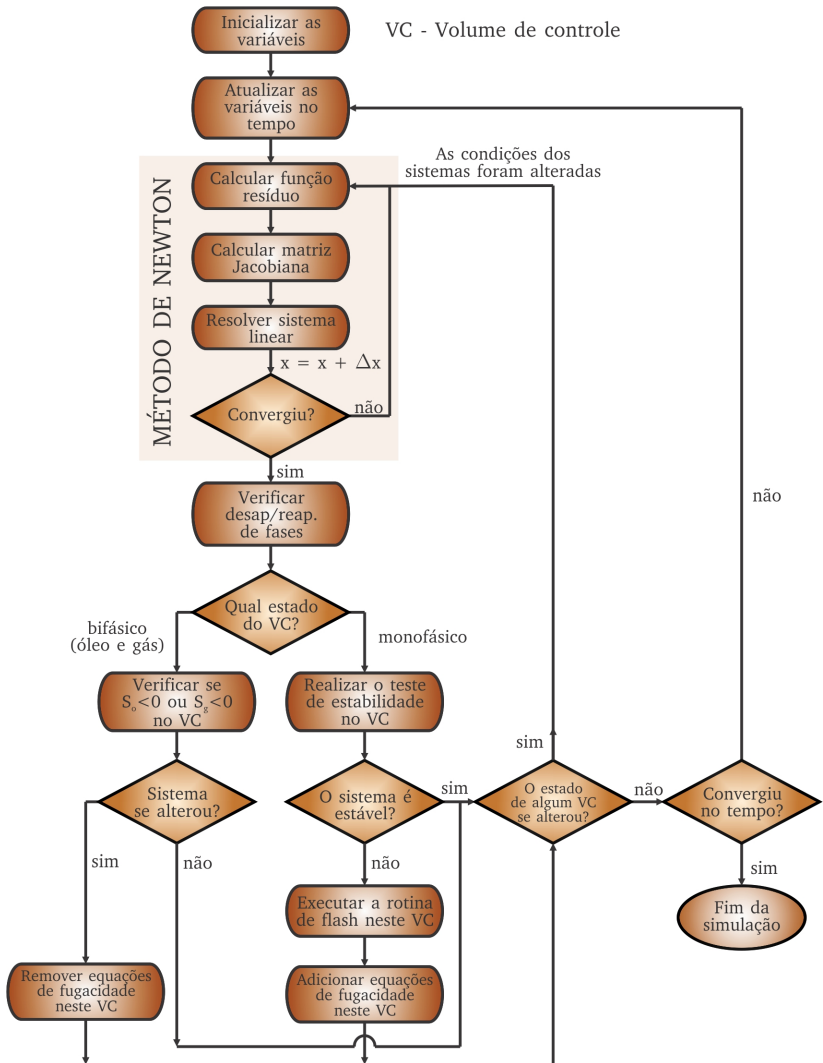


Figura 12 – Diagrama computacional do algoritmo utilizado neste trabalho.

Resultados

Os resultados que serão mostrados doravante correspondem a testes e validações das rotinas e modelos implementados neste trabalho. Primeiramente, faz-se uma validação da rotina de *flash* com um simulador termodinâmico comercial. Em seguida, simulações de diferentes casos com uma quantidade variada de componentes são feitas. Estas são comparadas com simuladores comerciais de reservatórios de petróleo.

Os reservatórios utilizados neste trabalho possuem algumas propriedades em comum, tais como compressibilidade de rocha, porosidade, permeabilidade relativa, etc. A densidade da água adotada foi de $\rho_w = 1009,2 \text{ kg/m}^3$, com compressibilidade (c_w) nula. Por simplicidade, a pressão capilar foi considerada nula, as curvas de permeabilidade relativa são as mesmas para todos os casos e estão apresentadas na tabela 4. A saturação de líquido utilizada nas tabelas de permeabilidade relativa, S_l , é calculada por

$$S_l = 1 - S_g. \quad (109)$$

As permeabilidades relativas das fases água e gás são obtidas diretamente da tabela 4. Já o cálculo da permeabilidade relativa da fase óleo é feito através do modelo de Stone II (STONE, 1973). A expressão para o cálculo de k_{r_o} é dada por

$$k_{r_o} = (k_{r_{ow}} + k_{r_w})(k_{r_l} + k_{r_g}) - (k_{r_w} + k_{r_g}). \quad (110)$$

Tabela 4 – Tabelas de permeabilidade relativa.

S_w	k_{rw}	k_{row}	S_l	k_{rl}	k_{rg}
0,2	0	1	0,2	0	1
0,2899	0,0022	0,6769	0,2899	0	0,56
0,3778	0,018	0,4153	0,3778	0	0,39
0,4667	0,0607	0,2178	0,4667	0,011	0,35
0,5556	0,1138	0,0835	0,5556	0,037	0,2
0,6444	0,2809	0,0123	0,6444	0,0878	0,1
0,7	0,4009	0	0,7	0,1715	0,05
0,7333	0,4855	0	0,7333	0,2963	0,03
0,8222	0,7709	0	0,8222	0,4705	0,01
0,9111	1	0	0,9111	0,88	0,001
1	1	0	1	1	0

Caso a equação acima tenha como resultado $k_{r_o} < 0$, então a fase está imóvel e faz-se $k_{r_o} = 0$.

A porosidade de referência utilizada foi de $\phi^{\text{ref}} = 0,13$ e a compressibilidade da rocha, utilizada na eq. (59), foi $c_R = 5,8 \times 10^{-10} \text{Pa}^{-1}$, com $p^{\text{ref}} = 101,325 \text{kPa}$.

5.1 Validação da rotina de flash

Inicialmente serão validados os métodos implementados para os cálculos da rotina de *flash*. Esta é uma etapa importante do processo de simulação em um modelo composicional, pois ela permite a determinação do reaparecimento de uma fase em um volume de controle, além de permitir determinar as condições iniciais do problema a partir do conhecimento da pressão, temperatura e composição global do sistema.

Esta validação será feita através de comparações com um aplicativo de determinação de propriedades termodinâmicas de fluidos, o WinProp (CMG, 2011c). O fluido original é composto por 22 componentes, com propriedades e características físicas descritas em Kenyon & Behie (1987). Entretanto, fez-se uso de um procedimento bastante comum na área de simulação composicional de reservatórios: a redução do número de componentes do problema a partir de um agrupamento em pseudocomponentes. A partir deste processo, o conjunto resultante adotado consiste em 7 pseudocomponentes e foi gerado por Chen *et al.* (2006a), com as propriedades ajustadas de tal forma que possam representar de maneira adequada o sistema original. O processo de redução do número de componentes através do ajuste das propriedades moleculares usadas na equação de estado não está no escopo deste trabalho e pode ser encontrado em Whitson & Brulé (2000).

As propriedades de cada pseudocomponente são mostradas na tabela 5 e os valores (κ_{ij}) da matriz de interação binária, utilizados na eq. (20), são mostrados na tabela 6. A composição do fluido é mostrada na ta-

Tabela 5 – Propriedades dos componentes.

Comp.	P_c (atm)	T_c (K)	ω	M_i	Ω_a	Ω_b
P_1	45,45	189,2	0,00891	16,38	0,344772	0.063282
P_2	51,29	305,4	0,11352	31,77	0,521974	0.099825
P_3	39,89	395,8	0,17113	50,64	0,514972	0.107479
P_4	31,95	485,1	0,26910	77,78	0,419169	0.093455
P_5	27,91	592,0	0,34196	118,44	0,485943	0.074860
P_6	17,71	697,1	0,51730	193,95	0,570583	0.101206
P_7	12,52	804,4	0,72755	295,30	0,457236	0.077796

abela 7. Os componentes foram agrupados em pseudocomponentes (CHEN *et al.*, 2006B) da seguinte forma: (CH_4, N_2) , (C_2H_6, CO_2) , (C_3H_8, C_4H_{10}) , (C_5H_{12}, C_6H_{14}) , (C_{7+}^1) , (C_{7+}^2) , (C_{7+}^3) , onde os três últimos correspondem a

uma distribuição de hidrocarbonetos pesados com mais de 7 moléculas de carbono.

Tabela 6 – Matriz de interação binária.

Comp.	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6	P_7
P_1	0						
P_2	0,000622	0					
P_3	-0,002471	-0,001540	0				
P_4	0,011418	0,010046	0,002246	0			
P_5	-0,028367	0,010046	0,002246	0	0		
P_6	-0,1	0,010046	0,002246	0	0	0	
P_7	0,206868	0,010046	0,002246	0	0	0	0

Tabela 7 – Composição molar do fluido.

Pseudocomponente	Componentes	z_i
P_1	CH_4, N_2	0,6793
P_2	C_2H_6, CO_2	0,099
P_3	C_3H_8, C_4H_{10}	0,1108
P_4	C_5H_{12}, C_6H_{14}	0,045
P_5	C_{7+}^1	0,05011
P_6	C_{7+}^2	0,0134
P_7	C_{7+}^3	0,00239

Primeiramente, comparam-se as frações molares de cada fase e os coeficientes de equilíbrio para um ponto no gráfico. O ponto escolhido corresponde a $T = 366,5$ K e $P = 15000$ kPa (ponto A, indicado no diagrama da figura 13). A tabela 8 mostra os valores para as frações molares de líquido obtidas através da rotina de *flash* feita neste trabalho e os valores obtidos através do WinProp. Já na tabela 9 tem-se comparações

Tabela 8 – Comparações entre as frações molares do componente na fase líquido (x_{iL}) para $P = 15000$ kPa.

Propriedade	WinProp	Presente trabalho	Diferença
x_{P_1L}	0,41237	0,41272	$3,4 \times 10^{-4}$
x_{P_2L}	0,08802	0,08804	$2,0 \times 10^{-5}$
x_{P_3L}	0,13263	0,13226	$3,7 \times 10^{-4}$
x_{P_4L}	0,07581	0,07578	$3,2 \times 10^{-5}$
x_{P_5L}	0,21340	0,21342	$1,6 \times 10^{-5}$
x_{P_6L}	0,06412	0,06413	$7,2 \times 10^{-6}$
x_{P_7L}	0,01364	0,01366	$1,3 \times 10^{-5}$

similares porém para as frações molares de vapor e, por último, na tabela 10 estão comparados os coeficiente de equilíbrio (K_i). Note uma diferença muito pequena entre os resultados.

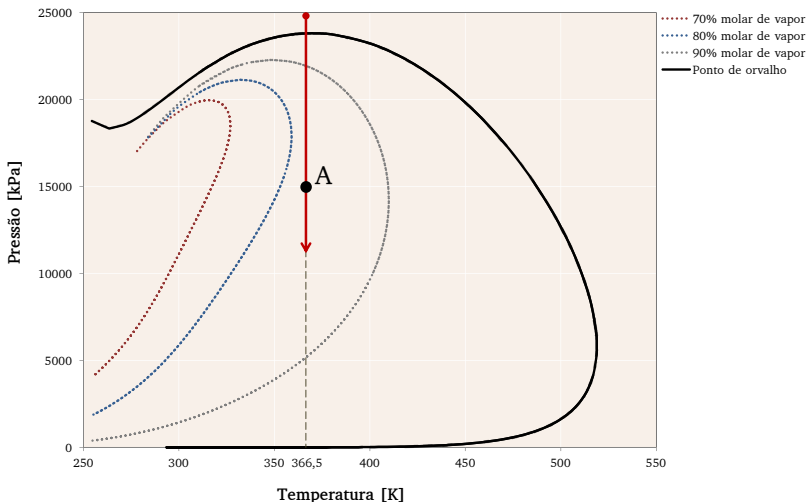


Figura 13 – Diagrama P-T para o fluido com composição dada pela tabela 7.

Tabela 9 – Comparações entre as frações molares do componente na fase vapor (x_{iV}) para $P = 15000$ kPa.

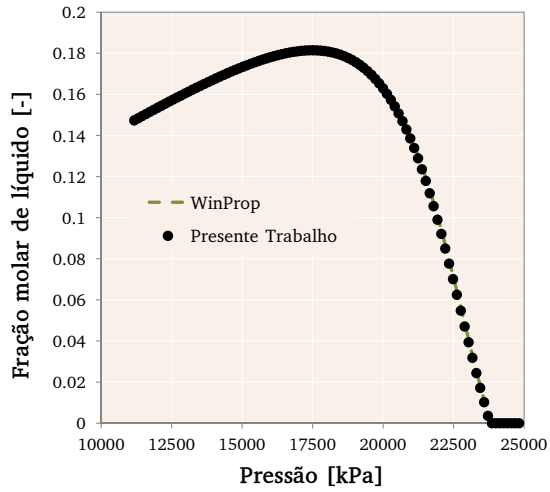
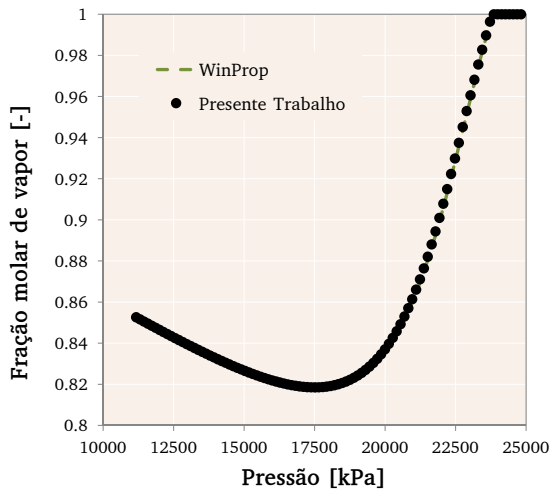
Propriedade	WinProp	Presente trabalho	Diferença
x_{p_1V}	0,73532	0,73518	$1,4 \times 10^{-4}$
x_{p_2V}	0,10131	0,10130	$7,0 \times 10^{-6}$
x_{p_3V}	0,10622	0,10630	$8,3 \times 10^{-5}$
x_{p_4V}	0,03853	0,03855	$1,5 \times 10^{-5}$
x_{p_5V}	0,01584	0,01588	$3,9 \times 10^{-5}$
x_{p_6V}	0,00275	0,00277	$1,2 \times 10^{-5}$
x_{p_7V}	0,00003	0,00003	$2,1 \times 10^{-7}$

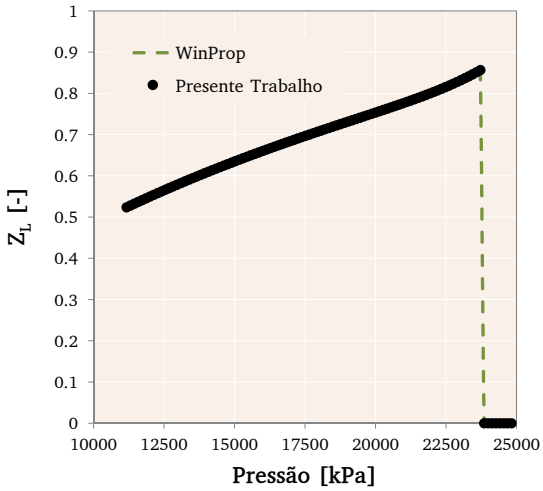
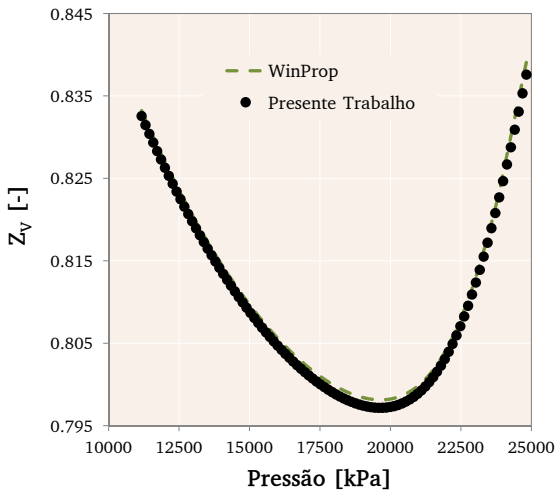
Para uma validação mais completa da rotina de *flash*, fez-se um procedimento que consiste em uma redução de pressão à temperatura constante. O processo é indicado no diagrama P-T mostrado na figura 13 para os 7 pseudocomponentes. O problema ocorre a uma temperatura constante de 366,5 K, com uma pressão inicial de 25 MPa que decresce até aproximadamente 11 MPa. Como pode ser percebido pelo diagrama da figura 13, este é um caso típico de um reservatório de gás retrógrado. Inicialmente, existe apenas a fase gás e a medida que a pressão diminui, óleo começa a aparecer. Entretanto, ao continuar a redução de pressão, a fração molar de óleo começa a diminuir novamente.

Tabela 10 – Comparações entre os coeficientes de equilíbrio (K_i) para $P = 15000$ kPa.

Coeficiente	WinProp	Presente trabalho	Diferença
K_{P_1}	1,78315	1,78132	$1,8 \times 10^{-3}$
K_{P_2}	1,15096	1,15061	$3,5 \times 10^{-4}$
K_{P_3}	0,80089	0,80374	$2,9 \times 10^{-3}$
K_{P_4}	0,50827	0,50869	$4,1 \times 10^{-4}$
K_{P_5}	0,07421	0,07438	$1,8 \times 10^{-4}$
K_{P_6}	0,04295	0,04313	$1,8 \times 10^{-4}$
K_{P_7}	0,00207	0,00209	$1,3 \times 10^{-5}$

Os resultados são mostrados nas figuras 14 e 15. A boa concordância dos resultados sugere que a metodologia utilizada para solução da rotina de *flash* é adequada. Como a rotina de *flash* é apenas um módulo inserido em uma estrutura computacional mais geral (correspondente ao modelo composicional), é importante que a mesma seja resolvida corretamente. A solução das equações de conservação não deve ser influenciada por possíveis erros decorrentes de uma solução de *flash* incorreta.

(a) Fração molar de líquido (F_L).(b) Fração molar de vapor (F_V).**Figura 14** – Comparação dos resultados para a fração molar de cada fase.

(a) Fator de compressibilidade do líquido (Z_L).(b) Fator de compressibilidade do vapor (Z_V).**Figura 15** – Comparação dos resultados para o fator de compressibilidade.

5.2 Validação com o GEM

Nesta seção um problema foi criado e a solução é comparada com a do software comercial GEM (CMG, 2011A). O GEM é um simulador composicional em malhas *corner-point* com uma solução desacoplada das equações de equilíbrio. É um aplicativo bastante robusto e amplamente utilizado na área de simulação de processos de recuperação avançada de petróleo. Trata-se portanto de uma ferramenta útil para validar a solução do modelo composicional estudado neste trabalho.

O problema consiste em um reservatório de óleo com quatro componentes: CH_4 , C_2H_6 , C_4H_{10} e um pseudocomponente FC_7 . As propriedades utilizadas na equação de estado são: pressão crítica (P_c), temperatura crítica (T_c), fator acêntrico (ω) e massa molar (M_i). Os valores destas propriedades para cada componente são dadas na tabela 11. A matriz de interação binária foi considerada nula.

Tabela 11 – Propriedades dos componentes.

Comp.	P_c (atm)	T_c (K)	ω	M_i	Z_c
CH_4	45,40	190,6	0,008	16,04	0,3074
C_2H_6	48,20	305,4	0,098	30,07	0,3074
C_4H_{10}	37,50	425,2	0,193	58,12	0,3074
FC_7	30,97	543,2	0,308	96,00	0,3074

A geometria deste problema é mostrada na figura 16. Trata-se de um reservatório heterogêneo e anisotrópico, com quatro camadas. A saturação inicial de água é $S_w = 0,01$ e a composição inicial dos hidrocarbonetos presentes no reservatório é dada na tabela 12. O reservatório está

Tabela 12 – Composição molar global do fluido.

Componente	z_i
CH_4	0,1
C_2H_6	0,4
C_4H_{10}	0,4
FC_7	0,1

inicialmente a uma pressão de 6894,8 kPa e na temperatura de 366,5 K. A temperatura é considerada constante durante o processo de extração de óleo. Sob estas condições, o diagrama P-T deste fluido é mostrado na figura 17. As curvas deste diagrama correspondem às linhas de fração volumétrica de gás constante. Como é possível perceber no diagrama,

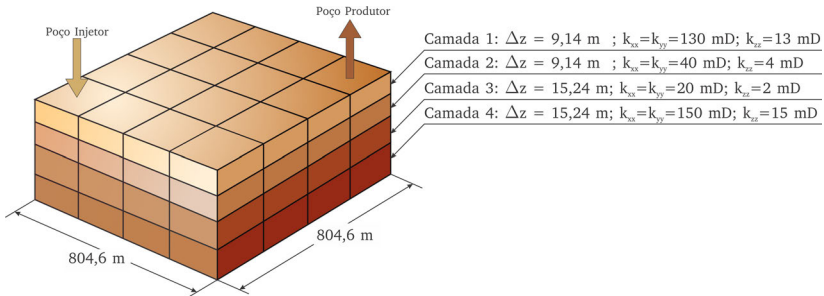


Figura 16 – Geometria e características do reservatório.

inicialmente (ponto vermelho) o reservatório possui apenas óleo, além de uma quantidade mínima de água ($S_w = 0,01$). Com o início da produção de óleo, a pressão no reservatório se reduz e a fase gás surge quando a pressão atinge a pressão de bolha.

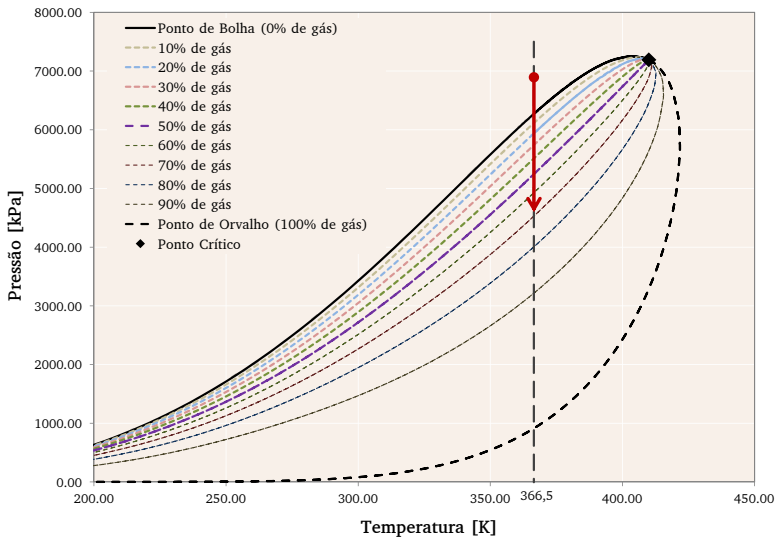


Figura 17 – Diagrama P-T para o fluido com composição dada pela tabela 12, mostrando curvas de fração volumétrica de gás constante.

O problema é simulado durante 2500 dias, com passo de tempo máximo de 50 dias. O reservatório possui dois poços nas posições indicadas na figura 16. O poço injetor está operando com uma condição de vazão

de água constante de $79,5 \text{ m}^3/\text{d}$ e restrição na pressão máxima igual a $P_{\text{max}} = 13,8 \text{ MPa}$. O poço produtor opera com vazão constante de óleo de $23,8 \text{ m}^3/\text{d}$ com restrição na pressão mínima igual a $P_{\text{min}} = 3,4 \text{ MPa}$. Ambas as vazões são prescritas nas condições de superfície. Portanto, para o caso do poço produtor, torna-se necessário o uso dos separadores descritos na seção 3.2.1 para verificar a vazão de óleo e calcular a vazão gás nas condições de superfície. Neste problema, foi considerado um separador de apenas um estágio com pressão de $101,325 \text{ kPa}$ e temperatura de $15 \text{ }^\circ\text{C}$, ou seja, um estágio em condições de estocagem. Como a vazão de óleo é prescrita no separador, a pressão no calcanhar é resultado da simulação. O raio dos poços é $0,3048 \text{ m}$.

Note que a malha de volumes de controle utilizada no o simulador GEM é diferente da malha do presente trabalho (figura 18). Isso foi feito para tentar fazer com que o volume dos volumes de controle dos dois métodos fosse o mais próximo possível para a comparação dos resultados. No EbFVM, os volumes de controle são construídos a partir da malha de elementos mostrada na figura 16, onde o centro de cada volume de controle é cada um dos vértices da malha, como esquematizado na figura 9.

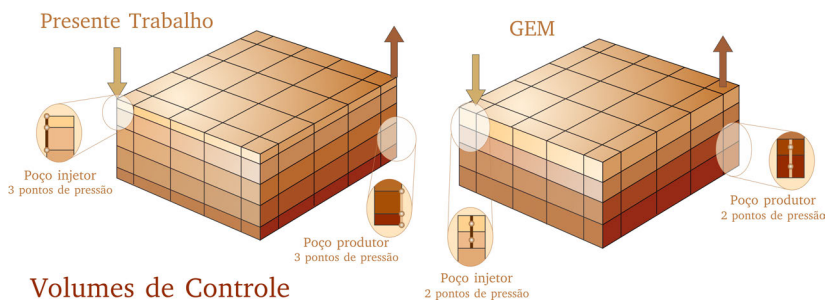
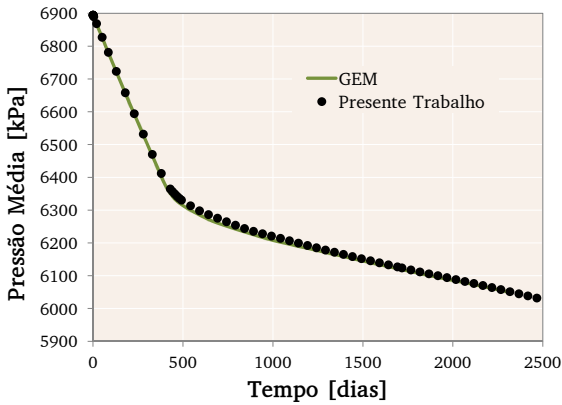


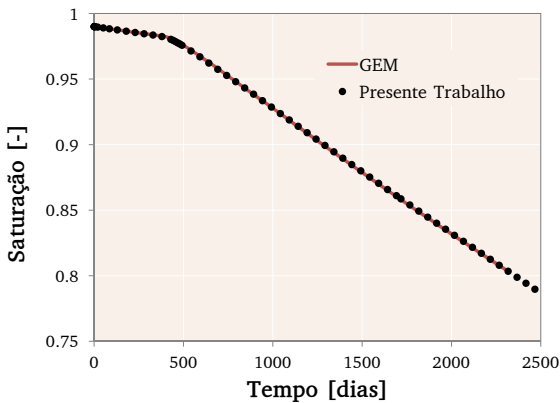
Figura 18 – Volumes de controle utilizados para o EbFVM e para o GEM com base na geometria da figura 16.

Na figura 5.19(a) é mostrada a pressão média no reservatório e nas figuras 5.19(b), 5.20(a) e 5.20(b) estão mostradas as saturações médias do reservatório durante a simulação e sua respectiva comparação com os resultados do GEM. Estas variáveis foram escolhidas para comparação pelo fato de que, como as metodologias numéricas para a solução do problema são diferentes, dificilmente os resultados seriam iguais ponto

a ponto, somente quando um refino bastante grande das malhas fosse utilizado. Ambos os métodos são conservativos e baseados no balanço de propriedades em volumes de controle (variações do Método dos Volumes Finitos), portanto, as propriedades globais devem ser iguais, não importando o tipo de malha utilizada.



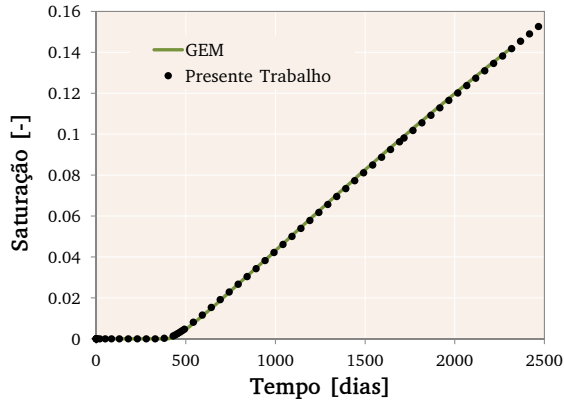
(a) Pressão média no reservatório.



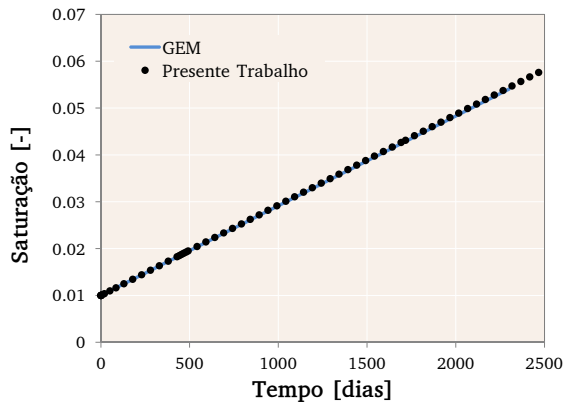
(b) Saturação média de óleo.

Figura 19 – Propriedades médias no reservatório.

O campo de pressão para o tempo $t = 2500$ d é mostrado na figura 21. Já na figura 22, tem-se o campo de saturação de gás para o mesmo



(a) Saturação média de gás.



(b) Saturação média de água.

Figura 20 – Propriedades médias no reservatório.

instante de tempo. Visualmente e analisando a escala de valores, os resultados são semelhantes. É importante notar que as variáveis no modelo do GEM estão armazenadas no centro dos blocos da malha, enquanto que no presente trabalho elas estão localizadas nos vértices. Na figura 22, consta também o campo de saturação de gás para o plano $z = -5\text{m}$ em ambas as malhas. Note que o campo de saturação de gás é bastante semelhante, lembrando que inicialmente a saturação de gás é nula.

A figura 23 mostra a curva de razão gás-óleo, comumente utilizada

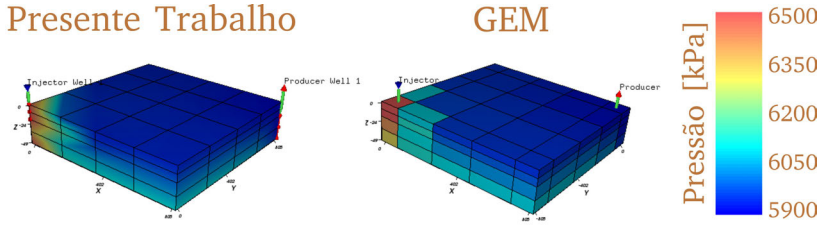


Figura 21 – Campo de pressão no reservatório para $t = 2500$ dias.

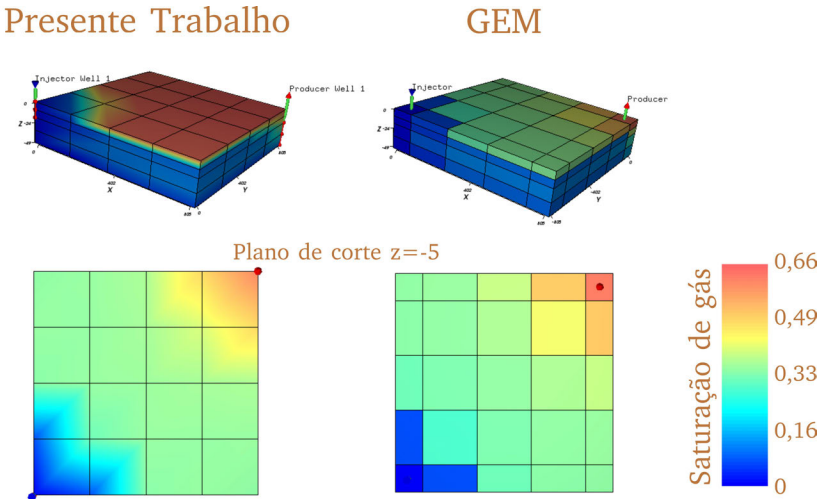


Figura 22 – Campo de saturação de gás e saturação de gás no plano $z = -5$ m para $t = 2500$ dias.

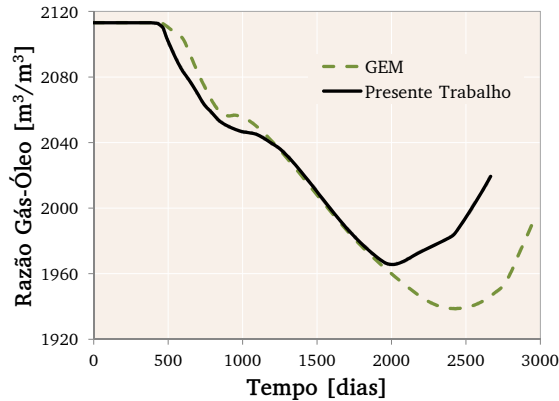


Figura 23 – Curva razão gás-óleo.

na área de petróleo, definida como a razão entre a vazão produzida de gás e vazão produzida de óleo, em condições de superfície. As diferenças são visíveis. Há duas hipóteses para explicar essa discrepância. Primeiramente, tem-se o fato das variáveis do EbFVM estarem armazenadas nos vértices da malha e, conseqüentemente, a pressão no calcanhar do poço é menor no presente trabalho, pois a profundidade é menor e o aparecimento de gás nos volumes de controle nos quais o poço produtor passa ocorre antes, afetando a forma da curva da figura 23. Outra razão diz respeito ao tamanho dos volumes de controle. Como pode ser observado na figura 18, o volume dos volumes de controle nas proximidades do poço no presente trabalho é menor do que no simulador GEM. Como a vazão de óleo é constante, a adoção de volumes de controle menores dará origem a pressões mais baixas nas redondezas do poço produtor no presente trabalho. Este fato pode contribuir para as diferenças mostradas na figura 23.

5.3 Simulação de um processo de injeção de água

Este caso ilustra um processo de injeção de água em um reservatório com 2 componentes: CO_2 e FC_{10} , sendo o último um pseudocomponente. As tabelas 13 e 14 mostram as propriedades de cada componente e a matriz de interação binária associada. O conjunto de componentes

Tabela 13 – Propriedades dos componentes.

Comp.	P_c (atm)	T_c (K)	ω	M_i	Z_c
CO_2	72,8	304,2	0,225	44,01	0,274159
FC_{10}	25,01	622,1	0,443774	134,00	0,25527

possuem características bastante diferentes entre si, com o CO_2 sendo um componente leve de maior tendência em permanecer na fase gasosa, enquanto que o FC_{10} é um componente pesado, de características completamente opostas. As frações molares globais inicialmente são $z_{CO_2} = 0,4$ e $z_{FC_{10}} = 0,6$. A ideia é fazer a comparação do modelo implementado no presente trabalho com os simuladores IMEX (CMG, 2011B) e GEM (CMG, 2011A). O primeiro é um simulador *black oil* e o segundo um simulador composicional, ambos em malhas *corner-point*. É esperado que, pelo fato de ser um processo de injeção de água, o modelo *black oil* possa representar bem o problema, pois as variações na composição global do sistema não devem ser muito significativas.

Tabela 14 – Matriz de interação binária.

Comp.	CO_2	FC_{10}
CO_2	0	
FC_{10}	0,15	0

Os dados necessários para a simulação *black oil* são obtidos através do aplicativo já comentado WinProp, por meio de um procedimento similar ao que será mostrado na seção 5.6, que apresenta uma forma de calcular as propriedades básicas dos fluidos do modelo *black oil* a partir de uma análise composicional do problema.

A malha utilizada para este problema, bem como as permeabilidades de cada camada são mostradas nas figuras 24. As condições de operação dos poços são (figura 24): vazão máxima de óleo de $31,8 \text{ m}^3/\text{d}$ e pressão mínima de 4250 kPa no poço produtor e vazão máxima de água de $23,8 \text{ m}^3/\text{d}$ com pressão máxima de 19000 kPa no poço injetor. Estas

vazões são prescritas nas condições de superfície. O raio dos poços é de 0,3m.

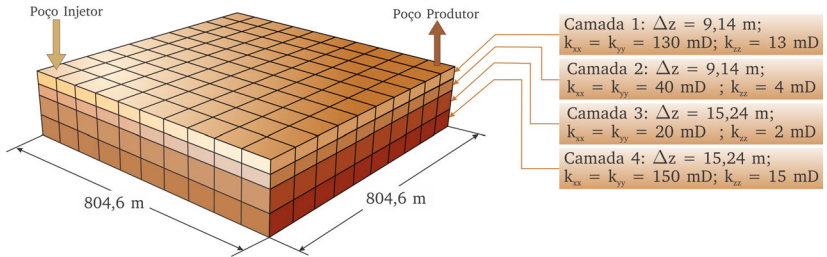
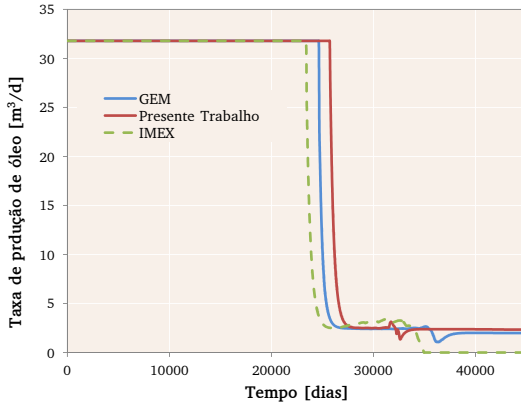


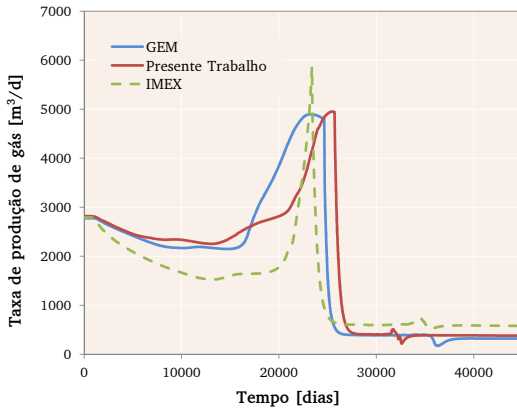
Figura 24 – Geometria e características do reservatório.

As condições iniciais são $S_w = 0,2$ e $S_o = 0,8$, portanto sem a presença de gás livre. Mesmo com a injeção de água, a pressão do reservatório diminui e gás se forma neste reservatório ao longo do tempo. Os resultados para as curvas de produção são mostrados nas figuras 25 e 26. Na figura 25, tem-se as taxas de produção instantânea de óleo e gás para os três simuladores. Existe uma defasagem dos resultados obtidos no presente trabalho em relação aos resultados obtidos pelo GEM. Isso pode estar relacionado às questões de armazenamento das variáveis (no centro ou nos vértices da malha) e ao tamanho dos volumes de controle. Os resultados do simulador IMEX são próximos, mas os perfis são diferentes. Uma razão provável para esta diferença é que, inicialmente, a composição global em todos os volumes de controle é a mesma para todos os simuladores. Ao longo da simulação, essa composição vai mudando e, conseqüentemente, afetando as propriedades físicas das fases óleo e gás (densidade, viscosidade, etc.). Como o IMEX utiliza um modelo *black oil*, a composição global não se altera e o valor das propriedades físicas irá se distanciar dos valores obtidos nos simuladores composicionais.

Na figura 26, verifica-se que os resultados obtidos no presente trabalho e pelo GEM são próximos. Nota-se entretanto uma grande discrepância nos resultados obtidos para a produção acumulada de gás pelo IMEX.

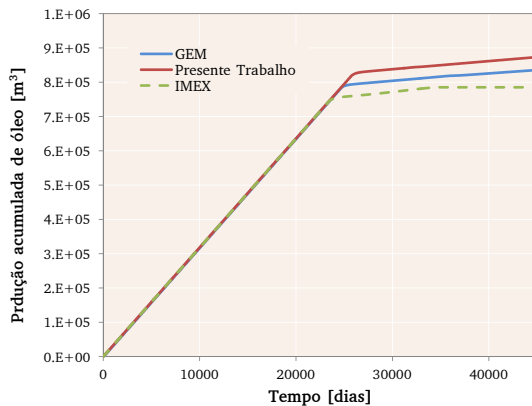


(a) Taxa de produção de óleo.

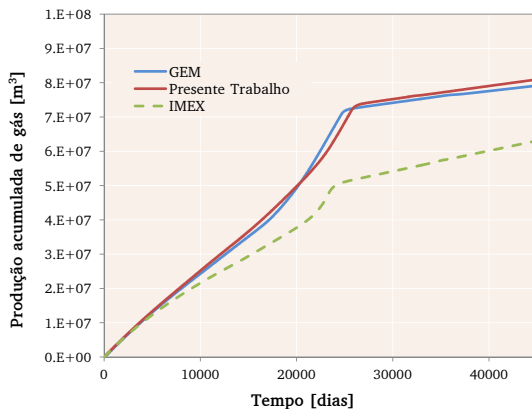


(b) Taxa de produção de gás.

Figura 25 – Comparação dos resultados de produção instantânea para o processo de injeção de água.



(a) Produção acumulada de óleo.



(b) Produção acumulada de gás.

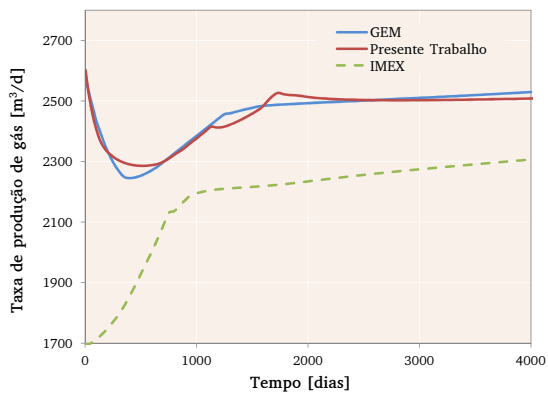
Figura 26 – Comparação dos resultados de produção acumulada para o processo de injeção de água.

5.4 Simulação de um processo de injeção de CO_2

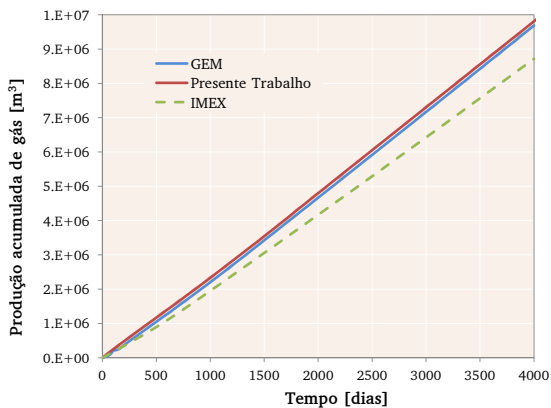
Esta simulação utiliza todas as propriedades e condições iniciais do caso anterior, porém altera-se o fluido de injeção. Agora se tem uma injeção de gás composto de 0,99 molar de CO_2 e 0,01 molar de FC_{10} . Este caso tem como objetivo mostrar a generalidade do modelo composicional em termos de solução de problemas. Um fluido de composição diferente pode ser injetado no reservatório, o que causa uma alteração considerável na composição global do sistema ao longo do tempo.

As condições de operação dos poços são de vazão máxima de óleo de $31,8 \text{ m}^3/\text{d}$ e pressão mínima de 4250 kPa no poço produtor e vazão máxima de gás de $23850 \text{ m}^3/\text{d}$ e pressão máxima de 19000 kPa no poço injetor. Estas vazões são prescritas nas condições de superfície. A vazão maior no poço injetor para o caso de injeção de gás se deve ao fato da densidade do gás ser muito menor do que a densidade da água. O raio dos poços também é de 0,3m.

Os resultados de produção de gás são mostrados na figura 27. Como durante esta simulação a vazão produzida de óleo foi sempre constante ($Q_o = 31,8 \text{ m}^3/\text{d}$), as curvas de produção de óleo foram omitidas, já que seriam todas idênticas. Note que neste caso, os resultados do simulador IMEX apresentam uma diferença maior em relação aos resultados do GEM e do presente trabalho desde o início da simulação, pois um gás de composição diferente (0,99 molar de CO_2) é injetado durante a simulação. Conforme já comentado, no modelo *black oil* não é possível prescrever a composição do fluido injetado e, portanto, o gás injetado no modelo *black oil* possui a mesma composição (é o mesmo gás) do gás do reservatório.



(a) Taxa de produção de gás.



(b) Produção acumulada de gás.

Figura 27 – Comparação dos resultados de produção para o processo de injeção de CO_2 .

5.5 Simulação composicional com malha híbrida

O objetivo deste caso é apresentar um exemplo para a simulação de um processo de injeção de gás rico em CO_2 utilizando um reservatório de geometria mais complexa, com uma malha não-estruturada composta de mais de um tipo de elemento. Esta malha é composta de tetraedros, hexaedros, prismas e pirâmides. Na tabela 15, os dados relativos a esta malha são mostrados. Os componentes presentes neste reservatório são

Tabela 15 – Dados referentes à malha não-estruturada.

Elemento	Quantidade	Domínio	Valores
tetraedro	35286	total de vértices	8073
hexaedro	544	dimensão máxima em x	200m
prisma	544	dimensão máxima em y	200m
pirâmide	576	dimensão máxima em z	130m

os mesmos utilizados nas seções 5.3 e 5.4, isto é, CO_2 e FC_{10} . Portanto, as propriedades de cada componente estão mostradas nas tabelas 13 e 14. A composição global inicial dos fluidos presentes neste reservatório é $z_{CO_2} = 0,4$ e $z_{FC_{10}} = 0,6$.

A geometria da malha, além da disposição dos poços, é mostrada na figura 28. Os poços injetores estão indicados em azul, enquanto que os produtores em vermelho. O raio dos poços é de 0,1 m. Os poços injetores

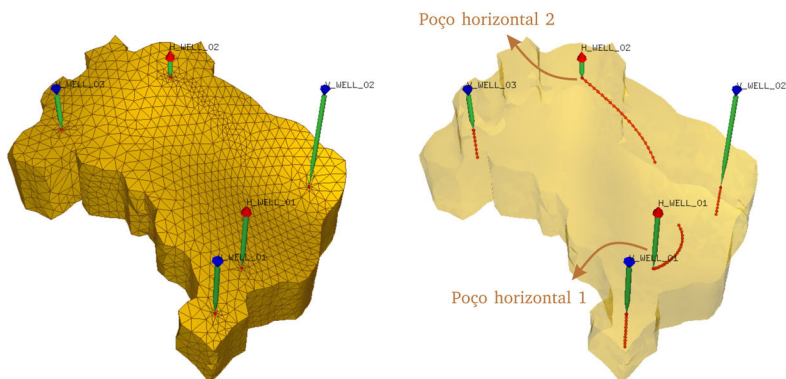


Figura 28 – Malha não-estruturada utilizada no problema.

estão injetando gás com uma vazão prescrita de $8640 \text{ m}^3/\text{d}$ composto de 0,99 molar de CO_2 e 0,01 molar de FC_{10} . Já os poços produtores

operam em vazão de óleo prescrita de $47,7 \text{ m}^3/\text{d}$. Todas as condições de operação são prescritas na superfície. A pressão inicial é de 7000 kPa , aproximadamente 69 atmosferas, logo a vazão de gás injetada é muito menor nas condições de reservatório, devido a alta pressão que lá existe.

A variável tempo foi adimensionalizada resultando em um valor adimensional conhecido como *Volume Poroso Injetado* - VPI, que corresponde à razão entre vazão total injetada até um instante de tempo e o volume poroso total do reservatório. O VPI pode ser obtido a partir da seguinte expressão

$$\text{VPI} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{inj}}} \int_0^t Q_T^i(t) dt}{\int_{\Omega} \phi dV}, \quad (111)$$

onde Q_T^i é a vazão total do poço injetor i em um dado instante de tempo e N_{inj} o número de poços injetores. O termo $\int_{\Omega} \phi dV$ corresponde ao volume poroso do reservatório.

O campo de saturação de gás é mostrado na figura 29 para quatro instantes de tempo distintos. A geometria foi cortada de forma a passar pelos poços injetores e evidenciar o processo de injeção de gás. As frações

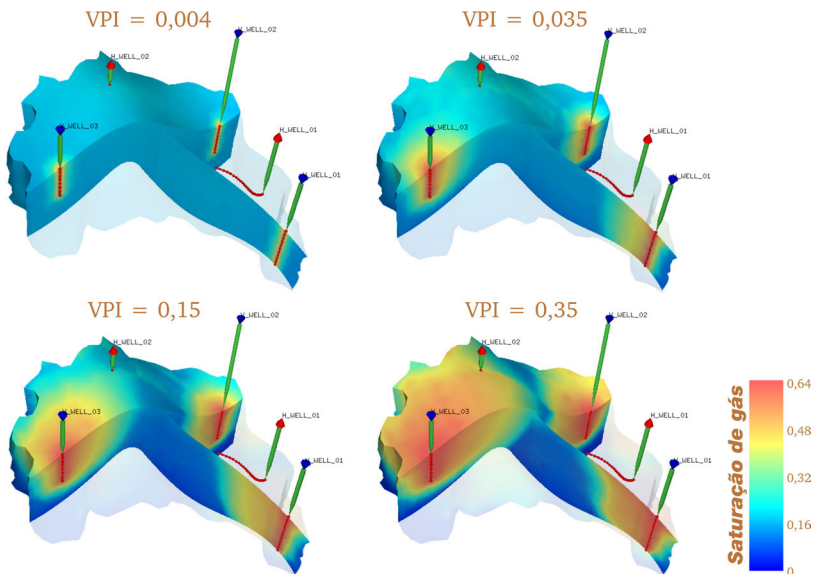


Figura 29 – Campo de saturação de gás em quatro instantes de tempo.

de CO_2 nas fases óleo e gás estão mostradas nas figuras 30 e 31. Já a fração global de CO_2 pode ser vista na figura 32. Pode-se observar que a concentração de CO_2 é maior na fase gás, já que é um componente mais leve. Este processo de injeção de gás resultou em um aumento de pressão

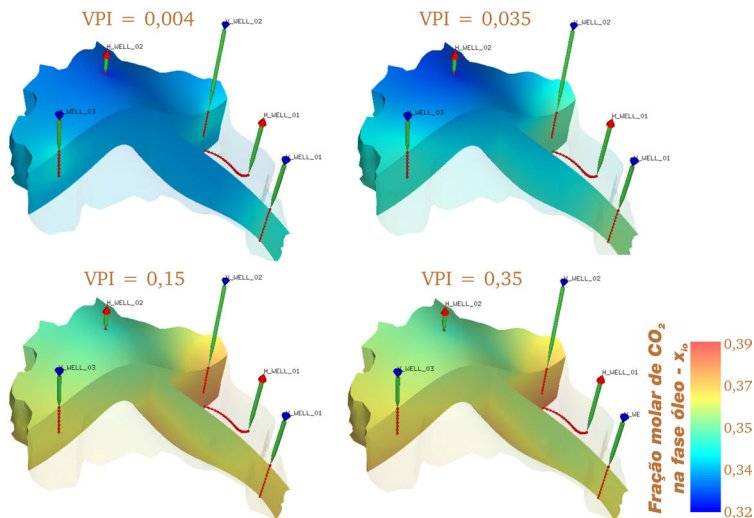


Figura 30 – Campo de fração molar de CO_2 na fase óleo (x_{CO_2o}) em quatro instantes de tempo.

no reservatório até $VPI = 0,25$. Após este tempo a pressão média começa a decrescer, como ilustrado na figura 33.

A figura 34 mostra as pressões no calcanhar dos poços produtores, ou seja, a pressão da primeira completação do poço ($P_{s=0}^W$) e a respectiva pressão do volume de controle do reservatório ao qual o calcanhar está associado. Note que, para o poço horizontal 1, a diferença de pressão entre poço e reservatório aumenta ao longo do tempo de forma mais rápida que o poço horizontal 2. Como a condição de contorno dos poços produtores é de vazão de óleo prescrita, isso pode indicar que a saturação de óleo nas proximidades do poço horizontal 1 diminuiu de maneira mais rápida, exigindo que o poço tenha uma pressão cada vez mais baixa a fim de manter a mesma vazão de óleo. As pressões dos poços possuem um comportamento similar à pressão média do reservatório (figura 33).

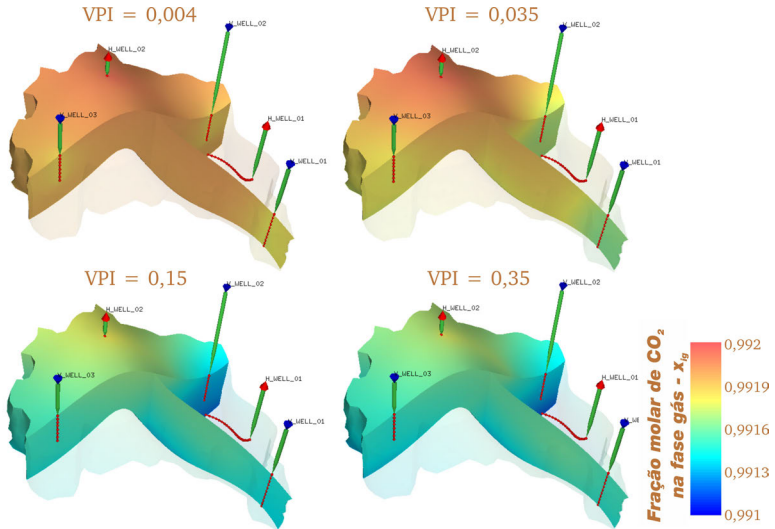


Figura 31 – Campo de fração molar de CO_2 na fase gás (x_{CO_2g}) em quatro instantes de tempo.

A quantidade volumétrica de cada fluido no reservatório ao longo do tempo é mostrada na figura 35. A injeção progressiva de gás aumenta sua quantidade dentro do reservatório e o volume óleo, por sua vez, é reduzido. Devido às condições de permeabilidade relativa da tabela 4, a água permanece imóvel ($k_{rw} = 0$) durante todo o processo ($S_w < 0,2$), resultando em um volume constante de água no reservatório durante toda a simulação.

Na figura 36 tem-se a taxa de produção de gás dos poços produtores, identificados na figura 28. Neste problema, a taxa de produção de gás fornece uma importante informação com relação ao tempo que leva para o gás que está sendo injetado nos poços injetores chegar até os poços produtores. Pode-se perceber que, para o poço horizontal 1, a produção de gás aumenta mais rapidamente, logo o gás injetado chega mais rápido ao poço horizontal 1. Isso também está de acordo com a figura 34, a qual está indicando que a saturação de óleo está menor na proximidade deste poço e, portanto, a saturação de gás está maior.

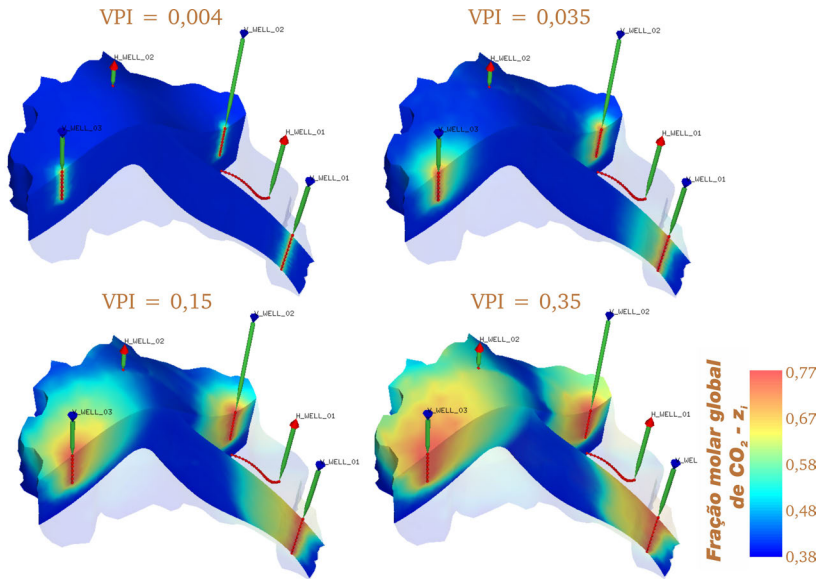


Figura 32 – Campo de fração molar global de CO_2 (z_{CO_2}) em quatro instantes de tempo.

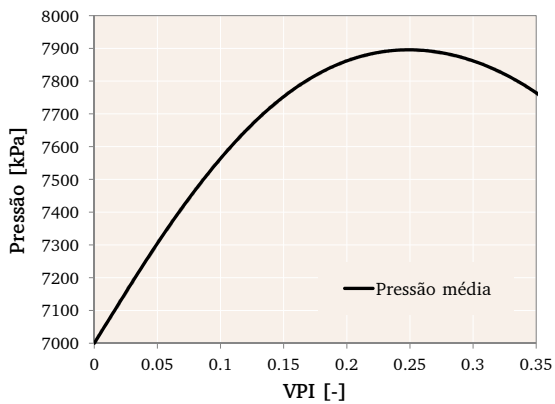
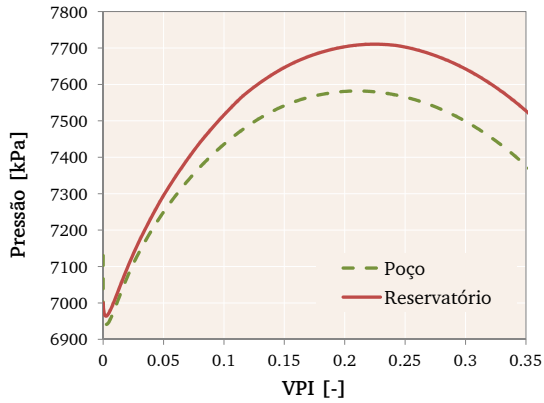
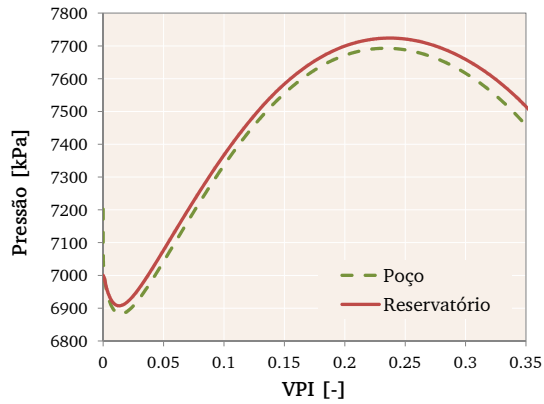


Figura 33 – Pressão média no reservatório ao longo do tempo.



(a) Poço horizontal 1.



(b) Poço horizontal 2.

Figura 34 – Pressão no calcanhar e pressão do volume de controle do reservatório.

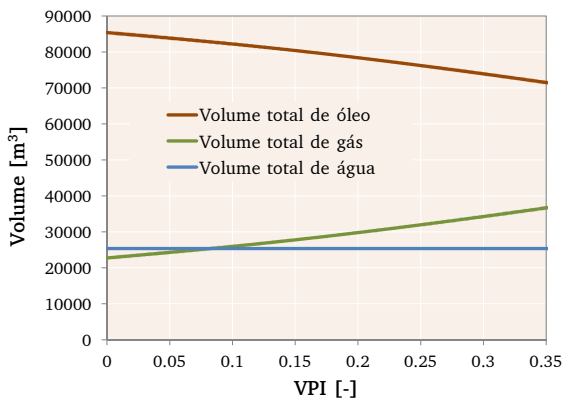


Figura 35 – Volume total de cada fase nas condições de reservatório.

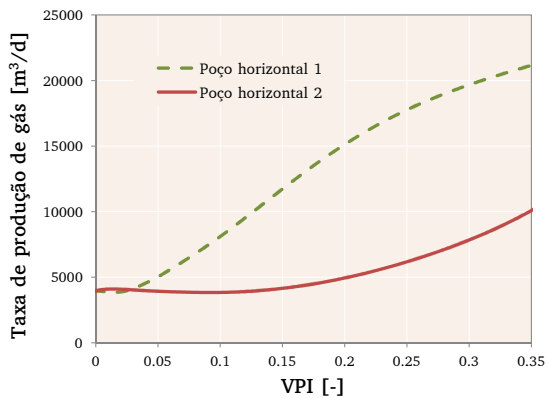


Figura 36 – Taxa de produção de gás nos poços produtores.

5.6 Cálculo das propriedades para o modelo black oil

O objetivo desta seção é apresentar outra aplicação existente para o modelo composicional desenvolvido neste trabalho. Conforme já comentado, as simplificações feitas no modelo *black oil* resultam em uma redução considerável no número de incógnitas do problema. Embora elas substituam o complexo fluido real por um fluido muito mais simples, fazem com que o modelo *black oil* seja bastante vantajoso na aplicação em casos reais de larga escala.

Uma das dificuldades do modelo *black oil* diz respeito à obtenção das propriedades físicas do modelo, as chamadas tabelas PVT. Esta seção apresenta uma forma simples de obter estas tabelas para qualquer situação na qual se conheça o número de componentes e sua composição global, a partir das rotinas de equilíbrio de fases implementadas neste trabalho.

Os resultados das expressões deduzidas neste trabalho serão validados por meio do aplicativo WinProp, que também permite a determinação das propriedades do modelo *black oil* a partir de um procedimento semelhante. Em seguida, serão apresentados alguns resultados para o cálculo de propriedades em um modelo *black oil* térmico, i.e., em que as propriedades dependem da pressão e da temperatura.

Os três parâmetros principais do modelo *black oil* (DAKE, 1978), que relacionam volumes dos fluidos nas condições de reservatório com volumes nas condições de superfície, são:

R_s - Razão gás-óleo ou razão de solubilidade, que é o volume de gás nas condições de superfície que irá dissolver em um dado volume de óleo quando ambos são levados para as condições de pressão e temperatura do reservatório.

B_o - Fator volume de formação do óleo, é o volume de óleo ocupado no reservatório, a uma pressão e temperatura, dividido pelo volume deste óleo nas condições de superfície.

B_g - Fator volume de formação do gás, é o volume de gás livre ocupado no reservatório, a uma pressão e temperatura, dividido pelo volume deste gás nas condições de superfície.

Em geral, espera-se que o volume de um fluido com composição constante aumente com a redução da pressão. Entretanto, o compor-

tamento do óleo é mais complexo, pois é uma mistura de vários hidrocarbonetos que pode sofrer variação em sua composição a partir das variações na pressão e temperatura. Um barril de óleo nas condições de reservatório, ao ser trazido à superfície, pode sofrer uma redução no volume, mesmo com a redução da pressão. Isso ocorre pois, ao ser trazido à superfície, o gás que estava dissolvido no óleo é liberado (FANCHI, 2000).

As propriedades definidas anteriormente (R_s , B_o e B_g) são funções explícitas da pressão, temperatura e composição global do fluido. Conforme já comentado, no modelo *black oil* está assumido que esta composição permanece constante. A seguinte expressão matemática pode ser utilizada para determinar a razão gás-óleo ou razão de solubilidade (R_s),

$$R_s(P, T) = \frac{V_{g,STD}}{V_{o,STD}}. \quad (112)$$

O fator volume de formação do óleo é definido matematicamente como,

$$B_o(P, T) = \frac{V_o(P, T)}{V_{o,STD}}. \quad (113)$$

Já o fator volume de formação do gás pode ser calculado com precisão razoável (AHMED, 2006) a partir da razão entre o volume de gás nas condições de reservatório e o volume nas condições padrão como se este tivesse um comportamento de gás ideal, em que a expressão $Pv = RT$ é válida. Ou seja,

$$B_g(P, T) = \frac{V_g(P, T)}{V_{g,STD}^{GI}}. \quad (114)$$

As propriedades do modelo *black oil* podem ser obtidas numericamente com as equações (112)-(114), a partir de uma caracterização adequada dos fluidos. Também é possível utilizar correlações (AHMED, 2006; JOHNS, 2004) para determiná-las ou realizar experimentos para medir os volumes e calcular estas propriedades com as mesmas expressões.

Para fins didáticos, um experimento será apresentado utilizando uma amostra de óleo de reservatório em um recipiente (figura 37) conectado a uma bomba de mercúrio que permite alterar o volume deste sistema. Esta amostra é levada à pressão de ponto de bolha e mesma temperatura do reservatório do qual o fluido utilizado foi obtido. A pressão é reduzida aumentando o volume do recipiente através da redução da quantidade

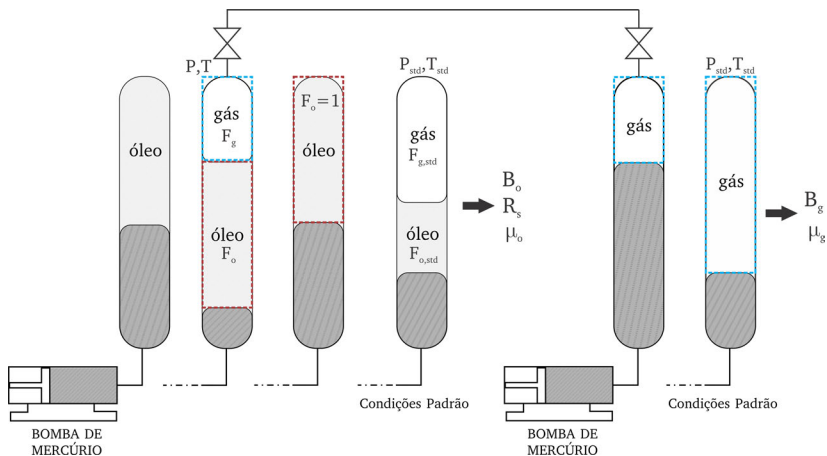


Figura 37 – Esquema para determinação das propriedades do modelo *black oil*.

de mercúrio. Com isto, ocorre o aparecimento de gás, o qual é então removido através de uma válvula mantendo-se a pressão constante. Este gás é levado a outro recipiente que também possui o volume controlado. Sua composição e volume são medidos nas condições do experimento (P e T) e nas condições padrão (P_{std} e T_{std}), calculando-se assim o fator volume de formação do gás (B_g). Nesta etapa, a viscosidade do gás também é medida.

Ao separar o gás, o óleo remanescente tem sua viscosidade medida e em seguida é levado até as condições padrão para obter o fator volume de formação e a razão gás-óleo, a partir das frações de óleo e gás que surgem neste processo.

A partir de um procedimento numérico que simula o experimento de laboratório esquematizado na figura 37, pode-se calcular R_s , B_o e B_g . O processo numérico utilizado neste trabalho considera a seguinte relação

$$Pv = ZRT, \quad (115)$$

a qual, por sua vez, permite obter as seguintes expressões

$$\begin{aligned} B_g(P, T) &= \frac{Z_g T}{P} \left(\frac{P}{T} \right)_{\text{STD}}, \\ B_o(P, T) &= \frac{Z_o T}{P} \left(\frac{P}{F_o Z_o T} \right)_{\text{STD}}, \\ R_s(P, T) &= \left(\frac{F_g Z_g}{F_o Z_o} \right)_{\text{STD}}, \end{aligned} \quad (116)$$

onde F_o e F_g são as frações molares das fases óleo e gás resultantes do cálculo de *flash*. Vale ressaltar que, para o cálculo de R_s e B_o , o cálculo do equilíbrio de fases nas condições padrão é feito considerando como composição global do sistema a composição da fase óleo nas condições de reservatório (sistema destacado em vermelho na figura 37). Ela pode ser diferente da composição original caso exista gás livre nas condições de reservatório. As viscosidades de cada fase são calculadas utilizando o modelo proposto em Lohrenz *et al.* (1964), descrito no apêndice D.

Os resultados são comparados com as soluções obtidas através do aplicativo WinProp (CMG, 2011c), o qual também permite calcular propriedades para o modelo *black oil* a partir de uma análise composicional. Os fluidos que serão utilizados nesta seção são compostos de seis componentes: CH_4 , C_3H_8 , FC_6 , FC_{10} , FC_{15} , FC_{20} , sendo os quatro últimos pseudocomponentes obtidos da biblioteca de componentes que existe no WinProp.

As propriedades moleculares dos componentes que serão utilizadas na equação de estado para o cálculo das propriedades de cada fase são dadas na tabela 16 e a matriz de interação binária é mostrada na tabela

Tabela 16 – Propriedades dos componentes.

Comp.	P_c (atm)	T_c (K)	ω	M_i	Z_c
CH_4	45,40	190,6	0,008	16,04	0,2876
C_3H_8	41,90	369,8	0,152	44,10	0,2805
FC_6	32,46	507,5	0,27504	86,0	0,2682
FC_{10}	25,01	622,1	0,443774	134,0	0,25527
FC_{15}	18,25	718,6	0,651235	206,0	0,2405
FC_{20}	14,36	782,9	0,816053	275,0	0,2296

17. A composição molar deste fluido é mostrada na tabela 18. A descrição deste fluido é baseada no trabalho de Killough & Kossack (1987), conhe-

cido como o quinto projeto da SPE, um problema *benchmark* na área de simulação de reservatórios de petróleo.

Tabela 17 – Matriz de interação binária.

Comp.	CH_4	C_3H_8	FC_6	FC_{10}	FC_{15}	FC_{20}
CH_4	0					
C_3H_8	0,008537	0				
FC_6	0,025345	0,004620	0			
FC_{10}	0,044372	0,014638	0,002866	0		
FC_{15}	0,067047	0,029340	0,010971	0,002657	0	
FC_{20}	0,085139	0,042358	0,019634	0,007631	0,001296	0

Tabela 18 – Composição molar do fluido.

Componente	z_i
CH_4	0,5
C_3H_8	0,03
FC_6	0,07
FC_{10}	0,2
FC_{15}	0,15
FC_{20}	0,05

Nas comparações feitas com o WinProp, considera-se um reservatório com uma temperatura de 70°C e a pressão é reduzida a partir do ponto de bolha ($P_b = 23043,5$ kPa) até a pressão de $P = 16000$ kPa. Nas figuras 38, 39 e 40 tem-se a comparação dos resultados. A boa concordância dos resultados sugere que o método para obtenção das propriedades do modelo *black oil* utilizado neste trabalho é adequado.

É importante notar que o procedimento proposto pode ser feito para quaisquer valores de pressão e temperatura. No caso de um modelo *black oil* térmico, por exemplo, estas curvas seriam necessárias para vários pontos de pressão e temperatura. Isto pode ser facilmente obtido com a implementação feita neste trabalho e será descrito a seguir.

5.6.1 Propriedades do modelo *black oil* em função da pressão e temperatura

Para ilustrar o procedimento, fez-se o cálculo das propriedades para um intervalo de 300 a 400 K para a temperatura e 5000 a 20000 kPa para a pressão, para a mesma composição da tabela 18. Nas figuras 41, 42 e 43 pode-se observar o comportamento destas propriedades em função

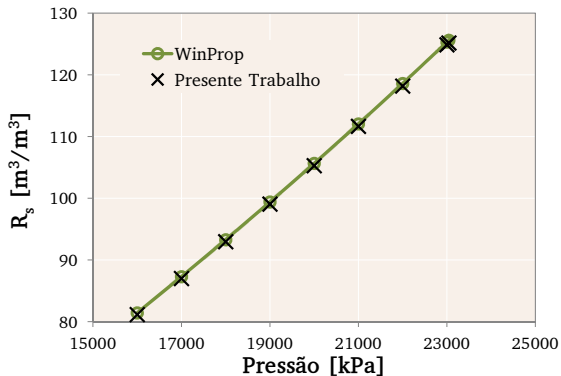


Figura 38 – Curva razão de solubilidade R_s .

da pressão e temperatura. Os resultados são superfícies que possuem um comportamento relativamente suave.

Com as tabelas que deram origem às superfícies das figuras 41, 42 e 43, o cálculo de derivadas das propriedades do modelo *black oil* em relação às variáveis dependentes torna-se uma tarefa mais simples, já que aproximações numéricas destas derivadas são facilmente obtidas.

Não existem muitas referências na literatura sobre a utilização de modelos *black oil* térmicos. Em geral, utilizam-se modelos pseudocomposicionais ou composicionais para uma modelagem térmica. Todavia, existem vantagens de utilizar um modelo *black oil* devido à sua simplicidade, estabilidade e menor número de incógnitas.

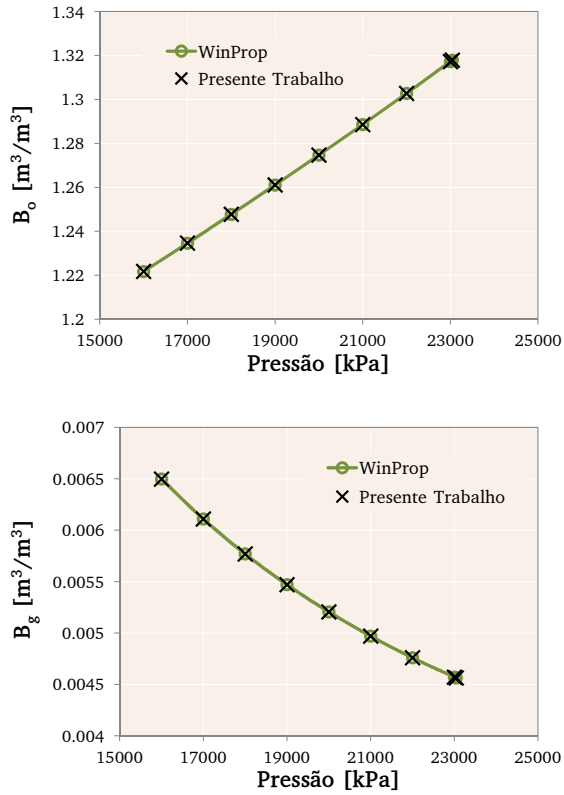


Figura 39 – Fator volume de formação de cada fase.

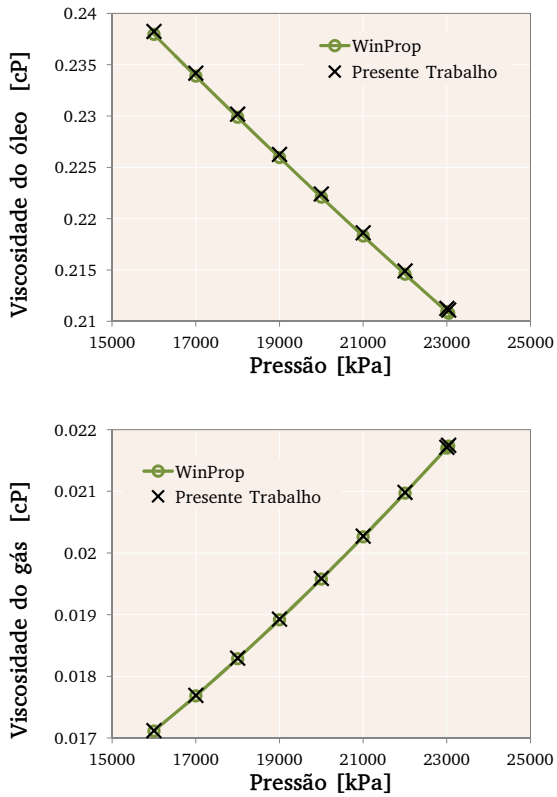


Figura 40 – Viscosidades de cada fase.

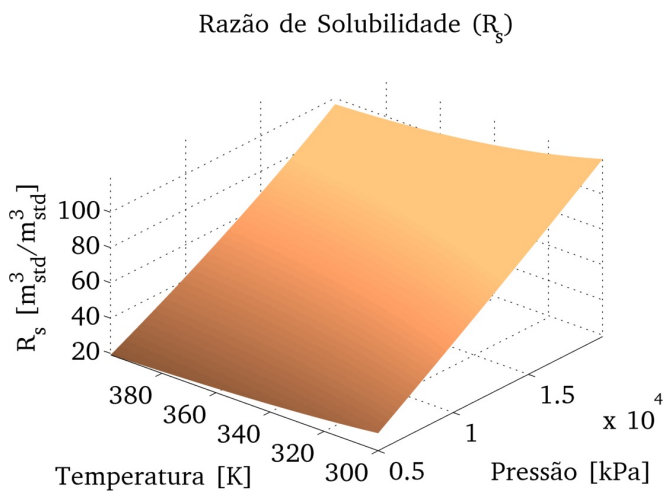


Figura 41 – Razão de solubilidade em função da pressão e temperatura.

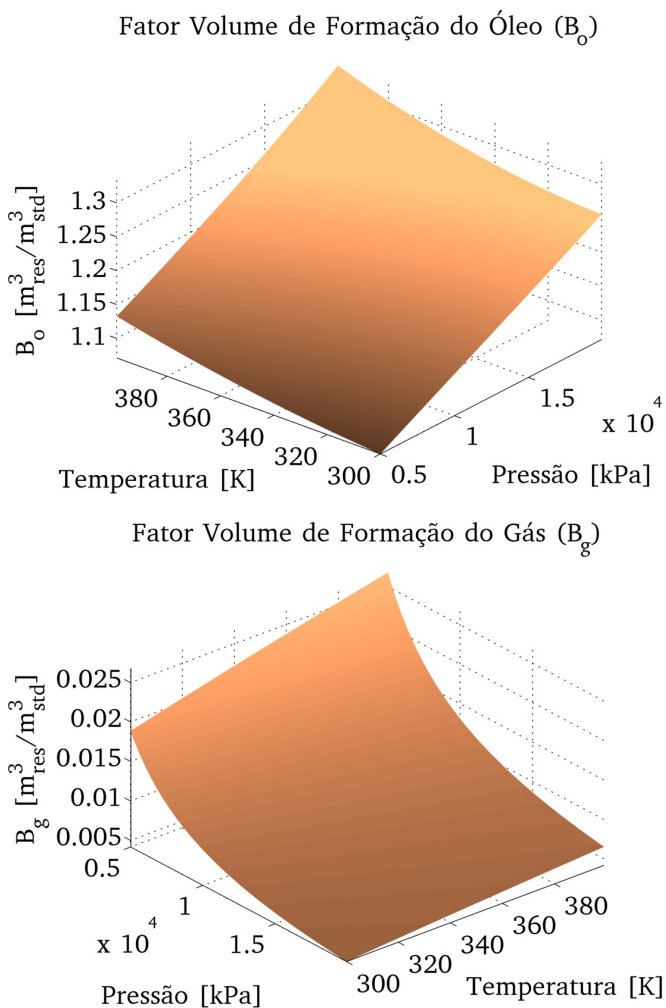


Figura 42 – Fator volume de formação de cada fase em função da pressão e temperatura.

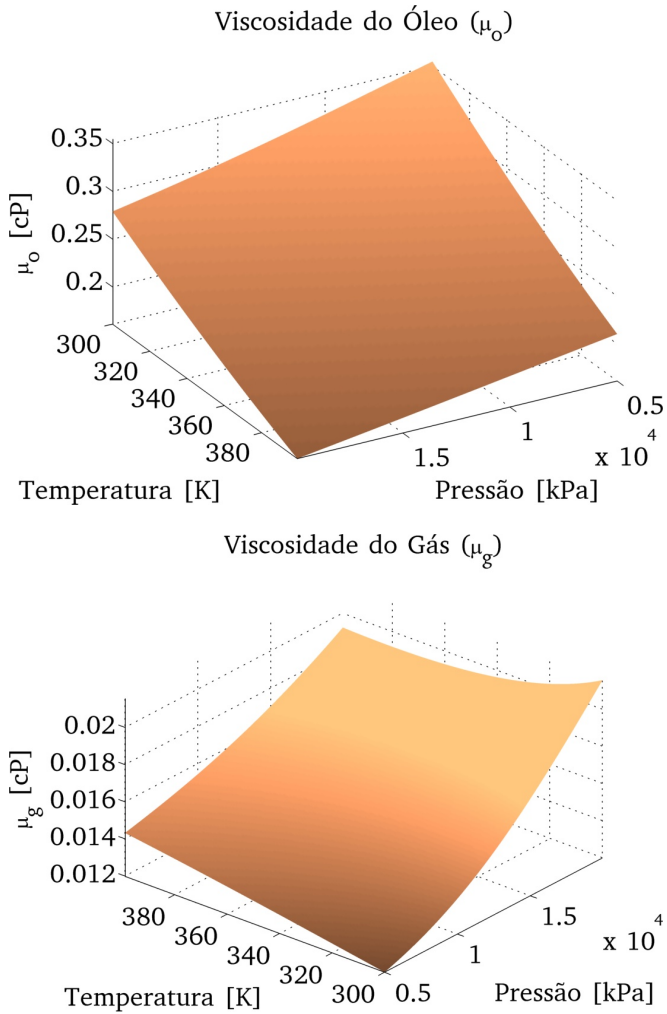


Figura 43 – Viscosidade de cada fase em função da pressão e temperatura.

Conclusões

Este trabalho apresentou o estudo e a implementação de um modelo composicional trifásico e multicomponente para a simulação de reservatórios de petróleo em malhas não-estruturadas. Dentre todas as características do modelo e do código implementado, pode-se destacar um modelo composicional com formulação totalmente implícita em malhas não-estruturadas, um procedimento para a solução da rotina de *flash* utilizando o método de *Newton-Raphson* combinado com substituições sucessivas e um procedimento para a solução do teste de estabilidade através da minimização da energia livre de *Gibbs* que também utilizou o método de *Newton-Raphson* combinado com substituições sucessivas.

Através de um esquema de cálculo automático por diferenças finitas da matriz Jacobiana utilizando o conceito de *matrix coloring*, o modelo utilizado foi bastante geral. Portanto, quaisquer tabelas ou correlações poderiam ser utilizadas para determinar as propriedades de cada fase, da rocha, curvas de permeabilidade relativa e pressão capilar. Vale lembrar que a equação de estado utilizada foi a equação de *Peng-Robinson*, porém não existe nenhuma restrição no modelo ou no código em utilizar outra equação de estado. O procedimento para calcular a matriz Jacobiana através do *matrix coloring* não é tão direto, muitos estudos e testes foram feitos em diferentes problemas a fim de garantir que o cálculo da matriz estava correto.

Para os processos de recuperação avançada, que englobam a injeção de gás, notou-se que o modelo composicional permite uma maior flexibilidade do processo de injeção quando comparado ao modelo *black oil*, já que o gás injetado pode possuir uma composição arbitrária. Essa diferença pôde ser observada nos resultados do modelo *black oil* em relação ao modelo composicional, principalmente para a fase gás (figura 27, por exemplo). Portanto, a utilização deste modelo deve ser feita com cuidado e sempre com uma boa compreensão das hipóteses assumidas, pois a validade das hipóteses do modelo *black oil* está garantida apenas para certos processos de recuperação.

Para trabalhar com as malhas não-estruturadas, a EFVLib (MALISKA *et al.*, 2008, 2009, 2010, 2011) foi utilizada a fim de tratar todos os detalhes do EbFVM. O cálculo de gradientes, interpolações de propriedades para cada tipo de elemento e cálculo do índice de poço, todos esses procedimentos tiveram seus esforços reduzidos através da utilização da biblioteca. Desta forma, foi possível resolver problemas para reservatórios com poços de trajetória arbitrária, desde que adequadamente configurados durante o processo de geração da malha. Dentre as dificuldades desta metodologia, pode-se destacar o aumento considerável do *stencil* da matriz Jacobiana. Isso está associado ao fato de que o fluxo para uma face de um volume de controle depende de variáveis que estão em todos os vértices do elemento. Por este motivo, o processo de solução utilizando malhas não-estruturadas torna-se mais lento, tanto para construir a matriz, quanto para resolver o sistema linear resultante.

O procedimento apresentado para calcular as propriedades do modelo *black oil* a partir de uma análise composicional não foi encontrado com uma descrição clara na literatura e, portanto, foi deduzido neste trabalho e validado com um software comercial de referência (WinProp). Além disso, não foi possível encontrar trabalhos que tratem sobre as propriedades do modelo *black oil* em função da pressão e temperatura (modelo térmico). Este assunto foi tratado no último tópico do capítulo de resultados deste trabalho e permitiu uma maior compreensão sobre as propriedades envolvidas no modelo. Espera-se utilizar este tópico como referência para futuros estudos relacionados à modelos térmicos do tipo *black oil*.

O código desenvolvido neste trabalho mostrou-se uma ferramenta interessante para testar novas metodologias, formulações, etc. Como não

existe cálculo manual de derivadas, os esforços concentram-se apenas em modelar e discretizar adequadamente as equações de resíduo, que são essencialmente as equações de conservação que governam o problema, juntamente com as equações constitutivas que fecham o problema.

6.1 Sugestões para trabalhos futuros

Dentre as possibilidades de evoluir os estudos de modelos composicionais, algumas linhas de pesquisa serão sugeridas por possuir um forte interesse da comunidade científica e industrial na área de simulação de reservatórios de petróleo. São elas:

- Inclusão da equação da energia no modelo composicional;
- Modelos composicionais com um número arbitrário de fases, pois existem situações em que duas fases oleosas podem existir;
- Estudo da ocorrência de troca de massa entre a fase água e as demais fases;
- Acoplamento de modelos de geomecânica com o modelo composicional;
- Cálculo manual da matriz Jacobiana caso uma solução mais rápida do problema seja requerida.

Referências

- AAVATSMARK, I.; KLAUSEN, R. **Well Index in Reservoir Simulation for Slanted and Slightly Curved Wells in 3D Grids.** *SPE Journal*, v. 8, n. 1, pp. 41–48, 2003.
- AHMED, T. **Reservoir Engineering Handbook**, 3rd edition. Elsevier Science, 2006.
- ALMEHAIDEB, R. A.; AZIZ, K.; PEDROSA, O. A. **A Reservoir/Wellbore Model for Multiphase Injection and Pressure Transient Analysis.** *SPE - Society of Petroleum Engineers*, n. SPE 17941, 1989.
- AZIZ, K. **Notes for Petroleum Reservoir Simulation.** Stanford University, 1993.
- AZIZ, K.; SETTARI, A. **Petroleum Reservoir Simulation**, 1st edition. Applied Science Publishers, 1979.
- BAKER, L. E.; PIERCE, A. C.; LUKS, K. D. **Gibbs Energy Analysis of Phase Equilibria.** *SPE Journal*, 1982.
- BALAY, S.; BROWN, J.; ; BUSCHELMAN, K.; EIJKHOUT, V.; GROPP, W. D.; KAUSHIK, D.; KNEPLEY, M. G.; MCINNES, L. C.; SMITH, B. F.; ZHANG, H. **PETSc User's Manual.** Relatório Técnico, Argonne National Laboratory, 2008.
- BALAY, S.; BROWN, J.; BUSCHELMAN, K.; GROPP, W. D.; KAUSHIK, D.; KNEPLEY, M. G.; MCINNES, L. C.; SMITH, B. F.; ZHANG, H., 2009. PETSc Web page. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- BALIGA, B. R.; PATANKAR, S. V. **A control-volume finite-element method for two-dimensional fluid flow and heat transfer.** *Numerical Heat Transfer*, v. 6, pp. 245–261, 1983.

- BRADLEY, H. B. **Petroleum Engineering Handbook**. Society of Petroleum Engineers Richardson, TX, U.S.A, 1987.
- CAO, H. **Development of Techniques for General Purpose Simulators**. Tese de Doutorado, Stanford University, 2002.
- CHEN, Z.; HUAN, G.; MA, Y. **Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media**. Computational Science & Engineering. Society of Industrial and Applied Mathematics - SIAM, 2006.
- CHEN, Z.; HUAN, G.; WANG, H. **Computer Simulation of Compositional Flow Using Unstructured Control Volume Finite Element Methods**. *Computing*, v. 78, pp. 31–53, 2006.
- CMG. **GEM User's Guide - Advanced Compositional and GHG Reservoir Simulator**. Computer Modelling Group Ltd., 2011.
- CMG. **IMEX User's Guide - Advanced Oil/Gas Reservoir Simulator**. Computer Modelling Group Ltd., 2011.
- CMG. **WinProp User's Guide - Phase Property Program**. Computer Modelling Group Ltd., 2011.
- COATS, K. H. **An Equation of State Compositional Model**. *Society of Petroleum Engineers Journal*, v. 20, n. 5, pp. 363–376, 1980.
- CORDAZZO, J. **Simulação de Reservatórios de Petróleo Utilizando o Método EbFVM e Multigrid Algébrico**. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2006.
- DA CUNHA, A. R. **Uma metodologia para simulação numérica tridimensional de reservatórios de petróleo utilizando modelo black-oil e formulação em frações mássicas**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC, 1996.
- DAKE, L. P. **Fundamentals of reservoir engineering**. Elsevier Science, 1978.
- DARCY, H. **Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon, Victor Dalmond, Paris**. 1856.

- DOS SANTOS, L. O. S. **Development of a Multi-Formulation Compositional Simulator**. Tese de Doutorado, The University of Texas at Austin, 2013.
- EDWARDS, C. H. **Advanced Calculus of Several Variables**. Dover, 1994.
- FANCHI, J. R. **Integrated Flow Modeling**, vol. 49 of *Developments in Petroleum Science*. Elsevier Science, 2000.
- GEBREMEDHIN, A. H.; MANNE, E.; POTHEN, A. **What Color Is Your Jacobian? Graph Coloring for Computing Derivatives**. *SIAM - Society for Industrial and Applied Mathematics*, v. 47, pp. 629–705, 2005.
- GOMES, H. P. **Modelo Composicional de Reservatórios com Formulação Totalmente Implícita**. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, 1990.
- HURTADO, F. S. V. **Uma Formulação de Volumes Finitos Baseada em Elementos para a Simulação do Deslocamento Bifásico Imiscível em Meios Porosos**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2005.
- HURTADO, F. S. V. **Formulação tridimensional de volumes finitos para simulação de reservatórios de petróleo com malhas não-estruturadas híbridas**. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2011.
- HURTADO, F. S. V.; MALISKA, C. R.; DA SILVA, A. F. C. **Application of Flux-Corrected Transport to an Unstructured-Grid Finite-Volume Formulation for Reservoir Simulation**. *Proceedings of the XXVIII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering CMNE/CILAMCE*, 2007.
- JOHNS, R. T. **Oil Recovery**. In: *Encyclopedia of Energy*, vol. 4, pp. 701–713. Elsevier Science, 2004.
- KENYON, D. E.; BEHIE, O. A. **Third Comparative Solution Project Gas Cycling of Retrograde Condensate Reservoirs**. *SPE - Society of Petroleum Engineers*, 1987.
- KILLOUGH, J. E.; KOSSACK, C. A. **Fifth Comparative Solution Project: Evaluation of Miscible Flood Simulators**. *SPE - Society of Petroleum Engineers*, n. 16000, 1987.

- LOHRENZ, J.; BRAY, B. G.; CLARK, C. R. **Calculating Viscosities of Reservoir Fluids From Their Compositions.** *Society of Petroleum Engineers Journal*, 1964.
- LUCIANETTI, R. M. **Métodos de Krylov-Newton Aplicados à Simulação Numérica de Reservatórios de Petróleo.** Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC, 2000.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**, 2ª edition. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora, 2004.
- MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V.; DONATTI, C. N.; AMBRUS, J. **Especificação e planejamento da biblioteca EFVLib.** Relatório Técnico, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 2008.
- MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V.; DONATTI, C. N.; PESCADOR JR., A. V. B. **Desenvolvimento e implementação da biblioteca EFVLib.** Relatório Técnico, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 2009.
- MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V.; DONATTI, C. N.; PESCADOR JR., A. V. B. **Testes e exemplos de aplicação da biblioteca EFVLib.** Relatório Técnico, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 2010.
- MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V.; DONATTI, C. N.; PESCADOR JR., A. V. B.; RIBEIRO, G. G. **Manual de classes da biblioteca EFVLib.** Relatório Técnico, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 2011.
- MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; TADA, M. P.; KARPINSKI, L.; PESCADOR, JR., A. A. V. B.; SOPRANO, A. B.; MAGRI, V. A. P. **WellRes: Simulador Poço-Reservatório-Relatório Técnico Final.** Relatório Técnico, Laboratório SINMEC/UFSC, Laboratório SINMEC/UFSC, Fevereiro, 2012.
- MICHELSSEN, M. L. **The Isothermal Flash Problem - Part I - Stability.** *Fluid Phase Equilibria*, v. 9, pp. 1–19, 1982.
- MICHELSSEN, M. L. **The Isothermal Flash Problem - Part II - Phase-Split Calculation.** *Fluid Phase Equilibria*, v. 9, pp. 21–40, 1982.

- ORR, JR., F. M.; TABER, J. J., 1987. **Phase Diagrams**, ch. 23. Petroleum Engineering Handbook. Society of Petroleum Engineers, Richardson, TX.
- PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- PEACEMAN, D. W. **Interpretation of Well-Block Pressures in Numerical Reservoir Simulation With Nonsquare Grid Blocks and Anisotropic Permeability**. *SPE Journal*, v. 23, pp. 531–543, 1983.
- RACHFORD, H. H.; RICE, J. D. **Procedure for Use of Electronic Digital Computers in Calculating Flash Vaporization Hydrocarbon Equilibrium**. *Petroleum Transactions - AIME*, v. 195, 1952.
- ROSA, A. J.; DE SOUZA CARVALHO, R.; XAVIER, J. A. D. **Engenharia de Reservatórios de Petróleo**. Interciência, 2006.
- SAAD, Y. **Iterative Methods for Sparse Linear Systems**, second edition edition. 2000.
- SANDLER, S. I. **Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics**, 4th edition. John Wiley & Sons, Inc, 2006.
- SMITH, J. M.; NESS, H. C. V.; ABBOTT, M. M. **Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics**. McGraw Hill, 1996.
- SOPRANO, A. B. **Modelagem Matemática e Solução Numérica do Escoamento Multifásico Unidimensional em Poços Horizontais**. *Trabalho de Conclusão de Curso - Universidade Federal de Santa Catarina*, 2010.
- SOPRANO, A. B.; DA SILVA, A. F. C.; MALISKA, C. R., 2012. **Numerical Solution of the Multiphase Flow of Oil, Water and Gas in Horizontal Well in Natural Petroleum Reservoirs**. In: *Mecánica Computacional*, vol. XXXI, p. 683–693. Asociación Argentina de Mecánica Computacional.
- STIEL, L. I.; THODOS, G. **The Viscosity of Nonpolar Gases at Normal Pressures**. *AIChE*, v. 7, n. 4, 1961.
- STONE, H. L. **Estimation of Three-Phase Relative Permeability And Residual Oil Data**. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, v. 12, n. 4, 1973.

WHITSON, C. H.; BRULÉ, M. R. **Phase Behaviour, Monograph**, vol. 20 of *Henry L. Doherty Series*. Society of Petroleum Engineers - SPE, 2000.

WILSON, G. M. **A Modified Redlich-Kwong Equation of State, Application to General Physical Data Calculations**. *AIChE*, 1969.

Visão geral do código

A seguir serão apresentados os arquivos criados para o código implementado neste trabalho, seguidos de uma breve descrição das funcionalidades de cada um. A implementação foi feita de maneira a seguir um padrão conhecido como TDD - *Test Driven Development*, ou programação orientada a testes. Desta forma, o arquivo de entrada é o arquivo **test_CompositionalSimulator.cpp**, que realiza todos os testes implementados. As classes e rotinas são testadas na medida em que são implementadas. Todos os testes sempre são rodados a fim de garantir que alguma mudança posterior em uma classe que foi previamente desenvolvida não cause alterações nos resultados inicialmente obtidos e validados. Isso garante maior robustez ao código e permite alterações que podem ser rapidamente validadas.

A.1 Arquivos de configuração, entrada e saída de dados

Utils.h Arquivo de cabeçalho para configuração das classes básicas do modelo.

Config.h Arquivo de cabeçalho para configuração das classes utilizadas no problema.

ConfigBoost.h Arquivo de cabeçalho para configuração da biblioteca *Boost*.

ConfigPhaseBehaviour.h Arquivo de cabeçalho para configuração das classes utilizadas para o cálculo do equilíbrio de fases.

ConfigSTL.h Arquivo de cabeçalho para configuração das classes da *Standard Template Library - STL*.

ConversionFactors.h/cpp Funções utilizadas para conversão de unidades.

MultiTable.h/cpp Classe com a implementação de uma estrutura de tabela com várias colunas e interpolação das propriedades.

SaveFileClass.h Classe para salvar os resultados da simulação.

A.2 Arquivos de definição das entidades do modelo

BinaryInteractionMatrix.h Classe da matriz de interação binária.

Component.h Classe componente, com informação sobre propriedades físicas.

Phase.h Classe para a estrutura de uma fase, possuindo as rotinas que permitem calcular suas propriedades físicas.

A.3 Arquivos de definição das entidades do equilíbrio de fases

EquationOfState.h/cpp Classe com a implementação das equações de estado, interface e equações especializadas.

RachfordRice.h/cpp Rotina para solução do procedimento de Rachford & Rice (1952).

PhaseEquilibriaAnalyzer.h/cpp Estrutura que realiza o cálculo do equilíbrio de fases, desde a determinação do teste de estabilidade até o cálculo de *flash*.

A.4 Arquivos com o simulador e solver não-linear

PETScNonLinearSolver.h Classe base abstrata com a implementação de um *solver* não-linear genérico que realiza a interface com a PETSc.

NonLinearFlashSolver.h Classe derivada da PETScNonLinearSolver configurada para resolver a rotina de *flash*.

NonLinearStabilityTestSolver.h Classe derivada da PETScNonLinearSolver configurada para resolver o teste de estabilidade.

CompositionalSimulator.h Classe base do simulador composicional derivada de PETScNonLinearSolver.

A.5 Arquivos de definição da entidades com as variáveis do problema

PhysicalSystem.h Estrutura com informações do sistema físico de um volume de controle do reservatório.

ReservoirProperties.h Estruturas com as propriedades físicas e campos do reservatório.

SimulationInfo.h Estrutura com informações ao longo da simulação.

WellProperties.h Estrutura com informações das propriedades do poço.

Separator.h Classe com a implementação de separadores.

Models.h Classes com os modelos utilizados para cálculo das propriedades físicas.

A.6 Arquivo de testes

test_CompositionalSimulator.cpp Arquivo de testes do métodos implementados neste trabalho.

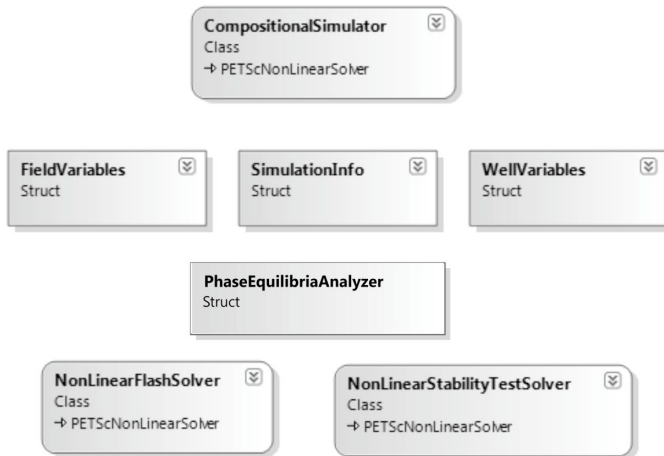


Figura 44 – Classes e estruturas principais implementadas neste trabalho.

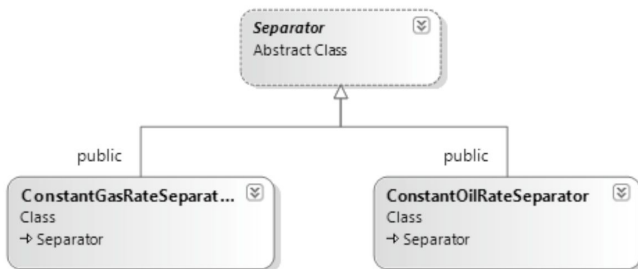


Figura 45 – Estrutura dos separadores.

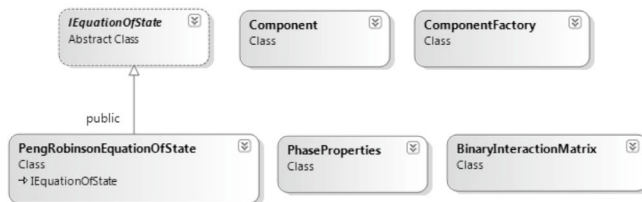


Figura 46 – Classes relacionadas à equação de estado.

Determinação das raízes da equação de estado

Existem várias maneiras de calcular as raízes de uma equação cúbica: analiticamente ou através de métodos iterativos. Os métodos analíticos são mais atraentes para utilizar em códigos de simulação, pois eles permitem a determinação de todas as raízes e evitam a possibilidade de que o método itere para a raiz errada. O procedimento analítico de determinação das raízes é mostrado a seguir:

Seja uma equação cúbica na forma,

$$Z^3 + BZ^2 + CZ + D = 0, \quad (117)$$

onde B , C , e D são constantes. Definindo,

$$\alpha = \frac{3C - B^2}{3}, \quad (118)$$

e,

$$\beta = \frac{2B^3 - 9BC + 27D}{27}, \quad (119)$$

o determinante Δ é definido como,

$$\Delta = \frac{\beta^2}{4} + \frac{\alpha^3}{27}. \quad (120)$$

Desta forma, o seguinte teste pode ser feito:

- Se $\Delta > 0$, então 1 raiz é real e 2 raízes são imaginárias;
- Se $\Delta = 0$, então 3 raízes são reais, sendo 2 raízes iguais;
- Se $\Delta < 0$, então 3 raízes são reais.

Na prática, para obter as soluções da equação de estado cúbica, basta fazer dois testes: $\Delta > 0$ e $\Delta \leq 0$.

Se $\Delta > 0$, a raiz real é calculada por

$$Z = \Gamma_A + \Gamma_B - \frac{B}{3}, \quad (121)$$

onde,

$$\Gamma_A = \left(-\frac{\beta}{2} + \sqrt{\Delta} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (122)$$

$$\Gamma_B = \left(-\frac{\beta}{2} - \sqrt{\Delta} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (123)$$

Se $\Delta \leq 0$, as três raízes são calculadas através de

$$Z_1 = 2\sqrt{-\frac{\alpha}{3}} \cos\left(\frac{\varphi}{3}\right) - \frac{B}{3}, \quad (124)$$

$$Z_2 = 2\sqrt{-\frac{\alpha}{3}} \cos\left(\frac{\varphi}{3} + \frac{2\pi}{3}\right) - \frac{B}{3}, \quad (125)$$

$$Z_3 = 2\sqrt{-\frac{\alpha}{3}} \cos\left(\frac{\varphi}{3} + \frac{4\pi}{3}\right) - \frac{B}{3}, \quad (126)$$

com,

$$\varphi = \arccos\left(-\frac{\frac{\beta}{2}}{\sqrt{-\frac{\alpha^3}{27}}}\right). \quad (127)$$

A escolha da raiz correta da equação de estado irá depender do problema. A raiz do meio sempre é descartada, pois é uma solução que não possui interpretação física. Na maioria dos casos, a menor das raízes é a raiz correta se a fase for líquida e a maior das raízes é a solução correta para a fase vapor. Todavia, a fim de garantir a escolha correta da raiz Z , o procedimento correto consiste em descartar a raiz do meio e calcular a energia de *Gibbs* com Z_{\min} e Z_{\max} . A raiz que fornecer a menor energia de *Gibbs* é a raiz correta.



”Matrix Coloring”

O processo de cálculo da matriz Jacobiana é parte mais complexa de qualquer solução não-linear, especialmente em problemas de muitas variáveis. O procedimento descrito neste apêndice é baseado na aproximação das derivadas de uma coluna inteira da matriz Jacobiana, \mathbf{J} . Seja $\vec{f} : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ uma função resíduo. Se \vec{e}_k é o vetor com valor 1 na k -ésima linha e 0 nas demais, então a partir da aproximação

$$\mathbf{J}(\vec{x}) \cdot \vec{e}_k \approx \frac{1}{\epsilon} [\vec{f}(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_k) - \vec{f}(\vec{x})], \quad (128)$$

a qual corresponde à derivada ao longo da direção \vec{e}_k , pode-se determinar a k -ésima coluna de \mathbf{J} a partir de um cálculo extra da função resíduo \vec{f} em $\vec{x} + \epsilon \vec{e}_k$, assumindo que $\vec{f}(\vec{x})$ já foi calculado e ϵ é um incremento pequeno. Note que, se a esparsidade da matriz não for explorada, o processo de cálculo de uma matriz Jacobiana com n colunas irá exigir n cálculos adicionais de função resíduo \vec{f} .

Se $\vec{f} = [f_1 \ f_2 \ f_3 \ f_4 \ f_5]^T$ e a matriz Jacobiana possui a seguinte estrutura

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} J_{11} & J_{12} & 0 & 0 & J_{15} \\ 0 & 0 & J_{23} & 0 & 0 \\ 0 & J_{32} & J_{33} & J_{34} & 0 \\ J_{41} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_{54} & J_{55} \end{pmatrix}, \quad (129)$$

então para calcular a coluna 1 da matriz \mathbf{J} , de acordo com a eq. (128), faz-se

$$\mathbf{J} \cdot \vec{e}_1 \approx \frac{1}{\epsilon} \left[\vec{f}(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_1) - \vec{f}(\vec{x}) \right] = \begin{bmatrix} \frac{f_1(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_1) - f_1(\vec{x})}{\epsilon} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{f_4(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_1) - f_4(\vec{x})}{\epsilon} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (130)$$

e, para calcular a coluna 3,

$$\mathbf{J} \cdot \vec{e}_3 \approx \frac{1}{\epsilon} \left[\vec{f}(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_3) - \vec{f}(\vec{x}) \right] = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{f_2(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_3) - f_2(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_3(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_3) - f_3(\vec{x})}{\epsilon} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (131)$$

Este procedimento exigiu dois cálculos extras da função resíduo \vec{f} .

Agora considere um subconjunto da matriz Jacobiana no qual duas colunas diferentes não possuem qualquer elemento não-nulo na mesma linha. Este subconjunto é classificado como *estruturalmente ortogonal*, ou seja, dadas as colunas \vec{j}_k e \vec{j}_l de um mesmo conjunto estruturalmente ortogonal, então

$$\vec{j}_k \cdot \vec{j}_l = 0. \quad (132)$$

Na figura 47, as colunas 1 e 3 da matriz são estruturalmente ortogonais entre si, enquanto que as colunas 1 e 2 não são.

Define-se o vetor \vec{d} como o vetor com valor 1 nas componentes em que o valor de todas as colunas de um subconjunto estruturalmente ortogonal seja não-nulo e valor 0 nas demais componentes. Se for calculada a derivada de \vec{f} ao longo da direção \vec{d} , pode-se calcular simultaneamente todas as componentes não-nulas destas colunas a partir de um único cálculo de função resíduo $\vec{f}(\vec{x} + \epsilon \vec{d})$. Considerando a matriz Jacobiana da eq. (129) e o subconjunto de colunas estruturalmente ortogonais $\{\vec{j}_1, \vec{j}_3\}$,

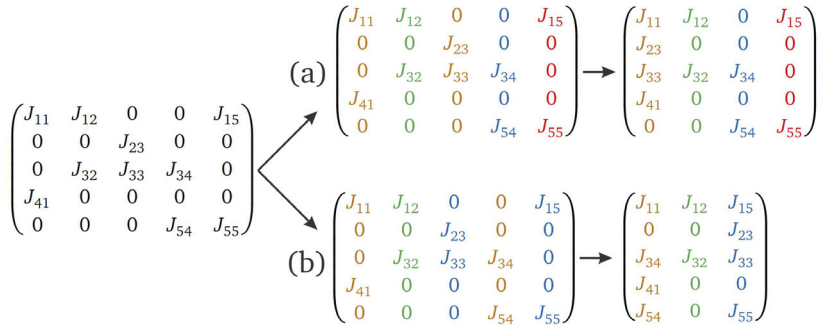


Figura 47 – Dois agrupamentos diferentes em subconjuntos estruturalmente ortogonais para a matriz \mathbf{J} .

se $\vec{d} = \vec{e}_1 + \vec{e}_3 = [1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0]^T$, então a expressão

$$\mathbf{J} \cdot \vec{d} \approx \frac{1}{\epsilon} \left[\vec{f}(\vec{x} + \epsilon \vec{d}) - \vec{f}(\vec{x}) \right] = \begin{bmatrix} \frac{f_1(\vec{x} + \epsilon \vec{d}) - f_1(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_2(\vec{x} + \epsilon \vec{d}) - f_2(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_3(\vec{x} + \epsilon \vec{d}) - f_3(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_4(\vec{x} + \epsilon \vec{d}) - f_4(\vec{x})}{\epsilon} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (133)$$

permite calcular as componentes J_{11} , J_{41} , J_{23} e J_{33} da matriz Jacobiana \mathbf{J} . As componentes 1 e 4 do vetor $\mathbf{J} \cdot \vec{d}$ correspondem às componentes 1 e 4 da primeira coluna da matriz ($\vec{j}_1 = \mathbf{J} \cdot \vec{e}_1$), enquanto que as componentes 2 e 3 do vetor $\mathbf{J} \cdot \vec{d}$ correspondem às componentes 2 e 3 da terceira coluna, $\vec{j}_3 = \mathbf{J} \cdot \vec{e}_3$. Esse procedimento só foi possível a partir da condição que

$$\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_3 = 0.$$

Neste caso, apenas um cálculo extra da função \vec{f} foi necessário. Portanto, o exemplo acima fornece um procedimento para reduzir o número de cálculos da função resíduo para construção da matriz Jacobiana, desde que se conheça a estrutura da matriz *a priori*.

O agrupamento das colunas da matriz Jacobiana em subconjuntos estruturalmente ortogonais pode ser feito de várias formas. Todavia, como mostrado na figura 47, existem casos em que o número de subconjuntos

é menor, o que implica em um número menor de cálculos da função \vec{f} . Nesta figura, o caso (a) resulta em 4 vetores \vec{d} diferentes e, portanto, 4 cálculos extras da função \vec{f} . Já o caso (b) resulta em apenas 3 cálculos da função \vec{f} . Desta forma, pode-se estabelecer o seguinte problema:

Dado o padrão de esparsidade da matriz Jacobiana, particionar as colunas no menor número possível de grupos estruturalmente ortogonais.

Este problema é conhecido como *matrix coloring*. Alguns métodos para a otimização do agrupamento das colunas podem ser encontrados em Gebremedhin *et al.* (2005). A figura 48 mostra um exemplo de um processo de agrupamento de colunas estruturalmente ortogonais. Note que a redução no número de colunas da matriz é considerável, reduzindo bastante o número de cálculos da função \vec{f} .

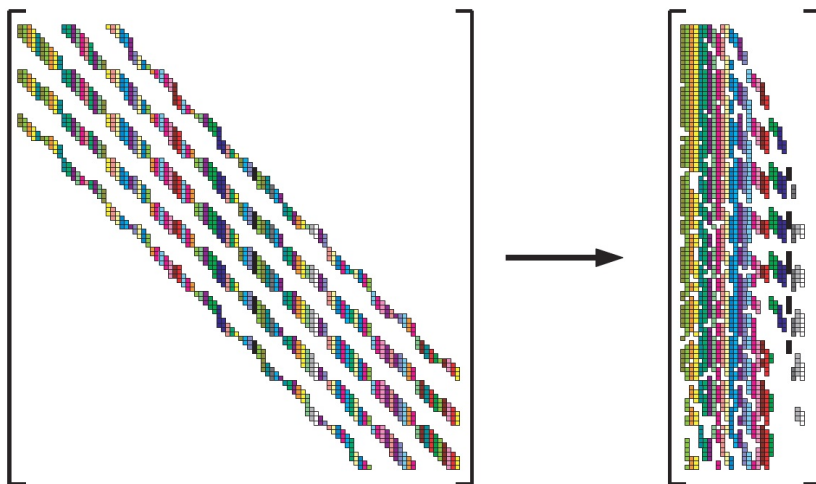


Figura 48 – Estrutura da matriz Jacobiana e seu formato agrupado através do *matrix coloring*.

Neste trabalho, fez-se uso dos algoritmos de agrupamento das colunas da matriz (*matrix coloring*) que estão implementados na biblioteca PETSc (BALAY *et al.*, 2009). Entretanto, sua utilização não é tão direta. O processo que deve ser feito consiste em primeiro determinar o padrão de esparsidade da matriz Jacobiana. No modelo composicional, isso depende da malha utilizada e do número de componentes do problema. Desta

forma, a partir dessas informações a estrutura da matriz Jacobiana é montada informando quais são as componentes não-nulas da matriz, simplesmente colocando o valor 1 nas componentes da matriz que podem ser não-nulas ao longo da simulação. Neste trabalho, a função (em linguagem C++)

```
void BuildJacobianStructure (...);
```

é utilizada para gerar esta estrutura. Em seguida, utiliza-se a seguinte sequência de funções da biblioteca PETSc (BALAY *et al.*, 2009):

```
void SetJacobianColoring() {  
    ISColoring iscoloring;  
    MatGetColoring(m_jacobian, MATCOLORINGID, &iscoloring);  
    MatFDColoringCreate(m_jacobian, iscoloring, &m_jacobian_color);  
    ISColoringDestroy(&iscoloring);  
    MatFDColoringSetFunction(m_jacobian_color, static_ResidualFunction, this);  
    MatFDColoringSetFromOptions(m_jacobian_color);  
}
```

Este processo irá reduzir o tamanho da matriz Jacobiana a partir do procedimento ilustrado na figura 48. A aproximação da matriz Jacobiana é feita através da função

```
SNESDefaultComputeJacobianColor (...);
```

também intrínseca da biblioteca PETSc. Com isso, basta implementar a função resíduo (\vec{f}) para o problema e a matriz Jacobiana será calculada automaticamente. Se a estrutura da matriz Jacobiana e a função resíduo forem implementadas corretamente pelo usuário, a aproximação obtida por este procedimento estará correta.

Cálculo das viscosidades

O cálculo da viscosidade do óleo e do gás para o modelo composicional apresentado neste trabalho é feito utilizando o modelo proposto por Lohrenz *et al.* (1964). Os cálculos a seguir são feitos para cada fase (óleo e gás), assumindo que os fatores de compressibilidade (Z_o e Z_g) já foram calculados. Isto significa que são conhecidos o volume molar da fase, densidade, etc.

Primeiramente, calcula-se o parâmetro de viscosidade, ζ_i , do componente a partir da seguinte expressão,

$$\zeta_i = \frac{T_{ci}^{\frac{1}{6}}}{M_i^{\frac{1}{2}} P_{ci}^{\frac{3}{2}}}, \quad (134)$$

com P_{ci} dado em atm. A equação de Stiel & Thodos (1961) permite calcular a viscosidade à baixa pressão para um componente puro, μ_i^* ,

$$\mu_i^* \zeta_i = 10^{-4} \left[4,61 T_{ri}^{0,618} - 2,04 e^{-0,449 T_{ri}} + 1,94 e^{-4,058 T_{ri}} + 0,1 \right], \quad (135)$$

onde,

$$T_{ri} = \frac{T}{T_{ci}}. \quad (136)$$

O cálculo da viscosidade à baixa pressão da mistura é obtido através da

seguinte interpolação

$$\mu^* = \frac{\sum_{i=1}^{N_c} (x_i \mu_i^* \sqrt{M_i})}{\sum_{i=1}^{N_c} (x_i \sqrt{M_i})}, \quad (137)$$

e o parâmetro de viscosidade da mistura é

$$\zeta = \frac{\left[\sum_{i=1}^{N_c} (x_i T_{ci}) \right]^{\frac{1}{6}}}{\left[\sum_{i=1}^{N_c} (x_i M_i) \right]^{\frac{1}{2}} \left[\sum_{i=1}^{N_c} (x_i P_{ci}) \right]^{\frac{2}{3}}}. \quad (138)$$

O volume crítico pode ser obtido através de

$$v_c = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{x_i Z_{ci} R T_{ci}}{P_{ci}} = \sum_{i=1}^{N_c} x_i v_{ci}, \quad (139)$$

A densidade reduzida é definida como,

$$\rho_r = \frac{v_c}{v}, \quad (140)$$

onde v é o volume molar da fase. Finalmente, a viscosidade da fase (em Pa.s) é dada por

$$\mu = 10^{-3} \times \left[\frac{(a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4)^4 - 10^{-4}}{\zeta} + \mu^* \right], \quad (141)$$

com os coeficientes possuindo os valores padrão de

$$a_0 = 0,1023 \quad (142)$$

$$a_1 = 0,023364 \quad (143)$$

$$a_2 = 0,058533 \quad (144)$$

$$a_3 = -0,040758 \quad (145)$$

$$a_4 = 0,0093324 \quad (146)$$

podendo ser alterados caso seja desejado ajustar a correlação com medições experimentais.