

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PETRÓLEO

Dissertação Apresentada à  
Faculdade de Engenharia Mecânica  
Como Requisito Parcial à Obtenção do  
Título de Mestre em Engenharia de Petróleo

SIMULADOR COMPOSICIONAL DE RESERVATÓRIOS  
COM FORMULAÇÃO IMPLÍCITA EM PRESSÃO E SATURAÇÕES E  
SEMI IMPLÍCITA EM COMPOSIÇÕES

Este exemplar corresponde a redação final da tese  
defendida pelo Enge. Celso Cesar Moreira Branco e aprovada  
pela comissão julgadora em 19 de julho de 1991

25/91

  
Prof. Dr. Fernando Rodriguez de La Garza

Autor: Celso Cesar Moreira Branco

Orientador: Fernando Rodriguez de La Garza†

Julho de 1991

70.911.0100

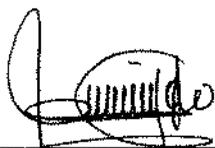
UNICAMP  
BIBLIOTECA CENTRAL

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PETRÓLEO

A dissertação "Simulador Composicional de Reservatórios com Formulação Implícita em Pressão e Saturações e Semi Implícita em Composições", elaborada por Celso Cesar Moreira Branco e aprovada por todos os membros da Banca Examinadora foi aceita pela Sub-Comissão de Pós-Graduação como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia de Petróleo.

Campinas, 19 de Julho de 1991.

Banca Examinadora



---

Fernando Rodríguez de La Garza, PhD.



---

Antonio Cláudio de França Corrêa, PhD.



---

Sidney Stuckenbruck, PhD.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Criador pela fé.

À PETROBRÁS, pela oportunidade.

Agradeço ao Professor Fernando Rodriguez, meu orientador, pelo suporte técnico durante os momentos difíceis da elaboração deste trabalho. Da mesma maneira sou grato ao Professor Antônio Cláudio de França Corrêa meu iniciador na área de simulação de reservatórios.

Aos colegas do CENPES, Valter A. M. Branco, Pedro Wilson Teixeira, Luciane Bonet e Sérgio L. P. F. Coelho pelo apoio durante a redação da tese.

A Oswaldo Pedrosa Jr., que como gerente e técnico soube compreender as dificuldades decorrentes deste trabalho.

Agradeço particularmente a Farid Salomão Shecaira cujos comentários foram essenciais para o bom término deste empreendimento.

Aos meus pais. A Célia e Ana Luiza.

## RESUMO

Apresenta-se um modelo composicional isotérmico, bidimensional do escoamento em reservatórios, implícito na pressão e nas saturações de fluidos e semi implícito nas variáveis composicionais. Apenas os termos de fluxo das equações de transporte são tratados de forma explícita, e somente nas variáveis dependentes das composições dos fluidos. Nas células na região de uma fase a variável primária saturação de gás é substituída por uma variável composicional, que passa a receber tratamento totalmente implícito. A formulação concebida permite a redução da matriz jacobiana original a uma matriz blocada de três por três semelhante àquelas obtidas em simuladores do tipo "black-oil" totalmente implícitos.

Outras características do modelo incluem a consideração de efeitos capilares e gravitacionais e o cálculo dos termos fonte levando em conta as condições de separação de fluidos na superfície. As relações de equilíbrio e as densidades das fases são resolvidas através da equação de estado de Peng e Robinson.

A validação do modelo, baseada na teoria do escoamento bifásico em regime permanente, indicou perfeito ajuste entre resultados teóricos e simulados.

Apresentam-se aplicações a testes de formação, depleção e produção através de injeção de gás, tanto para reservatórios de óleo volátil quanto de gás retrógrado. As conclusões mostram os efeitos da permeabilidade relativa na deposição de condensado bem como a importância da análise de reservatórios através das produções mássicas dos componentes. O desempenho computacional é reportado em todos os casos.

## ABSTRACT

This work presents an isothermal, two-dimensional, compositional reservoir model implicit in pressure and saturations and partially explicit in compositions. Only the flow terms are treated explicitly in the compositional variables. In the single phase cells the primary variable gas saturation is substituted by one compositional variable which is then treated as fully implicit. This formulation was conceived in order to simplify the jacobian matrix since its initial configuration can be reduced to a 3x3 block matrix similar to those achieved in fully implicit black-oil simulators.

Capillary and gravitational effects are considered. Fluids separation conditions at surface are taken into account in the calculation of the source terms. Fluid phase equilibria and densities are computed through the Peng-Robinson equation of state.

The validation of the model was conducted through the steady state two phase flow theory. Analytical and simulated results obtained showed excellent agreement.

Applications to pressure tests in wells, reservoir depletion and gas injection in reservoirs are presented. Conclusions show the effects of the relative permeability curves in deposition of liquid in gas condensate reservoirs and also the importance of the reservoir analysis based on component mass production. Computational performance are reported in all studied cases.

## ÍNDICE

1	Introdução	1
2	Revisão Bibliográfica	6
3	Modelo Matemático	11
3.1	Equações do Escoamento em Meio Poroso.....	11
3.2	Equações do Equilíbrio Líquido Vapor.....	15
3.3	Equações de Pressões Capilares.....	16
3.4	Equações Restritivas.....	17
3.5	Condições de Contorno.....	17
3.6	Condição Inicial.....	18
4	Solução Numérica do Sistema de Equações	19
4.1	Discretização das Equações de Fluxo.....	19
4.2	Linearização do Sistema de Equações - Metodologia Proposta.....	35
4.3	Equações Matriciais para a Formulação Implícita em Pressão e Saturações e Semi Implícita em Composições.	40
4.4	Tratamento de Células com Fase Única.....	49
4.5	Tratamento dos Termos Fonte.....	54
4.6	Inicialização da Malha de Simulação.....	61
5	Propriedades de Rocha e Fluidos	68
5.1	Pressões Capilares.....	68
5.2	Permeabilidades Relativas.....	69
5.3	A Equação de Estado de Peng e Robinson.....	71
5.4	Cálculo das Densidades.....	75
5.5	Cálculo das Fugacidades.....	77
5.6	Cálculo das Viscosidades.....	78
5.7	Cálculo de Pressões de Saturação.....	83
5.8	Cálculo de Liberação Instantânea "Flash".....	89

6	Estrutura Lógica do Modelo Computacional	96
7	Validação do Modelo	106
7.1	Teoria do Escoamento Bifásico em Regime Permanente	106
7.2	Comparação dos Resultados Analíticos com os da Simulação.....	111
8	Aplicações do Modelo e Discussão de Resultados	124
8.1	Simulação de Testes de Pressão em Poços.....	124
8.2	Simulação de Depleção em Reservatórios.....	131
8.3	Simulação de Produção de Reservatórios com Ciclagem de Gás.....	139
9	Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros	147
	Referências Bibliográficas	150
	Apêndice A - Dedução das Equações do Equilíbrio de Fases	155
	Apêndice B - Derivadas das Equações de Fluxo e de Equilí- brio Líquido Vapor	162
	Apêndice C - Derivadas das Densidades e do Fator Z	176
	Apêndice D - Derivadas das Fugacidades	181
	Apêndice E - Derivadas das Viscosidades	188
	Apêndice F - Propriedades dos Pseudo Componentes e Tabelas de Pressões Capilares	193

## Lista de Tabelas

7.1	Composição inicial dos fluidos.....	113
7.2	Dados dos reservatórios simulados para validação.....	116
7.3	Parâmetros de produção dos poços para validação.....	116
7.4	Parâmetros de simulação para validação.....	117
7.5	Dados de desempenho computacional das simulações para validação.....	123
8.1	Parâmetros de simulação para testes de formação.....	126
8.2	Dados de desempenho computacional das simulações de teste de formação.....	131
8.3	Dados de reservatório e de produção para as simula- ções de depleção.....	133
8.4	Dados de desempenho computacional das simulações de depleção.....	138
8.5	Composição dos gases injetados nas ciclagens.....	139
8.6	Dados de reservatório e de produção para as simula- ções de ciclagem.....	142
8.8	Dados de desempenho computacional nas simulações de ciclagem.....	146

## Lista de Figuras

4.1	Esquema da matriz jacobiana para uma malha de $N_x=4$ e $N_z=3$ .....	41
4.2	Disposição dos elementos não nulos da célula $i,k$ na matriz jacobiana.....	43
4.3	Esquema representativo da equação matricial (M5).....	45
7.1	Fração molar na fase líquida $x$ pressão para o gás do poço 3-RNS-90d.....	114
7.2	Fração molar da fase vapor $x$ pressão para o óleo volátil.....	114
7.3	Curvas de permeabilidade relativa gás óleo.....	115
7.4	Vazões de óleo e gás e pressão de fluxo no poço pro- dutor $x$ tempo (caso a, reservatório linear de gás)....	118
7.5	Vazão de óleo e pressão de fluxo no poço produtor $x$ tempo (caso b, reservatório radial de gás).....	118
7.6	Razão de mobilidades das fases óleo e gás e relação das frações molares $L/V$ $x$ pressão (casos a e b).....	119
7.7	Constantes de equilíbrio dos pseudo componentes $P_1$ e $P_3$ $x$ pressão (casos a e b).....	119
7.8	Vazões de óleo e gás e pressão de fluxo no poço pro- dutor $x$ tempo (caso c, reservatório linear de óleo)...	121
7.9	Vazão de gás e pressão de fluxo no poço produtor $x$ tempo (caso d, reservatório radial de óleo).....	121
7.10	Razão de mobilidades das fases óleo e gás e relação das frações molares $L/V$ $x$ pressão (casos c e d).....	122
7.11	Constantes de equilíbrio dos pseudo componentes $P_1$ e $P_3$ $x$ pressão (casos C e d).....	123
8.1	Pressão de fluxo $x$ tempo, testes de formação em po- ços de gás retrógrado.....	128

8.2	Saturação de óleo x tempo, testes de formação em poços de gás retrógrado.....	128
8.3	Pressão de fluxo x tempo, testes de formação em poços de óleo volátil.....	129
8.4	Saturação de gás x tempo, testes de formação em poços de óleo volátil.....	130
8.5	Vazão de óleo e razão gás óleo x tempo, depleção em reservatório de gás retrógrado.....	134
8.6	Vazão de gás e pressão de fluxo x tempo, depleção em reservatório de gás retrógrado.....	134
8.7	Produção mássica acumulada dos pseudo componentes P1 e P3+, depleção em reservatório de gás retrógrado.....	135
8.8	Vazão de óleo e razão gás óleo x tempo, depleção em reservatório de óleo volátil.....	137
8.9	Vazão de gás e pressão de fluxo x tempo, depleção em reservatório de óleo volátil.....	137
8.10	Produção mássica acumulada dos pseudo componentes P1 e P3+, depleção em reservatório de óleo volátil.....	138
8.11	Vazão de óleo e razão gás óleo x tempo, ciclagem em reservatório de gás retrógrado.....	143
8.12	Produção mássica acumulada dos pseudo componentes P3+, ciclagem em reservatório de gás retrógrado.....	143
8.13	Vazão de óleo e razão gás óleo x tempo, ciclagem em reservatório de óleo volátil.....	144
8.14	Vazão de gás x tempo, ciclagem em reservatório de óleo volátil.....	145
8.15	Produção mássica acumulada dos pseudo componentes P3+, ciclagem em reservatório de óleo volátil.....	145

## Nomenclatura

### Símbolos

- a - constante da equação de Peng e Robinson,  $[\text{Pa}\cdot\text{m}^6/\text{Kg mol}^2]$
- A - (1) Capítulo 3 : área,  $[\text{m}^2]$   
- (2) Capítulo 5 : constante da equação de Peng e Robinson
- b - constante da equação de Peng e Robinson,  $[\text{m}^3/\text{Kg mol}]$
- $b_w$  - inverso do fator volume de formação da água,  $[\text{m}^3/\text{m}^3]$
- B - constante da equação de Peng e Robinson
- c - correção do volume molar na equação de Peng e Robinson modificada,  $[\text{m}^3/\text{Kg mol}]$
- $c_r$  - compressibilidade do volume poroso,  $[\text{Pa}^{-1}]$
- D - profundidade,  $[\text{m}]$
- $\hat{e}$  - vetor unitário
- $f_m$  - fugacidade do componente m,  $[\text{Pa}]$
- $f_{mf}$  - fugacidade do componente m na fase f,  $[\text{Pa}]$
- F - função genérica
- g - aceleração da gravidade,  $[\text{m}/\text{s}^2]$
- G - energia livre de Gibbs,  $[\text{J}]$
- $\bar{G}$  - energia livre molar parcial de Gibbs,  $[\text{J}/\text{Kg mol}]$
- $h_{ref}$  - profundidade de referência,  $[\text{m}]$
- H - entalpia,  $[\text{J}]$
- $H_x$  - comprimento do reservatório na direção x,  $[\text{m}]$
- $H_y$  - comprimento do reservatório na direção y,  $[\text{m}]$
- $H_z$  - comprimento do reservatório na direção z,  $[\text{m}]$
- IP - índice de produtividade de poço,  $[\text{m}^3]$
- J - elemento genérico de matriz jacobiana
- $k_{rf}$  - permeabilidade relativa à fase f, [fração]
- $k_{rog}$  - permeabilidade relativa ao óleo em ambiente contendo gás e óleo móveis, [fração]
- $k_{row}$  - permeabilidade relativa ao óleo em ambiente contendo água e óleo móveis, [fração]
- K - permeabilidade absoluta,  $[\text{m}^2]$
- $\bar{K}$  - tensor de permeabilidades absolutas
- $K_m$  - constante de equilíbrio do componente m
- L - fração molar na fase líquida, [fração]
- $n_f$  - número de moles total da fase f,  $[\text{Kg mol}]$
- $n_m^f$  - número de moles do componente m na fase f,  $[\text{Kg mol}]$

- $\vec{n}$  - vetor normal a uma superfície
- $N_x$  - número de células na malha ao longo da direção x ou r
- $N_z$  - número de células na malha ao longo da direção z
- $p$  - pressão, [Pa]
- $p_f$  - pressão na fase f, [Pa]
- $p_{ref}$  - pressão de referência, [Pa]
- $p_{wf}$  - pressão de fluxo no poço, [Pa]
- $P_c$  - pressão crítica, [Pa]
- $P_{cgo}$  - pressão capilar gás óleo, [Pa]
- $P_{cgoe}$  - pressão capilar gás óleo de entrada, [Pa]
- $P_{cgom}$  - pressão capilar gás óleo máxima, [Pa]
- $P_{cwo}$  - pressão capilar água óleo, [Pa]
- $P_{cwoe}$  - pressão capilar água óleo de entrada, [Pa]
- $P_{cwom}$  - pressão capilar água óleo máxima, [Pa]
- PM - peso molecular
- $q_f$  - vazão volumétrica da fase f em reservatório, [m<sup>3</sup>/s]
- $q_{fs}$  - vazão volumétrica da fase f na superfície, [m<sup>3</sup>/s]
- $q_m$  - vazão molar do componente m, [Kg mol/s]
- Q - calor, [J]
- $Q_{m_a}$  - vazão molar do componente m na face a, [Kg mol/s]
- $Q_{w_a}$  - vazão volumétrica da água na face a, [m<sup>3</sup>/s]
- $Q_{th}$  - vazão molar total de hidrocarbonetos no reservatório, [Kgmol/s]
- $Q_{th_s}$  - vazão molar total de hidrocarbonetos em condições de separação de fluidos na superfície, [Kgmol/s]
- r - direção radial ou coordenada ao longo da direção r, [m]
- $r_e$  - raio externo de reservatório cilíndrico, [m]
- $r_o$  - raio do nó de uma célula com poço em malha radial, [m]
- $r_w$  - raio de poço, [m]
- R - constante universal dos gases [Pa.m<sup>3</sup>/Kg mol.°K]
- S - entropia, [J/°K]
- $S_f$  - saturação da fase f, [fração]
- $S_{wi}$  - saturação de água irreducível, [fração]
- t - tempo, [s]
- T - temperatura, [°K]
- $T_c$  - temperatura crítica, [°K]
- $T_r$  - temperatura reduzida
- $\vec{u}_f$  - vetor velocidade da fase f, [m/s]

- U - energia interna, [J]
- v - volume molar, [m<sup>3</sup>/Kg mol]
- $\tilde{v}$  - volume molar corrigido, [m<sup>3</sup>/Kg mol]
- V - (1) Capítulo 3 : volume, [m<sup>3</sup>]
- (2) Capítulos 5 e 7 : fração molar na fase vapor, [fração]
- $V_c$  - volume crítico, [m<sup>3</sup>/Kg mol]
- $V_p$  - volume poroso, [m<sup>3</sup>]
- w - fator acêntrico
- $w_m$  - fração molar do componente m na fase aquosa, [fração]
- W - trabalho, [J]
- x - direção x ou coordenada ao longo da direção x, [m]
- $x_m$  - fração molar do componente m na fase líquida, [fração]
- X - variável genérica
- $Y_m$  - fração molar do componente m na fase vapor, [fração]
- y - direção y ou coordenada ao longo da direção y, [m]
- z - direção z ou coordenada ao longo da direção z, [m]
- $z_m$  - fração molar global do componente m num fluido, [fração]
- Z - fator de compressibilidade
- $Z_f$  - fator de compressibilidade da fase f

#### Letras gregas

- $\alpha_a$  - fator geométrico da face a, [m<sup>3</sup>]
- $\delta_{mj}$  - coeficiente de interação binária dos componentes m e j
- $\delta\bar{X}$  - vetor de diferenças finitas no vetor de variáveis  $\bar{X}$
- $\Delta t$  - intervalo de passo de tempo, [s]
- $\bar{\epsilon}$  - vetor de tolerância
- $\phi$  - porosidade, [fração]
- $\Phi_f$  - potencial da fase f, [Pa]
- $\gamma_f$  - peso específico da fase f, [N/m<sup>3</sup>]
- $\bar{\gamma}$  - peso específico médio de um fluido, [N/m<sup>3</sup>]
- $\lambda_f$  - mobilidade da fase f, [Kg mol/m<sup>3</sup>.Pa.s]
- $\rho$  - densidade molar, [Kg mol/m<sup>3</sup>]
- $\rho_f$  - densidade molar da fase f, [Kg mol/m<sup>3</sup>]
- $\rho_{fs}$  - densidade molar da fase f na superfície, [Kg mol/m<sup>3</sup>]
- $\xi_f$  - potencial químico do componente m, [J/Kg mol]
- $\mu_f$  - viscosidade dinâmica da fase f, [Pa.s]
- $\Omega_a$  - constante da equação de Peng e Robinson
- $\Omega_b$  - constante da equação de Peng e Robinson

## Subescritos

- c - relativo a componente ou a propriedades críticas
- f - fase
- g - fase gás
- h - relativo a hidrocarboneto
- i - relativo à direção x ou radial
- j - identificador de componente
- k - relativo à direção z
- l - fase líquida
- m - identificador de componente
- n - índice de passo de tempo ou identificador de componente
- o - fase óleo
- r - índice para a direção radial
- s - condições de pressão e temperatura de superfície
- t - índice de tempo
- v - fase vapor
- w - fase água
- x - índice para a direção x
- z - índice para a direção z
- u - índice de iteração

## Sobrescritos

- F - número total de fases
- k - índice de fase
- l - fase ou fase líquida
- v - fase vapor
- T - indicador de vetor transposto

## 1. INTRODUÇÃO

A Indústria do Petróleo, atividade de inegável importância na Economia das Nações, compreende um amplo e diversificado espectro de ramos da Engenharia. Suas ações na área de produção desenvolvem-se desde a perfuração exploratória, passam pela avaliação e delimitação das jazidas culminando com a definição, implementação e acompanhamento de estratégias racionais de sua exploração.

Nesse contexto, a uma disciplina - Engenharia de Reservatórios - compete papel essencial. Seu objetivo, em sentido amplo, é o de maximizar a recuperação econômica de hidrocarbonetos através da seleção, entre diferentes alternativas, dos métodos mais adequados ao desenvolvimento de um campo de petróleo em particular. Algumas importantes questões são investigadas como, por exemplo, a definição do número e disposição ótima dos poços, intervalos a serem completados, métodos de elevação dos fluidos produzidos, dados laboratoriais de rocha e fluidos, análise da viabilidade do emprego de técnicas especiais de recuperação, injeção de água e gás, e, em especial, previsões de produção que servem de base para as estimativas de investimentos, despesas e receitas.

Esses estudos têm sido desenvolvidos com o auxílio de modelos que procuram reproduzir o comportamento do sistema físico sob observação. Os primeiros modelos empregados basearam-se na análise das curvas de declínio [1], metodologia de alto grau de empirismo, que leva em conta apenas a evolução histórica da produção dos poços. Num segundo estágio passaram-se a utilizar os assim chamados modelos de dimensão zero ou de balanço de materiais [2]. Nesse caso a jazida passou

a ser encarada como um tanque, desconsiderando-se sua geometria externa, porém com propriedades físicas semelhantes às obtidas em laboratório para a rocha e fluidos reais. Finalmente, na década de 60, surgem os chamados simuladores de reservatórios, que se tornaram possíveis devido ao avanço na tecnologia dos computadores digitais.

Uma definição simples desses algoritmos é dada por Coats [3]. Segundo esse autor, um simulador de reservatórios é um conjunto de equações de diferenças, escritas para cada uma das células em que o sistema físico - o reservatório - é subdividido, e que representam as leis de conservação de massa, de energia e de quantidade de movimento, esta última aproximada pela lei empírica de Darcy que rege o escoamento de fluidos em meios porosos. Constitui-se, destarte, um sistema de equações que tem como característica importante o fato de muitas vezes estas serem não lineares, o que impõe a utilização de métodos numéricos iterativos para sua solução [4].

Os primeiros simuladores foram concebidos levando em conta as três fases normalmente presentes no reservatório - gás, óleo e água - permitindo uma representação adequada dos quatro mecanismos básicos de recuperação de hidrocarbonetos, quais sejam, a expansão de fluidos, seu deslocamento por força da injeção de um segundo fluido, drenagem gravitacional e embebição capilar. Esses modelos, conhecidos por "black-oil", são ainda amplamente empregados na indústria.

Na década de 70, período da primeira crise do petróleo, cresce o interesse pelos chamados métodos especiais de recuperação. A então nascente tecnologia tinha por objetivo mobilizar ou acelerar a recuperação do óleo residente no reservatório, através da utilização de agentes externos. A

aplicação desses agentes - academicamente classificados, de acordo com seu mecanismo de ação em térmicos, químicos e miscíveis - exigiam uma cuidadosa análise de viabilidade, dados os altos custos de implantação e operação envolvidos. Essa nova demanda levou ao desenvolvimento de simuladores de propósito particular uma vez que os complexos processos físicos e químicos não eram levados em conta nos tradicionais "black-oil". Como um dos produtos dessa evolução tecnológica são criados os modelos ditos composicionais, que responderam ainda necessidade da indústria de estudar, com maior detalhe, reservatórios de óleo volátil e de gás e condensado. Concentrar-se-á, daqui por diante, a discussão nesse tipo de modelo.

Novamente citando Coats [3], um simulador composicional é indicado naquelas situações em que o comportamento termodinâmico dos fluidos, em termos de suas relações de pressão, volume e temperatura (PVT), não pode ser adequadamente descrito pelos métodos convencionais. Assim, as fases hidrocarbonetos não são mais consideradas como de composição fixa como nos "black-oil", outrossim são agora representadas como uma mistura de  $n_c$  componentes que pode variar ao longo do espaço e do tempo. Resolve-se, portanto, de forma rigorosa a transferência de massa entre as fases líquida e vapor de acordo com o comportamento de fase especificado para cada componente. Processos que dependem fortemente da composição dos fluidos como o escoamento miscível por injeção de dióxido de carbono ( $CO_2$ ), revaporização de óleo residual por injeção de gás pobre, depleção natural de reservatórios de óleo volátil e de gás e condensado, entre outros, são mais acuradamente reproduzidos através de técnicas composicionais.

Uma característica importante desse tipo de modelo é o grande número de equações envolvidas, por célula da malha, se comparado com os demais. Diferentes abordagens matemáticas para a solução desse sistema de equações podem ser adotadas. São muito comuns na área de simulação o emprego do método das diferenças finitas para a discretização das equações diferenciais parciais que descrevem o escoamento dos fluidos, e do processo iterativo de Newton-Raphson para sua solução [4]. Baseados nos procedimentos citados acima, diversas formulações têm sido propostas diferindo no maior ou menor grau de implicitude adotado. Esse último conceito está ligado ao número de variáveis, dentre o total, que são tratadas de forma prioritária no procedimento de Newton-Raphson. Num extremo estão os métodos explícitos, onde apenas a pressão é variável primária, reduz-se o esforço computacional requerido mas, em contrapartida, a solução é menos estável [4]. Noutro extremo se situa o processo totalmente implícito onde todas as variáveis são primárias. A solução é incondicionalmente estável porém o esforço dispendido é substancialmente maior.

Outro aspecto relevante diz respeito à condução dos cálculos volumétricos e de equilíbrio entre as fases. No passado foram usados dados tabelados ou correlações para a geração de constantes de equilíbrio. Atualmente dá-se preferência às equações de estado [5] por se acreditar que estas provêm maior consistência nos cálculos de propriedades e de equilíbrio de fases, particularmente quando as composições destas se aproximam da região crítica [6].

O presente trabalho apresenta um modelo totalmente composicional, trifásico, isotérmico, implícito nas variáveis pressão e saturações de fluidos e com tratamento explícito das

variáveis composicionais nos termos de fluxo das equações de transporte. A equação de estado de Peng e Robinson [7] é empregada nos cálculos de propriedades e equilíbrio de fases. Esse esquema procura aliar as vantagens do procedimento implícito ao mesmo tempo em que, gerando equações matriciais semelhantes às obtidas nos modelos "black-oil", busca uma redução no esforço computacional requerido. Tal virtude foi a principal motivação do estudo ora apresentado.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Conceitualmente, um simulador composicional é um algoritmo que permite o acompanhamento da movimentação de fluidos num reservatório ao longo do espaço e do tempo, bem como resolve as condições de equilíbrio entre as fases presentes. Sua formulação matemática é, em geral, constituída de um conjunto de  $n_c$  equações de balanço molar para os  $n_c$  componentes hidrocarbonetos; e uma adicional, de balanço volumétrico, para a água. São as chamadas equações de fluxo. Além dessas compõem o sistema outras  $n_c$  equações de equilíbrio de fases; duas relações de pressão capilar; uma expressão restritiva relativa às saturações e duas outras para as frações molares nas fases líquida e vapor. Assim, dispõe-se, por bloco da malha de simulação, de um total de  $2n_c + 6$  equações para  $2n_c + 6$  variáveis, quais sejam, pressões e saturações nas fases óleo, gás e água e  $2n_c$  frações molares no líquido e vapor.

Os primeiros simuladores composicionais de aplicação geral foram desenvolvidos por Kazemi & Vestal [8] em 1978 e por Fussel & Fussel [9] em 1979. De forma resumida, o procedimento usado em ambas as referências consiste na combinação linear das  $n_c + 1$  equações de fluxo em uma única, por bloco da malha, que é então derivada em relação à variável primária pressão, usando dados das demais variáveis obtidos no passo de tempo prévio. O sistema de equações assim formado é disposto em uma matriz, conhecida como matriz jacobiana, sendo então resolvido de forma iterativa. Atingida convergência na solução, as demais incógnitas, saturações e composições, são recalculadas usando os novos valores de pressão. Prossegue-se então para um novo passo de tempo. Essa técnica, descrita acima em linhas gerais,

caracteriza o procedimento de Newton-Raphson. O tratamento explícito dos termos de fluxo interblocos - não são desenvolvidas derivadas em relação às saturações e composições - identifica o que se convencionou chamar de método IMPES. Essa alternativa se por um lado é econômica em termos de demanda computacional, por outro impõe limitações no tamanho do passo de tempo visto que ela não possui estabilidade absoluta [4],[6]. Kazemi & Vestal [8] apresentaram ainda uma interessante discussão a respeito da inicialização dos dados nos blocos da malha bem como propuseram um método para contemplar as condições de separação de fluidos na superfície ao longo da simulação. Fussel & Fussel [9], por sua vez, introduziram um algoritmo de solução otimizado conhecido como MVNR ("Minimum Variable Newton-Raphson"). Esses autores foram ainda os primeiros a empregar uma equação de estado nos cálculos de propriedades e de equilíbrio entre as fases, no caso a de Redlich & Kwong [10], já que Kazemi & Vestal utilizaram dados tabelados e correlações na determinação das constantes de equilíbrio.

Em 1979 Coats [6] apresentou uma formulação totalmente implícita para o problema, igualmente baseada no método de Newton-Raphson. Essa opção tem como grande vantagem a garantia da estabilidade incondicional da solução, fato que viabiliza intervalos maiores de passo de tempo. Não obstante, têm como desvantagens a possibilidade de custo mais acentuado de esforço computacional quando comparado ao do método IMPES, bem como o risco de maiores erros de truncamento, relacionado ao uso de passos de tempo muito dilatados.

Nghiem, Fong & Aziz [11] em 1981, em trabalho discutido por Mansoori [12] e replicado por Nghiem [13],

derivaram uma variante do método de Kazemi & Vestal [8] ainda implícito apenas na pressão, mas empregando equação de estado no estudo do comportamento PVT dos fluidos. Nesse mesmo trabalho, os autores, seguindo os passos de Coats [6], implementaram uma metodologia para a correção de dados laboratoriais de permeabilidade relativa e de pressão capilar gás-óleo de forma a contemplar os efeitos da tensão interfacial dependente da composição das fases. Outra proposta sugerida por eles foi o uso de ponderação com dois pontos a montante para os termos das equações de fluxo avaliados na interface das células. Um estudo semelhante ao de Nghiem, Fong & Aziz foi publicado em 1989 por Schiozer [14].

Em 1983 Watts [15], baseando-se em idéia concebida por Acs, Doleschall & Farkas [16], apresentou uma formulação substancialmente diferente das anteriores. Seu método, dito sequencial implícito, procurou combinar aspectos positivos da formulação IMPES com as vantagens inerentes a uma de maior implicitude. Dessa forma, seu modelo, num primeiro estágio, resolve o sistema de equações apenas para a variável pressão, operação que é seguida por um cálculo implícito nas saturações. A técnica de construção da equação da pressão é baseada na premissa de que o volume de fluidos ocupando um bloco deve ser igual ao espaço disponível, ou seja o volume poroso deste bloco. Através da expansão de ambos esses termos em uma série de Taylor de primeira ordem deduz-se uma expressão relacionando variações nos volumes porosos e nos volumes das fases causadas por alterações na pressão. Este tipo de formulação foi qualificada por seu autor como "muito eficiente". Wong et alii. [5], no entanto, ressaltam não haver reportada na literatura nenhuma aplicação a casos práticos.

Em artigos publicados em 1985 e em 1986 Coats [17] e Coats & Smart [18] foram responsáveis por novas e importantes contribuições em temas ligados à simulação composicional. No primeiro deles Coats criou um método de grupamento de componentes, que ficou conhecido como "pseudoização", objetivando reduzir o número de elementos necessários à representação de um fluido, com conseqüente redução do esforço computacional requerido quando de sua simulação. Nesse mesmo trabalho o autor estudou a depleção de reservatórios de gás e condensado concluindo existir situações onde a modelagem composicional é imperiosa e outras onde a aproximação "black-oil" modificada é suficiente. Num estudo posterior Coats & Smart [18] introduziram o uso da regressão não linear multivariada com o fito de ajustar alguns dos parâmetros de equações de estado, de forma a que estas possibilitassem a reprodução dos dados gerados em laboratório com maior grau de fidelidade. Esta técnica permitiu um avanço no emprego dessas equações por lhes conferir maior confiabilidade em regiões de pressão, temperatura e composições não investigadas previamente em laboratório.

Em 1987 Wong et alii. [5], dando seqüência a relatório de Nutakki et alii. [19], realizaram um estudo comparativo entre algumas das formulações composicionais descritas na literatura. Nessa ocasião os autores fizeram uma tentativa de classificação das mesmas tomando por critério o modo como as condições de equilíbrio de fase eram tratadas, bem como estudaram métodos de adaptação de modelos composicionais para o caso de simulação "black-oil".

Concluindo esta revisão cumpre mencionar o modelo de Quandalle & Savary [20], apresentado em 1989 dando continuidade

a um artigo anterior do próprio Quandalle e de Sabathier [21]. Esses autores derivaram uma formulação implícita em pressão e saturações tendo, portanto, grau de implicitude intermediário entre o IMPES e o totalmente implícita. A rigor, o método de Quandalle & Savary possui dois grupos de variáveis primárias a depender do número de fases hidrocarbonetos presentes numa célula. Para as de duas fases, são variáveis primárias pressão e saturações, enquanto nas de fase única, pressão, saturação de água e uma incógnita composicional são consideradas prioritariamente. Além das três variáveis apontadas acima são também calculados outros  $n_c - 2$  dados composicionais com as  $n_c + 1$  equações de fluxo. Ao final de um passo de tempo é feito então um cálculo de liberação instantânea ("flash") de forma a se obter as restantes  $n_c + 1$  ou  $n_c + 2$  incógnitas composicionais, a depender do número de fases existentes no bloco.

A investigação de Quandalle & Savary serviu de base para uma formulação semelhante, originalmente concebida por Garza [22], que foi implementada no presente trabalho. Nesse modelo, que será visto adiante em detalhes, combinam-se alguns aspectos do tratamento totalmente implícito de Coats com as idéias de Quandalle & Savary no que concerne à implicitude em pressão e saturações e no tratamento das células de uma ou duas fases.

### 3. MODELO MATEMÁTICO

A modelagem matemática do escoamento multifásico em um reservatório, adotando-se uma abordagem composicional, compreende o seguinte sistema de equações :

- $n_c + 1$  equações de escoamento em meio poroso, uma para cada componente do sistema. Note-se que alguns compostos não hidrocarbonetos usualmente encontrados nos petróleos em pequenos teores, como  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{S}$ , serão aqui igualmente referidos como "componentes hidrocarbonetos";

- $n_c$  equações de equilíbrio termodinâmico entre as fases hidrocarbonetos líquido e vapor;

-duas expressões de pressão capilar que relacionam as pressões nas fases água, hidrocarboneto líquido (óleo) e hidrocarboneto vapor (gás), estas duas últimas doravante referidas como fases líquida e vapor;

-uma expressão restritiva quanto à soma de saturações;

-duas expressões restritivas quanto à soma das frações molares nas fases líquida e vapor.

#### 3.1 Equações do Escoamento em Meio Poroso

O escoamento de fluidos em meio poroso é matematicamente modelado através de equações que combinam os princípios de conservação de massa e de quantidade de movimento. Este último é aproximado pela lei empírica de Darcy, admitida como válida sob certas condições, quais sejam:

-escoamento isotérmico e laminar;

-meio poroso homogêneo, isotrópico, mecânica e quimicamente inerte em relação aos fluidos que o percolam.

Isto posto, as equações de balanço de massa, na sua forma integral sobre o volume V, podem ser expressas por [23] :

$$- \int_V \nabla \cdot \left( x_m \rho_o \vec{u}_o + y_m \rho_g \vec{u}_g + w_m \rho_w \vec{u}_w \right) dV = \quad (3.1)$$

$$= \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g + w_m \rho_w S_w \right) \right] dV + q_m$$

Onde  $m=1,2,\dots,n_c, n_c+1$ ; sendo o componente  $n_c+1$  relativo à água.

Aplicando o teorema da divergência de Gauss no lado esquerdo da equação (3.1), transforma-se a integral em volume em uma de superfície:

$$- \int_A \left( x_m \rho_o \vec{u}_o + y_m \rho_g \vec{u}_g + w_m \rho_w \vec{u}_w \right) \cdot \vec{n} dA = \quad (3.2)$$

$$= \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g + w_m \rho_w S_w \right) \right] dV + q_m$$

Introduzindo agora a expressão da lei de Darcy para o escoamento de uma fase f:

$$\vec{u}_f = - \bar{K} \frac{k_{rf}}{\mu_f} \nabla \phi_f \quad (f = o, g, w) \quad (3.3)$$

Onde o gradiente do potencial de fluxo da fase f é definido por:

$$\nabla \phi_f = \nabla p_f - \rho_f g \nabla D \quad (3.4)$$

Substituindo a equação (3.3) na expressão (3.2) obtém-se:

$$\int_A \bar{K} \left( x_m \rho_o \frac{k_{r_o}}{\mu_o} \nabla \Phi_o + y_m \rho_g \frac{k_{r_g}}{\mu_g} \nabla \Phi_g + w_m \rho_w \frac{k_{r_w}}{\mu_w} \nabla \Phi_w \right) \cdot \vec{n} \, dA =$$

(3.5)

$$= \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g + w_m \rho_w S_w \right) \right] dV + q_m$$

Admitindo agora que não existem componentes hidrocarbonetos na fase água nem tampouco o componente água ocorre nas fases líquida e vapor, geram-se as relações:

$$w_m = 0 \quad m=1, 2, \dots, n_c \quad (3.6)$$

$$w_{n_c+1} = z_w = 1 \quad (3.7)$$

$$x_m = \frac{n_m^l}{n_l} \quad m=1, 2, \dots, n_c \quad (3.8)$$

$$x_{n_c+1} = x_w = 0 \quad (3.9)$$

$$y_m = \frac{n_m^v}{n_v} \quad m=1, 2, \dots, n_c \quad (3.10)$$

$$y_{n_c+1} = y_w = 0 \quad (3.11)$$

Onde  $n_f$  ( $f = l, v$ ) é o número total de moles da fase  $f$  e  $n_m^f$  é o número de moles do componente  $m$  na fase  $f$ .

Substituindo as relações de (3.6) a (3.11) em (3.5) obtém-se:

$$\int_A \bar{K} \left( x_m \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} \nabla \Phi_o + y_m \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \nabla \Phi_g \right) \cdot \vec{n} \, dA = \quad (3.12)$$

$$= \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right) \right] dV + q_m$$

Sendo que o termo fonte  $q_m$  é dado por:

$$q_m = x_m \rho_o q_o + y_m \rho_g q_g \quad (3.13)$$

Onde  $m=1,2,\dots,n_c$  e ainda:

$$\int_A \bar{K} \left( b_w \frac{k_{rw}}{\mu_w} \nabla \Phi_w \right) \cdot \vec{n} \, dA = \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi b_w S_w \right] dV + b_w q_w \quad (3.14)$$

Para  $m = n_c + 1$ , ou seja para a água. Em (3.14) o balanço de massa foi substituído por um balanço de volume em condição de superfície através de:

$$\rho_w = b_w \rho_{wcs}$$

Onde  $\rho_{wcs}$  é a massa específica da água em condições de superfície (constante) e  $b_w$  é o inverso do fator volume de formação da água.

### 3.2 Equações do Equilíbrio Líquido Vapor

Uma hipótese adotada no modelo composicional ora descrito diz respeito à existência de equilíbrio instantâneo entre as fases líquida e vapor. Ou seja, em qualquer ponto do reservatório, sob quaisquer níveis de pressão, temperatura e composições de fases, admite-se que líquido e vapor alcançam o equilíbrio de forma imediata. Essa hipótese foi também considerada nos demais modelos revisados na literatura [5], [6], [8], [11], [14], [15], [20].

A clássica dedução das relações termodinâmicas que governam o equilíbrio de fases [24] é detalhada no Apêndice A. Em síntese, a condição de equilíbrio que é imposta se traduz na igualdade das fugacidades de cada um dos  $n_c$  componentes da mistura, em todas as fases presentes no sistema. Neste trabalho consideram-se apenas duas fases, quais sejam hidrocarboneto líquido e vapor. Assim sendo a equação do equilíbrio de fases tem a seguinte expressão:

$$f_{ml} = f_{mv} \quad \text{para } m = 1, 2, \dots, n_c \quad (3.15)$$

Onde, por definição, o ente termodinâmico fugacidade de um componente  $m$  em uma mistura, escrito como função de temperatura, volume e frações molares, é dado por [24]:

$$\ln \left( \frac{f_m}{p x_m} \right) = \frac{1}{RT} \int_{\infty}^V \left[ \frac{RT}{V} - \left( \frac{\partial p}{\partial n_m} \right)_{T, V, n_{j, j \neq m}} \right] dV - \ln Z \quad (3.16)$$

Com o uso de uma equação de estado, que relaciona as

variáveis pressão, volume e temperatura, é possível integrar-se a expressão (3.16) levando-a a uma forma mais trabalhável.

### 3.3 Equações de Pressões Capilares

O conceito de pressão capilar, longamente discutido por Leverett [25], traduz os efeitos da tensão interfacial existente quando do contato entre dois fluidos imiscíveis. Em meios porosos a magnitude dessa variável torna-se particularmente importante. Entre os fatores que a afetam estão os seguintes:

- tensão interfacial entre os fluidos;
- características de molhabilidade da rocha;
- geometria dos poros em termos de suas dimensões e formas;
- histórico de saturações do meio, uma vez que a pressão capilar tem comportamento com histerese;

Para sistemas óleo e água admite-se, usualmente, que o fluido preferencialmente molhante é a água. Expressa-se portanto a pressão capilar água-óleo por:

$$P_{cwo}(S_w) = p_o - p_w \quad (3.17)$$

Já em sistemas gás e óleo, este último é admitido como fluido molhante; a pressão capilar gás-óleo é dessa forma definida como:

$$P_{cgo}(S_g) = p_g - p_o \quad (3.18)$$

### 3.4 Equações Restritivas

As seguintes expressões, derivadas das definições de saturação de fluidos e de frações molares, complementam o modelo matemático sob análise:

$$S_g + S_w + S_o = 1 \quad (3.19)$$

$$\sum_{m=1}^{n_c} x_m = 1 \quad (3.20)$$

$$\sum_{m=1}^{n_c} y_m = 1 \quad (3.21)$$

Nota-se que a simples explicitação de uma variável em função das demais permitirá, através de (3.19), (3.20) e (3.21), a redução em três variáveis e em três incógnitas do sistema de equações do modelo matemático.

### 3.5 Condições de Contorno

Admite-se que o reservatório objeto da simulação é fechado nos seus limites. Tal situação é traduzida matematicamente pela condição de contorno de Neumann [4], que no caso de fluxo bidimensional num reservatório retângular é expressa por:

$$\left. \frac{\partial \Phi_f}{\partial x} \right|_{\substack{x=0 \\ x=H_x}} = 0 \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial \Phi_f}{\partial z} \right|_{\substack{z=0 \\ z=H_z}} = 0$$

Onde  $f = o, g, w$ ; e  $H_x$  e  $H_z$  são os limites externos do

reservatório ao longo dos eixos  $x$  e  $z$ .

A interação do reservatório com o exterior foi simulada através de termos fonte nas equações de fluxo. O tratamento desses termos será detalhado mais adiante.

### 3.6 Condição Inicial

As pressões e saturações no reservatório no tempo zero são determinadas a partir de valores fornecidos em um ponto de referência. Admite-se a existência de equilíbrio capilar e gravitacional. A composição inicial do fluido é sempre considerada conhecida.

#### 4. SOLUÇÃO NUMÉRICA DO SISTEMA DE EQUAÇÕES

Neste capítulo será descrito o método de solução empregado ao modelo matemático apresentado anteriormente. Do conjunto de equações que o compõe, aquelas chamadas de equações de fluxo se encontram em forma diferencial caracterizada por fortes não linearidades. Assim sendo, para sua resolução adotou-se uma representação discretizada do *continuum*, o que gerou um sistema algébrico de equações não lineares. Este sistema foi resolvido pelo método numérico de Newton-Raphson.

##### 4.1 Discretização das Equações de Fluxo

As equações (3.12) e (3.14) do escoamento dos componentes em meio poroso são constituídas de três parcelas usualmente chamadas de termos de acumulação, termos de fluxo e termos fonte. Mais especificamente são eles:

$$\text{Termos de acumulação} = \left\{ \begin{array}{l} \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right) \right] dV \\ \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left( \phi b_w S_w \right) dV \end{array} \right.$$

$$\text{Termos de fluxo} = \left\{ \begin{array}{l} \int_A \bar{K} \left( x_m \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} \nabla \Phi_o + y_m \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \nabla \Phi_g \right) \cdot \vec{n} dA \\ \int_A \bar{K} \left( b_w \frac{k_{rw}}{\mu_w} \nabla \Phi_w \right) \cdot \vec{n} dA \end{array} \right.$$

$$\text{Termos fonte} = \begin{cases} q_m = x_m \rho_o q_o + y_m \rho_g q_g \\ q_w = b_w q_w \end{cases}$$

Onde  $m=1,2,\dots,n_c$ .

Adotando-se um procedimento de diferenças finitas implícito no tempo, a discretização dos termos de acumulação, a menos dos erros de truncamento, é desenvolvida através da seguinte aproximação:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right) \right]_{ik}^{n+1} \cong \frac{1}{\Delta t} \Delta_t \left[ \phi \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right) \right]_{ik} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \phi b_w S_w \right)_{ik}^{n+1} \cong \frac{1}{\Delta t} \Delta_t \left( \phi b_w S_w \right)_{ik} \quad (4.2)$$

Onde o operador  $\Delta_t$  de diferenças finitas no tempo é definido por:

$$\Delta_t X \equiv X^{n+1} - X^n \quad (4.3)$$

Onde  $X$  é uma variável ou produto genérico, e os sobrescritos  $n+1$  e  $n$  se referem a dois níveis consecutivos no tempo. Usando as definições em (4.1) e (4.2) as formas discretizadas finais dos termos de acumulação ficam:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right) \right]_{ik}^{n+1} dV \cong \frac{V_{ik}}{\Delta t} \Delta_t \left[ \phi \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right) \right]_{ik} \quad (4.4)$$

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \left( \phi b_w S_w \right)_{ik}^{n+1} dV \cong \frac{V_{ik}}{\Delta t} \Delta_t \left( \phi b_w S_w \right)_{ik} \quad (4.5)$$

Em (4.4) e (4.5) admite-se que as variáveis dependentes de pressões, saturações e composições, que ocorrem no nó de uma célula genérica de volume  $V_{ik}$  da malha de simulação, são valores médios para esta célula, de forma tal a permitir a integração desenvolvida em (4.4) e (4.5). Como se observa a aproximação por diferenças finitas dos termos de acumulação não depende de forma direta da geometria da célula.

Já a discretização dos termos de fluxo é fortemente dependente da geometria da malha. Para qualquer sistema de coordenadas em duas dimensões os termos de fluxo são aproximados por:

$$\int_A \bar{K} \left( x_m \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} \nabla \Phi_o + y_m \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \nabla \Phi_g \right)_{ik} \cdot \vec{n} \, dA = \quad (4.6)$$

$$Q_m^{n+1}{}_{i-1/2} + Q_m^{n+1}{}_{i+1/2} + Q_m^{n+1}{}_{k-1/2} + Q_m^{n+1}{}_{k+1/2} \quad m=1, 2, \dots, n_c$$

e para a água:

$$\int_A \bar{K} \left( b_w \frac{k_{rw}}{\mu_w} \nabla \Phi_g \right) \cdot \vec{n} \, dA = Q_w^{n+1}{}_{i-1/2} + Q_w^{n+1}{}_{i+1/2} + Q_w^{n+1}{}_{k-1/2} + Q_w^{n+1}{}_{k+1/2} \quad (4.7)$$

Onde os termos  $Q_m^{n+1}{}_{i-1/2}$ ,  $Q_m^{n+1}{}_{i+1/2}$ ,  $Q_m^{n+1}{}_{k-1/2}$  e  $Q_m^{n+1}{}_{k+1/2}$  representam o fluxo do componente  $m$  ( $m=1, 2, \dots, n_c, n_{c+1} \equiv w$ ) no nível  $n+1$  de tempo através das faces de uma célula genérica  $i, k$  (de geometria qualquer).

Para uma malha retangular, bidimensional e em sistema de coordenadas cartesiano, as integrações indicadas em (4.6) e (4.7) são desenvolvidas tomando por base que:

-os eixos principais do tensor de permeabilidade  $\bar{K}$  coincidem com as direções x e z.

-a operação de gradiente de potencial de uma fase f é dada pelo vetor:

$$\nabla\Phi_f = \frac{\partial\Phi_f}{\partial x} \hat{e}_x + \frac{\partial\Phi_f}{\partial z} \hat{e}_z$$

Assim para a face  $i+1/2$  do bloco tem-se que:

$$\vec{n} \equiv \hat{e}_x$$

$$dA = H_y dz = \Delta y dz$$

Logo o produto abaixo, que aparece em (4.6) e (4.7), fica:

$$\bar{K} \nabla\Phi_f \cdot \vec{n} = K_x \frac{\partial\Phi_f}{\partial x} = K_x \left( \frac{\partial p_f}{\partial x} - \frac{\partial \gamma_f D}{\partial x} \right) \quad \text{onde } f=o,g,w$$

e assim o termo  $Q_{m_{i+1/2}}$  fica:

$$Q_{m_{i+1/2}} = \Delta y \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} K_x \left( x_m \lambda_o \frac{\partial\Phi_o}{\partial x} + y_m \lambda_g \frac{\partial\Phi_g}{\partial x} \right) dz \quad (4.8)$$

Onde a mobilidade  $\lambda_f$  de uma fase f (f=o,g) é definida por:

$$\lambda_f = \frac{\rho_f k_{rf}}{\mu_f} \quad (4.9)$$

Resolvendo a integral em (4.8) obtém-se:

$$Q_{m_{i+1/2}} = \left[ K_x \left( \left( x_m \lambda_o \right)_{i+1/2} \frac{\partial \Phi_o}{\partial x} + \left( y_m \lambda_g \right)_{i+1/2} \frac{\partial \Phi_g}{\partial x} \right) \right] \Delta y \Delta z_k \quad (4.10)$$

Onde  $\Delta z_k = z_{k+1/2} - z_{k-1/2}$ .

Admitindo agora que a vazão  $Q_{m_{i+1/2}}$  permanece constante ao longo de um intervalo de tempo  $\Delta t$  e que a permeabilidade absoluta  $K_x$  é apenas função de  $x$ , a equação (4.10) pode ser integrada entre  $x_i$  e  $x_{i+1}$  fornecendo:

$$Q_{m_{i+1/2}} = \left[ \left( x_m \lambda_o \right)_{i+1/2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} d\Phi_o + \left( y_m \lambda_g \right)_{i+1/2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} d\Phi_g \right] \Delta y \Delta z_k \cdot \frac{1}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{K_x}} \quad (4.11)$$

As integrais que aparecem em (4.11) são avaliadas por:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} d\Phi_f = \Phi_{f_{i+1}} - \Phi_{f_i} = \Delta \Phi_{f_{i+1/2}} = p_{f_{i+1}} - p_{f_i} - \gamma_{f_{i+1/2}} (D_{i+1} - D_i) \quad (4.12)$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{K_x} = \frac{x_{i+1/2} - x_i}{K_{x_i}} + \frac{x_{i+1} - x_{i+1/2}}{K_{x_{i+1}}} \quad (4.13)$$

Usando os resultados (4.12) e (4.13) em (4.11) obtém-se:

$$Q_{m_{i+1/2}} = \frac{\Delta y \Delta z_k}{\frac{x_{i+1/2} - x_i}{K_{x_i}} + \frac{x_{i+1} - x_{i+1/2}}{K_{x_{i+1}}}} \cdot \left[ \left( x_m \lambda_o \right)_{i+1/2} \left( \Phi_o_{i+1} - \Phi_o_i \right) + \left( y_m \lambda_g \right)_{i+1/2} \left( \Phi_g_{i+1} - \Phi_g_i \right) \right] \quad (4.14)$$

$$\cdot \left[ \left( x_m \lambda_o \right)_{i+1/2} \left( \Phi_o_{i+1} - \Phi_o_i \right) + \left( y_m \lambda_g \right)_{i+1/2} \left( \Phi_g_{i+1} - \Phi_g_i \right) \right]$$

Para o caso de malha de blocos centrados tem-se que:

$$x_{i+1/2} - x_i = \frac{\Delta x_i}{2} \quad e \quad x_{i+1} - x_{i+1/2} = \frac{\Delta x_{i+1}}{2}$$

e assim define-se o fator geométrico  $\alpha_{i+1/2}$  da face  $i+1/2$  por:

$$\alpha_{i+1/2} = \frac{\Delta y \Delta z_k}{\frac{x_{i+1/2} - x_i}{K_{x_i}} + \frac{x_{i+1} - x_{i+1/2}}{K_{x_{i+1}}}} = \frac{2 \Delta y \Delta z_k}{\frac{\Delta x_i}{K_{x_i}} + \frac{\Delta x_{i+1}}{K_{x_{i+1}}}} \quad (4.15)$$

Note-se que em (4.15) já se está considerando um valor médio para a permeabilidade absoluta ao longo de  $x$ , no caso uma média harmônica. Substituindo (4.15) em (4.14) obtém-se:

$$Q_{m_{i+1/2}} = \pm \alpha_{i+1/2} \left[ \left( x_m \lambda_o \Delta \Phi_o \right)_{i+1/2} + \left( y_m \lambda_g \Delta \Phi_g \right)_{i+1/2} \right]$$

Expressão que pode ser reescrita como:

$$Q_{m_{i+1/2}} = \left( x_m T_o \Delta \Phi_o + y_m T_g \Delta \Phi_g \right)_{i+1/2} \quad (4.16)$$

Em (4.16) a transmissibilidade da fase  $f$  ( $f = o, g$ ) é definida por:

$$T_{f_{i+1/2}} = \left( \alpha \lambda_f \right)_{i+1/2} \quad (4.17)$$

De forma análoga ( $\vec{n} \equiv -\hat{e}_x$ ) obtém-se o termo de fluxo da face  $i-1/2$  :

$$Q_{m_{i-1/2}} = \left( x_m T_o \Delta\Phi_o + y_m T_g \Delta\Phi_g \right)_{i-1/2} \quad (4.18)$$

cujo fator geométrico  $\alpha_{i-1/2}$  é calculado por:

$$\alpha_{i-1/2} = \frac{\Delta y \Delta z_k}{\frac{x_i - x_{i-1/2}}{K_{x_i}} + \frac{x_{i-1/2} - x_{i-1}}{K_{x_{i+1}}}} = \frac{2\Delta y \Delta z_k}{\frac{\Delta x_i}{K_{x_i}} + \frac{\Delta x_{i-1}}{K_{x_{i-1}}}} \quad (4.19)$$

A diferença finita de potencial  $\Delta\Phi_{f_{i-1/2}}$  é definida de forma semelhante ao feito em (4.12), ou seja:

$$\Delta\Phi_{f_{i-1/2}} = p_{f_i} - p_{f_{i-1}} - \gamma_{f_{i-1/2}} \left( D_i - D_{i-1} \right) \quad (4.20)$$

Da mesma forma os termos  $Q_{w_{i\pm 1/2}}$  são expressos por:

$$Q_{w_{i\pm 1/2}} = \pm \alpha_{i\pm 1/2} \left( \frac{b_w k_{rw}}{\mu_w} \right)_{i\pm 1/2} \Delta\Phi_{w_{i\pm 1/2}} = \pm \left( T_w \Delta\Phi_w \right)_{i\pm 1/2} \quad (4.21)$$

Para a face  $k+1/2$ , malha retangular, usa-se procedimento semelhante ao aplicado na face  $i+1/2$ . Considera-se que em  $k+1/2$ :

$$\vec{n} = \hat{e}_z$$

$$dA = H_y dx = \Delta y dx$$

$$\vec{K} \nabla \Phi_f \cdot \vec{n} = K_z \frac{\partial \Phi_f}{\partial z}$$

Usando as relações anteriores obtém-se que:

$$Q_{m_{k+1/2}} = \Delta y \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} K_z \left( x_m \lambda_o \frac{\partial \Phi_o}{\partial z} + y_m \lambda_g \frac{\partial \Phi_g}{\partial z} \right) dx$$

que resulta em:

$$Q_{m_{k+1/2}} = \left[ K_z \left( \left( x_m \lambda_o \right)_{k+1/2} \frac{\partial \Phi_o}{\partial z} + \left( y_m \lambda_g \right)_{k+1/2} \frac{\partial \Phi_g}{\partial z} \right) \right] \Delta y \Delta x_i \quad (4.22)$$

Onde  $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ .

Novamente admite-se que a vazão  $Q_{m_{k+1/2}}$  permanece constante ao longo de um passo de tempo  $\Delta t$ , bem como  $K_z$  é apenas função de  $z$ . Integrando-se (4.22) entre  $z_k$  e  $z_{k+1}$  obtém-se, para malha de blocos centrados, a expressão para o fator geométrico  $\alpha_{k \pm 1/2}$ :

$$\alpha_{k+1/2} = \frac{\Delta y \Delta x_i}{\frac{z_{k+1/2} - z_k}{K_{z_k}} + \frac{z_{k+1} - z_{k+1/2}}{K_{z_{k+1}}}} = \frac{2 \Delta y \Delta x_i}{\frac{\Delta z_k}{K_{z_k}} + \frac{\Delta z_{k+1}}{K_{z_{k+1}}}} \quad (4.23)$$

Fórmula semelhante é gerada para o fator geométrico  $\alpha_{k-1/2}$ :

$$\alpha_{k-1/2} = \frac{\frac{\Delta y \Delta x_i}{z_k - z_{k-1/2}} + \frac{\Delta y \Delta x_i}{z_{k-1/2} - z_{k-1}}}{\frac{\Delta z_k}{K_{z_k}} + \frac{\Delta z_{k-1}}{K_{z_{k-1}}}} = \frac{2\Delta y \Delta x_i}{\frac{\Delta z_k}{K_{z_k}} + \frac{\Delta z_{k-1}}{K_{z_{k-1}}}} \quad (4.24)$$

Também aqui os fatores geométricos respondem pela média das permeabilidades absolutas entre duas células contíguas. Usando (4.23) e (4.24) obtém-se a expressão geral para os termos de fluxo  $Q_{m_{k\pm 1/2}}$ :

$$Q_{m_{k\pm 1/2}} = \pm \alpha_{k\pm 1/2} \left[ \left( x_m \lambda_o \Delta \Phi_o \right)_{k\pm 1/2} + \left( y_m \lambda_g \Delta \Phi_g \right)_{k\pm 1/2} \right]$$

Ou ainda:

$$Q_{m_{k\pm 1/2}} = \pm \left( x_m T_o \Delta \Phi_o + y_m T_g \Delta \Phi_g \right)_{k\pm 1/2} \quad (4.25)$$

Da mesma forma os termos  $Q_{w_{k\pm 1/2}}$  são expressos por:

$$Q_{w_{k\pm 1/2}} = \pm \alpha_{k\pm 1/2} \left( \frac{b_w k_{rw}}{\mu_w} \right)_{k\pm 1/2} \Delta \Phi_{w_{k\pm 1/2}} = \pm \left( T_w \Delta \Phi_w \right)_{k\pm 1/2} \quad (4.26)$$

Aqui as diferenças (finitas) de potencial são escritas como:

$$\text{face } k+1/2: \Delta \Phi_{f_{k+1/2}} = \Phi_{f_{k+1}} - \Phi_{f_k} = p_{f_{k+1}} - p_{f_k} + \gamma_{f_{k+1/2}} (D_{k+1} - D_k) \quad (4.27)$$

$$\text{face } k-1/2: \Delta \Phi_{f_{k-1/2}} = \Phi_{f_k} - \Phi_{f_{k-1}} = p_{f_k} - p_{f_{k-1}} + \gamma_{f_{k-1/2}} (D_k - D_{k-1}) \quad (4.28)$$

Num sistema de coordenadas cilíndricas usa-se a mesma metodologia aplicada antes às coordenadas cartesianas. As seguintes considerações fundamentam a dedução. O vetor gradiente de potencial da fase  $f$ , para geometria bidimensional, é definido por:

$$\nabla\Phi_f = \frac{\partial\Phi_f}{\partial r} \hat{e}_r + \frac{\partial\Phi_f}{\partial z} \hat{e}_z$$

Admite-se também que os eixos principais do tensor de permeabilidades absolutas coincidem com  $r$  e  $z$ . Assim para as faces  $i\pm 1/2$  tem-se que:

$$\vec{n} = \pm \hat{e}_r$$

$$dA = 2\pi r dz$$

$$\bar{K} \nabla\Phi_f = K_r \frac{\partial\Phi_f}{\partial r}$$

Usando as relações acima as vazões  $Q_{m_{i\pm 1/2}}$  ficam:

$$Q_{m_{i\pm 1/2}} = \pm 2\pi \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} r K_r \left( x_m \lambda_o \frac{\partial\Phi_o}{\partial r} + y_m \lambda_g \frac{\partial\Phi_g}{\partial r} \right) dz$$

(4.29)

Integrando a expressão (4.29) acima e admitindo-se então que a vazão permanece constante ao longo de um passo de tempo  $\Delta t$  e que  $K_r$  é apenas função de  $r$ , duas novas integrações, desta vez

ao longo de  $r_i$  até  $r_{i+1}$  e de  $r_{i-1}$  até  $r_i$ , fornecem finalmente que:

$$Q_{m_{i\pm 1/2}} = \pm \left( x_m T_o \Delta\Phi_o + y_m T_g \Delta\Phi_g \right)_{i\pm 1/2} \quad (4.30)$$

Onde  $m=1,2,\dots,n_c$ . Da mesma forma para a água obtém-se:

$$Q_{w_{i\pm 1/2}} = \pm \alpha_{i\pm 1/2} \left( \frac{b_w k_{rw}}{\mu_w} \right)_{i\pm 1/2} \Delta\Phi_{w_{i\pm 1/2}} = \pm \left( T_w \Delta\Phi_w \right)_{i\pm 1/2} \quad (4.31)$$

Note-se que as equações (4.30) e (4.31) acima são idênticas às anteriores (4.16), (4.18) e (4.21) deduzidas para um sistema de coordenadas cartesiano. A diferença de geometria está contemplada nos fatores geométricos que aqui se escrevem como:

$$\alpha_{i+1/2} = \frac{2 \pi \Delta z_k}{\frac{1}{K_{r_i}} \ln \frac{r_{i+1/2}}{r_i} + \frac{1}{K_{r_{i+1}}} \ln \frac{r_{i+1}}{r_{i+1/2}}} \quad (4.32)$$

$$\alpha_{i-1/2} = \frac{2 \pi \Delta z_k}{\frac{1}{K_{r_{i-1}}} \ln \frac{r_{i-1/2}}{r_{i-1}} + \frac{1}{K_{r_i}} \ln \frac{r_i}{r_{i-1/2}}} \quad (4.33)$$

As diferenças de potencial são idênticas às expressas em (4.12) e (4.20).

Usando raciocínio semelhante ao apresentado acima

obtém-se as equações para as vazões  $Q_{m_{k\pm 1/2}}$  em coordenadas cilíndricas:

$$Q_{m_{k\pm 1/2}} = \pm \left( x_m T_o \Delta\Phi_o + y_m T_g \Delta\Phi_g \right)_{k\pm 1/2} \quad (4.34)$$

e para o componente água:

$$Q_{w_{k\pm 1/2}} = \pm \alpha_{k\pm 1/2} \left( \frac{b_w k_{rw}}{\mu_w} \right)_{k\pm 1/2} \Delta\Phi_{w_{k\pm 1/2}} = \pm \left( T_w \Delta\Phi_w \right)_{k\pm 1/2} \quad (4.35)$$

Em (4.34) e (4.35) os fatores geométricos são calculados por:

$$\alpha_{k+1/2} = \frac{2 \pi \left( r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2 \right)}{\frac{\Delta z_k}{K_{z_k}} + \frac{\Delta z_{k+1}}{K_{z_{k+1}}}} \quad (4.36)$$

$$\alpha_{k-1/2} = \frac{2 \pi \left( r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2 \right)}{\frac{\Delta z_k}{K_{z_k}} + \frac{\Delta z_{k-1}}{K_{z_{k-1}}}} \quad (4.37)$$

Na implementação da malha de simulação em sistema de coordenadas cilíndricas adotou-se uma distribuição exponencial das dimensões das células ao longo do eixo r. Assim admitiu-se a seguinte transformação de escala:

$$\rho = \ln \left( \frac{r}{r_w} \right)$$

Onde  $r_w$  é o raio do poço de produção associado à malha

cilíndrica e  $r$  um ponto qualquer ao longo do eixo  $r$ . Para uma malha com  $N_x$  células ao longo do eixo  $r$  tem-se que:

$$\Delta\rho = \frac{1}{N_x} \left[ \ln \left( \frac{r_e}{r_w} \right) \right]$$

Onde  $r_e$  é o raio externo do reservatório. As distâncias das interfaces de uma célula  $i, k$  genérica em relação à face do poço são calculadas por:

$$r_{i+1/2} = r_w \exp(i \Delta\rho) \quad \text{e} \quad r_{i-1/2} = r_w \exp((i-1) \Delta\rho)$$

As posições dos pontos de malha ("centros dos blocos") na malha cilíndrica foram calculadas admitindo a existência de regime permanente de escoamento no interior das células, como desenvolvido por Pedrosa [23]. Esse critério fornece que:

$$r_i = r_{i-1/2} \exp \left( \frac{\beta^2}{\beta^2 - 1} \ln \beta - \frac{1}{2} \right) \quad \text{onde} \quad \beta = \frac{r_{i+1/2}}{r_{i-1/2}}$$

A forma discretizada final das equações de fluxo incorpora as parcelas referentes aos termos de acumulação dados em (4.4) e (4.5) e aos termos de fluxo escritos de forma completa em (4.6) e (4.7) e detalhados em (4.16), (4.18), (4.21), (4.25) e (4.26), para geometria cartesiana, e em (4.30), (4.31), (4.34) e (4.35) para geometria cilíndrica. Obviamente, em cada caso de geometria de malha aplicam-se os fatores geométricos específicos.

Isto posto, as equações de fluxo em diferenças finitas

ficam, para  $m = 1, 2, \dots, n_c$ :

$$\begin{aligned} \Delta \left( T_o x_m \Delta \Phi_o \right)_{ik}^{n+1} + \Delta \left( T_g y_m \Delta \Phi_g \right)_{ik}^{n+1} &= \left( q_o \rho_o x_m + q_g \rho_g y_m \right)_{ik}^{n+1} + \\ + \frac{V_{i,k}}{\Delta t} \left[ \phi^{n+1} \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right)^{n+1} - \phi^n \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right)^n \right]_{ik} \end{aligned} \quad (4.38)$$

e para a água:

$$\Delta \left( T_w \Delta \Phi_w \right)_{ik}^{n+1} = \frac{V_{i,k}}{\Delta t} \left[ \left( \phi b_w S_w \right)_{ik}^{n+1} - \left( \phi b_w S_w \right)_{ik}^n \right] + \left( q_w b_w \right)_{ik}^{n+1} \quad (4.39)$$

Em (4.38) e (4.39) o operador de diferenças finitas no espaço  $\Delta$ , em duas dimensões, é definido como:

$$\begin{aligned} \Delta \left( T \Delta \Phi_f \right)_{ik} &= \left( \Delta_x T_x \Delta_x \Phi_f + \Delta_z T_z \Delta_z \Phi_f \right)_{ik} = \\ &= \left[ \left( T_x \Delta_x \Phi_f \right)_{i+1/2} - \left( T_x \Delta_x \Phi_f \right)_{i-1/2} \right]_k + \left[ \left( T_z \Delta_z \Phi_f \right)_{k+1/2} - \left( T_z \Delta_z \Phi_f \right)_{k-1/2} \right]_i \end{aligned}$$

Onde  $f = o, g, w$ .

A definição anterior do operador de diferenças finitas implica em que existirão para uma célula qualquer  $i, k$  termos como:

$$\left\{ \left[ x_m \lambda_o \right] ; \left[ y_m \lambda_g \right] ; \left[ \frac{b_w k_{rw}}{\mu_w} \right] \right\}_{i \pm 1/2 \text{ ou } k \pm 1/2}$$

Ou seja termos dependentes de propriedades nas interfaces das

células. Sua avaliação foi feita empregando-se o chamado esquema de ponderação com um ponto a montante consoante descrito em [4]. Assim, por exemplo, avaliar-se-á  $x_{m, i+1/2}$  por:

-fluxo ocorre da célula  $i$  para a  $i+1$  :  $x_{m, i+1/2} = x_{m, i}$

-fluxo ocorre da célula  $i+1$  para a  $i$  :  $x_{m, i+1/2} = x_{m, i+1}$

E assim por diante com as demais variáveis de interface, a menos dos pesos específicos  $\gamma_{f, i\pm 1/2}$  e  $\gamma_{f, k\pm 1/2}$  ( $f=o, g, w$ ) que foram calculados pelo valor médio de  $\gamma_f$  entre duas células contíguas.

Concluindo, algumas das variáveis que aparecem nas equações de fluxo discretizadas (4.38) e (4.39) podem ser substituídas por combinações de outras, de forma a reduzir o número de incógnitas do sistema. Usam-se para tanto as relações restritivas do modelo matemático. No presente estudo foram feitas as seguintes considerações:

-As pressões nas fases gás  $p_g$  e água  $p_w$  foram eliminadas usando as relações de pressões capilares dadas em (3.17) e (3.18):

$$p_g = p_o + P_{cgo} \quad (4.40)$$

$$p_w = p_o - P_{cwo} \quad (4.41)$$

-A saturação de óleo  $S_o$  foi eliminada usando a relação (3.19):

$$S_o = 1 - S_g - S_w \quad (4.42)$$

-A porosidade no nível de tempo  $n+1$ ,  $\phi^{n+1}$ , é dada [4] pela relação abaixo, em função da compressibilidade  $c_r$  da rocha admitida como constante:

$$\phi^{n+1} = \phi^n \left[ 1 + c_r \left( p_o^{n+1} - p_o^n \right) \right] \quad (4.43)$$

As frações molares  $x_{n_c}$  e  $y_1$  são substituídas por:

$$x_{n_c} = 1 - \sum_{m=1}^{n_c-1} x_m \quad (4.44)$$

$$y_1 = 1 - \sum_{m=1}^{n_c} y_m \quad (4.45)$$

usando-se as restrições mostradas em (3.20) e (3.21).

Com as considerações acima as incógnitas do sistema passam a ser a pressão na fase óleo  $p_o$ , as saturações de gás  $S_g$  e de água  $S_w$  e as frações molares no líquido  $x_1, x_2, \dots, x_{n_c-1}$ ; e as frações molares no vapor  $y_2, y_3, \dots, y_{n_c}$ . Tem-se portanto a cada passo de tempo  $n+1$  e em cada nó  $i,k$  da malha de cálculo um conjunto de  $2n_c+1$  incógnitas e equações. Como já comentado na revisão bibliográfica, existem diferentes métodos para solução desse sistema de equações. A contribuição deste trabalho consiste na proposição de um novo procedimento, cujos detalhes são apresentados nas próximas seções.

#### 4.2 Linearização do Sistema de Equações - Metodologia Proposta

Nesta seção apresenta-se uma nova formulação cujo objetivo é permitir a simulação composicional de problemas em que os métodos sequenciais [15] podem se mostrar instáveis, e onde procedimento totalmente implícito [6] se configure como excessivamente dispendioso.

O método proposto neste trabalho, em princípio semelhante ao de Quandalle et. al. [20], baseia-se na seguinte aproximação:

-Tratamento totalmente implícito nas variáveis pressão  $p_o$  e saturações de fluidos  $S_g$  e  $S_w$  ;

-Tratamento explícito nas variáveis composicionais  $x_m$  e  $y_m$ , (para  $m = 1, 2, \dots, n_c$ ) nos termos de fluxo das equações de transporte (4.38) e (4.39). Note-se que em todos os demais termos das equações de transporte - termos fonte e de acumulação - bem como nas equações de equilíbrio líquido vapor (3.15) o tratamento é ainda totalmente implícito em relação às composições.

O tratamento explícito dos termos de fluxo em relação às variáveis composicionais está representado, para a fase óleo, como mostrado abaixo:

$$\begin{aligned} & \Delta x_m^{n+1} T_o \left( p_o, S_g, S_w, x_1, x_2, \dots, x_{n_c} \right)^{n+1} \Delta \Phi_o^{n+1} \cong \\ & \cong \Delta x_m^I T_o \left[ \left( p_o, S_g, S_w \right)^{n+1} \left( x_1, x_2, \dots, x_{n_c} \right)^I \right] \Delta \Phi_o^{n+1} \end{aligned}$$

O termo de fluxo da fase gás é escrito da mesma maneira:

$$\begin{aligned} \Delta y_m^{n+1} T_g \left( p_o, S_g, S_w, Y_2, Y_3, \dots, Y_{n_c} \right)^{n+1} \Delta \Phi_g^{n+1} &\cong \\ \cong \Delta y_m^1 T_g \left[ \left( p_o, S_g, S_w \right)^{n+1} \left( Y_2, Y_3, \dots, Y_{n_c} \right)^1 \right] \Delta \Phi_g^{n+1} \end{aligned}$$

Para  $m = 1, 2, \dots, n_c$  e onde o nível 1 será mais adiante definido.

Uma vez estabelecidas as aproximações mostradas acima, o sistema de equações do problema é resolvido através do método iterativo de Newton-Raphson. Seu procedimento é revisto abaixo. Considere-se um sistema  $F_i$  de equações algébricas não lineares em  $n$  incógnitas  $X_1, X_2, \dots, X_n$ :

$$F_i \left( \bar{X} \right) \cong F_i \left( X_1, X_2, \dots, X_n \right)^T = 0 \quad (4.46)$$

Onde  $i = 1, 2, \dots, n$ . Deseja-se encontrar o vetor  $\bar{X}$  que seja solução do sistema em (4.46). Para tanto se cria um processo iterativo onde o sistema  $F_i$  é expandido em torno do vetor  $\bar{X}^U$  até os termos de primeira ordem, pela fórmula de Taylor:

$$F_i \left( \bar{X}^{U+1} \right) = F_i \left( \bar{X}^U + \delta \bar{X}^{U+1} \right) = F_i \left( \bar{X}^U \right) + \sum_{j=1}^n J_{ij}^U \delta \bar{X}_j^U = 0 \quad (4.47)$$

Para  $i, j = 1, 2, \dots, n$  e onde o termo  $J_{ij}^U$  significa:

$$J_{ij}^U = \left( \frac{\partial F_i}{\partial X_j} \right)_{\bar{X} = \bar{X}^U} \quad (4.48)$$

A matriz constituída por todos os elementos  $J_{ij}^U$  é conhecida como matriz jacobiana. Usando a igualdade a direita da equação (4.47) obtém-se:

$$F_i \left( \bar{X}^U \right) + \sum_{j=1}^n J_{ij}^U \delta \bar{X}_j^{U+1} = 0 \quad (4.49)$$

Da expressão (4.49) gera-se o sistema linear se equações:

$$\sum_{j=1}^n J_{ij}^U \delta \bar{X}_j^{U+1} = - F_i \left( \bar{X}^U \right) \quad (4.50)$$

Da expressão (4.50) determina-se o vetor  $\delta \bar{X}_j^{U+1}$  a partir do qual uma nova estimativa  $\bar{X}^{U+1}$  da solução do sistema é encontrada:

$$\bar{X}^{U+1} = \bar{X}^U + \delta \bar{X}^{U+1} \quad (4.51)$$

O processo descrito se repete até que:

$$\left| F_i \left( \bar{X}^{U+1} \right) \right| < \bar{\epsilon}$$

e/ou:

$$(4.52)$$

$$\left| \bar{X}^{U+1} - \bar{X}^U \right| = \left| \delta \bar{X}^U \right| < \bar{\epsilon}$$

Onde  $\bar{\epsilon}$  é um vetor tolerância. A convergência do método está em parte ligada à qualidade da estimativa inicial da solução, ou seja o vetor  $\bar{X}^{(0)}$ . Podem mesmo ocorrer situações onde não se obtém convergência ou esta se aproxima de uma solução "não física" do sistema de equações. Este último caso é frequente, por exemplo, nos cálculos de equilíbrio líquido vapor (cálculos de liberação "flash") fato que impõe o uso de algoritmos mais robustos. Voltar-se-á a esse tema nos itens referentes aos cálculos de equilíbrio de fases.

No caso particular do modelo em desenvolvimento, o sistema  $F_i$  de equações é composto, para cada célula  $i,k$  da malha de simulação, por:

$-n_c+1$  equações de fluxo discretizadas, definidas a partir de (4.38) e (4.39):

$$\begin{aligned}
 F_{m,i,k}^{n+1} = & \Delta \left[ \left( T_o^l \ x_m^U \right) \Delta \left( p_o^{n+1} + \gamma_o^l \Delta z \right) + \left( T_g^l \ y_m^U \right) \Delta \left( p_g^{n+1} + \gamma_g^l \Delta z \right) \right]_{i,k} + \\
 & - \frac{V_{p,i,k}^n}{\Delta t} \left[ \left( 1 + c_r \Delta_t p_o \right) \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right)^{n+1} + \right. \\
 & \left. - \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right)^n \right]_{i,k} - \left( \alpha_o \rho_o x_m + \alpha_g \rho_g y_m \right)_{i,k}^{n+1} = 0
 \end{aligned}
 \tag{4.53}$$

Onde  $m = 1, 2, \dots, n_c$ . Note-se que o nível  $l$  indica tratamento implícito em pressão e saturações e explícito em composições. Para o componente água a função de resíduos é:

$$\begin{aligned}
 F_{w,i,k}^{n+1} = & \Delta \left( T_w \Delta \phi_w \right)_{ik}^{n+1} - \frac{V_{p,i,k}^n}{\Delta t} \left[ \left( 1 + c_r \Delta_t p_o \right) \left( \phi b_w S_w \right)^{n+1} + \right. \\
 & \left. - \left( \phi b_w S_w \right)^n \right]_{ik} - \left( \alpha_w b_w \right)_{ik}^n = 0
 \end{aligned}
 \tag{4.54}$$

$-n_c$  equações de equilíbrio líquido vapor, definidas sobre (3.15):

$$F_{f,m,i,k}^{n+1} = f_{ml}^{n+1} - f_{mv}^{n+1} = 0 \quad \text{para } m = 1, 2, \dots, n_c
 \tag{4.55}$$

As funções de residuo em (4.53), (4.54) e (4.55) são dependentes das seguintes variáveis:

$$F_{m_{ik}} = F_{m_{ik}} \left( \bar{X}_{i-1,k}, \bar{X}_{i,k-1}, \bar{X}_{i,k}, \bar{X}_{i,k+1}, \bar{X}_{i+1,k} \right) = 0$$

$$\text{onde } \bar{X} = \left( p_o, S_g, S_w, x_1, x_2, \dots, x_{n_c-1}, Y_2, Y_3, \dots, Y_{n_c} \right)^T$$

$$F_{w_{ik}} = F_{w_{ik}} \left( \bar{W}_{i-1,k}, \bar{W}_{i,k-1}, \bar{W}_{i,k}, \bar{W}_{i,k+1}, \bar{W}_{i+1,k} \right) = 0$$

$$\text{onde } \bar{W} = \left( p_o, S_g, S_w \right)^T$$

$$F_{f_{m_{ik}}} = F_{f_{m_{ik}}} \left( p_o, x_1, x_2, \dots, x_{n_c-1}, Y_2, Y_3, \dots, Y_{n_c} \right)_{ik} = 0$$

Observe-se que nas expressões (4.53) e (4.54), que se referem às equações de fluxo discretizadas, a dependência funcional envolve variáveis da célula  $i,k$  sendo considerada e também das células vizinhas a ela, quais sejam a  $i-1,k$ ;  $i+1,k$ ;  $i,k-1$  e  $i,k+1$ . Já as equações de equilíbrio (4.55) contemplam apenas variáveis da célula  $i,k$  considerada.

Na formulação ora proposta a linearização do sistema de equações, através do método de Newton-Raphson, considera as variáveis  $x_m, T_o, \gamma_o, Y_m, T_g, \gamma_g$ , nos termos de fluxo de (4.53), no nível  $l=v$  de iteração (em relação às composições). Ou seja, admite-se que essas variáveis dependem implicitamente de pressão e de saturações porém são funções explícitas em relação às composições. Assim, no cálculo dos elementos da

matriz jacobiana tem-se que:

$$\frac{\partial T_f}{\partial p_o} \neq 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial T_f}{\partial S_f} \neq 0 \quad \text{porém} \quad \frac{\partial T_f}{\partial x_m} = \frac{\partial T_f}{\partial y_m} = 0 \quad (4.56)$$

Onde  $f = o, g, w$ . A diferença desse modelo em relação ao totalmente implícito reside, portanto, no tratamento das variáveis de interface: neste os termos de fluxo também são avaliados de forma implícita em relação à composição.

A razão de ser da nova formulação se deve ao fato de que o tratamento proposto leva a uma matriz jacobiana cuja estrutura, bastante particular, é suscetível de redução a uma matriz blocada de 3 por 3 semelhante àquelas obtidas em formulações do tipo "black-oil" trifásicas totalmente implícitas. Este é o tema do próximo item.

#### 4.3 Equações Matriciais para a Formulação Implícita em Pressão e Saturações e Semi Implícita em Composições

Considerando a formulação descrita no item (4.2) e adotando-se:

- as variáveis primárias  $p_o, S_g, S_w, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, Y_2, Y_3, \dots, Y_{n_c}$ ;
- escoamento bidimensional, esquema de cinco pontos;
- ordenação convencional das equações;
- termos de interface das equações de fluxo avaliados pela técnica de ponderação com um ponto a montante;

Conclui-se que a estrutura da matriz jacobiana será pentadiagonal por blocos de  $2n_c+1$  por  $2n_c+1$ ; assim para uma

malha com  $N_x$  por  $N_z$  blocos seu número total de linhas será de  $N_x N_z (2n_c + 1)$ . A figura 4.1 apresenta um esquema da matriz jacobiana para uma malha de  $N_x = 4$  e  $N_z = 3$ . As áreas hachuradas indicam as posições dos elementos não nulos.

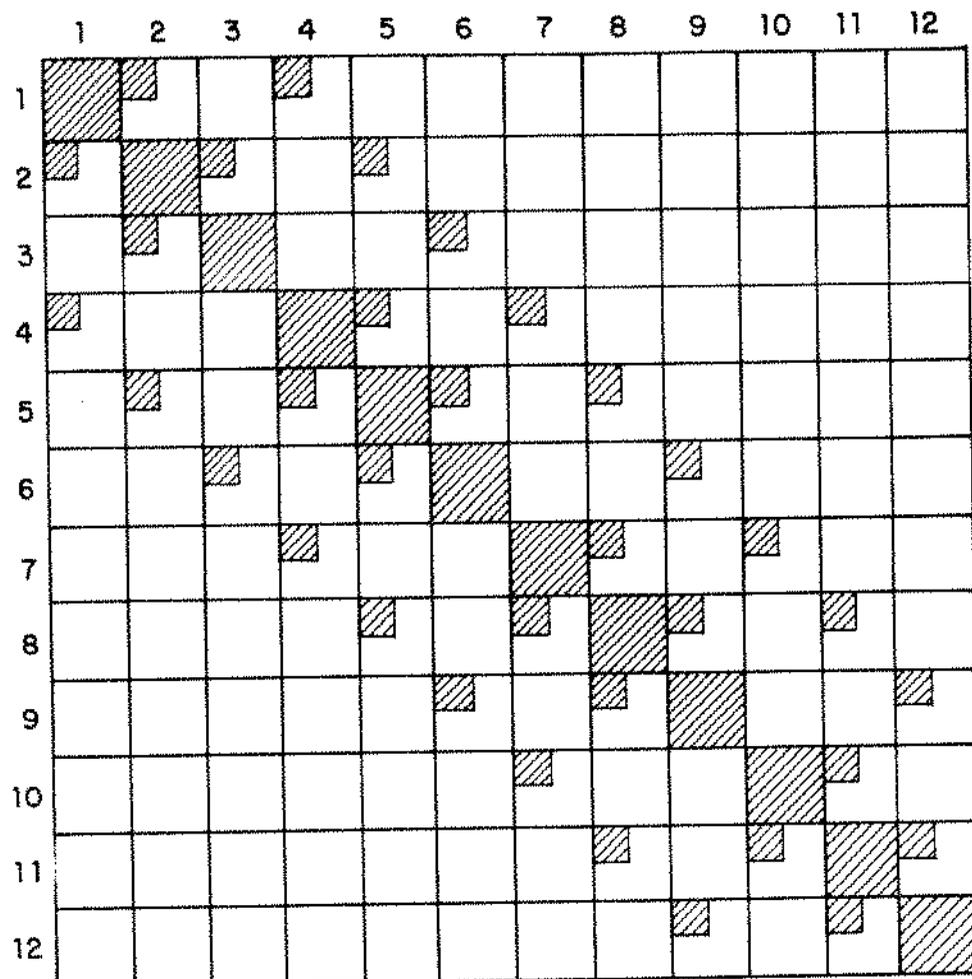


Figura 4.1: Esquema da matriz jacobiana para uma malha de  $N_x = 4$  e  $N_z = 3$

No Apêndice B constam exemplos das expressões dos elementos do jacobiano, derivadas das equações de fluxo e de equilíbrio líquido vapor em relação às variáveis primárias.

A figura 4.2 detalha a disposição das entradas não nulas na matriz jacobiana para uma célula  $i,k$  genérica. Considerando as submatrizes definidas nesta figura é possível escrever as equações matriciais (M1) e (M2) abaixo:

$$\bar{E}l_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i-1,k}} + \bar{C}l_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i,k-1}} + \bar{A}l_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i,k}} + \quad (M1)$$

$$\bar{A}r_{i,k} \delta \bar{X}_{l_{i,k}} + \bar{B}l_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i,k+1}} + \bar{D}l_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i+1,k}} = \bar{R}u_{i,k}$$

$$\bar{A}ll_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i,k}} + \bar{A}rl_{i,k} \delta \bar{X}_{l_{i,k}} = \bar{R}l_{i,k} \quad (M2)$$

$$\text{Onde } \delta \bar{X}_u = \left( \delta p_o, \delta S_g, \delta S_w, \delta x_1, \delta x_2, \dots, \delta x_{n_c-2} \right)^T$$

$$\text{e } \delta \bar{X}_l = \left( \delta x_{n_c-1}, \delta y_2, \delta y_3, \dots, \delta y_{n_c} \right)^T$$

Da equação (M2) obtém-se que:

$$\delta \bar{X}_{l_{i,k}} = \bar{A}rl_{i,k}^{-1} \left( \bar{R}l_{i,k} - \bar{A}ll_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i,k}} \right) \quad (M3)$$

Substituindo (M3) em (M1):

$$\begin{aligned} & \bar{E}l_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i-1,k}} + \bar{C}l_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i,k-1}} + \\ & + \left( \bar{A}l_{i,k} - \bar{A}r_{i,k} \bar{A}rl_{i,k}^{-1} \bar{A}ll_{i,k} \right) \delta \bar{X}_{u_{i,k}} + \quad (M4) \\ & + \bar{B}l_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i,k+1}} + \bar{D}l_{i,k} \delta \bar{X}_{u_{i+1,k}} = \bar{R}u_{i,k} - \bar{A}r_{i,k} \bar{A}rl_{i,k}^{-1} \bar{R}l_{i,k} \end{aligned}$$

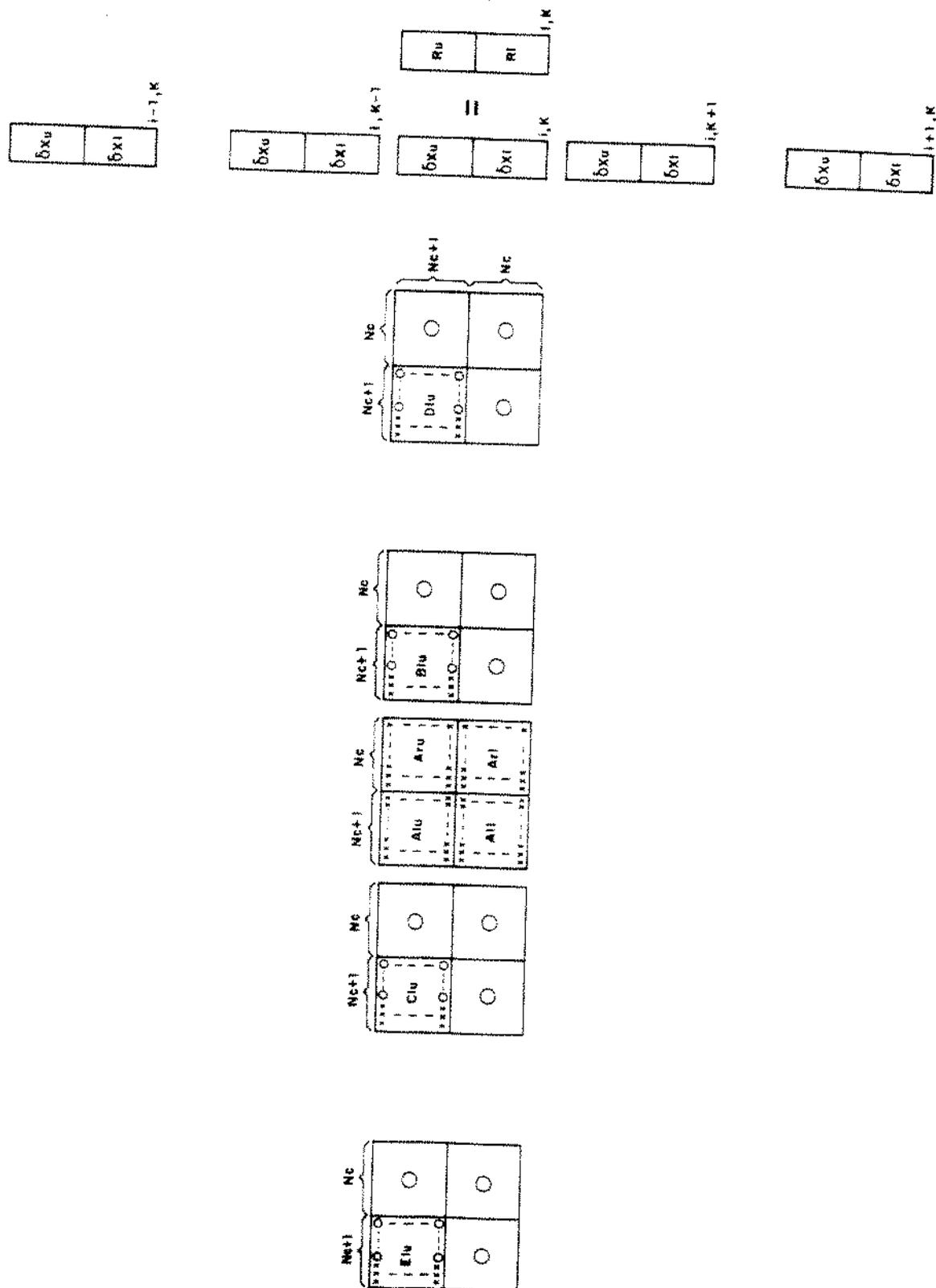


Figura 4.2: Disposição dos elementos não nulos da célula  $i, k$  na matriz jacobiana

Definindo-se as seguintes matrizes:

$$\bar{A}u_{i,k}^* = \left( \bar{A}lu_{i,k} - \bar{A}ru_{i,k} \bar{A}rl_{i,k}^{-1} \bar{A}ll_{i,k} \right)$$

$$\bar{R}u_{i,k}^* = \bar{R}u_{i,k} - \bar{A}ru_{i,k} \bar{A}rl_{i,k}^{-1} \bar{R}l_{i,k}$$

Usando as relações acima na equação (M4) obtém-se:

$$\begin{aligned} \bar{E}lu_{i,k} \delta \bar{X}u_{i-1,k} + \bar{C}lu_{i,k} \delta \bar{X}u_{i,k-1} + \bar{A}lu_{i,k}^* \delta \bar{X}u_{i,k} + \\ + \bar{B}lu_{i,k} \delta \bar{X}u_{i,k+1} + \bar{D}lu_{i,k} \delta \bar{X}u_{i+1,k} = \bar{R}u_{i,k}^* \end{aligned} \quad (M5)$$

A equação matricial (M5) acima está esquematizada na figura 4.3 onde novas submatrizes são definidas particionando-se as anteriores  $\bar{E}lu$ ,  $\bar{C}lu$ ,  $\bar{A}lu^*$ ,  $\bar{B}lu$ ,  $\bar{D}lu$  e  $\bar{R}u^*$ . Com estas partições as seguintes equações matriciais são possíveis:

$$\bar{E}lu1_{i,k} \delta \bar{X}u1_{i-1,k} + \bar{C}lu1_{i,k} \delta \bar{X}u1_{i,k-1} + \bar{A}lu1_{i,k}^* \delta \bar{X}u1_{i,k} + \quad (M6)$$

$$+ \bar{A}lu2_{i,k}^* \delta \bar{X}u2_{i,k} + \bar{B}lu1_{i,k} \delta \bar{X}u1_{i,k+1} + \bar{D}lu1_{i,k} \delta \bar{X}u1_{i+1,k} = \bar{R}u1_{i,k}^*$$

$$\bar{E}lu3_{i,k} \delta \bar{X}u1_{i-1,k} + \bar{C}lu3_{i,k} \delta \bar{X}u1_{i,k-1} + \bar{A}lu3_{i,k}^* \delta \bar{X}u1_{i,k} + \quad (M7)$$

$$+ \bar{A}lu4_{i,k}^* \delta \bar{X}u2_{i,k} + \bar{B}lu3_{i,k} \delta \bar{X}u1_{i,k+1} + \bar{D}lu3_{i,k} \delta \bar{X}u1_{i+1,k} = \bar{R}u2_{i,k}^*$$

onde  $\delta \bar{X}u1 = (\delta p_o, \delta S_g, \delta S_w)$  e  $\delta \bar{X}u2 = (x_1, x_2, \dots, x_{n-2})$

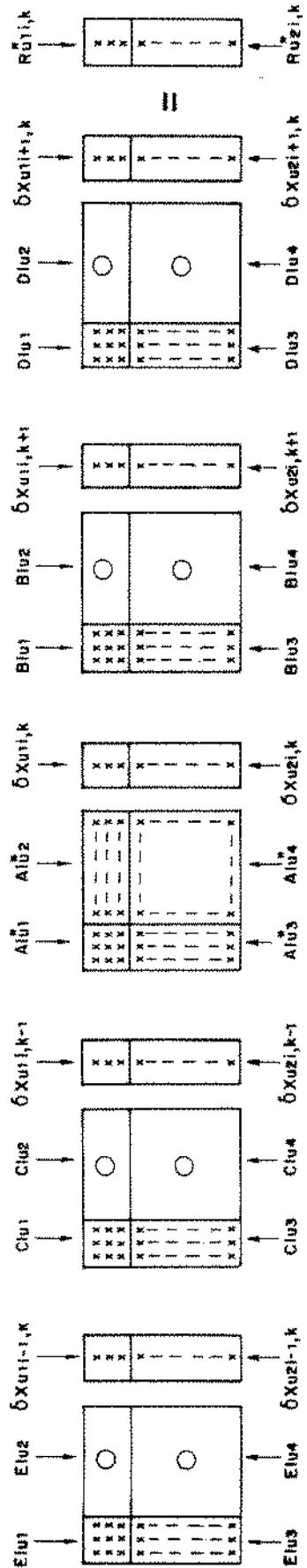


Figura 4.3: Esquema representativo da equação matricial (M5)

Isolando o vetor  $\delta \bar{X}_{u2}_{i,k}$  na equação (M7):

$$\delta \bar{X}_{u2}_{i,k} = \bar{A}lu4_{i,k}^{-1} \left( \bar{R}u2_{i,k} - \bar{E}lu3_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}_{i-1,k} - \bar{C}lu3_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}_{i,k-1} + \right. \\ \left. - \bar{A}lu3_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}_{i,k} - \bar{B}lu3_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}_{i,k+1} - \bar{D}lu3_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}_{i+1,k} \right) \quad (M8)$$

Substituindo (M8) em (M6) obtém-se:

$$\left( \underbrace{\bar{E}lu1_{i,k} - \bar{A}lu2_{i,k} \bar{A}lu4_{i,k}^{-1} \bar{E}lu3_{i,k}}_{\bar{E}_{i,k}} \right) \delta \bar{X}_{u1}_{i-1,k} + \\ + \left( \underbrace{\bar{C}lu1_{i,k} - \bar{A}lu2_{i,k} \bar{A}lu4_{i,k}^{-1} \bar{C}lu3_{i,k}}_{\bar{C}_{i,k}} \right) \delta \bar{X}_{u1}_{i,k-1} + \\ + \left( \underbrace{\bar{A}lu1_{i,k} - \bar{A}lu2_{i,k} \bar{A}lu4_{i,k}^{-1} \bar{A}lu3_{i,k}}_{\bar{A}_{i,k}} \right) \delta \bar{X}_{u1}_{i,k} + \\ + \left( \underbrace{\bar{B}lu1_{i,k} - \bar{A}lu2_{i,k} \bar{A}lu4_{i,k}^{-1} \bar{B}lu3_{i,k}}_{\bar{B}_{i,k}} \right) \delta \bar{X}_{u1}_{i,k+1} + \\ + \left( \underbrace{\bar{D}lu1_{i,k} - \bar{A}lu2_{i,k} \bar{A}lu4_{i,k}^{-1} \bar{D}lu3_{i,k}}_{\bar{D}_{i,k}} \right) \delta \bar{X}_{u1}_{i+1,k} = \\ = \left( \underbrace{\bar{R}u1 - \bar{A}lu2_{i,k} \bar{A}lu4_{i,k}^{-1} \bar{R}u2_{i,k}}_{\bar{R}_{i,k}} \right) \quad (M9)$$

Reescrevendo a expressão anterior de forma compacta tem-se:

$$\begin{aligned} \bar{E}_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}{}_{i-1,k} + \bar{C}_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}{}_{i,k-1} + \bar{A}_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}{}_{i,k} + \bar{B}_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}{}_{i,k+1} + \\ + \bar{D}_{i,k} \delta \bar{X}_{u1}{}_{i+1,k} = \bar{R}_{i,k} \end{aligned} \quad (M10)$$

Cada uma das submatrizes resultantes,  $\bar{E}_{i,k}$ ,  $\bar{C}_{i,k}$ ,  $\bar{A}_{i,k}$ ,  $\bar{B}_{i,k}$  e  $\bar{D}_{i,k}$  tem dimensão 3 por 3, enquanto os vetores  $\delta \bar{X}_{u1}$  e  $\bar{R}_{i,k}$  possuem 3 elementos. O conjunto das equações (M10), uma para cada célula da malha, formará - para geometria bidimensional e ordenamento convencional das equações- um sistema pentadiagonal por blocos de 3 por 3 elementos, semelhante aos obtidos em modelos "black-oil" trifásicos totalmente implícitos.

A solução do sistema de equações do modelo composicional apresentado envolveu, portanto, os seguintes passos para cada célula da malha:

-Cálculo das submatrizes  $\bar{E}_{lu,i,k}$ ,  $\bar{C}_{lu,i,k}$ ,  $\bar{A}_{lu,i,k}$ ,  $\bar{A}_{ru,i,k}$ ,  $\bar{A}_{ll,i,k}$ ,  $\bar{A}_{rl,i,k}$ ,  $\bar{B}_{lu,i,k}$  e  $\bar{D}_{lu,i,k}$ , onde  $i=1,2,\dots,N_x$  e  $k=1,2,\dots,N_z$ ;

-Redução das submatrizes acima para a forma mostrada na equação (M10), usando as partições definidas na figura 4.3.

-Solução do sistema no vetor incógnita  $\delta \bar{X}_{u1} = \begin{pmatrix} \delta p_o \\ \delta S_g \\ \delta S_w \end{pmatrix}^T$ . Empregou-se nessa etapa a rotina NSPIV [26], baseada em técnica para matrizes esparsas;

-Cálculo das demais incógnitas do sistema, que constam do vetor  $\delta\bar{X}_{u2} = (x_1, x_2, \dots, x_{n_c-2})$  através da expressão (M8) - que depende da solução  $\delta\bar{X}_{u1}$  obtida anteriormente. Calcula-se a seguir o vetor  $\delta\bar{X}_i = (x_{n_c-1}, y_2, y_3, \dots, y_{n_c})$  usando agora a equação (M3);

-Verificação da convergência da solução e, conforme o caso, execução de nova iteração ou passo de tempo ao longo da simulação.

A implementação computacional do processo descrito acima procurou otimizar o consumo de memória através do armazenamento permanente, por célula da malha, e a cada iteração newtoniana, apenas das submatrizes necessárias para a resolução das equações (M3), (M8) e (M10). Todas as demais matrizes e vetores envolvidos têm existência "temporária", ou seja, são usadas áreas comuns de memória independentemente da célula sendo considerada na montagem do sistema de equações.

Finalizando este item cumpre observar que o desenvolvimento mostrado até aqui é aplicável àquelas células que se encontram na chamada região de duas fases, onde óleo e gás coexistem em equilíbrio termodinâmico. Entretanto podem haver situações, na realidade muito frequentes, em que apenas uma fase hidrocarboneto está presente, só líquido ou só gás. Nesses casos o sistema de equações se reduz visto que perdem sentido as relações de equilíbrio de fases, permanecendo apenas as  $n_c+1$  equações de transporte. O tratamento desses casos particulares está detalhado no item 4.4 a seguir.

#### 4.4 Tratamento de Células com Fase Única

A discussão do modelo composicional até agora tem-se baseado num sistema de  $2n_c + 1$  equações por célula da malha de simulação, sendo  $n_c + 1$  de para o escoamento dos componentes e  $n_c$  que impõem a condição de equilíbrio entre as fases hidrocarbonetos. Subjacente a esse modelo está consideração da existência dessas duas fases numa dada célula. Entretanto, sob certas condições termodinâmicas, uma das fases pode não estar presente. Tal situação ocorre quando um fluido está sujeito a uma pressão acima de sua pressão de saturação, ou seja, apenas a fase líquida existe para um óleo acima de sua pressão de bolha e apenas a fase vapor está presente num gás com pressão acima da de orvalho. A ocorrência de um ou outro caso reduzirá o sistema de equações às expressões de transporte, visto que perderão o sentido as relações de equilíbrio de fases.

Um simulador composicional deve, portanto, estar equipado para identificar o número de fases presentes em cada célula bem como adaptar seu algoritmo de solução a essa situação. A verificação do número de fases coexistentes pode ser feita através do cálculo da pressão de saturação, admitindo-se como conhecido o fluido inicialmente presente; operação que é desenvolvida a cada passo de tempo ou, preferencialmente, a cada iteração newtoniana. Esta última opção foi a adotada no simulador desenvolvido. A adaptação do procedimento de solução, por sua vez, serviu-se de conveniente manipulação dos elementos do bloco diagonal principal da matriz jacobiana nas células de fase única.

O esquema abaixo mostra a disposição dos elementos no bloco diagonal principal para uma célula com duas fases:

$\frac{\partial F_w}{\partial p}$	$\frac{\partial F_w}{\partial S_g}$	$\frac{\partial F_w}{\partial S_w}$	$\frac{\partial F_w}{\partial x_1}$	.....	$\frac{\partial F_w}{\partial x_{n_c-2}}$	$\frac{\partial F_w}{\partial x_{n_c-1}}$	$\frac{\partial F_w}{\partial y_2}$	.....	$\frac{\partial F_w}{\partial y_{n_c}}$	$\delta p$
$\frac{\partial F_1}{\partial p}$	$\frac{\partial F_1}{\partial S_g}$	$\frac{\partial F_1}{\partial S_w}$	$\frac{\partial F_1}{\partial x_1}$	.....	$\frac{\partial F_1}{\partial x_{n_c-2}}$	$\frac{\partial F_1}{\partial x_{n_c-1}}$	$\frac{\partial F_1}{\partial y_2}$	.....	$\frac{\partial F_1}{\partial y_{n_c}}$	$\delta S_g$
$\frac{\partial F_2}{\partial p}$	$\frac{\partial F_2}{\partial S_g}$	$\frac{\partial F_2}{\partial S_w}$	$\frac{\partial F_2}{\partial x_1}$	.....	$\frac{\partial F_2}{\partial x_{n_c-2}}$	$\frac{\partial F_2}{\partial x_{n_c-1}}$	$\frac{\partial F_2}{\partial y_2}$	.....	$\frac{\partial F_2}{\partial y_{n_c}}$	$\delta S_w$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\delta x_1$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
$\frac{\partial F_{n_c}}{\partial p}$	$\frac{\partial F_{n_c}}{\partial S_g}$	$\frac{\partial F_{n_c}}{\partial S_w}$	$\frac{\partial F_{n_c}}{\partial x_1}$	.....	$\frac{\partial F_{n_c}}{\partial x_{n_c-2}}$	$\frac{\partial F_{n_c}}{\partial x_{n_c-1}}$	$\frac{\partial F_{n_c}}{\partial y_2}$	.....	$\frac{\partial F_{n_c}}{\partial y_{n_c}}$	$\delta x_{n_c-2}$
$\frac{\partial F_{f1}}{\partial p}$	0	0	$\frac{\partial F_{f1}}{\partial x_1}$	.....	$\frac{\partial F_{f1}}{\partial x_{n_c-2}}$	$\frac{\partial F_{f1}}{\partial x_{n_c-1}}$	$\frac{\partial F_{f1}}{\partial y_2}$	.....	$\frac{\partial F_{f1}}{\partial y_{n_c}}$	$\delta x_{n_c-1}$
$\frac{\partial F_{f2}}{\partial p}$	0	0	$\frac{\partial F_{f2}}{\partial x_1}$	.....	$\frac{\partial F_{f2}}{\partial x_{n_c-2}}$	$\frac{\partial F_{f2}}{\partial x_{n_c-1}}$	$\frac{\partial F_{f2}}{\partial y_2}$	.....	$\frac{\partial F_{f2}}{\partial y_{n_c}}$	$\delta y_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\delta y_3$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
$\frac{\partial F_{f_{n_c}}}{\partial p}$	0	0	$\frac{\partial F_{f_{n_c}}}{\partial x_1}$	.....	$\frac{\partial F_{f_{n_c}}}{\partial x_{n_c-2}}$	$\frac{\partial F_{f_{n_c}}}{\partial x_{n_c-1}}$	$\frac{\partial F_{f_{n_c}}}{\partial y_2}$	.....	$\frac{\partial F_{f_{n_c}}}{\partial y_{n_c}}$	$\delta y_{n_c}$

Na matriz acima as  $n_c + 1$  linhas superiores mostram as derivadas das  $n_c + 1$  equações de fluxo em relação às  $2n_c + 1$  incógnitas, enquanto as  $n_c$  linhas inferiores indicam as derivadas das  $n_c$  relações de equilíbrio em relação a essas mesmas incógnitas.

No caso de uma célula contendo apenas a fase óleo, admite-se que a saturação de gás ( $S_g$ ) é nula deixando, portanto, de ser incógnita. Da mesma forma as  $n_c$  variáveis relativas às frações molares na fase vapor ( $y_1$  a  $y_{n_c}$ ) perdem o sentido e o sistema se reduz a  $n_c+1$  equações de transporte em  $n_c+1$  variáveis ( $p_o, S_w, x_1, x_2, \dots, x_{n_c-1}$ ). Visando não alterar a montagem das submatrizes definidas no item 4.3 a seguinte relação é introduzida:

$$\delta S_g = \delta x_{n_c-1}$$

Com essa nova equação o bloco diagonal principal de uma célula com fase única líquida fica:

$$\left[ \begin{array}{cccc|cccc} \frac{\partial F_w}{\partial p} & 0 & \frac{\partial F_w}{\partial S_w} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \delta p \\ \frac{\partial F_1}{\partial p} & 0 & \frac{\partial F_1}{\partial S_w} & \frac{\partial F_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_{n_c-2}} & \frac{\partial F_1}{\partial x_{n_c-1}} & 0 & \dots & 0 & \delta S_g \\ \frac{\partial F_2}{\partial p} & 0 & \frac{\partial F_2}{\partial S_w} & \frac{\partial F_2}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial x_{n_c-2}} & \frac{\partial F_2}{\partial x_{n_c-1}} & 0 & \dots & 0 & \delta S_w \\ \vdots & \delta x_1 \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F_{n_c}}{\partial p} & 0 & \frac{\partial F_{n_c}}{\partial S_w} & \frac{\partial F_{n_c}}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_{n_c}}{\partial x_{n_c-2}} & \frac{\partial F_{n_c}}{\partial x_{n_c-1}} & 0 & \dots & 0 & \delta x_{n_c-2} \\ \hline 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & \delta x_{n_c-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & \delta y_2 \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \delta y_3 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \delta y_{n_c} \end{array} \right]$$

Complementa-se o artifício estendendo-se o tratamento totalmente implícito a uma variável composicional, no caso à variável  $x_{n_c-1}$ , de forma a manter o esquema de implicitude total em três das variáveis do problema. Aliás isto é recomendado por Quandalle e Savary [20] na sua formulação.

As operações matriciais introduzidas no item 4.3 permanecem válidas, obtendo-se ao final uma matriz de blocos de 3 por 3. Obviamente as correções  $\delta y_2, \delta y_3, \dots, \delta y_{n_c}$  serão sempre nulas visto que não existe a fase vapor.

Procedimento semelhante foi aplicado para as células identificadas como contendo apenas a fase vapor. Nesse caso admite-se que a saturação de gás corresponde ao complemento da saturação de água, deixando de ser incógnitas  $S_g, x_1, x_2, \dots, x_{n_c}$ . As seguintes relações adicionais são criadas visando não alterar o esquema padrão de montagem das submatrizes:

$$\delta S_g = \delta y_2$$

$$\delta x_1 = \delta y_3$$

$$\delta x_2 = \delta y_4$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$\delta x_{n_c-2} = \delta y_{n_c}$$

O novo algoritmo inclui ainda um tratamento totalmente implícito em uma variável composicional, no caso em  $y_2$ , mantendo o esquema de implicitude total em três das variáveis [20]. Usando as relações mostradas logo acima o bloco diagonal

principal de uma célula com fase única vapor é reescrito como:

$$\begin{array}{c}
 \left[ \begin{array}{cccc|cccc}
 \frac{\partial F_w}{\partial p} & 0 & \frac{\partial F_w}{\partial S_w} & 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial F_w}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial F_w}{\partial y_{n_c}} \\
 \frac{\partial F_1}{\partial p} & 0 & \frac{\partial F_1}{\partial S_w} & 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial F_1}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial y_{n_c}} \\
 \frac{\partial F_2}{\partial p} & 0 & \frac{\partial F_2}{\partial S_w} & 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial F_2}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial y_{n_c}} \\
 \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots \\
 \frac{\partial F_{n_c}}{\partial p} & 0 & \frac{\partial F_{n_c}}{\partial S_w} & 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial F_{n_c}}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial F_{n_c}}{\partial y_{n_c}} \\
 \hline
 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1
 \end{array} \right]
 \begin{array}{c}
 \delta p \\
 \delta S_g \\
 \delta S_w \\
 \delta x_1 \\
 \vdots \\
 \delta x_{n_c-2} \\
 \delta x_{n_c-1} \\
 \delta y_2 \\
 \delta y_3 \\
 \vdots \\
 \delta y_{n_c-1} \\
 \delta y_{n_c}
 \end{array}
 \end{array}$$

Como no caso anterior, as operações matriciais desenvolvidas no item 4.3 mantêm sua validade obtendo-se ao final uma matriz jacobiana reduzida de blocos de 3 por 3. As correções  $\delta x_1, \delta x_2, \dots, \delta x_{n_c-1}$  serão aqui necessariamente nulas.

Durante as diversas aplicações do modelo, que serão comentadas oportunamente, a evolução dos processos simulados normalmente partiu de uma situação de fase única para uma de duas fases. Não obstante, nada impede que o contrário ocorra, identificando-se o desaparecimento de uma fase através da obtenção de saturações de gás nulas ou iguais (ou maiores) que o complemento da saturação de água.

#### 4.5 Tratamento dos Termos Fonte

A interação do reservatório com o exterior, fisicamente associada aos poços, foi modelada através da inclusão de termos fonte nas equações de transporte (4.38) e (4.39), nas células definidas como contendo um poço. O método foi implementado de forma genérica permitindo a alocação de poços em qualquer célula da malha. Nas simulações do tipo seção transversal, geometrias radial ou cartesiana, admitiu-se ainda a possibilidade de poços completados em mais de uma camada, ou seja, é possível haver um ou mais blocos contribuindo para um mesmo poço.

As vazões de produção obtidas do reservatório foram consideradas a nível de superfície, melhor dizendo, nas condições de pressão e temperatura de separação dos fluidos especificadas em superfície. A correspondência entre as vazões em reservatório com as resultantes em superfície, para cada poço, partiu da hipótese de que a vazão molar total de hidrocarbonetos em reservatório ( $Q_{th}$ ) é igual à vazão molar total de hidrocarbonetos no separador ( $Q_{ths}$ ). Deprezaram-se, portanto, os efeitos de estocagem nos poços. A hipótese acima é traduzida por:

$$Q_{th} = Q_{ths} \quad (4.57)$$

A vazão  $Q_{ths}$  pode ser rerepresentada como:

$$Q_{ths} = q_{os} \rho_{os} + q_{gs} \rho_{gs} \quad (4.58)$$

Em (4.58) o subscrito s indica valores obtidos em superfície, para as densidades molares de óleo ( $\rho_{os}$ ) e gás ( $\rho_{gs}$ ) e vazões volumétricas de óleo ( $q_{os}$ ) e gás ( $q_{gs}$ ). Introduzindo agora os conceitos de fração molar líquida  $L_s$  e vapor  $V_s$ , em condições de separação, e empregando ainda a idéia admitida em (4.57), a expressão (4.58) pode ser desmembrada em:

$$q_{os} \rho_{os} = L_s Q_{ths} = L_s Q_{th} \quad (4.59)$$

$$q_{gs} \rho_{gs} = V_s Q_{ths} = V_s Q_{th} \quad (4.60)$$

$$\text{Onde } L_s + V_s = \frac{n_l + n_v}{n} = 1.$$

A vazão molar total de hidrocarbonetos no reservatório,  $Q_{th}$ , por sua vez, é composta pelas parcelas:

$$Q_{th} = \sum_{k=ki}^{kf} \left( q_{o_k} \rho_{o_k} + q_{g_k} \rho_{g_k} \right) \quad (4.61)$$

Onde  $ki$  e  $kf$  indicam as camadas inicial e final (contínuas) abertas ao fluxo no poço considerado. Substituindo a equação (4.61) nas anteriores (4.59) e (4.60) obtém-se as expressões que relacionam as vazões de reservatório com as de superfície:

$$q_{os} \rho_{os} = L_s \sum_{k=ki}^{kf} \left( q_{o_k} \rho_{o_k} + q_{g_k} \rho_{g_k} \right) \quad (4.62)$$

$$q_{gs} \rho_{gs} = V_s \sum_{k=ki}^{kf} \left( q_{o_k} \rho_{o_k} + q_{g_k} \rho_{g_k} \right) \quad (4.63)$$

A lei de Darcy serviu para o cálculo das vazões volumétricas dos fluidos no reservatório:

$$q_{f_k} = IP_k \frac{k_{rf}}{\mu_f} (p_{f_k} - p_{wf_k}) \quad (4.64)$$

Onde  $f = o, g, w$  e  $p_{wf_k}$  é a pressão de fluxo na camada  $k$ . Os índices de produtividade  $IP_k$  podem ser fornecidos ou calculados. Para esse último caso adotou-se o modelo de Peaceman [27] que propõe:

$$IP_k = \frac{2 \pi K \Delta z_k}{\ln \left( \frac{r_o}{r_w} \right)} \quad (4.65)$$

Onde  $r_w$  é o raio do poço e  $\Delta z_k$  é a espessura da célula que contém o poço. Para geometria radial tem-se ainda que:

$K$  : permeabilidade absoluta na direção radial;

$r_o$  : raio do nó da célula que contém o poço.

Já para geometria cartesiana essas variáveis significam:

$K$  : média geométrica das permeabilidades horizontal e vertical da célula que contém o poço;

$$r_o = 0.14 \Delta x_{i,k} \left( 1 + \alpha^2 \right)^{1/2} \quad \text{onde} \quad \alpha = \frac{\Delta x_{i,k}}{\Delta y} \quad \text{para} \quad 1/2 < \alpha < 2$$

A expressão (4.64) é dependente das pressões de fluxo  $p_{wf_k}$ , onde  $k = k_i$  a  $k_f$ . Além disso as equações que relacionam

as vazões de reservatório com suas resultantes de superfície, (4.62) e (4.63), dependem ainda da composição e propriedades dos fluidos em superfície. A solução a ser empregada será função do tipo de condição de contorno imposta ao problema. Duas possibilidades existem:

a) A pressão de fluxo na célula base ( $k = k_i$ ) das camadas completadas é fornecida. Nesse caso tem-se uma produção (ou injeção, inclusive de água) à pressão constante, tornando o cálculo das vazões volumétricas em reservatório direto. Conhecida a pressão na base, as pressões de fluxo nas camadas abertas acima dela, obviamente se estas existirem, são obtidas por [11]:

$$p_{wf_k} = p_{wf_{k_i}} - H_k \quad (4.66)$$

Onde  $H_{k_i} = 0$  ; os demais  $H_k$  são dados por:

$$H_k = \sum_{j=k_i}^{k-1} \gamma_{t_{j+1/2}} \left( z_{j-1} - z_j \right) \quad (4.67)$$

$$\text{Onde } \gamma_{t_{j+1/2}} = \frac{\left( \gamma_o q_o + \gamma_g q_g + \gamma_w q_w \right)_{j+1/2}}{\left( q_o + q_g + q_w \right)_{j+1/2}} \quad (4.68)$$

Os  $\gamma_f$  ( $f = o, g, w$ ) são os pesos específicos das fases.

Conhecidos os  $p_{wf_k}$  obtém-se as vazões em reservatório  $q_{f_k}$  ( $f=o, g, w$ ) que serão usadas nas equações de fluxo do simulador.

Ao final de cada passo de tempo calculam-se então as vazões dos hidrocarbonetos produzidos a jusante do separador através das equações (4.62) e (4.63). As informações sobre as frações e densidades molares geradas em superfície são providas através de um cálculo de liberação instantânea ("flash") para as condições de separação; usando a composição global  $z_{m_{\text{poço}}}$  ( $m=1,2,\dots,n_c$ ) dos fluidos como estes se apresentam em reservatório, que é igual à composição global  $z_{m_s}$  que chega ao separador. Esta composição global é definida por [8]:

$$z_{m_{\text{poço}}} = z_{m_s} = \frac{\sum_{k=k_i}^{k_f} \left( x_m \rho_o q_o + y_m \rho_g q_g \right)_k}{\sum_{k=k_i}^{k_f} \left( \rho_o q_o + \rho_g q_g \right)_k} \quad (4.69)$$

b) Num segundo caso a pressão de fluxo varia com a produção que se mantém constante. Nessa situação a pressão  $p_{wf_k}$  é obtida a partir das equações (4.62), para vazão de óleo especificada na superfície, ou (4.63) caso uma vazão de gás constante seja imposta. A expressão para o cálculo da pressão de fluxo é deduzida, usando como exemplo o caso de vazão de óleo  $q_{os}$  constante, substituindo-se a lei de Darcy, em (4.64), na equação (4.62):

$$\frac{q_{os} \rho_{os}}{Ls} = \sum_{k=k_i}^{k_f} IP_k \left[ \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} \left( p_o - p_{wf} \right) + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \left( p_g - p_{wf} \right) \right]_k$$

$$(4.70)$$

Admitindo-se agora que as diferenças de pressão nas fases óleo e gás em relação à pressão de fluxo são constantes em todas as camadas, ou seja:

$$p_{o_k} - p_{wf_k} = p_{g_k} - p_{wf_k} = \Delta p = \text{constante}$$

Reescreve-se a expressão (4.70) gerando-se a equação para a determinação da pressão de fluxo:

$$\Delta p = p_o - p_{wf} = \frac{q_{os} \rho_{os}}{L_s} \frac{1}{\sum_{k=ki}^{kf} IP_k \left( \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \right)_k} \quad (4.71)$$

Raciocínio semelhante é aplicável à produção constante de gás, obtendo-se:

$$\Delta p = p_o - p_{wf} = \frac{q_{gs} \rho_{gs}}{V_s} \frac{1}{\sum_{k=ki}^{kf} IP_k \left( \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \right)_k} \quad (4.72)$$

Como se observa em (4.71) e (4.72) a pressão de fluxo, necessária à determinação dos termos fonte, é dependente da composição e propriedades dos produtos, fases óleo e gás, gerados em superfície. Estes, por sua vez, são função da

composição das fases em equilíbrio no reservatório, que é justamente o que se está tentando calcular de forma iterativa a cada passo de tempo na simulação. Assim o problema a ser resolvido é não linear. Um tratamento totalmente implícito para sua solução demandaria um considerável esforço computacional fato que levou à adoção de uma aproximação explícita, na iteração prévia, para as funções dependentes das variáveis composicionais de superfície ( $L_s$ ,  $V_s$ ,  $\rho_{o_s}$  e  $\rho_{g_s}$ ). Ou seja, as informações sobre composição e propriedades das fases ao nível do separador são determinadas, via cálculo "flash", usando-se a composição global dos fluidos no reservatório, calculadas por (4.69), resultantes da iteração imediatamente anterior a em andamento. Ao fim de cada passo de tempo as vazões volumétricas  $q_{o_s}$  e  $q_{g_s}$  reportadas devem ser corrigidas para seus valores corretos, podendo ocorrer pequenas diferenças em relação à vazão estipulada inicialmente como constante.

As derivadas dos termos fonte em relação às variáveis primárias do modelo composicional são exemplificadas no Apêndice B com as demais derivadas das equações de fluxo.

#### 4.6 Inicialização das Variáveis da Malha de Simulação

A discussão sobre a solução do sistema de equações do modelo composicional se completa neste item onde são apresentados os principais dados necessários ao problema e a maneira como estes são associados aos valores iniciais das variáveis de cada célula da malha de simulação. Três diferentes configurações iniciais de reservatório foram previstas, podendo ou não conter aquífero subjacente. São elas:

- reservatório de óleo com gás em solução;
- reservatório de óleo com capa de gás;
- reservatório de gás;

O tratamento da condição inicial do reservatório exige uma série de informações sobre a geometria do reservatório e de propriedades da rocha e fluidos nela contidos. Sua descrição detalhada seria tediosa e desnecessária, ao menos para os objetivos presentes. Assim sendo, listam-se abaixo apenas os principais dados empregados nessa etapa:

- dimensões e cotas de referência do reservatório, entre elas as profundidades dos contatos água/óleo ( $h_{c_{w_o}}$ ) e óleo/gás ( $h_{c_{g_o}}$ );
- fase em que se encontra o fluido inicialmente presente no reservatório, se líquida (óleo) ou vapor (gás);
- composição inicial desse fluido,  $z_m$  para  $m = 1, 2, \dots, n_c$ ;
- pressão  $p_{ref}$  existente numa profundidade de referência  $h_{ref}$ ;
- saturação de água irreducível ( $S_{wi}$ );
- curvas de pressões capilares água/hidrocarboneto ( $P_{c_{w_o}}$ ) (água/óleo ou água/gás) e óleo/gás ( $P_{c_{g_o}}$ );

A associação das informações anteriores às variáveis do problema, que se segue ao lançamento da malha - ou seja a determinação das coordenadas de cada célula - admitiu a existência de equilíbrio capilar e gravitacional dos fluidos no interior do reservatório. Assim sendo, o seguinte procedimento foi implementado:

a) Cálculo da pressão de saturação do fluido inicial no reservatório bem como das composições das fases hidrocarbonetos em equilíbrio nessa pressão (líquida  $x_{m\text{ sat}}$  e vapor  $y_{m\text{ sat}}$  para  $m = 1, 2, \dots, n_c$ );

b) Cálculo da pressão na fase óleo em cada célula usando-se a pressão e profundidade de referência fornecidas. No caso de reservatório de óleo em que o contato óleo/gás está presente admitiu-se que a pressão de bolha, recém calculada na etapa a, ocorre na profundidade do contato, passando então a servir de ponto de referência. O algoritmo de cálculo das pressões iniciais na malha partiu da equação do equilíbrio hidrostático:

$$\int_{p_{ref}}^p dp = \int_{h_{ref}}^h \gamma(p) dh$$

Usando o teorema do valor médio, a integração da expressão acima gera:

$$p = p_{ref} + \bar{\gamma}(\bar{p}) (h - h_{ref}) \quad (4.73)$$

Onde  $\bar{p}$  é a pressão média entre  $p_{ref}$  e a pressão  $p$ , na cota  $h$ ,

que se pretende calcular. Sendo a equação (4.73) não linear, na sua solução empregou-se o método de Newton-Raphson já discutido anteriormente. Assim, partindo-se da equação da pressão média:

$$\bar{p} = \frac{p + p_{ref}}{2} \quad \text{ou seja} \quad p = 2\bar{p} - p_{ref}$$

Substituindo (4.73) na expressão acima obtém-se a função de resíduo  $F_r$ :

$$F_r = 2 \left( \bar{p} - p_{ref} \right) - \bar{\gamma} (\bar{p}) \left( h - h_{ref} \right) = 0$$

cuja derivada em relação a variável  $\bar{p}$  é:

$$\frac{dF_r}{d\bar{p}} = 2 - \left( h - h_{ref} \right) \frac{d\bar{\gamma}}{d\bar{p}}$$

Isto posto, calcula-se a pressão  $\bar{p}$  por procedimento iterativo onde:

$$\bar{p}^{u+1} = \bar{p}^u + \left( \frac{-F_r}{dF_r/d\bar{p}} \right)$$

As iterações se interrompem quando o módulo da correção na pressão  $\delta\bar{p}$  tornar-se menor que um valor de tolerância ou seja:

$$| \delta\bar{p} | = \left| \left( \frac{-F_r}{dF_r/d\bar{p}} \right) \right| < \text{tolerância}$$

Calculado  $\bar{p}$  obtém-se facilmente a pressão  $p$  procurada.

c) Verificação da existência de aquífero no reservatório e, se for o caso, determinação da pressão na fase hidrocarboneto  $p_{hc}$  (óleo ou gás, conforme o tipo de reservatório) no contato água/hidrocarboneto. Calcula-se então a pressão na fase água  $p_{wc}$  no contato água/hidrocarboneto, que servirá de referência para outras determinações de pressão na água:

$$P_{wc} = P_{hc} - P_{cwoe}$$

Onde  $P_{cwoe}$  é a pressão capilar água/hidrocarboneto de entrada. Existindo aquífero determina-se ainda a pressão capilar água/hidrocarboneto máxima  $P_{cwo m}$  cujo valor corresponde a saturação de água irreduzível  $S_{wi}$ .

d) Verificação da existência de capa de gás no reservatório. Nesse caso a pressão na fase óleo no contato gás óleo  $p_{oc}$  será igual à pressão de bolha calculada em b. Calcula-se então a pressão na fase gás  $p_{gc}$  nessa posição, que servirá de referência para outras determinações de pressão na fase vapor:

$$P_{gc} = P_{oc} + P_{cgoe}$$

Onde  $P_{cgoe}$  é a pressão capilar óleo/gás de entrada. Existindo capa de gás define-se ainda a pressão capilar óleo/gás máxima  $P_{cgo m}$  que corresponde a uma saturação de óleo residual.

e) Caso o reservatório contenha capa de gás e/ou aquífero calculam-se ainda, uma a uma e para cada célula da malha, as

pressões nas fases água  $p_w$  e gás  $p_g$ . Conclui-se o processo analisando-se a posição de cada bloco em relação aos contatos e a magnitude das pressões capilares nele existentes. Em função dos resultados as variáveis saturação de água  $S_w$ , de gás  $S_g$  e composições das fases líquida  $x_m$  e vapor  $y_m$  ( $m = 1, 2, \dots, n_c$ ) da célula recebem diferentes valores iniciais. Assim para:

1) Célula em região de água, ou seja seu topo é inferior ao contato água/hidrocarboneto, as variáveis ficam:

$$S_w = 1 \quad ; \quad S_g = 0 \quad ; \quad x_m = 0 \quad e \quad y_m = 0$$

2) Célula na zona de transição água/hidrocarboneto: aqui a pressão capilar água/hidrocarboneto  $P_{cwo} = P_{hc} - P_w$  no centro da célula será inferior à pressão capilar água/hidrocarboneto máxima  $P_{cwoM}$ . Nesse caso a saturação de água  $S_w$  será obtida da curva de pressão capilar água/hidrocarboneto com valor que corresponde à  $P_{cwo}$  determinada para esse bloco. As demais variáveis ficam:

$$\text{reservatório de gás :} \quad S_g = 1 - S_w \quad x_m = 0 \quad e \quad y_m = z_m$$

$$\text{reservatório de óleo:} \quad S_g = 0 \quad x_m = z_m \quad e \quad y_m = 0$$

Verifica-se ainda, como recomendado por Kazemi [8], se a pressão do bloco é superior à pressão de saturação certificando-se assim da presença de uma única fase hidrocarboneto.

3) Célula se encontra totalmente em região de óleo, isto é, seu topo está abaixo do contato óleo/gás e sua base está acima do contato água/óleo e da zona de transição água/óleo (ou seja sua  $P_{cwo} > P_{cwom}$ ). Nesse caso tem-se:

$$S_w = S_{wi} \quad ; \quad S_g = 0 \quad ; \quad x_m = z_m \quad e \quad y_m = 0$$

Verifica-se também se a pressão do bloco é maior que a pressão de bolha.

4) Célula está na região de gás, em reservatório de óleo, porém dentro da zona de transição óleo/gás: nesse caso a pressão capilar óleo/gás  $P_{cgo} = p_g - p_o$  do bloco é menor que a pressão capilar gás óleo máxima  $P_{cgom}$ . Com  $P_{cgo}$  obtém-se a  $S_g$  correspondente e as demais variáveis são iniciadas com:

$$S_w = S_{wi} \quad ; \quad x_m = x_{m_{sat}} \quad e \quad y_m = y_{m_{sat}}$$

5) Célula totalmente contida em região de gás:

em reservatório de óleo:  $S_g = 1 \quad ; \quad x_m = 0 \quad e \quad y_m = y_{m_{sat}}$

em reservatório de gás:  $S_g = 1 \quad ; \quad x_m = 0 \quad e \quad y_m = z_m$

Aqui a pressão do bloco deve ser maior que a pressão de orvalho, visto que apenas a fase gás existe.

A iniciação das variáveis da malha, como descrita até aqui, não levou em conta a existência de uma possível variação composicional no fluido com a profundidade por ação gravitacional. Esse fenômeno, que pode ser significativo em reservatórios muito espessos e para fluidos com elevado teor de frações leves, foi apontado por Wheaton [28] em recente trabalho. Esse autor apresenta uma técnica de iniciação de variáveis para modelos composicionais que contempla esse efeito, que, todavia, não foi implementada na presente versão do modelo.

## 5. PROPRIEDADES DE ROCHA E FLUIDOS

As equações do modelo composicional sob estudo incorporam variáveis que respondem pelas propriedades da rocha reservatório e pelo comportamento PVT dos fluidos nela contidos. Neste capítulo serão descritas as técnicas usadas na obtenção e utilização racional dessas propriedades. Enfatiza-se a aplicação da equação de estado de Peng-Robinson na geração de dados volumétricos e de equilíbrio entre as fases hidrocarbonetos.

### 5.1 Pressões Capilares

Os dados de pressão capilar água/hidrocarboneto e gás/óleo, cujas definições são apresentadas no item 3.3, foram fornecidos ao modelo através de tabelas em função da saturação de água ( $P_{cwo} = f(S_w)$ ) e de gás ( $P_{cgo} = f(S_g)$ ). Alguns comentários sobre a aplicação dessas informações são desenvolvidos a seguir.

As curvas de pressão capilar usadas nos modelos de reservatório são, geralmente, obtidas a partir de análises petrofísicas de laboratório. Nesses ensaios são empregadas amostras de meio poroso e de fluidos que de alguma maneira possam ser consideradas representativas do sistema físico real, isto é, o reservatório de petróleo. Em alguns casos de simulação composicional, no entanto, podem ocorrer fortes variações nas composições dos fluidos que, por sua vez, alteram os valores de tensão interfacial e de pressões capilares. Como exemplo pode-se citar os processos miscíveis de recuperação.

Nesses casos os dados de laboratório deixam de ter validade absoluta e servem apenas como uma referência. Visando considerar esse efeito alguns autores [6], [11] propuseram métodos, cujo embasamento é fortemente empírico, objetivando corrigir os valores de pressão capilar de forma a contemplar as variações da tensão interfacial. No presente trabalho esse tipo de correção não foi implementado porque julgou-se que os modelos disponíveis apresentavam pequeno substrato teórico, aliás como admitido por seus próprios autores.

Outra observação importante se refere a conhecida dependência da pressão capilar em relação ao histórico de saturações do meio poroso. Normalmente nos ensaios de laboratório as curvas de pressão capilar são construídas através de processo de drenagem, onde um fluido não molhante desloca outro molhante. Esses dados devem ser compatíveis com o processo sendo simulado. Por exemplo, na simulação da depleção de um reservatório de gás e condensado, onde a fase líquida surge como consequência da despressurização do sistema (fenômeno de condensação retrógrada) devem ser empregados dados de pressão capilar gás/óleo gerados por técnica de embebição. Tal análise não é rotineiramente efetuada em laboratório sendo, portanto, difícil considerá-la em algumas situações.

## 5.2 Permeabilidades Relativas

As informações sobre permeabilidades relativas foram fornecidas ao modelo a partir de dados tabelados, como estes são normalmente gerados em laboratório. Por razões

experimentais - cuja discussão foge ao escopo deste trabalho - a caracterização do comportamento de fluxo de uma rocha, é, na maioria das vezes, obtida em ambiente bifásico. Ou seja, geralmente dois experimentos independentes são realizados em laboratório: num deles a amostra de rocha é analisada quanto ao escoamento de água e óleo ( $K_w/K_o$ ) enquanto num segundo coexistem as fases gás e óleo ( $K_g/K_o$ ) (este último quase sempre na presença de uma saturação de água irreducível). No reservatório real, entretanto, o escoamento pode ocorrer em ambiente trifásico com fluxo concomitante das três fases. Para contornar esse problema, algumas correlações empíricas [4] tem sido propostas, onde "correções" aos dados usuais de laboratório são feitas de forma a reproduzir a situação trifásica. No presente trabalho adotou-se o modelo II de Stone [4] que aproxima a permeabilidade relativa ao óleo  $k_{ro}$  na presença de gás e de água por:

$$k_{ro} = \left( k_{row} + k_{rw} \right) \left( k_{rog} + k_{rg} \right) - \left( k_{rw} + k_{rg} \right) \quad (5.1)$$

Em (5.1)  $k_{row}$  e  $k_{rw}$  são as permeabilidades relativas ao óleo e à água obtidas em ambiente água/óleo e  $k_{rog}$  e  $k_{rg}$  são as permeabilidades relativas ao óleo e ao gás geradas na presença desses fluidos e sob saturação de água irreducível. Note-se que a expressão (5.1) convergirá para os valores de laboratório desde que em:

-ambiente bifásico água/óleo:  $k_{rog} = 1, k_{rg} = 0$  logo  $k_{ro} = k_{row}$

-ambiente bifásico gás/óleo :  $k_{row} = 1, k_{rw} = 0$  logo  $k_{ro} = k_{rog}$

A equação (5.1) implica em que  $k_{r_o} = f(S_w, S_g)$ ; conseqüentemente admite-se que as permeabilidades relativas às fases gás e água são dependentes apenas de suas próprias saturações, ou seja:

$$k_{r_w} = f(S_w)$$

$$k_{r_g} = f(S_g)$$

Como já comentado no item anterior sobre pressões capilares, aqui também podem ocorrer variações nos valores de permeabilidade relativa decorrentes de mudanças na composição dos fluidos. Pelas razões apontadas antes, esse efeito foi mais uma vez desconsiderado, apesar da existência de propostas empíricas [6], [11] de tornar as curvas de  $K_g/K_o$  dependentes da tensão interfacial.

O histórico de saturações, que como visto no item 5.1 afeta o comportamento capilar da rocha, também pode influenciar as curvas de permeabilidade relativa do tipo  $K_g/K_o$ . Assim sendo, nas simulações de reservatórios portadores de fluidos do tipo gás e condensado deve-se procurar empregar dados de  $K_g/K_o$  obtidos por processo de embebição sempre que disponíveis.

### 5.3 A Equação de Estado de Peng e Robinson

Uma equação de estado pode ser definida, conforme Firoozabadi [29], como uma equação algébrica que permite a descrição das relações entre pressão, volume e temperatura tanto para uma substância pura quanto para misturas, nos

estados sólido, líquido ou gasoso. Sua aplicação permite a determinação direta de propriedades volumétricas (densidades), térmicas e das funções de fugacidade que, por sua vez, possibilitam os cálculos de equilíbrio de fases. Dentre as diferentes famílias de equações de estado propostas na literatura [24], as do tipo cúbicas ganharam maior aceitação na área de Simulação de Reservatórios [29] por sua maior precisão nos cálculos de equilíbrio de fases para as complexas misturas normalmente encontradas nas jazidas de petróleo. Entre as cúbicas as mais comumente usadas são as de Redlich e Kwong [10] e sua variante de Soave [30], a de Peng e Robinson [7] e, mais recentemente, a de Schmidt e Wenzel [31]. Uma comparação das peculiaridades de cada uma delas foi desenvolvida por Firoozabadi [29].

No presente trabalho adotou-se a equação de estado de Peng e Robinson, tanto por ser ela frequentemente usada em simuladores composicionais como também por apresentar melhor desempenho em termos de capacidade preditiva de dados volumétricos [29] quando comparada às variantes da equação de Redlich e Kwong. A expressão matemática da equação de Peng e Robinson é mostrada a seguir:

$$p = \frac{R T}{v - b} - \frac{a(T)}{v(v+b) + b(v-b)} \quad (5.2)$$

Onde  $p$  é a pressão,  $R$  é a constante universal dos gases,  $v$  é o volume molar e  $T$  é a temperatura absoluta. Os outros dois parâmetros são obtidos a partir de duas propriedades críticas

do fluido, geralmente a temperatura e a pressão, sendo que o parâmetro  $a$  depende ainda da temperatura do sistema. Calculam-se  $a$  e  $b$  por:

$$a(T) = \Omega_a \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \alpha(T_r, w) \quad (5.3)$$

$$b = \Omega_b \frac{R T_c}{P_c} \quad (5.4)$$

Onde em (5.3) a variável  $\alpha(T_r, w)$  é obtida por:

$$\alpha(T_r, w)^{0,5} = 1 + m \left( 1 - T_r^{0,5} \right) \quad (5.5)$$

$$m = 0,37464 + 1,54226 w + 0,26992 w^2 \quad (5.6)$$

Em (5.5)  $T_r = T/T_c$  é a temperatura reduzida e em (5.6)  $w$  é o chamado fator acêntrico, constante característica do fluido ou de cada um de seus componentes. Para misturas as seguintes regras são ainda usadas no cálculo dos parâmetros  $a$  e  $b$ :

$$a = \sum_{m=1}^{n_c} \sum_{j=1}^{n_c} a_{m,j} x_m x_j \quad \text{onde} \quad a_{m,j} = \left( 1 - \delta_{m,j} \right) a_m^{0,5} a_j^{0,5} \quad (5.7)$$

$$b = \sum_{m=1}^{n_c} b_m x_m \quad (5.8)$$

Originalmente  $\Omega_a = 0,42747$  e  $\Omega_b = 0,08664$  porém, por vezes, tais

valores são alterados quando esses parâmetros são usados como variáveis em processos de regressão não linear visando ajustar a equação de estado a dados PVT obtidos em laboratório [18].

Os termos  $\delta_{m,j} = \delta_{j,m}$  que aparecem na expressão (5.7) são os chamados coeficientes de interação binária, utilizados em misturas, de forma a melhorar o desempenho da equação de estado [32]. Esses coeficientes são particularmente importantes quando  $m$  corresponde a um componente leve e  $j$  a componente de maior peso molecular. Como os  $\Omega_a$  e  $\Omega_b$ , os  $\delta_{m,j}$  são também considerados variáveis primárias [18] quando do emprego de regressão não linear para ajuste de equação de estado.

Uma forma alternativa da equação de Peng e Robinson é derivada a partir da definição do fator de compressibilidade  $Z$ :

$$Z = \frac{P v}{R T} \quad (5.9)$$

Substituindo (5.9) na expressão original (5.2) e após conveniente rearranjo dos termos obtém-se uma equação cúbica em  $Z$ , equivalente à equação de Peng e Robinson dada em (5.2):

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad (5.10)$$

Onde:

$$A = \frac{a p}{R^2 T^2} \quad (5.11)$$

$$B = \frac{b p}{R T} \quad (5.12)$$

#### 5.4 Cálculo das Densidades

A determinação das densidades molares ( $\rho$ ) das fases hidrocarbonetos, através de equação de estado, baseia-se na definição do fator de compressibilidade  $Z$  mostrada em (5.9). Assim tem-se que:

$$\rho = \frac{1}{V} = \frac{P}{Z R T} \quad (5.13)$$

Onde  $Z$  é a raiz da equação cúbica (5.10). Para um fluido na região de duas fases a solução de (5.10) gerará mais de uma raiz, sendo que a maior corresponderá à fase vapor ( $Z_v$ ) e a menor (positiva) será associada à fase líquida ( $Z_l$ ).

Apesar do melhor desempenho da equação de Peng e Robinson na previsão de dados volumétricos, quando comparada às variantes da de Redlich e Kwong, este tipo de cálculo continua sendo, segundo Firoozabadi [29], um ponto fraco das equações de estado cúbicas. Tendo em vista esse aspecto, Peneloux et. alii. [33] e mais tarde Jhavery et. al. [34], introduziram um parâmetro adicional na equação de Peng e Robinson, de tal forma a promover uma "translação" no volume molar calculado procurando aproximá-lo para um valor mais próximo do real. Ou seja:

$$\tilde{v} = v - c \quad \text{onde} \quad c = \sum_{m=1}^{n_c} c_m x_m \quad (5.14)$$

Onde  $\tilde{v}$  e  $v$  são os volumes molares corrigido e original e  $c$  é a translação. As constantes  $c_m$  são próprias de cada componente da

mistura. Jhavery et. al. [34] indicam métodos para a determinação dos  $c_m$ , alguns deles dependentes de informações de laboratório, o que torna as vezes difícil sua aplicação. Na falta dos  $c_m$  a equação (5.14) retorna à forma original proposta por Peng e Robinson [7]. É importante realçar que a correção mostrada não altera as equações de fugacidade, usadas nos cálculos de equilíbrio líquido vapor, como demonstrado nas referências [33] e [34].

Na implementação do modelo composicional o cálculo das densidades de ambas as fases hidrocarbonetos foi desenvolvido com a equação de Peng e Robinson, apesar dos valores de densidade da fase líquida serem considerados de menor qualidade que os da fase vapor [31]. Não obstante existir uma correlação para o cálculo de densidade de óleo [35], ainda assim optou-se pelo uso da própria equação de estado por ser essa a solução empregada na maioria dos simuladores citados na literatura e pelo fato da correlação mencionada ser bastante antiga (1960). Incorporou-se ainda a possibilidade do uso do terceiro parâmetro comentada acima, que, todavia, não pode ser testada no presente trabalho por falta dos dados necessários à caracterização dos  $c_m$ . As massas específicas da fase água, por sua vez, foram fornecidos ao modelo como função da pressão.

Conhecida a densidade molar, de qualquer das fases, seu peso específico é facilmente calculado por:

$$\gamma = \rho g \text{ PM} \quad \text{onde} \quad \text{PM} = \sum_{m=1}^{n_c} x_m \text{ PM}_m \quad (5.15)$$

Onde  $\text{PM}_m$  é o peso molecular do componente m. No Apêndice C são

apresentadas as derivadas da densidade molar e do fator de compressibilidade Z em relação à pressão e à composição.

### 5.5 Cálculo das Fugacidades

O conceito de fugacidade foi introduzido no item 3.2 quando da apresentação das condições de equilíbrio de fases. Na ocasião, resultou como a principal dessas condições a imposição de igualdade entre as fugacidades de cada componente do sistema nas fases líquida e vapor, ou seja:

$$f_{ml} = f_{mv} \quad (5.16)$$

A relação acima é usada em todas as etapas da simulação composicional, ora fazendo parte do próprio sistema de equações do modelo matemático, ora sendo usada quando dos cálculos auxiliares de pressão de saturação e de liberação "flash". Não é difícil concluir-se, portanto, que o conceito em questão desempenha extraordinária importância na modelagem composicional.

Como já mostrado, a expressão que define a fugacidade em termos de pressão, volume, temperatura e composição é dada por:

$$\ln \left( \frac{f_m}{p x_m} \right) = \frac{1}{R T} \int_{\infty}^V \left[ \frac{RT}{V} - \left( \frac{\partial P}{\partial n_m} \right)_{T, V, n_{j, j \neq m}} \right] dV - \ln Z$$

Onde  $m, j = 1, 2, \dots, n_c$ . Usando a equação de Peng e Robinson,

que relaciona as variáveis PVT, torna-se possível a integração da expressão acima obtendo-se:

$$\ln \left( \frac{f_{m1}}{p x_m} \right) = \frac{b_m}{b} (Z - 1) - \ln (Z - B) +$$

$$- \frac{A}{2 \sqrt{2} B} \left( \frac{2 \sum_{n=1}^{n_c} x_n a_{n,m}}{a} - \frac{b_m}{b} \right) \ln \left( \frac{Z + 2,414 B}{Z - 0,414 B} \right)$$

(5.17)

Os parâmetros  $a$ ,  $b_m$ ,  $b$ ,  $A$ ,  $B$  e  $Z$  que aparecem em (5.17) foram definidos no item 5.4 anterior. A expressão (5.17) está escrita em termos das frações molares do óleo  $o$  que permite, portanto, o cálculo da fugacidade do componente  $m$  na fase líquida ( $f_{m1}$ ). Para a fugacidade da fase vapor ( $f_{mv}$ ) a expressão é a mesma, naturalmente que substituindo-se as frações molares  $x_m$  por  $y_m$ .

As derivadas das equações de fugacidade em relação à pressão e à composição, cujas deduções não são triviais, são apresentadas no Apêndice D. Essas derivadas comporão os elementos das  $n_c$  linhas inferiores de cada uma das submatrizes diagonais principais da matriz jacobiana.

## 5.6 Cálculo das Viscosidades

As viscosidades da fase água foram fornecidas ao modelo em tabela, como função da pressão; já as das fases hidrocarbonetos foram calculadas pela correlação de Lohrenz et.

alii. [36]. Duas razões fundamentaram a escolha desse método: o primeiro diz respeito a sua aceitação por outros autores de formulações composicionais, entre eles Coats [6] e Nghiem et. alii. [11]. O segundo, e mais importante, está ligado a sua forma de apresentação, qual seja, expressões matemáticas facilmente deriváveis e de simples implementação num algoritmo computacional. O mesmo não se pode dizer da correlação de Carr et. alii. [37] - aplicável apenas a fase vapor - cujos dados são dispostos em gráficos. Uma terceira correlação, a de Lee et. al. [38] - constituída de um conjunto de equações, porém concebida apenas para gases - chegou a ser testada. Seus resultados, porém, foram semelhantes aos obtidos pelo método de Lohrenz et. alii. Optou-se assim pelo último que é aplicável para líquidos e gases.

O procedimento de Lohrenz et. alii. descreve a viscosidade como dependente da pressão, temperatura e da composição do fluido. Conhecidas essas variáveis, o método consiste das seguintes etapas:

a) Determinação das viscosidades ( $\mu_m^*$ ) dos componentes puros a baixa pressão e na temperatura de interesse: para cada fração calculam-se:

$$\mu_m^* \zeta_m = 34 \times 10^{-5} T_{rm}^{0,94} \quad \text{para } T_{rm} < 1,5 \quad (5.18)$$

$$\mu_m^* \zeta_m = 17,78 \times 10^{-5} \left( 4,58 T_{rm} - 1,67 \right)^{5/8} \quad \text{para } T_{rm} > 1,5 \quad (5.19)$$

Onde  $T_{rm} = T/T_{cm}$  é a temperatura reduzida do componente m. O

parâmetro auxiliar  $\zeta_m$  em (5.18) e (5.19) é definido por:

$$\zeta_m = \frac{T_{cm}^{1/6}}{PM_m^{1/2} P_{cm}^{2/3}} \quad (5.20)$$

Em (5.20) a pressão crítica  $P_{cm}$  deve ser dada em atmosferas e a temperatura crítica  $T_{cm}$  em graus Kelvin (a mesma unidade da temperatura  $T$  do sistema).

b) Cálculo da viscosidade da mistura ( $\mu^*$ ) a baixa pressão e na temperatura de interesse: usando os valores obtidos na etapa anterior determina-se:

$$\mu^* = \frac{\sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m \mu_m^* \sqrt{PM_m} \right)}{\sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m \sqrt{PM_m} \right)} \quad (5.21)$$

Onde aqui os  $x_m$  são as frações molares dos componentes do fluido (seja ele líquido ou gasoso).

Na sua versão original, a correlação de Lohrenz et. alii. [36] propõe, ao final da etapa b, procedimentos diferentes para o cálculo de viscosidades de gases e de líquidos. Para misturas gasosas os autores sugerem a determinação do valor da viscosidade a partir de gráficos

propostos por Baron et. alii. [39]. Para líquidos Lohrenz et. alii. desenvolvem um método próprio, baseado na densidade do fluido, que será detalhado a seguir. Segundo argumentação de Lohrenz et. alii., a razão de ser desses procedimentos diversos se deve apenas à dificuldade de obtenção de valores precisos de densidades da fase gás, existente na época da publicação da sua correlação (1964). Removido esse impedimento a metodologia para líquidos e gases poderia ser a mesma [36]. Assim sendo, no presente trabalho adotaram-se procedimentos idênticos para o cálculo das viscosidades das fases líquida e vapor, uma vez que os dados de densidade do gás, obtidos via equação de estado de Peng e Robinson, podem ser considerados de boa qualidade. Essa opção também foi seguida por Coats [6] e Nghiem et. alii. [11] em seus modelos composicionais. Isto posto, o método de Lohrenz et. alii. prossegue na sua etapa c:

c) Cálculo da densidade da mistura ( $\rho$ ) na pressão e temperatura de interesse: como comentado anteriormente, esse dado é provido pela equação de estado de Peng e Robinson. Observação importante é a de que  $\rho$  deve ser usado com unidade do sistema inglês, qual seja libra mol por pé cúbico ( $\text{lbmol}/\text{pé}^3$ ).

d) Cálculo da densidade reduzida da mistura, definida por:

$$\rho_r = \frac{\rho}{\rho'_c} = \rho V'_c \quad (5.22)$$

Onde  $\rho'_c$ , densidade pseudocrítica da mistura, e  $V'_c$  são definidos

COMO:

$$\rho'_c = \frac{1}{V'_c} = \frac{1}{\sum_{m=1}^{n_c} (x_m V_{cm})} \quad (5.23)$$

Onde  $V_{cm}$  é o volume crítico do componente  $m$  (em pé<sup>3</sup>/lbmol).

e) Cálculo da viscosidade da mistura na pressão e temperatura de interesse: nessa etapa, a última, determina-se a viscosidade  $\mu$ , em centipoise, corrigindo-se o valor de  $\mu^*$  obtido antes por:

$$\mu = \mu^* + \frac{\left( a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4 \right)^4 - a_5}{\zeta} \quad (5.24)$$

Na expressão (5.24) os parâmetros  $a_j$  ( $j = 0, 1, \dots, 5$ ) são constantes iguais a:

$$\begin{aligned} a_0 &= 0,1023000 & ; & & a_1 &= 0,0233640 & ; & & a_2 &= 0,0585330 \\ a_3 &= -0,0407580 & ; & & a_4 &= 0,0093324 & ; & & a_5 &= 0,0001000 \end{aligned}$$

O parâmetro auxiliar  $\zeta$ , denominador em (5.24), é definido como:

$$\zeta = \frac{\left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m T_{cm} \right)^{1/6}}{\left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m P M_m \right)^{1/2} \left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m P_{cm} \right)^{2/3}} \quad (5.25)$$

As expressões das derivadas da viscosidade em relação à pressão e composição são desenvolvidas no Apêndice E.

## 5.7 Cálculo de Pressões de Saturação

A pressão de saturação é definida como sendo a pressão, a uma dada temperatura, onde um fluido inicialmente monofásico passa a coexistir com uma segunda fase. Estendendo essa idéia definem-se ainda a pressão de bolha, aquela onde um líquido passa a coexistir com uma quantidade infinitesimal da fase vapor, e pressão de orvalho, aquela em que um gás passa a coexistir com uma quantidade infinitesimal da fase líquida.

O conceito de pressão de saturação é importante na simulação composicional pois através dele pode-se identificar o número de fases presentes numa célula e, conseqüentemente, o conjunto de equações aplicáveis. No item 4.4 foi detalhado o tratamento dispensado ao modelo matemático de forma a contemplar as situações de células com fase única e células na região de duas fases.

O cálculo da pressão de saturação, baseando-se na sua definição, consiste na determinação da pressão em que as fases líquida e vapor estarão em equilíbrio, sob temperatura conhecida, quando sujeitas às seguintes condições:

-para a pressão de bolha :  $L = 1$  logo  $z_m \equiv x_m$ ;

-para a pressão de orvalho:  $V = 1$  logo  $z_m \equiv y_m$ ;

Onde  $m = 1, 2, \dots, n_c$ ,  $L$  e  $V$  são as frações molares nas fases líquida e vapor ( $L + V = 1$ ) e  $z_m$  é a fração molar global do componente  $m$ , definida por:

$$z_m = Lx_m + Vy_m \quad \text{onde} \quad \sum_{m=1}^{n_c} z_m = 1 \quad (5.26)$$

O problema posto acima é modelado através das relações de equilíbrio:

$$f_{ml} - f_{mv} = 0 \quad (5.27)$$

E das equações restritivas:

$$\sum_{m=1}^{n_c} x_m = 1 \quad \text{ou} \quad \sum_{m=1}^{n_c} y_m = 1 \quad (5.28)$$

Onde as  $n_c + 1$  incógnitas são a pressão de saturação e as composições da fase, dita "ausente", em equilíbrio com a predominante. Ou seja, para um líquido calculam-se a pressão de bolha e a composição da fase vapor ( $y_{m_{sat}}$ ). Para um gás determinam-se a pressão de orvalho e a composição da fase líquida ( $x_{m_{sat}}$ ).

A solução do sistema composto por (5.27) e por uma das equações em (5.28), aparentemente simples, é na realidade bastante complexa devido a forte não linearidade em (5.27) e a dificuldade de representação do comportamento de fases, através de equações de estado, em região próxima ao ponto crítico. Dois métodos de solução, ambos iterativos, são normamente empregados: um deles é conhecido por substituição sucessiva (SS) e o outro é baseado no procedimento de Newton-Raphson. O método SS, rotineiramente citado nos compêndios sobre Termodinâmica Clássica [24], tem as vantagens de ser extremamente simples e possuir menor sensibilidade à estimativa inicial do vetor solução; apresenta, porém, a desvantagem de uma baixa velocidade de convergência. O segundo

método, introduzido num excelente artigo por Fussel e Yanosik [40], possui rápida convergência, entretanto, é mais sensível à qualidade da estimativa inicial. Este problema se agrava quando a pressão de saturação do fluido se encontra próxima da região crítica. Nesse caso é muito comum obter-se uma solução trivial para o sistema em (5.27), ou seja:

$$x_m = y_m \quad \text{para } m = 1, 2, \dots, n_c$$

que apesar de ser raiz do sistema, não caracteriza uma solução física para o problema.

Considerando as características dos dois métodos, Nghiem et. alii. [41] desenvolveram um processo híbrido que, iniciando as iterações no método SS e concluindo o cálculo, se necessário, por uma variante do método de Newton-Raphson, combinou as vantagens inerentes a cada um dos procedimentos originais.

No presente trabalho adotou-se a idéia de Nghiem et. alii. adaptando seu algoritmo de forma a executar um número fixo de iterações do tipo SS seguido do número necessário de iterações com o método de Newton-Raphson. Essa solução permitiu contornar muitas situações onde o procedimento Newton-Raphson de forma isolada convergiria para a resposta trivial. Ambos os métodos são detalhados a seguir, iniciando-se pelas etapas do cálculo SS:

a) Entrada dos dados de temperatura, tipo de fluido (líquido ou gás) e sua composição, e estimativas iniciais da pressão de saturação e da composição da fase ausente;

b) Cálculo das constantes de equilíbrio  $K_m$  ( $m = 1, 2, \dots, n_c$ ) através da expressão [24]:

$$K_m = \left( \frac{f_{ml}}{p x_m} \right) \left( \frac{p y_m}{f_{mv}} \right) = \frac{f_{ml} y_m}{f_{mv} x_m} \quad (5.29)$$

Onde  $y_m$  e  $x_m$  são as composições das fases; na primeira iteração usam-se os dados fornecidos na etapa a e nas demais os valores originais da fase predominante e os corrigidos, como descrito a seguir, da fase ausente.

c) Fazendo uso da definição de constante de equilíbrio [24]:

$$K_m = \frac{Y_m}{x_m} \quad (5.30)$$

calculam-se então os valores corrigidos da composição da fase ausente através dos  $K_m$  recém determinados na etapa b, ou seja:

-no cálculo da pressão de bolha, a fase líquida  $x_m$  não muda e a vapor é a ausente, logo:

$$Y_m^{U+1} = K_m x_m \quad (5.31)$$

-no cálculo da pressão de orvalho, a fase vapor  $y_m$  não se altera e a líquida é a ausente logo:

$$x_m^{U+1} = y_m / K_m \quad (5.32)$$

d) Verifica-se a convergência do processo; para a pressão de bolha:

$$\left| 1 - \sum_{m=1}^{n_c} y_m^{U+1} \right| < \text{tolerância} \quad \text{e} \quad \left| y_m^{U+1} - y_m^U \right| < \text{tolerância} \quad (5.33)$$

e para a pressão de orvalho:

$$\left| 1 - \sum_{m=1}^{n_c} x_m^{U+1} \right| < \text{tolerância} \quad \text{e} \quad \left| x_m^{U+1} - x_m^U \right| < \text{tolerância} \quad (5.34)$$

Atendidas as exigências em (5.33) ou (5.34) as iterações se encerram e  $x_{m_{sat}}^{U+1} = x_m^{U+1}$  ou  $y_{m_{sat}}^{U+1} = y_m^{U+1}$ , conforme o caso. Caso contrário segue-se para a etapa e.

e) Ajuste da pressão: um critério empírico que foi adotado consiste em:

-para  $\sum_{m=1}^{n_c} x_m^{U+1}$  ou  $\sum_{m=1}^{n_c} y_m^{U+1} > 1$ , conforme o caso, a nova pressão será  $P^{U+1} = CP^U$  onde  $C > 1$  (entre 1,05 e 1,50);

-para  $\sum_{m=1}^{n_c} x_m^{U+1}$  ou  $\sum_{m=1}^{n_c} y_m^{U+1} < 1$ , conforme o caso, a nova pressão será  $P^{U+1} = CP^U$  onde  $C < 1$  (entre 0.80 e 0.98).

Retorna-se então para a etapa b ou segue-se para o algoritmo de Newton-Raphson caso tenham se esgotado o número máximo de iterações SS estipuladas. A aplicação deste segundo procedimento, cujo teoria foi descrita no item 4.2, baseou-se nas equações (5.27); eliminando-se uma variável composicional

através das restrições em (5.28). Assim no cálculo de pressão de bolha fez-se:

$$y_1 = 1 - \sum_{m=2}^{n_c} y_m$$

e para a pressão de orvalho:

$$x_{n_c} = 1 - \sum_{m=1}^{n_c-1} x_m$$

As funções de resíduo  $F_m$  e os elementos da matriz jacobiana  $J_{m,j}$  serão:

-Para a pressão de bolha:

$$F_m = f_{ml} - f_{mv}$$

$$J_{m,1} = \frac{\partial f_{ml}}{\partial p} - \frac{\partial f_{mv}}{\partial p} \quad \text{e} \quad J_{m,j} = - \frac{\partial f_{mv}}{\partial y_j}$$

Onde  $m = 1, 2, \dots, n_c$  e  $j = 2, 3, \dots, n_c$ .

-Para a pressão de orvalho:

$$F_m = f_{ml} - f_{mv}$$

$$J_{m,1} = \frac{\partial f_{ml}}{\partial p} - \frac{\partial f_{mv}}{\partial p} \quad \text{e} \quad J_{m,j+1} = \frac{\partial f_{ml}}{\partial x_j}$$

Onde  $m = 1, 2, \dots, n_c$  e  $j = 1, 2, \dots, n_c-1$ .

Na análise da convergência do processo, além das verificações usuais nas correções da pressão  $\delta p$  e das frações molares  $\delta x$  ou  $\delta y$ , um critério adicional é usado, qual seja:

$$\sum_{m=1}^{n_c} \left( \frac{f_{ml}}{f_{mv}} - 1 \right)^2 < \text{tolerância}$$

### 5.8 Cálculo de Liberação Instantânea "Flash"

Uma liberação "flash" pode ser definida como sendo um processo de separação de um fluido, decorrente de uma variação na pressão ou na temperatura do sistema, mantendo-se sua massa constante. O cálculo "flash", por sua vez, é o procedimento matemático que, a partir da composição inicial do fluido e das novas condições de pressão e temperatura a que ele passa a estar sujeito, permite a determinação das composições das fases em equilíbrio bem como as frações molares nas fases líquida (L) e vapor (V) resultantes da liberação.

O cálculo "flash" implementado no presente trabalho baseou-se na combinação dos métodos de substituição sucessiva SS [24] com uma variante do de Newton-Raphson, proposta por Fussel e Yanosik [40]. Ou seja, o processo se inicia com um número fixo de iterações do tipo SS passando a seguir, caso não se alcance até então convergência, para o procedimento de Newton-Raphson. Como visto no item 5.7, essa solução objetiva conjugar a simplicidade do método SS, apesar de sua lenta convergência, com a robustez do procedimento de Newton-Raphson, ainda que dispendiosa em termos de esforço computacional.

O modelo matemático para uma liberação "flash" é composto pelas seguintes equações, para  $m = 1, 2, \dots, n_c$ :

$$f_{ml} - f_{mv} = 0 \quad (5.35)$$

$$z_m = Lx_m + Vy_m \quad (5.36)$$

$$L + V = 1 \quad (5.37)$$

Sendo  $z_m$  a fração molar global e L e V as frações molares nas fases líquida e vapor. Complementa o modelo uma das três restrições a seguir:

$$\sum_{m=1}^{n_c} z_m = 1 \quad (5.38a)$$

$$\sum_{m=1}^{n_c} x_m = 1 \quad (5.38b)$$

$$\sum_{m=1}^{n_c} y_m = 1 \quad (5.38c)$$

Usando o conceito de constante de equilíbrio  $K_m = y_m/x_m$  as equações (5.36) e (5.37) são combinadas de forma a gerar:

$$x_m = \frac{z_m}{K_m + L(1 - K_m)} \quad (5.39)$$

$$y_m = \frac{K_m z_m}{K_m + L(1 - K_m)} \quad (5.40)$$

Fazendo agora (5.38b)-(5.38c) e substituindo a seguir (5.39) e (5.40) na diferença, obtém-se:

$$\sum_{m=1}^{n_c} x_m - \sum_{m=1}^{n_c} y_m = \sum_{m=1}^{n_c} \frac{z_m}{K_m + L(1 - K_m)} - \sum_{m=1}^{n_c} \frac{K_m z_m}{K_m + L(1 - K_m)}$$

A expressão acima será definida como a função  $\Phi(L)$  que, teoricamente, deve ser igual a zero:

$$\Phi(L) = \sum_{m=1}^{n_c} \frac{z_m (1 - K_m)}{K_m + L(1 - K_m)} = 0 \quad (5.41)$$

As expressões (5.39), (5.40) e (5.41) deduzidas acima são importantes no método SS, cujas etapas são descritas a seguir:

a) Entrada dos dados de pressão e de temperatura da liberação e da composição global  $z_m$  da mistura. Estimativas das frações molares  $L$ ,  $V$ ,  $x_m$  e  $y_m$  também devem ser fornecidas, mesmo que de baixa qualidade;

b) Cálculo das constantes de equilíbrio  $K_m$  ( $m = 1, 2, \dots, n_c$ ) através da expressão [24]:

$$K_m^{U+1} = \left( \frac{f_{ml}}{p x_m} \right) \left( \frac{p y_m}{f_{mv}} \right) = \frac{f_{ml} y_m}{f_{mv} x_m} \quad (5.42)$$

c) Calculam-se a seguir, usando os  $K_m$  da etapa b, a função  $\Phi(L)$ , expressa em (5.41), e a derivada  $\Phi'(L)$  de  $\Phi(L)$  em relação a  $L$ . Com estes dados determina-se um novo valor para  $L$ :

$$L^{U+1} = L^U + \frac{\Phi(L)}{\Phi'(L)} \quad (5.43)$$

Ou seja,  $L^{U+1}$  é obtido através da técnica de Newton-Raphson em que se faz uma única iteração. Caso  $L^{U+1} < 0$  este assume o valor de  $L^U/2$ , se  $L^{U+1} > 1$  admite-se que  $L^{U+1} = (L^U + 1)/2$ ;

d) Calculam-se então os novos valores das composições das fases líquida  $x_m^{U+1}$  e vapor  $y_m^{U+1}$  através das equações (5.39) e (5.40), usando os  $K_m$  recém determinados na etapa b e o  $L^{U+1}$  obtido no passo c;

e) Verifica-se a convergência do processo através de:

$$| \Phi(L) | < \text{tolerância} \quad (5.44)$$

$$| x_m^{U+1} - x_m^U | < \text{tolerância} \quad (5.45)$$

$$| y_m^{U+1} - y_m^U | < \text{tolerância} \quad (5.46)$$

Atendidas as condições em (5.44), (5.45) e (5.46) as iterações se encerram. Caso contrário retorna-se a etapa b ou passa-se para o algoritmo de Newton-Raphson, caso tenham se esgotado o número máximo de iterações SS prestabelecidas.

A implementação do procedimento Newton-Raphson seguiu estritamente o preconizado por Fussel e Yanosik [40]. Esses autores conceberam uma variante do método original, denominada de "minimum variable Newton-Raphson - MVNR". Em essência o procedimento consiste na redução do número de variáveis e de equações, ditas primárias, que são efetivamente desenvolvidas segundo a técnica de Newton-Raphson. As demais incógnitas do problema, as secundárias, são determinadas em função das anteriores através de equações secundárias. Dois grupos de variáveis primárias são definidos:

-grupo LX, indicada para fluido predominantemente vapor, constituído por L e  $x_2$  a  $x_{n_c}$ ; as demais variáveis (V,  $x_1$  e  $y_1$  a  $y_{n_c}$ ) são secundárias;

-grupo VY, indicada para fluido predominantemente líquido, composto por V e  $y_2$  a  $y_{n_c}$ ; as demais variáveis (L,  $y_1$  e  $x_1$  a  $x_{n_c}$ ) são secundárias;

As equações primárias, para ambas as classes acima, são as de

equilíbrio líquido vapor mostradas em (5.35); as restantes, (5.36), (5.37) e (5.38b) ou (5.38c), são as secundárias. Ao fim de cada iteração newtoniana as variáveis secundárias são atualizadas em função dos valores recém determinados para as primárias, usando aquelas equações tratadas de forma secundária. As funções de resíduo e os elementos do jacobiano para os dois grupos definidos acima são deduzidos a seguir:

-Para o grupo LX: as funções de resíduo são as próprias relações de equilíbrio, ou seja  $F_m = f_{ml} - f_{mv}$ . Os elementos da matriz são obtidos por:

$$J_{m,1} = \frac{\partial}{\partial L} (f_{ml} - f_{mv}) = \sum_{j=2}^{n_c} \frac{\partial}{\partial y_j} (f_{ml} - f_{mv}) \frac{\partial y_j}{\partial L} = - \sum_{j=2}^{n_c} \frac{\partial f_{mv}}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial L} \quad (5.47)$$

Em (5.47) o termo  $\frac{\partial y_j}{\partial L}$  é obtido através das relações (5.36) e (5.37):

$$y_j = \frac{z_j - Lx_j}{1 - L} \quad \text{logo} \quad \frac{\partial y_j}{\partial L} = \frac{y_j - x_j}{V} \quad (5.48)$$

Substituindo (5.48) em (5.47) obtém-se:

$$J_{m,1} = - \frac{1}{V} \sum_{j=2}^{n_c} \frac{\partial f_{mv}}{\partial y_j} (y_j - x_j) \quad (5.49)$$

Os demais elementos da matriz jacobiana são definidos por:

$$J_{m,j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (f_{ml} - f_{mv}) = \frac{\partial f_{ml}}{\partial x_j} - \frac{\partial f_{mv}}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial x_j} \quad (5.50)$$

Em (5.50) a derivada  $\frac{\partial y_j}{\partial x_j}$  é obtida com o auxílio de (5.36):

$$\frac{\partial y_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{z_j - Lx_j}{1 - L} \right) = - \frac{L}{V} \quad (5.51)$$

Substituindo (5.51) em (5.50) obtém-se finalmente:

$$J_{m,j} = \frac{\partial f_{ml}}{\partial x_j} + \frac{L}{V} \frac{\partial f_{mv}}{\partial y_j} \quad (5.52)$$

Onde  $m = 1, 2, \dots, n_c$  e  $j = 2, 3, \dots, n_c$ .

-Para o grupo VY: as funções de resíduo são as mesmas do grupo LX; os elementos da matriz são:

$$J_{m,1} = \frac{\partial}{\partial V} (f_{ml} - f_{mv}) = \sum_{j=2}^{n_c} \frac{\partial}{\partial x_j} (f_{ml} - f_{mv}) \frac{\partial x_j}{\partial V} = \sum_{j=2}^{n_c} \frac{\partial f_{ml}}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial V} \quad (5.53)$$

Onde em (5.53) a derivada  $\frac{\partial x_j}{\partial V}$  é obtida empregando as relações (5.36) e (5.37):

$$x_j = \frac{z_j - Vy_j}{1 - V} \quad \text{logo} \quad \frac{\partial x_j}{\partial V} = \frac{x_j - y_j}{L} \quad (5.54)$$

Substituindo (5.54) em (5.53) obtém-se:

$$J_{m,1} = \frac{1}{L} \sum_{j=2}^{n_c} \frac{\partial f_{ml}}{\partial x_j} (x_j - y_j) \quad (5.55)$$

Os demais elementos da matriz jacobiana ficam:

$$J_{m,j} = \frac{\partial}{\partial y_j} (f_{ml} - f_{mv}) = \frac{\partial f_{ml}}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial y_j} - \frac{\partial f_{mv}}{\partial y_j} \quad (5.56)$$

Em (5.56) a derivada  $\frac{\partial x_j}{\partial y_j} = -\frac{V}{L}$  é obtida diretamente de

(5.51). Usando esse resultado em (5.56) chega-se a:

$$J_{m,j} = -\frac{V}{L} \frac{\partial f_{ml}}{\partial x_j} - \frac{\partial f_{mv}}{\partial y_j} \quad (5.57)$$

Onde  $m = 1, 2, \dots, n_c$  e  $j = 2, 3, \dots, n_c$ .

Como feito no cálculo da pressão de saturação, a verificação da convergência das iterações contou com um critério adicional qual seja:

$$\sum_{m=1}^{n_c} \left( \frac{f_{ml}}{f_{mv}} - 1 \right)^2 < \text{tolerância}$$

Concluindo essa exposição é importante observar que é recomendável, por vezes, dividir um processo de liberação em estágios intermediários quando as condições inicial e final do sistema são muito distantes. É o caso, por exemplo, da simulação da liberação de um fluido da condição de reservatório diretamente para a de superfície. O cálculo pode apresentar problemas de convergência, em especial quando não se tem uma estimativa ao menos razoável do vetor solução.

## 6. ESTRUTURA LÓGICA DO MODELO COMPUTACIONAL

Este capítulo destina-se a comentar, ainda que sem muitos detalhes, o desenvolvimento da estrutura lógica do modelo computacional implementado. Essa análise tem sua importância pois, apesar de não trazer novidades quanto ao tratamento do problema em si, demonstra como o conjunto de conceitos e hipóteses - substrato do modelo matemático sob estudo - foi resumido e combinado de uma forma objetiva e lógica.

Na concepção do programa computacional, escrito em linguagem FORTRAN, priorizaram-se dois aspectos:

- Máxima modularidade visando facilitar sua implementação, teste, manutenção e eventual extensão;
- Otimização da demanda de memória, meta que foi balizada pelo não comprometimento da eficiência em termos de velocidade de processamento. Esses itens são particularmente importantes na simulação composicional dado o elevado número de equações envolvidas.

Isto posto, serão descritos a seguir os módulos funcionais incorporados no sistema computacional, cada qual composto por uma ou mais unidades de subprogramas. A ordem de exposição guarda absoluta correspondência com a efetivamente implantada. Assim tem-se:

- 1)Leitura dos dados de entrada: basicamente constituídos pelas características geométricas, petrofísicas e de temperatura do reservatório, dados sobre os poços de produção e/ou injeção, condições de separação de fluidos na superfície, parâmetros de

simulação, composição e propriedades dos componentes do fluido original e do eventualmente injetado no reservatório e dados PVT da fase água.

2) Tratamento das unidades dos dados de entrada, uniformizando-as para o Sistema Internacional.

3) Lançamento da malha de simulação, tarefa composta pelo cálculo das posições e cotas dos pontos de malha, volume dos blocos e fatores geométricos das interfaces das células. Leva-se em conta, obviamente, o tipo de discretização da malha a ser usado, se radial ou cartesiano.

4) Cálculo dos índices de produtividade dos poços, caso estes não sejam fornecidos diretamente como dados de entrada.

5) Cálculo dos parâmetros da equação de estado de Peng e Robinson dependentes apenas das propriedades críticas dos componentes. Ou seja, variáveis que não se alteram durante a simulação.

6) Inicialização das variáveis pressão, saturações de fluidos e composições para cada célula da malha. Segue-se procedimento discutido em detalhes no item 4.6. Nesta unidade cria-se ainda uma matriz auxiliar (matriz de ponteiros) que servirá para identificar o número de fases hidrocarbonetos presentes na célula. Para as de fase única registra-se também o tipo de fase existente, se líquida ou vapor. Essa matriz, de extrema importância no controle da montagem da matriz jacobiana, é atualizada a cada iteração como será descrito futuramente.

7) Determinação dos volumes porosos originais dos blocos usando

as porosidades corrigidas para o efeito da pressão de sobrecarga através da constante de compressibilidade da rocha.

8) Cálculo da reserva mássica (em Kg moles) de cada um dos componentes hidrocarbonetos no reservatório.

9) Determinação dos parâmetros composicionais iniciais das fases hidrocarbonetos líquida e vapor nas condições de separação dos fluidos em superfície, isto é, densidades molares  $\rho_{os}$  e  $\rho_{gs}$  e frações molares  $L_s$  e  $V_s$ . Este cálculo consiste de liberações "flash" sobre o fluido inicial, desde a condição de pressão e temperatura de reservatório até o estágio final de separação. O procedimento é executado em etapas uma vez que não se dispõem ainda de boas estimativas desses parâmetros. Ao final os resultados são armazenados pois servirão como estimativa inicial para o próximo cálculo iterativo dessas variáveis.

10) Montagem das matrizes auxiliares necessárias ao uso da rotina NSPIV [26] de resolução de sistema esparso de equações.

11) Impressão de controle, em arquivo auxiliar, dos dados de entrada e das variáveis iniciais das células.

12) Inicialização de variáveis auxiliares de controle da execução da simulação como, por exemplo, contadores de iterações e de passos de tempo, de acumulação de tempo e de controle de impressão de resultados.

Ao fim da etapa 12 concluem-se os procedimentos preliminares da simulação. As próximas etapas, que se repetem a cada passo de tempo e dentro deles a cada iteração, constituem o processo de simulação propriamente dito.

13) Ponto de retorno ao fim de um passo de tempo bem sucedido; incrementa-se o contador de passos de tempo e reinicia-se com zero o contador de iterações.

14) Ao início de cada novo passo de tempo as variáveis de cada célula da malha assumem os valores daquelas recém determinadas no passo de tempo anterior (ou dos valores iniciais no caso do primeiro passo). Ou seja, para todo par  $i, k$ :

$$\bar{X}_{i,k}^{n+1,1} \equiv \bar{X}_{i,k}^n$$

Onde  $\bar{X}_{i,k} = \left( p_o, S_g, S_w, x_1, x_2, \dots, x_{n_c}, y_1, y_2, y_3, \dots, y_{n_c} \right)^T$ .

Os sobrescritos  $n+1,1$  e  $n$  indicam, respectivamente, a primeira iteração do passo de tempo  $n+1$  e iteração final do passo de tempo  $n$ . Atualizam-se ainda os volumes porosos dos blocos.

15) Controle do número de fases em cada célula e atualização da matriz de ponteiros através de:

a) determinação da pressão de saturação nas células de fase única usando a técnica descrita no item 5.7. O objetivo é o de verificar se esta célula se manteve nessa condição, fase única, ou se as eventuais alterações ocorridas na composição e/ou na pressão do bloco levaram ao surgimento de uma segunda fase. Duas situações são possíveis [6], [9], [11]:

-a pressão do bloco é maior que a pressão de saturação calculada: nesse caso a célula permanece com fase única. A matriz de ponteiros não se altera e os resultados de pressão de saturação e de composição da fase "ausente" são armazenados para uso como estimativa inicial num próximo cálculo de pressão de saturação;

-a pressão do bloco é menor que a pressão de saturação calculada: nesse caso a célula entra na região de duas fases. A matriz de ponteiros passa a refletir essa nova situação. Como recomendado por Jones et. al. [42] executa-se a seguir um cálculo "flash" de maneira a se determinar as composições das duas fases em equilíbrio; obtém-se ainda uma estimativa da saturação de gás através de:

$$S_g = \frac{V}{\rho_g} \left( \frac{1}{L/\rho_o + V/\rho_g} \right) (1 - S_w)$$

b) nas células com duas fases verifica-se, através da evolução das saturações de gás e de água, se ocorreu o desaparecimento de uma das fases. Assim [6]:

-se  $S_g \leq 0$  calcula-se a pressão de bolha do sistema que é então comparada com a pressão do bloco como descrito acima. Concluindo-se pelo desaparecimento da fase gás atualiza-se a matriz de ponteiros que passará a indicar a presença de fase única líquida. A composição da fase gás, agora ausente, e da pressão de bolha são armazenadas para uso como estimativa inicial no cálculo da mesma na próxima iteração. Se  $S_g$  for negativo ajusta-se seu valor para zero;

-se  $S_g + S_w \geq 1$  a fase líquida deve ter desaparecido. Verifica-se através do cálculo da pressão de orvalho do sistema e pela comparação desta com a pressão do bloco. Obtida resposta conclusiva a matriz de ponteiros passa a indicar a presença da fase única vapor; a composição da fase líquida, agora ausente, e da pressão de orvalho são retidas para uso futuro como estimativa inicial num próximo cálculo semelhante. Caso ocorra que  $S_g + S_w > 1$  ajusta-se para  $S_g = 1 - S_w$ .

16) Para cada célula da malha calculam-se a seguir as densidades molares das fases líquida e vapor ( $\rho_o$  e  $\rho_g$ ) e de suas derivadas em relação à pressão ( $\partial\rho_o/\partial p$  e  $\partial\rho_g/\partial p$ ) e em relação à composição ( $\partial\rho_o/\partial x_j$  para  $j = 1, 2, \dots, n_c - 1$  e  $\partial\rho_g/\partial y_j$  para  $j = 2, 3, \dots, n_c$ ). Usam-se como insumos os valores de pressão  $p_o$  e composições  $x_m$  e  $y_m$  ( $m = 1, 2, \dots, n_c$ ) da iteração em desenvolvimento. Caso esta seja a primeira iteração de um passo de tempo associa-se ainda:

$$\rho_f^n = \rho_f^{n+1,1} \quad \text{onde } f = o, g$$

Visando não duplicar esforço na resolução da equação de Peng e Robinson, ao final do cálculo das densidades e de suas derivadas verifica-se, através de teste com a matriz de ponteiros, se a célula em questão está na região de duas fases. Caso positivo aproveitam-se os dados recém obtidos dos fatores de compressibilidade  $Z_l$  e  $Z_v$ , bem como de suas derivadas, e determinam-se as fugacidades dos componentes em ambas as fases ( $f_{ml}$  e  $f_{mv}$ ) e suas derivadas. Esses valores são então dispostos nos elementos das submatrizes  $A_{ll}$  e  $A_{lv}$  e do vetor  $R_{i,k}$ , definidas no item 4.3. Estas submatrizes fazem parte da matriz diagonal principal correspondente à célula  $i,k$  da matriz jacobiana total. Nas células de fase única as submatrizes  $A_{ll}$  e  $A_{lv}$  são montadas como descrito no item 4.4 e o vetor  $R_{i,k}$  é anulado.

Resumindo, o módulo descrito acima além de prover os dados de densidade e de suas derivadas que serão necessários quando do cálculo das equações de fluxo e dos termos fonte, é ainda responsável pela montagem das partições da matriz jacobiana referentes às relações de equilíbrio líquido vapor.

17) Determinação, para cada célula da malha, das propriedades petrofísicas, permeabilidades relativas e pressões capilares e de suas derivadas em relação às saturações de água e de gás. Empregou-se a técnica de interpolação linear em tabelas.

18) Determinação das propriedades PVT da água - peso específico, inverso do fator volume de formação e viscosidade - para cada célula da malha. Novamente usou-se o método de interpolação linear.

19) Cálculo das viscosidades  $\mu_o$  e  $\mu_g$  e de suas derivadas em relação à pressão e à composição. Segue-se procedimento descrito no item 5.6.

20) Cálculo dos termos fonte  $q_o$  e  $q_g$  e de suas derivadas em relação à pressão, saturações de gás e de água e em relação às composições. Esses dados são então armazenados em matrizes auxiliares com indexação ligada às coordenadas das células definidas como contendo um poço. O método de cálculo, detalhado no item 4.5, é dependente do tipo de condição de contorno imposta. Para o caso de vazão especificada na superfície são realizados cálculos "flash" de forma a se obter os parâmetros composicionais do fluido produzido.

21) Montagem do sistema de equações. O procedimento, executado célula a célula, é composto pelas seguintes etapas:

- cálculo das diferenças de potencial e de suas derivadas;
- cálculo das transmissibilidades e de suas derivadas;
- determinação das frações molares nas fases líquida e vapor nas interfaces da célula (com um ponto a montante). Usam-se para tanto dados de  $x_m$  e  $y_m$  da iteração em desenvolvimento;

-cálculo das equações de fluxo e construção do vetor  $R_{u_{i,k}}$ . Os termos fonte são acrescentados às equações caso a célula possua poço;

-determinação das derivadas das equações de fluxo em relação às variáveis primárias, considerando-se também as dos termos fonte se for o caso. Os valores obtidos são dispostos nas submatrizes  $A_{lu_{i,k}}$ ,  $A_{ru_{i,k}}$ ,  $E_{lu_{i,k}}$ ,  $C_{lu_{i,k}}$ ,  $B_{lu_{i,k}}$  e  $D_{lu_{i,k}}$  definidas no item 4.3. Verifica-se, ao longo dos cálculos, se a célula em questão e as suas vizinhas possuem uma ou mais fases visto que o tratamento nas variáveis  $S_g$  e  $y_2$  ou  $x_{n_c-1}$  pode se alterar em função do número de fases presentes em cada célula. Os detalhes do método foram vistos no item 4.4.

-execução das operações matriciais deduzidas no item 4.3 obtendo-se ao final as partições referentes ao bloco  $i,k$  da matriz jacobiana e do vetor termo independente reduzidos. Nessa etapa usam-se também as submatrizes  $A_{ll_{i,k}}$  e  $A_{rl_{i,k}}$  e o vetor  $R_{l_{i,k}}$  construídos conforme mostrado na etapa 16 deste roteiro.

-armazenam-se finalmente as submatrizes necessárias à determinação das incógnitas composicionais da célula que, como visto no item 4.3, serão obtidas em função da solução gerada a partir da matriz jacobiana reduzida (etapa 22).

22) Solução do sistema de equações composto pela matriz jacobiana e vetor termo independente reduzidos, gerando-se as correções  $(\delta p_o, \delta S_g \text{ ou } \delta x_{n_c-1} \text{ ou } \delta y_2, \delta S_w)$  para cada célula da malha. Como citado, empregou-se nessa etapa a rotina otimizada NSPIV [26].

23) Atualização das variáveis primárias seguida da determinação dos valores das demais incógnitas através das equações

matriciais deduzidas no item 4.3. Ao mesmo tempo verifica-se a convergência da solução e comparam-se as magnitudes das correções  $\delta\bar{X}$  com valores limites, fornecidos como dados de entrada. Essa verificação objetiva impedir que as incógnitas assumam valores absurdos, fato que pode ocorrer caso a solução do problema fique instável. Detectado o problema o passo de tempo em andamento é interrompido e reiniciado com um incremento de tempo  $\Delta t$  reduzido.

24) Obtida convergência segue-se para a etapa 25; caso contrário incrementa-se o contador de iterações e retorna-se à etapa 15. Caso o número de iterações acumuladas no passo de tempo em andamento ultrapasse um valor limite, este é recusado e reiniciado com um incremento de tempo  $\Delta t$  reduzido.

25) Cálculo das produções mássicas acumuladas por componente a partir dos resultados de vazão e de  $\Delta t$  usados na simulação. Repete-se esse cálculo, desta vez por balanço de materiais.

26) Controle de impressão de resultados e, se for o caso, gravação dos mesmos em arquivos de saída. As vazões de superfície são reavaliadas como mencionado no item 4.5.

27) Controle do passo de tempo  $\Delta t$  para o próximo passo. Esta operação pode manter o  $\Delta t$  ou aumentá-lo conforme se tenha:

-o número de iterações acumuladas do passo recém concluído é menor que um valor limite prestabelecido;

-as máximas variações ocorridas nas variáveis ao longo do passo recém concluído se mostrem inferiores a limites prefixados.

28) Controle do período de simulação: esta pode se encerrar ou prosseguir em um novo passo de tempo retornando-se à etapa 13.

Finalizando este capítulo, merece ser observado que a etapa crítica do processo é a 15 - controle do número de fases por célula - uma vez que esta verificação é determinante quanto a montagem do sistema de equações.

## 7. VALIDAÇÃO DO MODELO

A validação do modelo desenvolvido baseou-se na teoria do escoamento bifásico em regime permanente, em particular no tratamento dado a esse problema por Chopra et. al. [43]. A mesma técnica foi posteriormente aplicada por Jones et. al. [42] na validação de um simulador composicional para o estudo da resposta de poços de gás e condensado durante testes de pressão. Antes da apresentação dos resultados propriamente ditos, a teoria citada acima será revista seguindo a metodologia concebida por seus autores.

### 7.2 Teoria do Escoamento Bifásico em Regime Permanente

As equações de balanço de massa para um sistema bifásico constituído de  $n_c$  componentes hidrocarbonetos, desconsiderando os efeitos capilares, gravitacionais e de dispersão, são escritas por:

$$\nabla \cdot \left( K \lambda_o x_m + K \lambda_g y_m \right) \nabla p - q_m^* = \frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( \rho_o S_o x_m + \rho_g S_g y_m \right) \right] \quad (7.1)$$

Onde  $m = 1, 2, \dots, n_c$ . A parcela fonte  $q_m^*$  na equação acima é dada em termos de vazão molar por unidade de volume de rocha.

Sabendo-se que  $\sum_{m=1}^{n_c} x_m = \sum_{m=1}^{n_c} y_m = 1$ , a soma das  $n_c$

expressões (7.1) fornece a equação de balanço global:

$$\nabla \cdot \left( K \lambda_o + K \lambda_g \right) \nabla p - q_h^* = \frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( \rho_o S_o + \rho_g S_g \right) \right] \quad (7.2)$$

No regime permanente não existe acumulação de massa ao longo do reservatório, logo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( \rho_o S_o x_m + \rho_g S_g y_m \right) \right] = 0 \quad (7.3)$$

Para  $m = 1, 2, \dots, n_c$ . Da mesma forma tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \phi \left( \rho_o S_o + \rho_g S_g \right) \right] = 0 \quad (7.4)$$

Não havendo produção de massa ao longo do reservatório a não ser no poço, representado pelo termo fonte em (7.1), essa equação, escrita para o regime permanente, numa região onde não exista poço, fica:

$$\nabla \cdot \left( K \lambda_o x_m + K \lambda_g y_m \right) \nabla p = 0 \quad (7.5)$$

A expressão (7.5) implica em que o argumento do divergente é um vetor constante, ou seja:

$$\left( K \lambda_o x_m + K \lambda_g y_m \right) \nabla p = \vec{u}_m \quad (7.6)$$

Onde  $\vec{u}_m$  é o vetor fluxo molar do componente  $m$  (constante). O mesmo raciocínio é aplicado à equação (7.2), isto é:

$$\nabla \cdot \left( K \lambda_o + K \lambda_g \right) \nabla p = 0 \quad (7.7)$$

Logo:

$$\left( K \lambda_o + K \lambda_g \right) \nabla p = \vec{u}_h \quad (7.8)$$

Onde  $\vec{u}_h$  é o vetor fluxo molar global de hidrocarbonetos, igualmente constante.

Os produtos escalares dos vetores em (7.6) e (7.7) por um vetor unitário  $\hat{e}$  geram:

$$\left[ \left( K \lambda_o x_m + K \lambda_g y_m \right) \nabla p \right] \cdot \hat{e} = \vec{u}_m \cdot \hat{e} \quad (7.9)$$

$$\left[ \left( K \lambda_o + K \lambda_g \right) \nabla p \right] \cdot \hat{e} = \vec{u}_h \cdot \hat{e} \quad (7.10)$$

Dividindo (7.9) por (7.10) obtém-se:

$$\frac{\vec{u}_m \cdot \hat{e}}{\vec{u}_h \cdot \hat{e}} = \frac{\lambda_o x_m + \lambda_g y_m}{\lambda_o + \lambda_g} = z_{mf} \quad (7.11)$$

Onde  $z_{mf}$  é fração molar global do componente  $m$  na mistura em fluxo no reservatório. Segundo Chopra et. al. [43] esta fração é aquela que seria obtida caso se analisa-se a corrente de fluido em movimento. Esse autor observa ainda que esta composição difere daquela que seria encontrada caso a análise fosse efetuada em uma amostra de testemunho preservado desse reservatório. As frações molares globais neste último caso, estático, são definidas por:

$$z_m = \frac{\rho_o S_o x_m + \rho_g S_g y_m}{\rho_o S_o + \rho_g S_g} \quad (7.12)$$

Considera-se agora o caso de um reservatório cujo limite externo apresente pressão acima da de saturação, isto é, o fluido ali existente é monofásico. Nessa região do reservatório não ocorrerão variações na composição do fluido em movimento, que será igual à composição do fluido original  $z_{mo}$ , assim:

$$z_{mf} = z_{mo} \quad (7.13)$$

Admitindo agora um escoamento em regime permanente, observa-se, através da equação (7.11), que a composição global da corrente fluida,  $z_{mf}$ , não varia com a posição. Ora se  $z_{mf}$  é igual a  $z_{mo}$  no trecho monofásico e não havendo alteração de  $z_{mf}$  com a posição conclui-se que a afirmação em (7.13) é sempre válida, apresente-se o fluido como mono ou bifásico, desde que exista o regime permanente. Essa importante conclusão é a base da técnica usada na validação do modelo composicional. Não obstante, o raciocínio pode ainda ser estendido.

Adotando a costumeira hipótese de que as fases em movimento no reservatório se encontram em equilíbrio termodinâmico, a expressão (7.11) pode ser reescrita como:

$$z_{mf} = \frac{\lambda_o x_m + \lambda_g y_m}{\lambda_o + \lambda_g} = L_f x_m + (1 - L_f) y_m \quad (7.14)$$

Onde:

$$L_f = \frac{\lambda_o}{\lambda_o + \lambda_g} \quad e \quad (1 - L_f) = \frac{\lambda_g}{\lambda_o + \lambda_g} \quad (7.15)$$

Um experimento de expansão à composição constante no fluido original do reservatório geraria as fases líquida e vapor cujas composições,  $x_{mo}$  e  $y_{mo}$ , são por definição relacionadas com a composição global do fluido por:

$$z_{mo} = L_e x_{mo} + (1 - L_e) y_{mo} \quad (7.16)$$

Onde  $L_e$  e  $V_e = (1 - L_e)$  são as frações molares das fases líquida e vapor num estágio qualquer de pressão e temperatura da expansão.

A equação (7.13), válida para o regime permanente, impõe que  $z_{mf} = z_{mo}$ . Logo pode-se afirmar que as frações molares das fases líquida e vapor na corrente fluida,  $x_m$  e  $y_m$ , serão iguais as suas correspondentes  $x_{mo}$  e  $y_{mo}$  do fluido original desde que ambos os fluidos estejam sujeitos às mesmas condições de temperatura e pressão. Escreve-se portanto que:

$$x_m = x_{mo} \quad \text{e} \quad y_m = y_{mo} \quad (7.17)$$

A expressão (7.17) pode ainda ser traduzida em termos das constantes de equilíbrio:

$$K_m = \frac{y_m}{x_m} = K_{mo} = \frac{y_{mo}}{x_{mo}} \quad (7.18)$$

Considerando agora as relações em (7.17) e a equação (7.13), as expressões (7.14) e (7.16) podem ser igualadas:

$$z_m = \frac{\lambda_o}{\lambda_o + \lambda_g} x_{mo} + \frac{\lambda_g}{\lambda_o + \lambda_g} y_{mo} = z_{mo} = Le x_{mo} + (1 - Le) y_{mo}$$

Rearranjando a equação acima obtém-se:

$$\left[ \frac{\lambda_o}{\lambda_o + \lambda_g} - Le \right] x_{mo} + \left[ \frac{\lambda_g}{\lambda_o + \lambda_g} - (1 - Le) \right] y_{mo} = 0 \quad (7.19)$$

Apenas no ponto crítico se tem  $x_{mo} = y_{mo}$ , nas demais condições de temperatura e pressão a equação (7.19) impõe que:

$$\frac{\lambda_o}{\lambda_o + \lambda_g} = Le \quad \text{ou} \quad \frac{\lambda_g}{\lambda_o + \lambda_g} = 1 - Le \quad (7.20)$$

Dividindo a primeira pela segunda das relações (7.20) acima

obtém-se finalmente que:

$$\frac{\lambda_o}{\lambda_g} = \frac{\frac{k_{ro}\rho_o}{\mu_o}}{\frac{k_{rg}\rho_g}{\mu_g}} = \frac{Le}{1 - Le} \quad (7.21)$$

Revisando as igualdades deduzidas em (7.17) conclui-se que os termos na equação (7.21) devem ser avaliados como funções de:

$$k_{ro}, \rho_o, \mu_o = f \left( x_m \text{ para } m = 1, 2, \dots, n_c; p; T \right)$$

$$k_{rg}, \rho_g, \mu_g = f \left( y_m \text{ para } m = 1, 2, \dots, n_c; p; T \right)$$

$$Le = f \left( x_{mo}, y_{mo} \text{ para } m = 1, 2, \dots, n_c; p; T \right)$$

A equação (7.21) implica que a relação de mobilidades das fases líquida e vapor, fluindo em regime permanente ao longo do reservatório, deve ser igual à relação entre as frações molares das fases líquida e vapor do fluido original, com ambos os sistemas submetidos a idênticas condições de temperatura e pressão.

## 7.2 Comparação dos Resultados Analíticos e da Simulação

O processo de validação consistiu da comparação dos resultados de razão de mobilidade, gerados pelo modelo em regime permanente, com informações obtidas em uma simulação de um experimento de expansão à composição constante em célula PVT do fluido original. Ou seja, ambas as relações presentes na igualdade em (7.21) foram determinadas, via procedimentos independentes, e então cotejadas.

As simulações do reservatório produziram dados para quatro diferentes situações:

- a) reservatório de gás retrógrado com geometria linear;
- b) reservatório de gás retrógrado com geometria radial;
- c) reservatório de óleo volátil com geometria linear;
- d) reservatório de óleo volátil com geometria radial;

A condição de escoamento em regime permanente foi alcançada através da produção do reservatório acompanhada da injeção simultânea do fluido original, sob pressão constante e igual à inicial, na extremidade oposta a do poço produtor.

A composição do gás usado nos casos a e b foi obtida a partir de análise cromatográfica do fluido produzido no poço 3-RNS-90d, Campo de Pescada (PETROBRÁS) [44]. A representação desse fluido para efeito de simulação contemplou o fracionamento de sua fração mais pesada, C<sub>11</sub>+, em dois pseudo componentes, seguida do reagrupamento das frações do sistema em seis pseudo componentes. A composição do óleo volátil, usado nas simulações c e d, foi adotada como sendo aquela da fração líquida em equilíbrio com o gás citado acima, na sua pressão de orvalho à temperatura original do reservatório (422°K).

A tabela (7.1) apresenta a composição original e agrupada ("pseudoizada") do gás estudado; nessa mesma tabela consta ainda a composição do óleo volátil. O Apêndice F contém as propriedades dos pseudo componentes. A figura (7.1) mostra a curva de depósito de líquido condensado desse gás, expressa pela fração molar da fase líquida como função da pressão. A figura (7.2), por sua vez, apresenta dados de fração molar na

fase vapor para diferentes pressões, obtidos numa expansão à composição constante para o óleo volátil.

Componente	Fração no Gás Original	Pseudo Componente	Fração no Gás Retrógrado	Fração no Óleo Volátil
CH <sub>4</sub>	0,60390	P1	0,61170	0,45941
N <sub>2</sub>	0,00780			
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0,14330	P2	0,14670	0,13716
CO <sub>2</sub>	0,00340			
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,09590	P3	0,17110	0,19540
C4	0,05360			
C5	0,02160			
C6	0,01250	P4	0,05080	0,09065
C7	0,01260			
C8	0,01340			
C9	0,00760			
C10	0,00470			
C11	0,01396	P5	0,01396	0,05383
C12+	0,00574	P6	0,00574	0,06355

Tabela 7.1: Composição inicial dos fluidos

Nas simulações desenvolvidas empregaram-se dois conjuntos de curvas de permeabilidade relativa gás óleo. Para os reservatórios de gás retrógrado, casos a e b, foram usados dados, obtidos por processo de embebição, constantes da referência [45]. Nos casos c e d, reservatórios portadores de óleo volátil, utilizaram-se curvas determinadas em laboratório por Branco et. al. [46] com amostras de rocha do próprio Campo de Pescada. Os dois conjuntos de curvas estão representados na figura (7.3). Dados de permeabilidade relativa água óleo foram desnecessários uma vez que admitiu-se a água como imóvel.

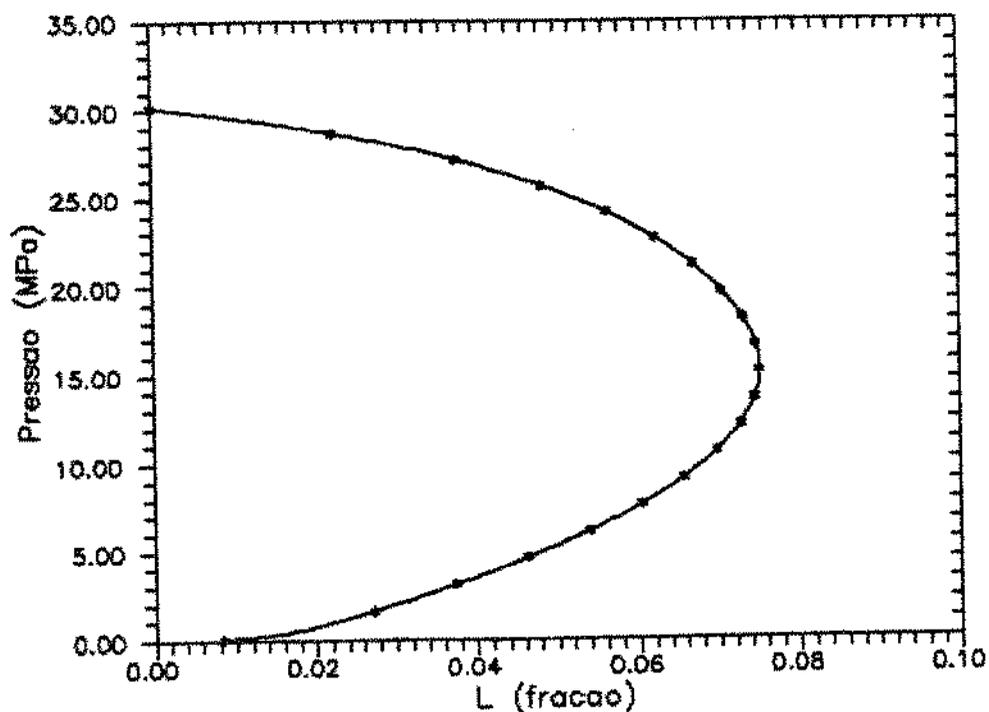


Figura 7.1: Fração molar na fase líquida x pressão para o gás do poço 3-RNS-90d

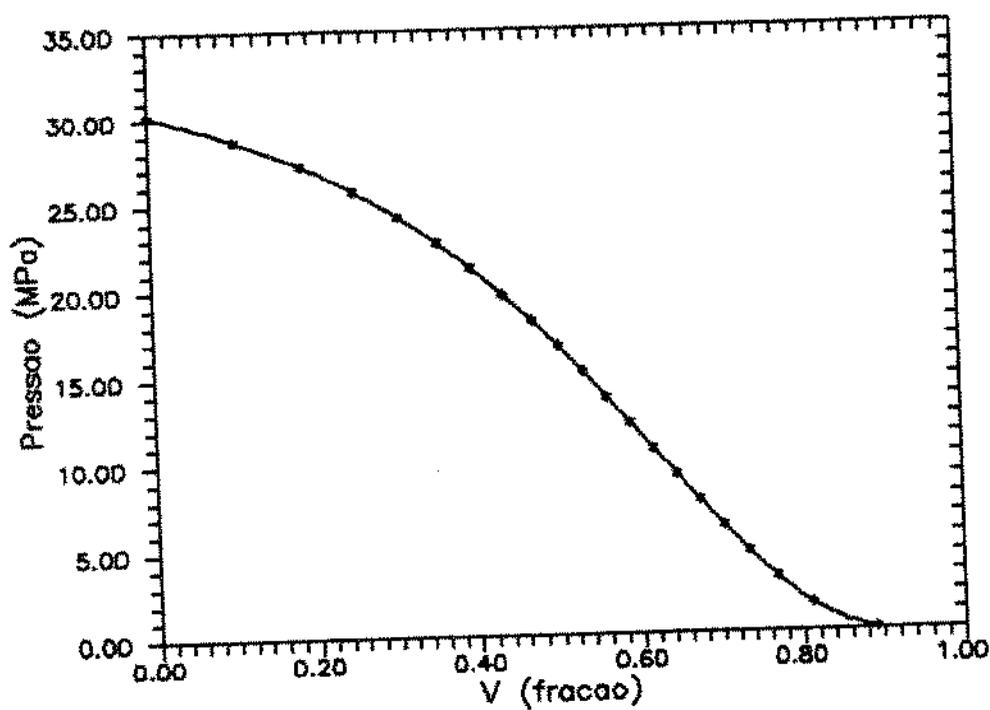


Figura 7.2: Fração molar na fase vapor x pressão para o óleo volátil

Como se nota na figura (7.1), o gás estudado apresenta um comportamento típico do fenômeno de condensação retrógrada.

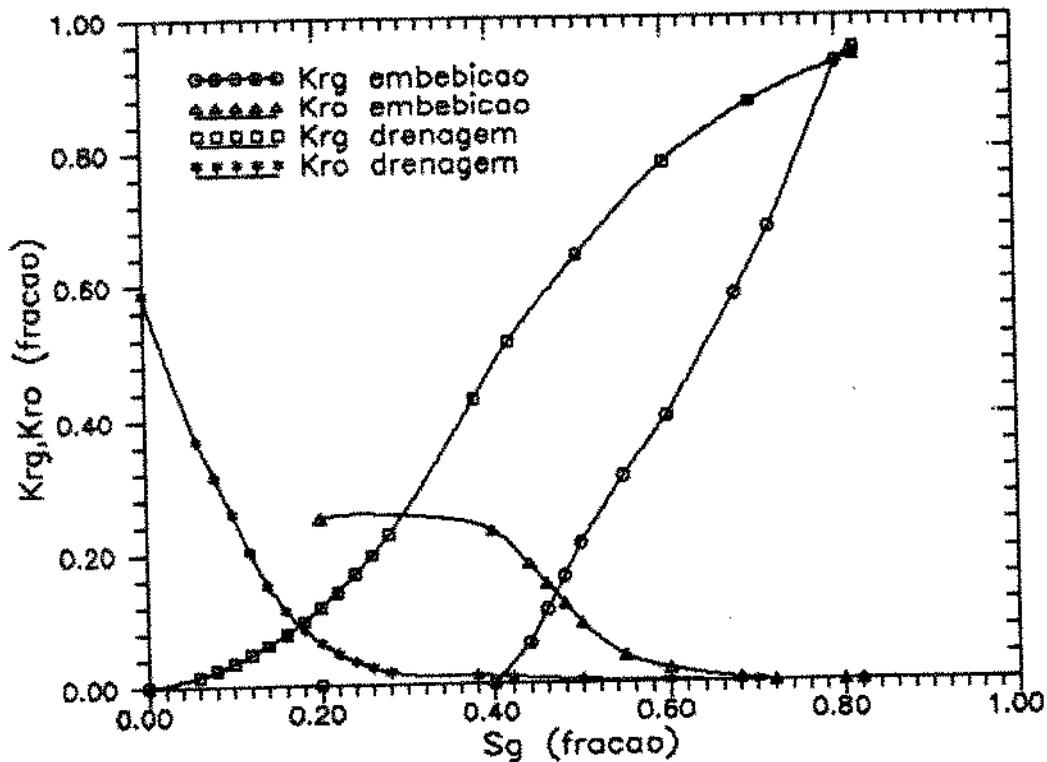


Figura 7.3: Curvas de permeabilidade relativa gás-óleo

Os dados de pressão capilar nos sistemas água óleo e gás óleo, usados apenas nas simulações de reservatórios de óleo, estão tabelados no Apêndice F.

Complementando as informações usadas nas simulações para efeito de validação, a tabela (7.2) apresenta algumas das características dos reservatórios estudados. Já as tabelas (7.3) e (7.4) mostram os dados de produção e de injeção dos poços e os parâmetros de simulação empregados.

Parâmetro	Unidade	Geometria do Reservatório	
		Radial	Linear
Extensão na direção x	m	500	1200
Extensão na direção z	m	20	20
Extensão na direção y	m	$2\pi r_e$	50
Topo do Reservatório (horizontal)	m	-2490,00	-2490,00
Pressão Inicial do Reservatório	MPa	31,03 a -2500,00 m	34,47 a -2500,00 m
Temp. do Reservatório	°K	422	422
$S_{wi}$	fração	0,20	0,20
$C_r$	Pa <sup>-1</sup>	$0,44 \times 10^{-3}$	$0,44 \times 10^{-3}$
$\phi$	fração	0,15	0,15
Permeabilidade Horiz.	m <sup>2</sup>	$9,87 \times 10^{-15}$	$9,87 \times 10^{-15}$
Permeabilidade Vert.	m <sup>2</sup>	$9,87 \times 10^{-15}$	$9,87 \times 10^{-15}$

Tabela 7.2: Dados dos reservatórios simulados para validação

Parâmetro	Unidade	Geometria do Reservatório	
		Radial	Linear
Raio dos poços	m	0,10	0,10
Vazão de gás $q_{gs}$ máx. casos a,b	m <sup>3</sup> /dia	$100,00 \times 10^3$	$150,00 \times 10^3$
Vazão de óleo $q_{os}$ máx. casos c,d	m <sup>3</sup> /dia	70,00	50,00
Pressão de fluxo mínima na produção $p_{wf}$	MPa	6,89	6,89
Pressão (constante) no poço de injeção	MPa	31,03	34,47
Temperatura de separação na superfície	°K	288,71	288,71
Pressão de separação na superfície	KPa	101,35	101,35

Tabela 7.3: Parâmetros de produção dos poços para validação

Parâmetro	Unidade	Geometria do Reservatório	
		Radial	Linear
Células na direção x	-	$N_x=8$	$N_x=16$
Células na direção z	-	$N_z=1$	$N_z=1$
Coordenadas dos poços de produção/injeção	-	(1,1)/(8,1)	(1,1)/(16,1)
$\Delta t$ inicial	dia	$1,00 \times 10^{-3}$	0,25
$\Delta t$ máximo	dia	5,00	10,00
$\Delta t$ mínimo	dia	$1,00 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-2}$
Tolerância na pressão	Pa	1378,95	1378,95
Toler. nas saturações	fração	$5,00 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-4}$
Tolerância nas frações molares	fração	$1,00 \times 10^{-6}$	$1,00 \times 10^{-7}$
Tolerância nas eqs. de equilíbrio	fração	$1,00 \times 10^{-7}$	$1,00 \times 10^{-7}$
No. máx. de iterações por passo de tempo	-	5	5
Variação máxima permitida na pressão	KPa	689,48	1034,21
Variação máxima permitida nas saturações	fração	$5,00 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-2}$

Tabela 7.4: Parâmetros de simulação para validação

Os resultados das simulações são apresentados a seguir. A figura (7.4) mostra as vazões de produção em superfície de óleo e de gás, além da pressão de fluxo no poço produtor, para o caso a, reservatório linear de gás. A figura (7.5) apresenta os mesmos dados para o caso b, reservatório radial de gás (aqui a vazão de gás permaneceu constante durante todo o período simulado). Ambos os gráficos demonstram que a condição de regime permanente de escoamento foi atingida após um período inicial onde ocorreu queda seguida de ascensão nas vazões de produção.

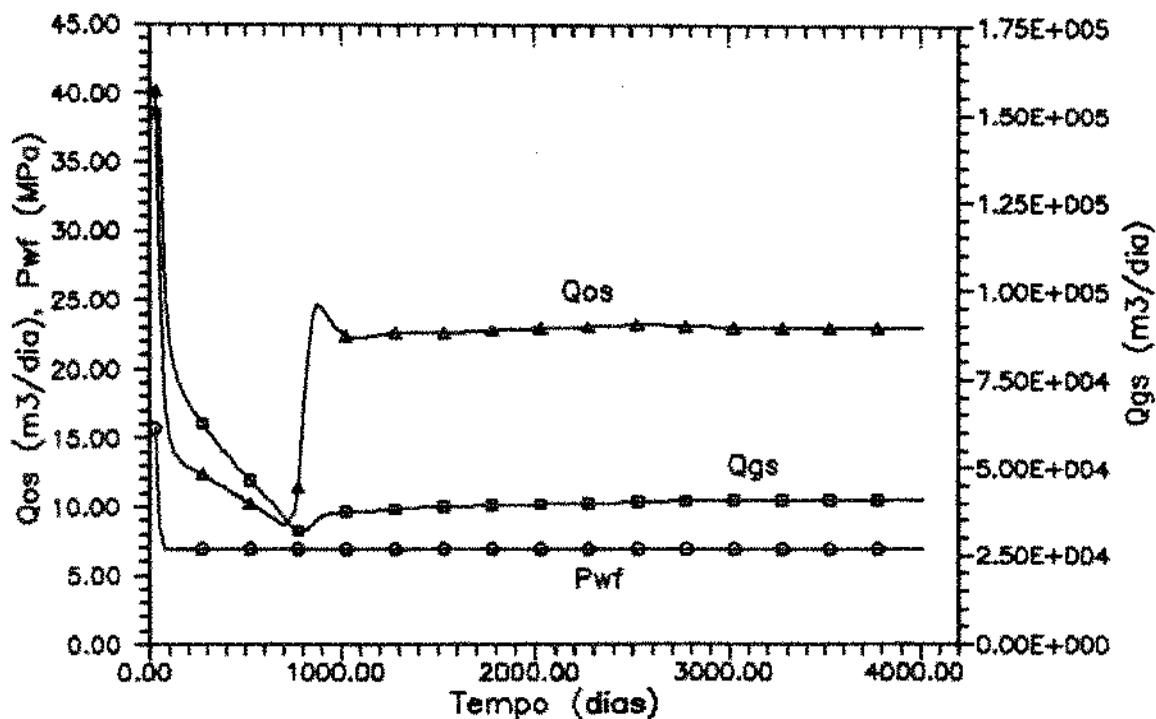


Figura 7.4: Vazões de óleo e gás e pressão de fluxo no poço produtor x tempo (caso a, reservatório linear de gás)

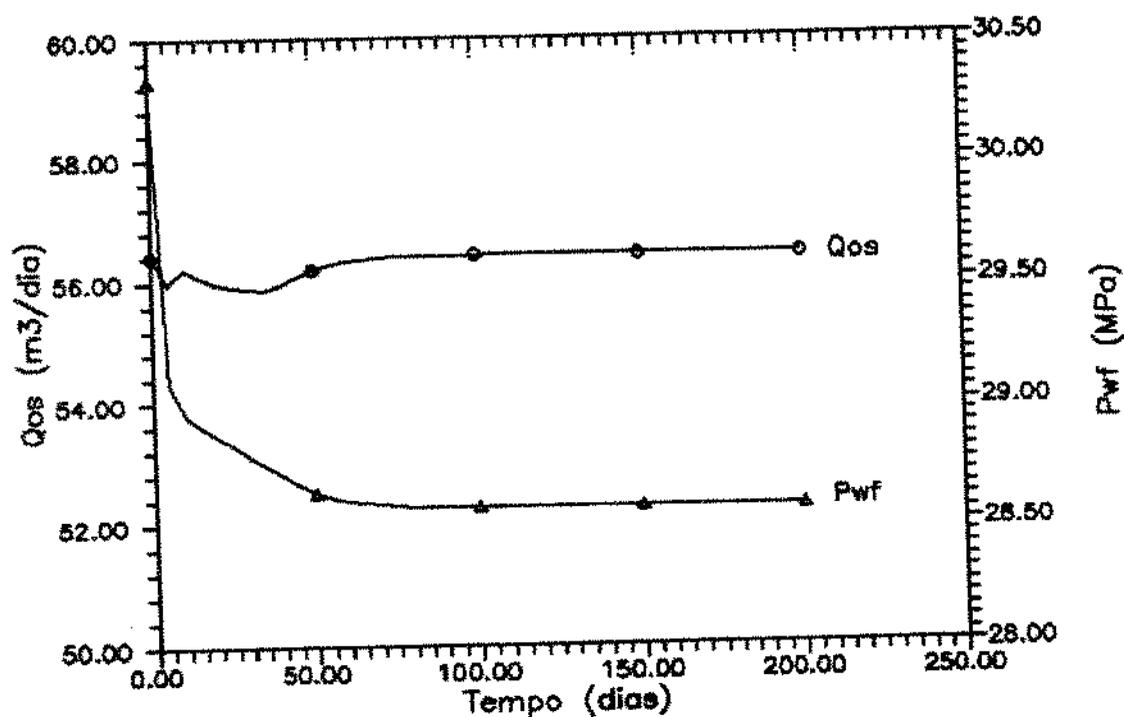


Figura 7.5: Vazão de óleo e pressão de fluxo no poço produtor x tempo (caso b, reservatório radial de gás)

Uma vez alcançado o regime permanente, os dados de mobilidade das fases óleo ( $\lambda_o$ ) e gás ( $\lambda_g$ ) e de constantes de equilíbrio  $K_m$  ( $m = 1, 2, \dots, n_c$ ) obtidos ao longo das células da malha de simulação, nos casos a e b, foram usados para a confecção das figuras (7.6) e (7.7). No gráfico (7.6) confrontam-se, para diferentes pressões, as relações de mobilidades  $\lambda_o/\lambda_g$  ao longo reservatório com as razões entre as frações molares das fases líquida e vapor (L/V), geradas via expansão à composição constante (ECC) do gás original. O excelente ajuste obtido entre esses dados demonstra, a luz da equação (7.21), a validade do modelo desenvolvido. Esta afirmação é reiterada na figura (7.7) onde as constantes de equilíbrio  $K_1$  e  $K_3$  (componentes P1 e P3) da simulação mostram absoluta correspondência com suas congêneres geradas via ECC no gás original, como previsto na equação analítica (7.18).

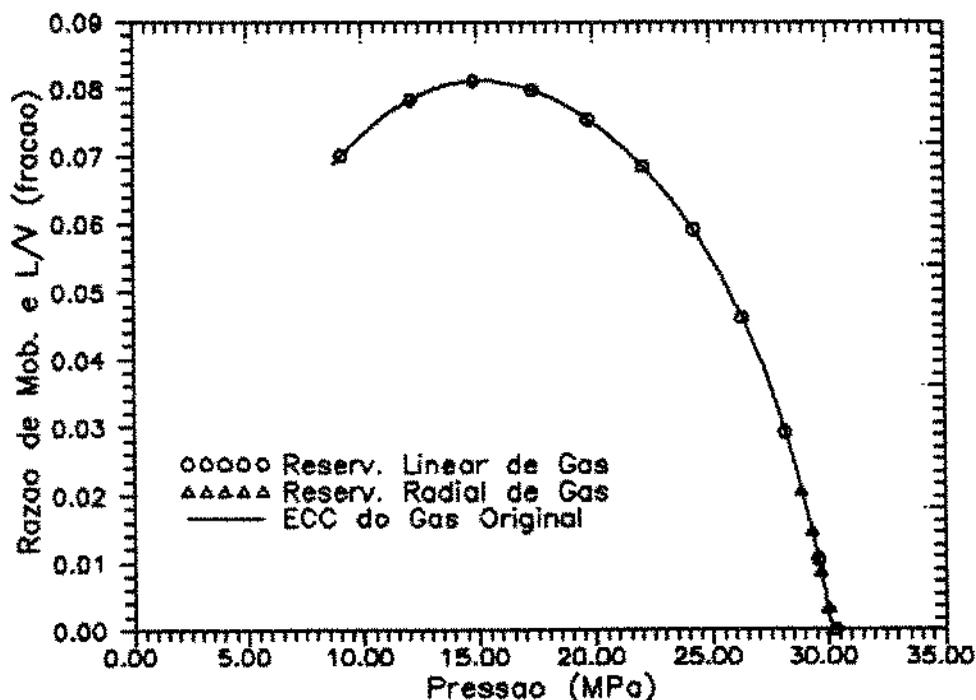


Figura 7.6: Razão de mobilidades das fases óleo e gás e relação das frações molares L/V x pressão (casos a e b)

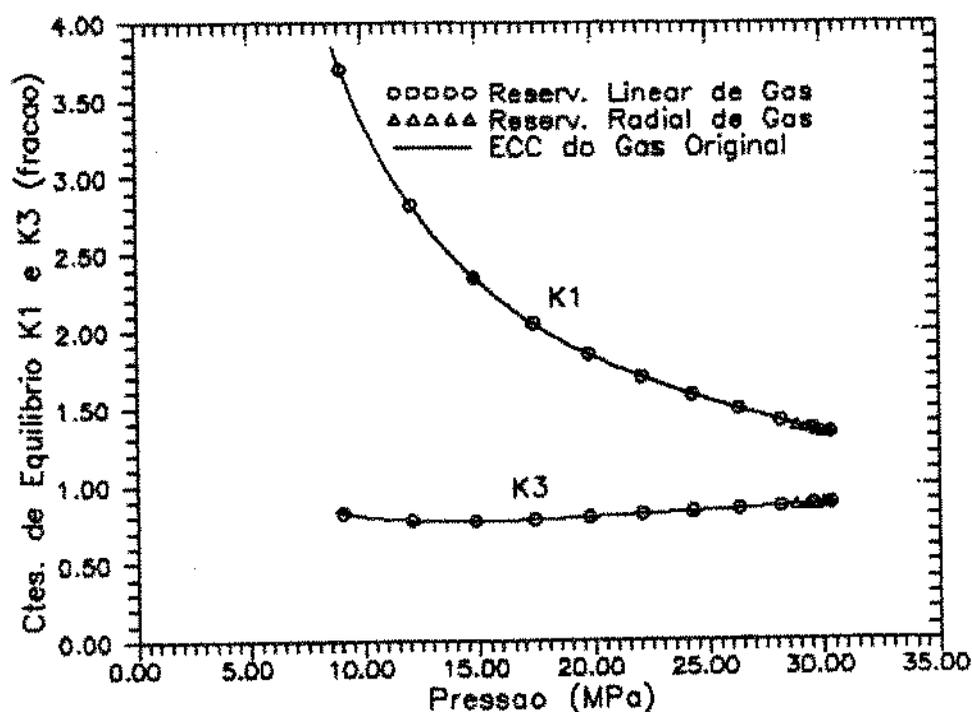


Figura 7.7: Constantes de equilíbrio dos pseudo componentes P1 e P3 x pressão (casos a e b)

Os resultados de vazão em superfície e de pressão de fluxo no poço produtor para as simulações dos reservatórios portadores de óleo volátil, casos c (linear) e d (radial), são apresentados nas figuras (7.8) e (7.9). Em ambos os casos atinge-se o regime permanente após um período inicial em que as vazões mostram alguma oscilação. Esse fato já era esperado uma vez que a ação do poço injetor, operando à pressão constante e igual à original do reservatório, só pode se fazer sentir a medida que a jazida experimenta um certo nível de depleção.

Como feito anteriormente, as razões de mobilidade  $\lambda_o/\lambda_g$  do modelo em regime permanente, casos radial e linear, foram comparadas com as relações L/V obtidas para diferentes pressões no experimento simulado de ECC do óleo original. A figura (7.10) ilustra o perfeito ajuste entre esses dados, validando o modelo para a simulação de reservatórios de óleo.

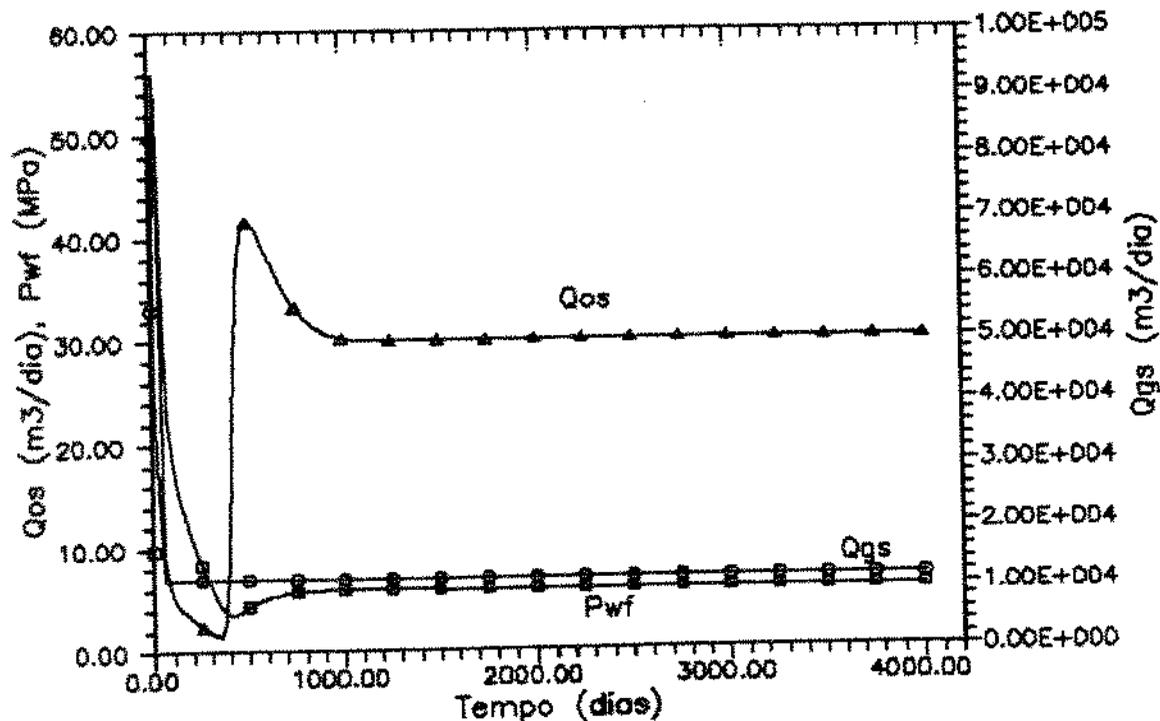


Figura 7.8: Vazões de óleo e gás e pressão de fluxo no poço produtor x tempo (caso c, reservatório linear de óleo)

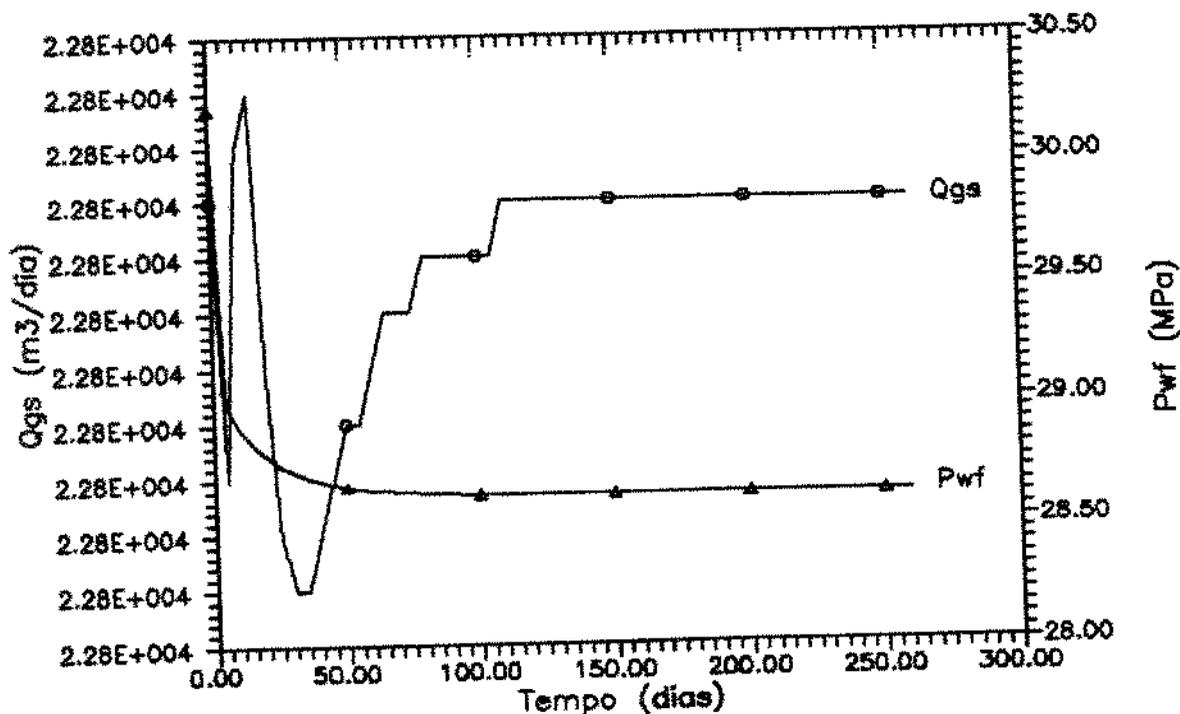


Figura 7.9: Vazão de gás e pressão de fluxo no poço produtor x tempo (caso d, reservatório radial de óleo)

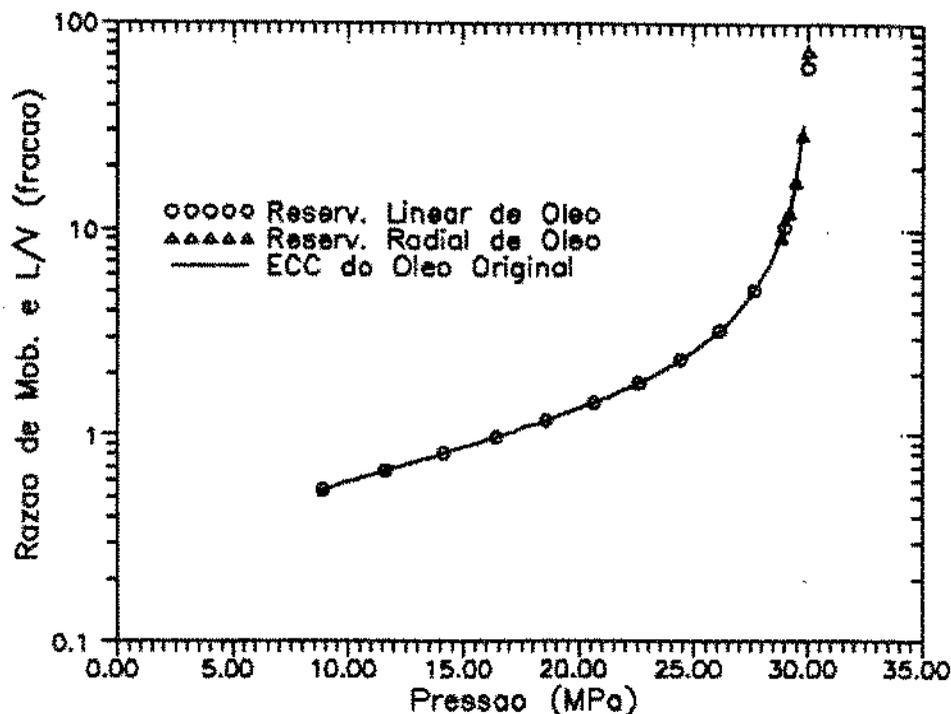


Figura 7.10: Razão de mobilidades das fases óleo e gás e relação das frações molares L/V x pressão (casos c e d)

Finalizando a apresentação dos resultados para as simulações de validação, a figura (7.11) mostra as constantes de equilíbrio dos componentes P1 e P3 obtidas a partir das composições das fases hidrocarbonetos nas células da malha. Como se nota elas reproduzem exatamente aquelas geradas na ECC do óleo original, como era de se esperar.

Concluindo este item, introduz-se a tabela (7.5) que contém dados inerentes ao desempenho computacional das simulações até agora descritas. Em todos os casos o computador utilizado foi um IBM 3090 instalado no Centro de Pesquisas da PETROBRÁS. O objetivo da exposição dessas informações é o de fornecer subsídios para - possíveis - futuras comparações com formulações composicionais alternativas à ora em análise.

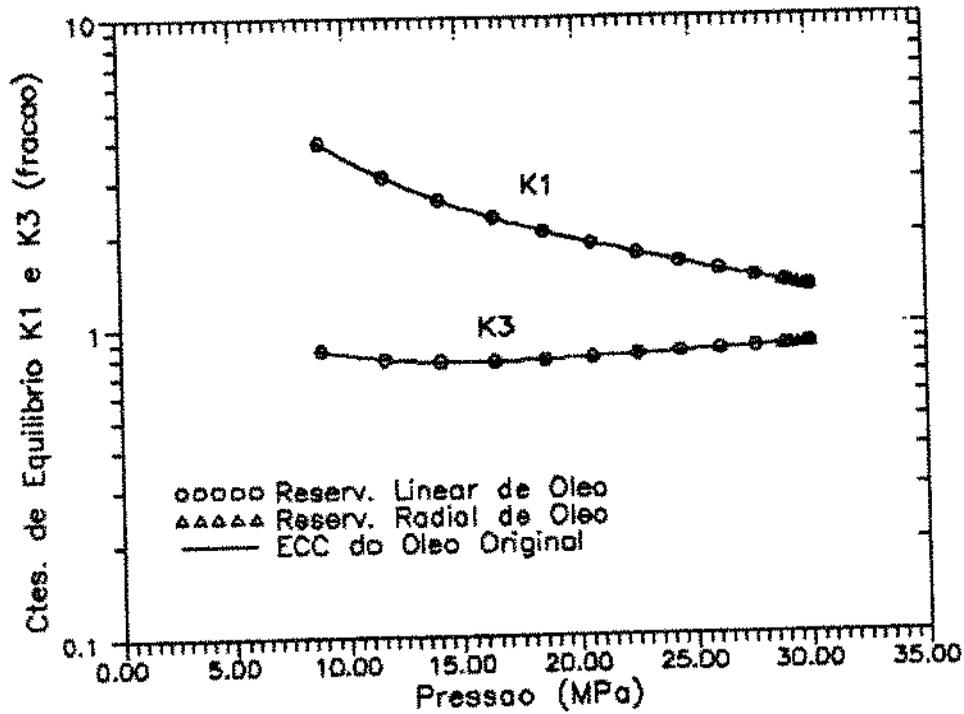


Figura 7.11: Constantes de equilíbrio dos pseudo componentes P1 e P3 x pressão (casos c e d)

Variável	Caso a	Caso b	Caso c	Caso d
Tempo de processamento	3,947 min	26,236 min	3,528 min	10,773 min
Período simulado (dias)	5000	200	5000	260
No. de passos de tempo acumulados	826	13598	898	5292
No. de iterações acumuladas	2931	21354	2776	10097
No. médio de iterações por passo	3,548	1,570	3,091	1,908
Passo de tempo $\Delta t$ médio	6,06 dias	21,18 min	5,57 dias	70,75 min

Tabela 7.5: Dados de desempenho computacional das simulações para validação

## 8. APLICAÇÕES DO MODELO E DISCUSSÃO DE RESULTADOS

A descrição do modelo composicional desenvolvido se encerra neste capítulo onde são apresentados alguns exemplos de aplicações práticas. Os casos estudados estão divididos em três grupos, a saber:

- simulação de testes de pressão em poços;
- simulação de depleção de reservatório;
- simulação de produção de reservatório com ciclagem de gás.

Em todas as situações acima os fluidos presentes nos diversos tipos de reservatório simulados são os mesmos usados nos casos de validação, suas composições são mostradas na tabela (7.1). Da mesma maneira, as curvas de permeabilidade relativa gás óleo empregadas são idênticas àquelas representadas na figura (7.3). Pressões capilares, usadas apenas nos reservatórios de óleo, constam do Apêndice F. Os demais dados, propriedades de reservatório e parâmetros de produção e de simulação, serão expostos caso a caso.

### 8.1 Simulação de Testes de Pressão em Poços

Este conjunto de simulações compreendeu a análise do comportamento da pressão de fluxo e das saturações de óleo e gás em reservatórios cilíndricos, discretizados de forma exponencial, drenados por um único poço central. Nos cinco casos estudados as seguintes variáveis foram investigadas:

- fluido inicialmente presente no reservatório, gás ou óleo;
- curva de permeabilidade relativa gás óleo ( $K_g/K_o$ ) empregada;
- existência de dano de formação no poço.

Os casos de reservatório portadores de gás retrógrado, discretizados em malha de  $N_x = 12$  e  $N_z = 1$ , são discriminados abaixo:

- e1)poço sem dano, simulado com curva de permeabilidade relativa gás óleo obtida por drenagem [46];
- e2)poço sem dano, simulado com curva de permeabilidade relativa gás óleo obtida por embebição [45];
- e3)poço com dano, simulado com curva de permeabilidade relativa gás óleo obtida por embebição [45].

O dano no poço, caso e3, foi modelado através da redução das permeabilidades absolutas horizontal e vertical das duas primeiras células da malha de  $9,87 \times 10^{-15} \text{ m}^2$ , usada nos demais blocos, para  $2,18 \times 10^{-15} \text{ m}^2$ . Considerando o esquema exponencial de construção dos blocos, malha de  $12 \times 1$ , raio do poço de 0,10 m, conclui-se que o raio de dano será igual a 0,414 m, correspondendo a um fator de película  $S$  igual a 5 [47]. Nos casos e1 e e2 as permeabilidades são constantes e iguais a  $9,87 \times 10^{-15}$ .

Os testes de formação simulados compreenderam um período inicial de fluxo de 24 horas, seguido de uma estática de 48 horas. As características do reservatório são as mesmas já apontadas na tabela (7.2), geometria radial, a menos das alterações nas permeabilidades comentadas acima. A vazão de teste, constante, para os três casos foi de  $200,00 \times 10^3 \text{ m}^3/\text{dia}$ ; os demais dados de produção são os mesmos mostrados na tabela (7.3). Os parâmetros de simulação, por sua vez, sofreram algumas modificações em relação aos anteriormente usados na validação. A tabela (8.1) apresenta seus novos valores.

Parâmetro	Unidade	Valor usado
Células na direção x	-	$N_x=12$
Células na direção z	-	$N_z=1$
$\Delta t$ inicial	dia	$1,00 \times 10^{-3}$
$\Delta t$ máximo	dia	$1,00 \times 10^{-1}$
$\Delta t$ mínimo	dia	$1,00 \times 10^{-4}$
Tolerância na pressão	Pa	1378,95
Toler. nas saturações	fração	$5,00 \times 10^{-4}$
Tolerância nas frações molares	fração	$1,00 \times 10^{-7}$
Tolerância nas eqs. de equilíbrio	fração	$1,00 \times 10^{-7}$
No. máx. de iterações por passo de tempo	-	5
Variação máxima permitida na pressão	KPa	689,48
Variação máxima permitida nas saturações	fração	$5,00 \times 10^{-2}$

Tabela 8.1: Parâmetros de simulação para testes de formação

As principais alterações se referem aos valores inicial, máximo e mínimo do passo de tempo  $\Delta t$ . Estes foram reduzidos para se obter uma melhor definição das incógnitas no curto período simulado (teste de duração total de 3 dias).

Os resultados dos três casos são apresentados nas figuras (8.1), pressão de fluxo em função do tempo, e (8.2), saturação de óleo na célula 1,1 contra o tempo. As pressões de fluxo mostraram o comportamento esperado: no poço danificado a queda foi mais acentuada, nos demais o declínio foi pouco influenciado pela fato de terem sido usadas curvas diferentes de  $K_g/K_o$ . Já a evolução da saturação de óleo, que uma vez

estabelecida não chegou a desaparecer com o fechamento do poço, demonstrou maior dependência em relação à permeabilidade relativa, em especial no período de crescimento de pressão. Assim foi que no caso e1, curva de  $K_g/K_o$  por drenagem, a saturação de óleo experimentou um significativo acréscimo nessa etapa, indicando que o fluido presente na célula 1,1, originalmente um gás, sofreu profunda alteração na sua composição a ponto de passar a comportar-se como um líquido. Nos outros dois casos, curva de  $K_g/K_o$  por embebição, esse fenômeno ocorreu de forma muito discreta no poço sem dano e não se manifestou no poço danificado. Essas conclusões são importantes pois demonstram a possibilidade de mudança radical na composição do fluido nas proximidades do poço, fato que pode acarretar erros de avaliação de reservatórios quando estes se basearem em amostragens - impróprias - desse fluido. Não obstante, comprovou-se ainda que o fenômeno em questão depende fortemente das características de fluxo do meio poroso, conclusão que confere maior importância à correta caracterização da rocha nos estudos de simulação de reservatórios. Os resultados obtidos comprovam ainda o já conhecido problema de potencial perda de produtividade em poços de gás retrógrado, decorrentes do dano induzido pela deposição de líquido no reservatório.

Em outros dois testes de formação analisaram-se reservatórios portadores de óleo volátil, ambos simulados com a curva de  $K_g/K_o$  obtida por drenagem [46], considerando que:

-caso f1, poço sem dano;

-caso f2, poço danificado com fator de película  $S$  igual a 5 modelado de forma semelhante à comentada anteriormente.

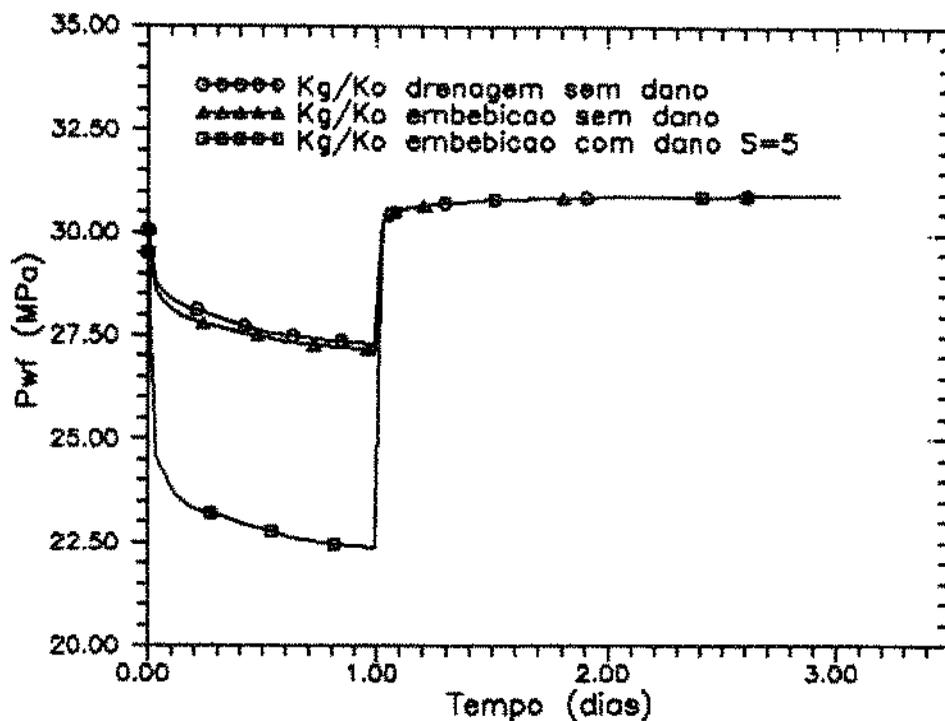


Figura 8.1: Pressão de fluxo x tempo, testes de formação em poços de gás retrógrado

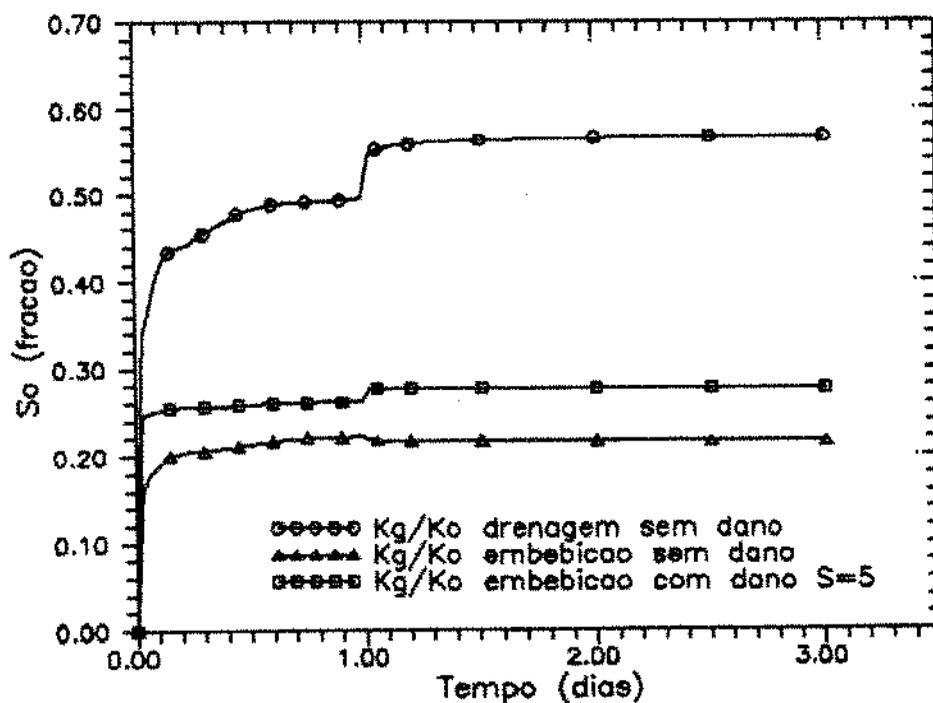


Figura 8.2: Saturação de óleo x tempo, testes de formação em poços de gás retrógrado

Os demais parâmetros de reservatório, de produção e de simulação são os mesmos mostrados nas tabelas (7.2), (7.3) e (8.1) respectivamente.

A figura (8.3) mostra os resultados de pressão de fluxo contra o tempo. Obteve-se a resposta esperada, qual seja, uma maior queda de pressão no poço danificado. O comportamento da pressão governou a evolução da saturação de gás com o tempo, cujos valores para a célula 1,1 são apresentados na figura (8.4). Como se observa nesse gráfico, o poço com dano permitiu o surgimento de uma saturação de gás superior àquela gerada no poço sem dano. Após o fechamento dos poços o gás livre desapareceu indicando que a pressão atingida superou a pressão de bolha do líquido.

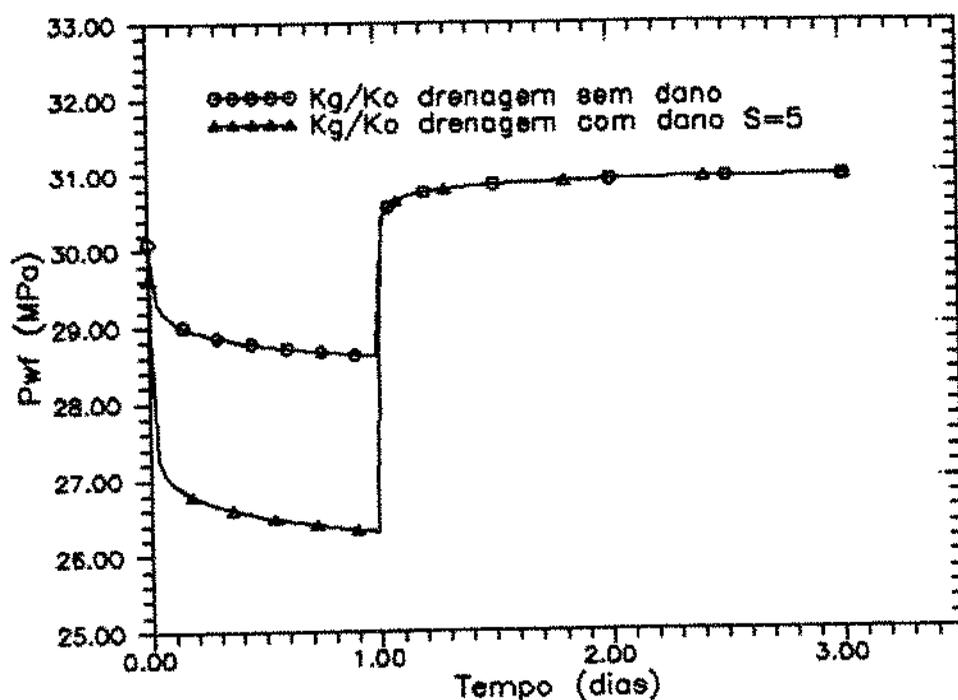


Figura 8.3: Pressão de fluxo x tempo, testes de formação em poços de óleo volátil

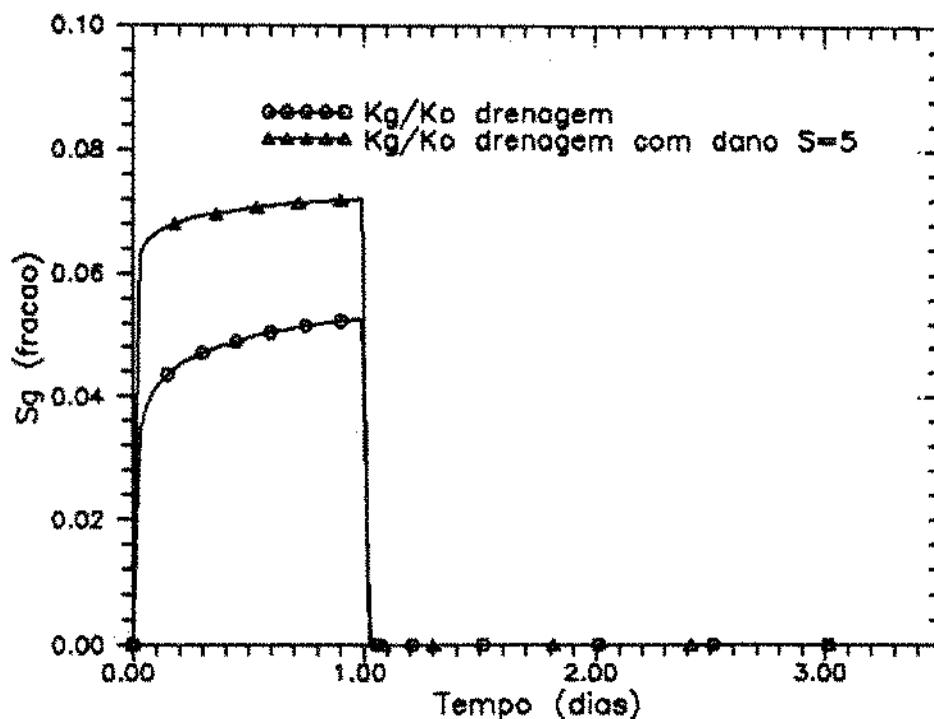


Figura 8.4: Saturação de gás x tempo, testes de formação em poços de óleo volátil

Concluindo este item, a tabela (8.2) apresenta algumas variáveis para avaliação do desempenho computacional das cinco simulações descritas acima, todas desenvolvidas no computador IBM 3090 do Centro de Pesquisas da PETROBRÁS. Observe-se que os resultados de passo de tempo médio, que se mostraram bastante reduzidos, estão influenciados pela limitação de 0,1 dia (144 minutos) imposta ao  $\Delta t$  máximo e pelo fato das simulações terem sido iniciadas com um  $\Delta t$  de apenas 0,001 dia (1,44 minutos). Apesar dessas considerações, o rendimento nas simulações em geometria radial parece, a primeira vista, pouco satisfatório em relação às que envolvem geometria cartesiana. Entretanto não é possível avaliar essa questão de forma definitiva uma vez que não se dispõe de dados comparativos.

Variável	Caso e1	Caso e2	Caso e3	Caso f1	Caso f2
Tempo de processamento (min)	3,921	3,940	5,719	4,290	7,474
Período simulado (dias)	3	3	3	3	3
No. de passos de tempo acumulados	1107	1035	1534	1175	2045
No. de iterações acumuladas	2701	3219	5881	4635	8090
No. médio de iter. por passo	2,440	3,110	3,834	3,945	3,956
Passo de tempo $\Delta t$ médio (min)	3,915	4,188	2,825	3,691	2,123

Tabela 8.2: Dados de desempenho computacional das simulações de teste de formação

## 8.2 Simulação de Depleção de Reservatórios

As simulações descritas a seguir objetivaram submeter o modelo à análise de um mesmo problema físico porém representado por diferentes configurações de malha de simulação. Dois casos foram estudados:

- g) reservatório linear de gás retrógrado, discretizado em malhas com pares  $(N_x, N_z)$  de  $(16 \times 4)$ ,  $(16 \times 2)$  e  $(8 \times 4)$ ;
- h) reservatório linear de óleo volátil, discretizado em malhas com pares  $(N_x, N_z)$  de  $(16 \times 4)$ ,  $(16 \times 2)$  e  $(8 \times 4)$ ;

Em ambos os casos a produção ocorreu por um único poço localizado numa das extremidades dos reservatórios. Os intervalos abertos ao fluxo foram equivalentes, ou seja, duas camadas (as inferiores) nas malhas de  $N_z = 4$  e uma camada nas malhas de  $N_z = 2$  (a inferior). Nos casos de gás retrógrado

usou-se a curva de permeabilidade relativa gás óleo obtida por embebição [45] e nos de óleo volátil a de drenagem [46]; ambas são mostradas na figura (7.3). Admitiu-se ainda a fase água como imóvel.

Os dados de reservatório e de produção são reapresentados na tabela (8.3), apesar de diferirem muito pouco em relação aqueles usados nos casos de validação em geometria linear. Os parâmetros de simulação são os mesmos usados anteriormente nos casos de validação (tabela 7.4) a menos no que concerne às dimensões da malha, comentada acima.

Os resultados para o caso g, reservatório de gás, são apresentados a seguir. A figura (8.5) contém os dados de vazão de óleo e de razão gás óleo (RGO); o gráfico (8.6) mostra a vazão de gás e a pressão de fluxo na base das camadas abertas. Finalmente, a figura (8.7) apresenta as produções mássicas acumuladas, em termos de número de moles, para o componente P1 e para a soma dos componentes de P3 a P6 (apenas para malha de 16x4). Neste último gráfico registram-se tanto os dados obtidos pela acumulação, ao longo do tempo, do produto da vazão molar pelo incremento de tempo, referidos como "dados da simulação", quanto os resultantes de um balanço de materiais nas células da malha. A perfeita concordância entre esses resultados demonstra uma vez mais a validade do modelo implementado.

Como se observa nas figuras mencionadas acima, a variação nas dimensões da malha não provocou alterações importantes na resposta do simulador. A evolução das variáveis vazões em superfície de gás e de óleo mostram o comportamento esperado, o mesmo ocorrendo com as produções mássicas acumuladas e com a pressão de fluxo.

Parâmetro	Unidade	Fluido Inicial no Reservatório	
		Gás Retrógrado	Óleo Volátil
Extensão na direção x	m	800	800
Extensão na direção z	m	20	20
Extensão na direção y	m	200	200
Topo do reservatório (horizontal)	m	-2490,00	-2490,00
Pressão inicial do reservatório	MPa	34,47 a -2500,00 m	34,47 a -2500,00 m
Temp. do reservatório	°K	422	422
$S_{wi}$	fração	0,20	0,20
$C_r$	Pa <sup>-1</sup>	$0,44 \times 10^{-3}$	$0,44 \times 10^{-3}$
$\phi$	fração	0,15	0,15
Permeabilidade horiz.	m <sup>2</sup>	$9,87 \times 10^{-15}$	$9,87 \times 10^{-15}$
Permeabilidade vert.	m <sup>2</sup>	$9,87 \times 10^{-15}$	$9,87 \times 10^{-15}$
Raio dos poços	m	0,10	0,10
Vazão máxima de produção	m <sup>3</sup> /dia	$80,00 \times 10^3$ (gás)	50,00 (óleo)
Pressão de fluxo mínima na produção $p_{wf}$	MPa	6,89	6,89
Temperatura de separação na superfície	°K	288,71	288,71
Pressão de separação na superfície	KPa	101,35	101,35

Tabela 8.3: Dados de reservatório e de produção para as simulações de depleção

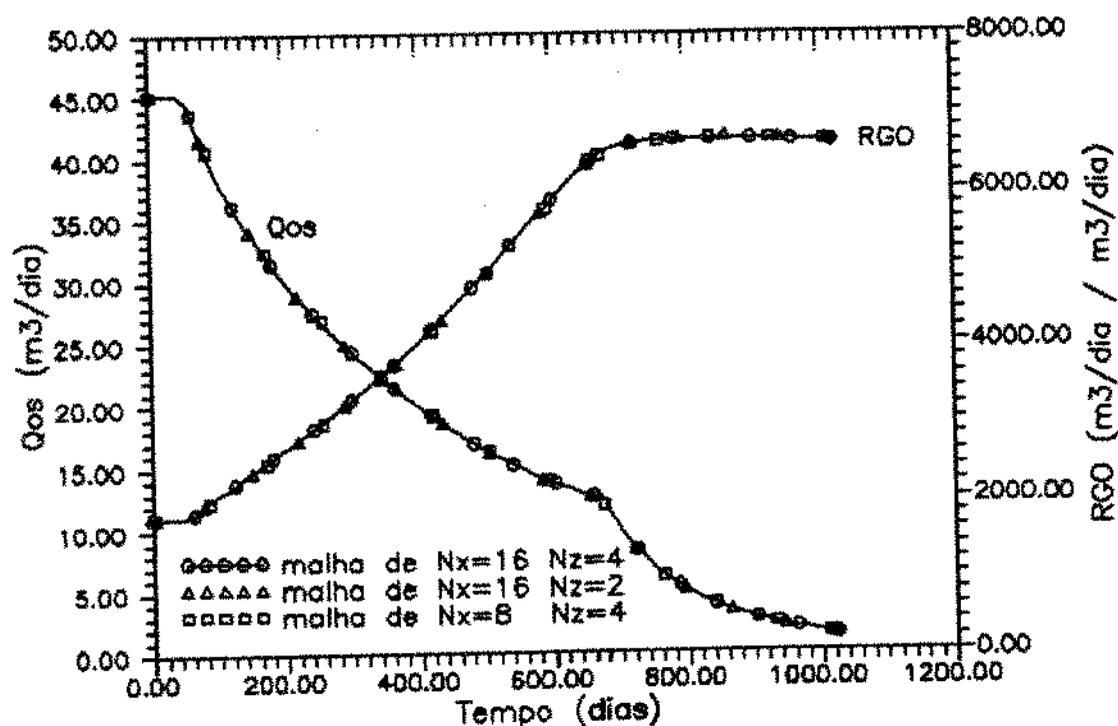


Figura 8.5: Vazão de óleo e razão gás óleo x tempo, depleção em reservatório de gás retrógrado

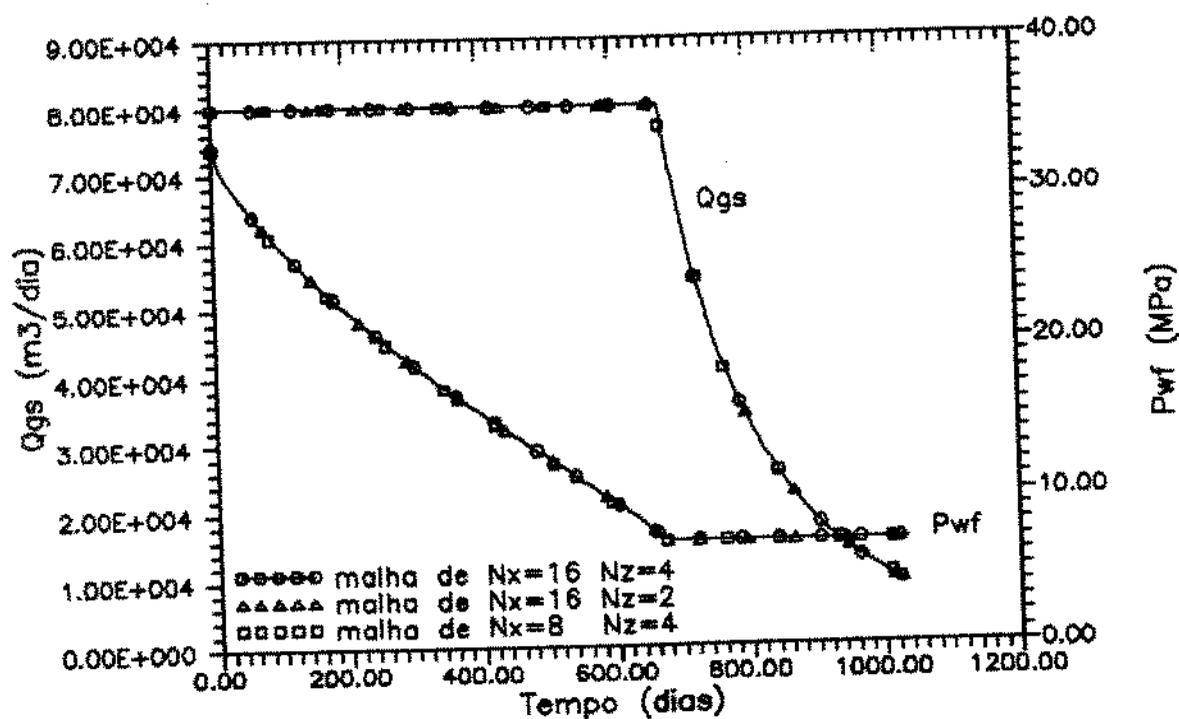


Figura 8.6: Vazão de gás e pressão de fluxo x tempo, depleção em reservatório de gás retrógrado

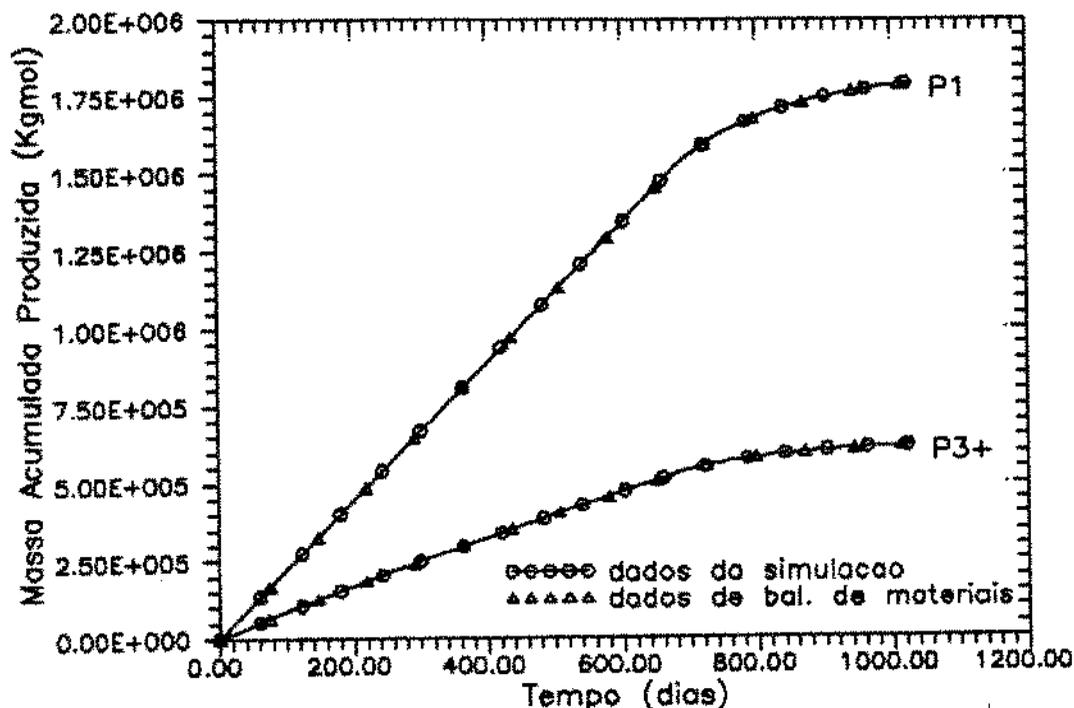


Figura 8.7: Produção mássica acumulada dos pseudo componentes P1 e P3+, depleção em reservatório de gás retrógrado

As simulações do caso h, reservatório de óleo, são resumidas nas figuras (8.8), (8.9) e (8.10). No gráfico (8.8) são mostrados os dados de vazão de óleo e de razão gás óleo como função do tempo. Nesta figura nota-se nitidamente o efeito provocado pelo uso de diferentes malhas de simulação, efeito este que se acentua quando a variação ocorre no número de camadas verticais. Com efeito, a RGO na malha de 16x2, apresenta valores muito superiores aos das demais malhas, 16x4 e 8x4, estes semelhantes entre si. Essa diferença de comportamento pode ser atribuída ao menor grau de segregação gravitacional que ocorre na malha com apenas duas camadas, fato que leva a uma produção mais acelerada do gás gerado ao longo da depleção do reservatório. Observe-se que a vazão de óleo

também sofre com a perda prematura do gás: seu declínio torna-se mais agudo em relação aos demais casos. A figura (8.9) ilustra a afirmação anterior, nela são mostradas a vazão de gás e a pressão de fluxo com o tempo.

Por fim, o gráfico (8.10) apresenta as produções mássicas acumuladas do componente P1 e da soma dos componentes P3 a P6 (apenas para a malha de 16x4). Como no caso anterior - reservatório de gás - aqui também se atingiu uma perfeita coerência entre os dados obtidos a partir das vazões molares ao longo do tempo ("dados da simulação") com aqueles gerados por balanço de materiais nas células da malha.

Finalizando, a tabela (8.4) apresenta uma síntese das variáveis que retratam o desempenho computacional dos casos simulados neste item. O computador usado foi o já mencionado IBM 3090 disponível no Centro de Pesquisas da PETROBRÁS. Observe-se que o rendimento aqui alcançado, operando em geometria cartesiana, foi muito superior ao conseguido antes em simulações com geometria radial.

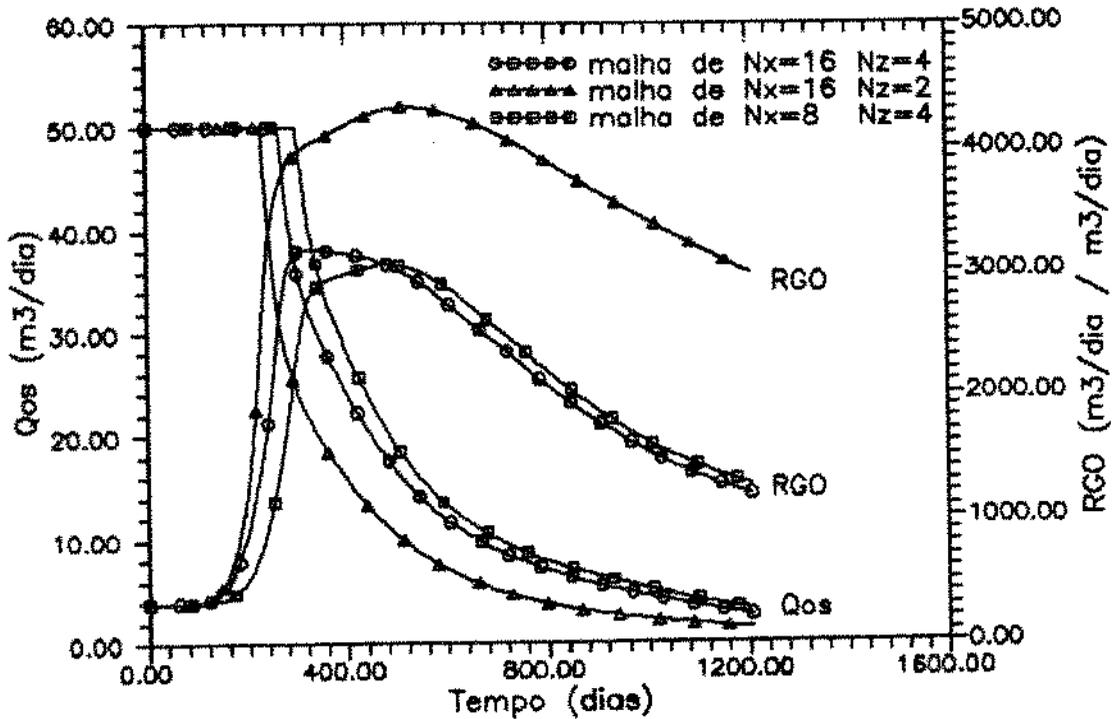


Figura 8.8: Vazão de óleo e razão gás óleo x tempo, depleção em reservatório de óleo volátil

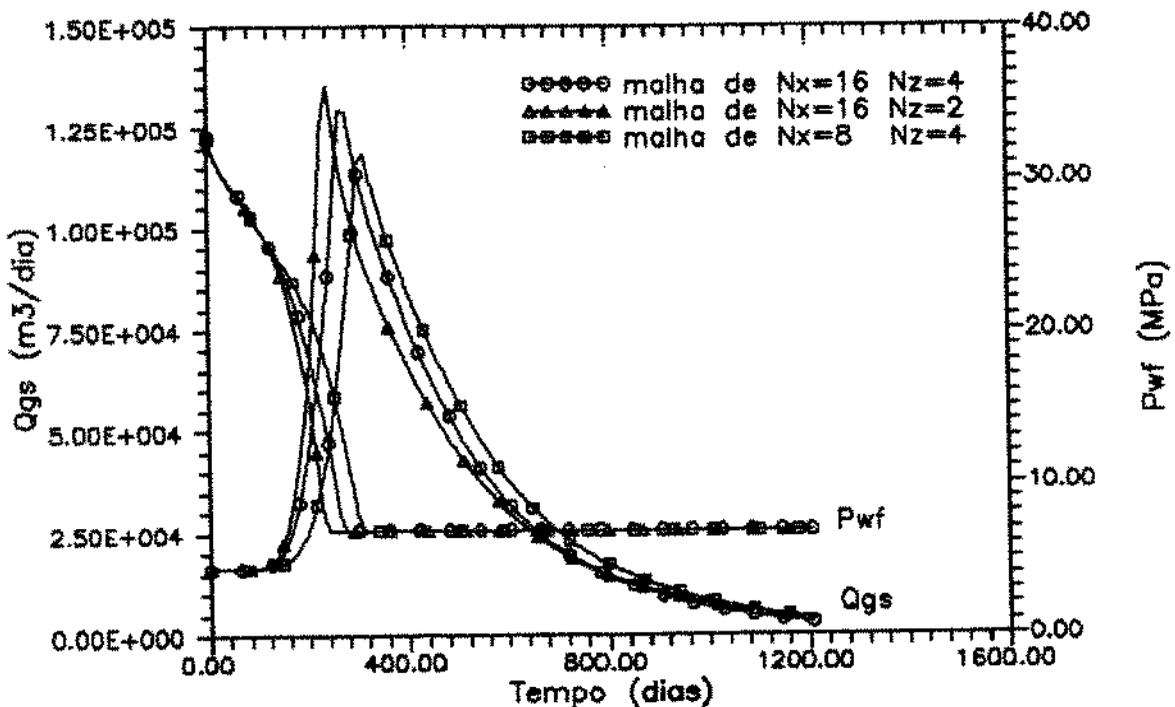


Figura 8.9: Vazão de gás e pressão de fluxo x tempo, depleção em reservatório de óleo volátil

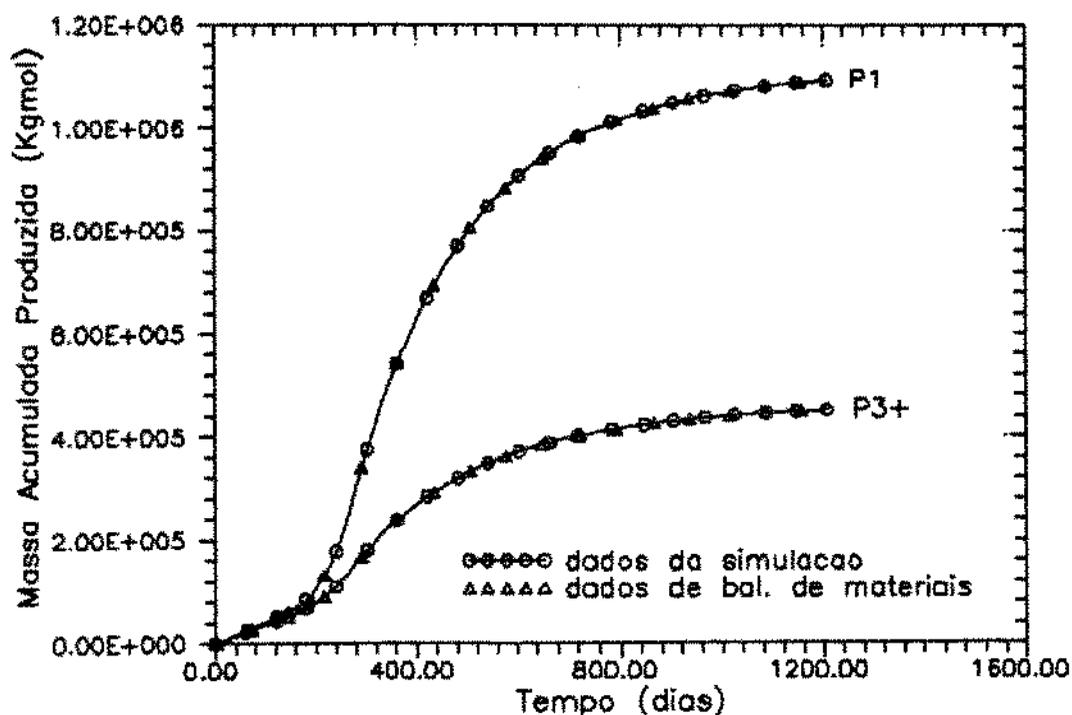


Figura 8.10: Produção mássica acumulada dos pseudo componentes P1 e P3+, depleção em reservatório de óleo volátil

Variável	Malha	Caso g Reserv. de gás	Caso h Reserv. de óleo
Tempo de processamento (min)	16x4	5,753	10,069
	16x2	1,599	2,995
	8x4	1,737	3,289
Período simulado (dias)	16x4	1033	1200
	16x2	1034	1200
	8x4	1041	1200
Número de passos de tempo acumulados	16x4	203	346
	16x2	148	259
	8x4	130	240
Número de iterações acumuladas	16x4	780	1361
	16x2	540	1004
	8x4	481	905
Passo de tempo $\Delta t$ médio (dias)	16x4	5,087	3,487
	16x2	6,987	4,663
	8x4	8,005	5,035

Tabela 8.4: Dados de desempenho computacional das simulações de depleção

### 8.3 Simulação de Produção de Reservatórios com Ciclagem de Gás

As últimas aplicações do modelo destinaram-se ao estudo do comportamento de reservatórios de gás retrógrado e de óleo volátil com produção assistida por injeção de gás. Visando isolar os efeitos deste método de recuperação, seus resultados foram comparados com os que seriam obtidos em uma depleção natural equivalente. Consideraram-se as seguintes situações:

- i) reservatório de gás retrógrado sujeito à injeção de gás com duas composições diferentes, referidas como gás 1 e gás 2;
- j) reservatório de óleo volátil submetido à injeção do gás 2;

A composição dos gases 1 e 2 é apresentada na tabela (8.5). A formulação do gás 1 é idêntica a da fase vapor, gerada nas condições de pressão e de temperatura de separação em superfície, a partir do gás retrógrado original. A formulação do gás 2, por sua vez, foi adotada como sendo a do efluente rejeitado de um processo (hipotético) de extração das frações mais ricas do gás produzido.

Pseudo Componente	Fluido Injetado	
	Gás 1	Gás 2
P1	0,652424	0,880000
P2	0,156151	0,120000
P3	0,178949	0,000000
P4	0,012473	0,000000
P5	0,000003	0,000000
P6	0,000000	0,000000

Tabela 8.5: Composição dos gases injetados nas ciclagens

A curva de permeabilidade relativa gás óleo obtida por embebição [45] foi usada nas simulações de reservatórios de gás. Nos de óleo empregou-se a curva de  $Kg/Ko$  por drenagem [46] (figura (7.3)). Admitiu-se a fase água como imóvel.

As malhas de simulação foram construídas com 12 células ao longo do eixo x e com 3 camadas na direção z. Os poços de produção e de injeção, posicionados nas extremidades da jazida, admitiram fluxo pelas células (1,1) e (12,3), respectivamente. Os outros parâmetros de simulação repetem os usados nas simulações de validação (linear) e de depleção - tabela (7.4) - a menos das dimensões da malha. Os dados de reservatório e de produção são mostrados na tabela (8.6).

Os resultados de vazão de óleo na superfície e de razão gás óleo (RGO) para o caso i, reservatório de gás, são mostrados na figura (8.11). Como se observa, a injeção dos gases 1 e 2 proporcionou desempenhos muito semelhantes, com pequena vantagem para o gás 2, o de composição mais pobre. Os resultados da depleção equivalente também são mostrados na figura (8.11), servindo como ponto de referência.

A figura (8.12) apresenta a produção mássica acumulada da soma dos pseudo componentes de P3 a P6 em função do tempo, ainda para o reservatório de gás (caso i). Como feito anteriormente nos casos de depleção, registram-se nesse gráfico tanto os "dados da simulação" quanto os obtidos por balanço de materiais, conseguindo-se, novamente, um perfeito ajuste entre ambas as metodologias. Observe-se ainda que os valores ali mostrados são "líquidos", ou seja, descontam a massa dos componentes que tenham sido eventualmente reinjetados no reservatório. A interpretação dos resultados leva a conclusões

até certo ponto surpreendentes, apesar de válidas apenas para o período simulado de 600 dias, relativamente curto. A ciclagem com o gás 1, por exemplo, mostrou o pior rendimento, facilmente justificável pelo fato de que a composição desse fluido contém teores razoáveis do componente P3. Assim, parte da massa produzida de P3 não pode ser contabilizada uma vez que é reintroduzida na jazida. A ciclagem com o gás 2, que não contém componentes nobres em sua formulação, apresentou a melhor eficiência de recuperação mássica, apesar de ter se mostrado pouco superior à depleção equivalente. Esse comportamento, a primeira vista anômalo, mostra que as vazões mais expressivas de óleo obtidas na ciclagem, em relação às da depleção, não são suficientes para sustentar uma produção mássica muito superior à alcançada nesta última. Ou seja, a maior vazão de gás fornecida na depleção consegue, ao menos no curto prazo, gerar quase a mesma quantidade de produtos nobres. Esse julgamento certamente se modificaria, a favor da ciclagem, num tempo de exploração da jazida maior que o simulado. Essas observações levam a importante conclusão de que as avaliações econômicas dos métodos de recuperação, ao menos para reservatórios de gás retrógrado e de óleo volátil, devem basear-se preferencialmente nas produções mássicas. Aliás esta é uma das próprias razões de ser da simulação composicional.

Os resultados para o caso j, reservatório de óleo volátil, estão ilustrados nas figuras (8.13), (8.14) e (8.15). O gráfico (8.13), que apresenta a vazão de óleo e a RGO em função do tempo, não deixa dúvidas quanto ao melhor desempenho, ao menos em termos de volume de óleo produzido, do reservatório sujeito à injeção de gás.

Parâmetro	Unidade	Fluido Inicial no Reservatório	
		Gás Retrógrado	Óleo Volátil
Extensão na direção x	m	1200	1200
Extensão na direção z	m	20	20
Extensão na direção y	m	200	200
Topo do reservatório (horizontal)	m	-2490,00	-2490,00
Pressão inicial do reservatório	MPa	34,47 a -2500,00 m	31,03 a -2500,00 m
Temp. do reservatório	°K	422	422
$S_{wi}$	fração	0,20	0,20
$C_r$	Pa <sup>-1</sup>	$0,44 \times 10^{-3}$	$0,44 \times 10^{-3}$
$\phi$	fração	0,15	0,15
Permeabilidade horiz.	m <sup>2</sup>	$9,87 \times 10^{-15}$	$9,87 \times 10^{-15}$
Permeabilidade vert.	m <sup>2</sup>	$9,87 \times 10^{-15}$	$9,87 \times 10^{-15}$
Raio dos poços	m	0,10	0,10
Vazão máxima de produção	m <sup>3</sup> /dia	$80,00 \times 10^3$ (gás)	60,00 (óleo)
Vazão de injeção de gás (constante)	m <sup>3</sup> /dia	$40,00 \times 10^3$	$30,00 \times 10^3$
Pressão de fluxo $p_{wf}$ mínima na produção	MPa	6,89	6,89
Temperatura de separação na superfície	°K	288,71	288,71
Pressão de separação na superfície	KPa	101,35	101,35

Tabela 8.6: Dados de reservatório e de produção para as simulações de ciclagem

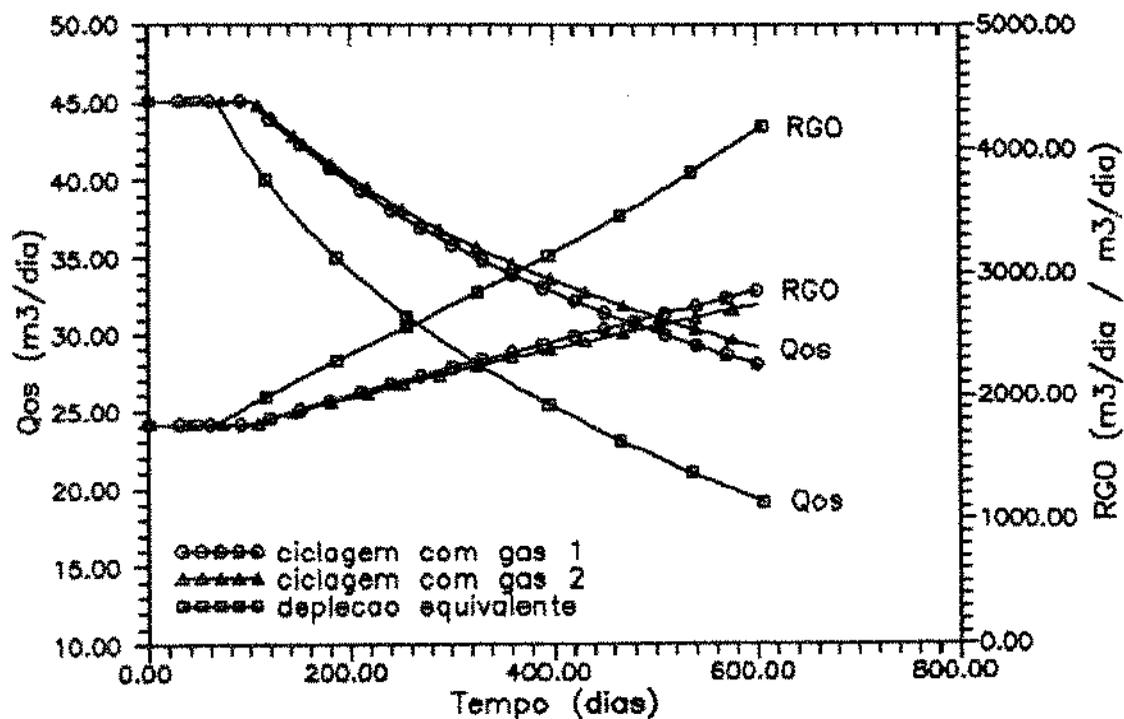


Figura 8.11: Vazão de óleo e razão gás óleo x tempo, ciclagem em reservatório de gás retrógrado

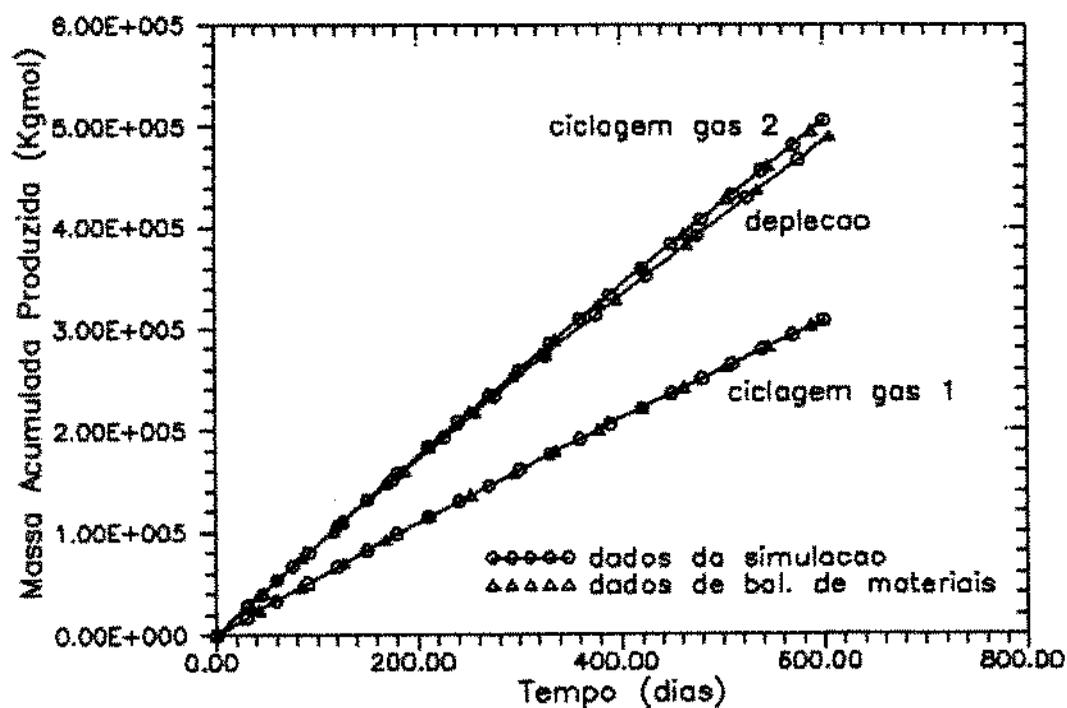


Figura 8.12: Produção mássica acumulada dos pseudo componentes P3+, ciclagem em reservatório de gás retrógrado

A figura (8.14), por sua vez, mostra a vazão de gás em função do tempo. Finalmente, o gráfico (8.15) contém os resultados de produção mássica acumulada da soma dos pseudo componentes de P3 a P6 (obtidos na simulação e por balanço de materiais). Como se observa, o desempenho do reservatório sob ciclagem mantém-se abaixo do obtido na depleção natural por um longo período de tempo. Entretanto, quando sua vazão de gás passa a crescer, a produção dos componentes ricos ganha novo impulso terminando por superar, com grande vantagem, aquela gerada no reservatório depletivo. Esse comportamento reforça a conclusão formulada logo acima quanto a importância da análise das produções mássicas.

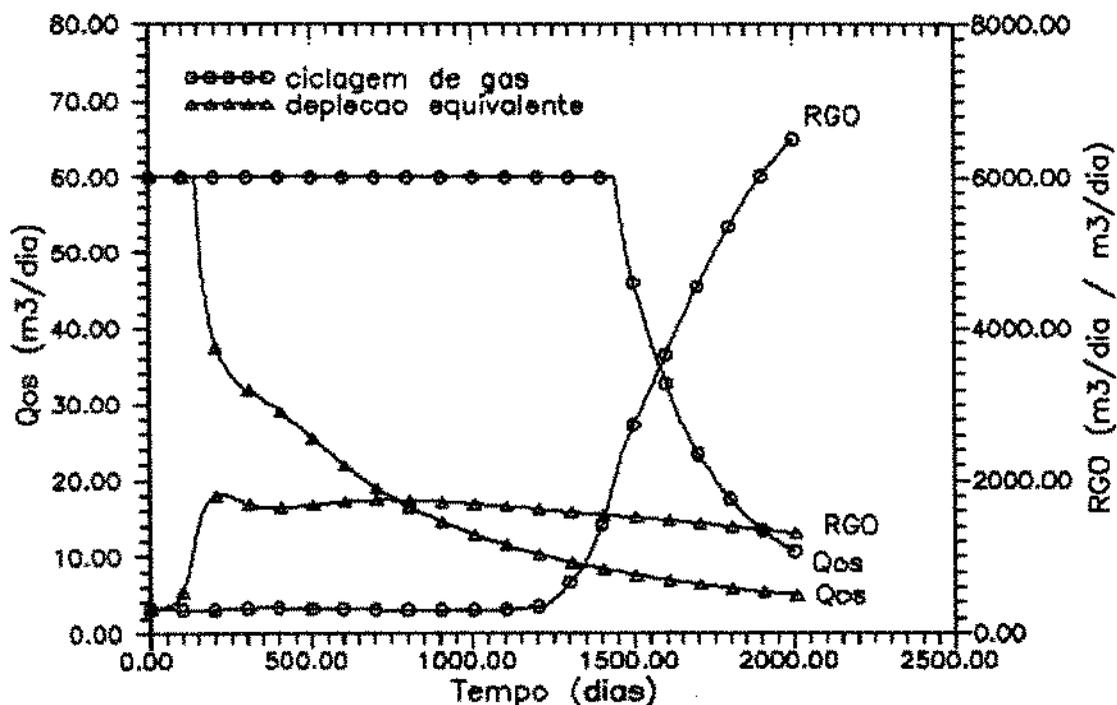


Figura 8.13: Vazão de óleo e razão gás óleo x tempo, ciclagem em reservatório de óleo volátil

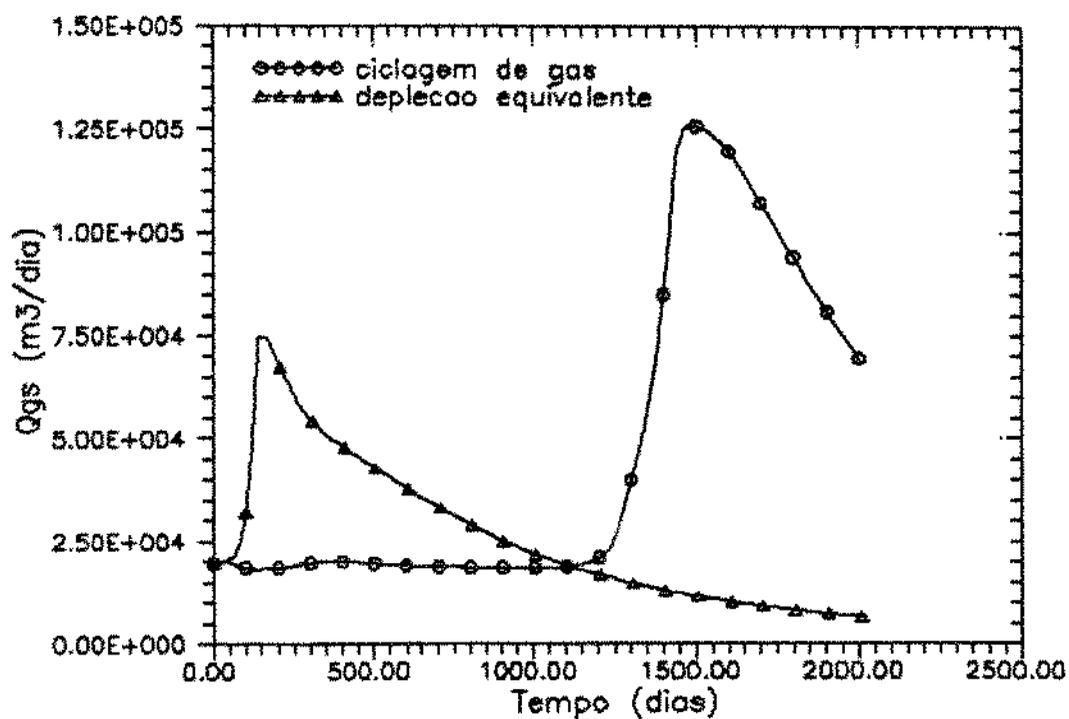


Figura 8.14: Vazão de gás x tempo, ciclagem em reservatório de óleo volátil

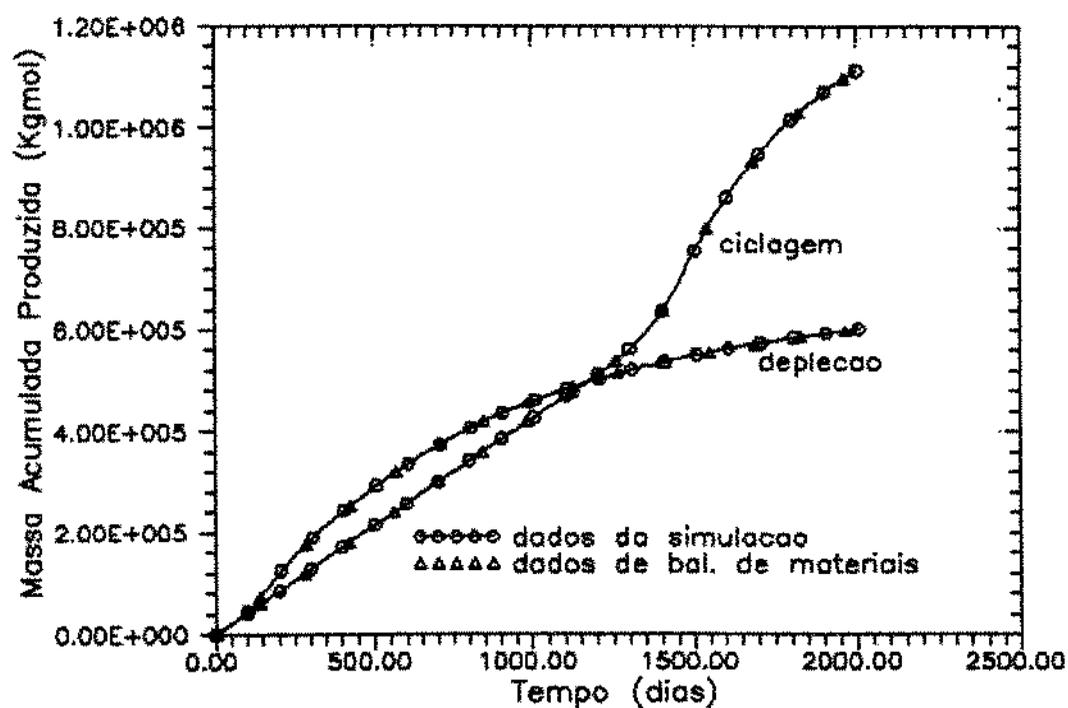


Figura 8.15: Produção mássica acumulada dos pseudo componentes P3+, ciclagem em reservatório de óleo volátil

Conclui-se a apresentação dos casos de ciclagem com o relato dos dados de desempenho computacional, expostos na tabela (8.7). O computador usado, como nos demais casos, foi o IBM 3090 instalado no Centro de Pesquisas da PETROBRÁS.

Variável	Caso i: Reservatório de Gás Retrógrado			Caso j: Reservatório de Óleo	
	Injeção do gás 1	Injeção do gás 2	Depleção equiv.	Injeção do gás 2	Depleção equiv.
Tempo de processamento (min)	8,851	7,576	1,023	19,157	3,436
Período simulado (dias)	600	600	600	2000	2000
No. de passos de tempo acumulados	496	411	76	1219	274
No. de iterações acumuladas	2093	1993	287	5150	918
No. médio de iter. por passo	4,220	4,849	3,776	4,225	3,350
Passo de tempo $\Delta t$ médio (dias)	1,211	1,462	7,977	1,641	7,325

Tabela 8.7: Dados de desempenho computacional nas simulações de ciclagem

É interessante observar na tabela acima a queda de rendimento da simulação nos casos em que há injeção de gás. Isto se deve ao maior esforço dispendido na resolução das equações de equilíbrio de fases, uma vez que as variações composicionais nos fluidos são mais intensas nos casos em que há injeção de gás.

## 9. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O trabalho apresentado descreve um modelo de reservatórios com tratamento composicional do escoamento e do equilíbrio de fases dos fluidos presentes em meio poroso. A solução do sistema de equações, baseada no método de Newton Raphson, adotou uma abordagem implícita na pressão e nas saturações de fluidos e explícita nas variáveis composicionais, ainda que apenas nos termos de fluxo das equações de transporte. Esse procedimento se altera nas células cujo fluido se encontra na chamada região de fase única, passando a totalmente implícito em uma variável composicional e deixando de considerar a saturação de gás como incógnita.

A razão de ser dessa formulação está ligada ao fato de que a matriz jacobiana resultante, de estrutura bastante particular, é suscetível de redução a uma matriz blocada de três por três semelhante àquelas obtidas em simuladores do tipo "black-oil" trifásicos totalmente implícitos.

Nos cálculos de equilíbrio e de densidades das fases hidrocarbonetos utilizou-se a equação de estado de Peng e Robinson modificada por Jhavery e Youngren. A concepção do modelo, porém, é geral, permitindo sua adaptação ao uso de qualquer outra equação de estado.

A implementação do modelo, escrito para geometrias cartesiana e cilíndrica em até duas dimensões, contemplou os efeitos capilares e gravitacionais mas desconsiderou os fenômenos de natureza difusiva. Uma hipótese importante admitida diz respeito ao estabelecimento instantâneo de equilíbrio termodinâmico entre as fases líquida e vapor

geradas. Em outra simplificação aceitou-se que a fase aquosa, apesar de móvel, não desenvolve interação em termos de solubilidade com as demais fases hidrocarbonetos.

O tratamento dos termos fonte, parcialmente explícito, considerou os fluidos produzidos a nível de superfície e permitiu a existência de poços operando por mais de uma camada.

A validação do modelo, baseada na teoria do escoamento bifásico em regime permanente, demonstrou perfeito ajuste entre os resultados teóricos e simulados, tanto para reservatórios de gás retrógrado quanto de óleo volátil, e em geometrias cartesianas e radial.

As aplicações a testes de pressão em poços apontaram a importância dos dados de permeabilidade relativa no sistema físico estudado. Com efeito, essa variável influencia a deposição de condensado nos reservatórios de gás retrógrado, fato que pode gerar profundas alterações na composição do fluido nas vizinhanças dos poços. Os distúrbios provocados chegam a descaracterizar o fluido inicial, um gás, a ponto deste passar a se comportar como um líquido volátil. São notáveis as consequências do fenômeno na avaliação de poços. Poços danificados foram igualmente estudados, obtendo-se as respostas de pressão de fluxo esperadas.

Nas demais aplicações, relacionadas à depleção natural e assistida por injeção de gás (ciclagem), estudaram-se os efeitos da discretização da malha e da composição do gás injetado na resposta do simulador. Entre as conclusões obtidas a mais interessante indicou a relevância da análise das produções mássicas dos componentes. Esses dados se mostraram tão ou mais importantes que os de vazão volumétrica para uma

correta avaliação econômica de jazidas de gás retrógrado ou de óleo volátil.

Os resultados de desempenho computacional, fornecidos para toda as simulações, demonstraram valores muito diferentes para os casos de geometria cartesiana, considerados satisfatórios, em relação aos de geometria cilíndrica onde o rendimento, a primeira vista, mostrou-se menos eficiente. Conclusões definitivas, entretanto, não são possíveis uma vez que não se dispõe de parâmetros para comparação. De toda forma, pode-se concluir que a formulação concebida nesse trabalho mostrou-se plenamente viável e satisfatória no seu desempenho global.

Uma primeira sugestão para extensão do trabalho ora desenvolvido, decorrente dos comentários feitos acima, é o de se cotejar os desempenhos desta formulação com os de uma totalmente implícita e implícita na pressão (do tipo IMPES).

Outra importante sugestão de estudo se refere a otimização dos métodos numéricos de cálculo de equilíbrio de fases, quais sejam, de liberação "flash" e de pressão de saturação. Esse problema, apesar de muito explorado na literatura, ainda não pode ser considerado resolvido, em especial quando a condição de pressão e de temperatura do fluido em questão é próxima ao ponto crítico. A aproximação adotada neste trabalho, um procedimento híbrido entre os métodos de substituição sucessiva e de Newton Raphson, se por um lado mostrou algumas virtudes, por outro é passível de muitas melhorias visando torná-lo mais robusto.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Arps, J.J., "Analysis of Decline Curves", *Trans., AIME* (1945), 160, 228-47.
- [2] Amix, J.W., Bass, D.M. & Whiting, R.L., *Petroleum Reservoir Engineering-Physical Properties*, New York, McGraw Hill Book Company, 1960.
- [3] Coats, K.H., "Reservoir Simulation: State-of-the-Art", Society of Petroleum Engineers, SPE 10020, 1982.
- [4] Aziz, K. & Settari, A., *Petroleum Reservoir Simulation*, London, Applied Science Pub., 1979.
- [5] Wong, T.W. et alii., "A Comparison of Two Approaches to Compositional and Black Oil Simulation", Society of Petroleum Engineers, SPE 15999, 1987.
- [6] Coats, K.H., "An Equation of State Compositional Model", *Soc. Pet. Eng. J.*, (outubro 1980) 363-376.
- [7] Peng, D.Y. & Robinson, D.B., "A New Two-Constant Equation of State", *I.&E.C. Fundamentals*, (1976), 15, No.1, 59-64.
- [8] Kazemi, H. & Vestal, C.R., "An Efficient Multicomponent Numerical Simulator", Society of Petroleum Engineers, SPE 6890, 1977.
- [9] Fussel, L.T. & Fussel, D.D., "An Iterative Technique for Compositional Reservoir Simulator", Society of Petroleum Engineers, SPE 6891, 1979.
- [10] Redlich, O. & Kwong, J.N.S., "On the Thermodynamics of Solutions V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions", *Chem. Rev.*, (1949) 44-233.
- [11] Nghiem, L.X., Fong, D.K. & Aziz, K., "Compositional Modeling With an Equation of State", *Soc. Pet. Eng. J.*, (dezembro 1984) 687-698.

- [12] Mansoori, J., "Discussion of Compositional Modeling With an Equation of State", *Soc. Pet. Eng. J.*, (abril 1982) 202-203.
- [13] Nghiem, L.X., "Author's Reply to Discussion of Compositional Modeling an With Equation of State", *Soc. Pet. Eng. J.*, (abril 1982) 204.
- [14] Shiozer, D.J., "Estudo de um Modelo Composicional para Simulação de Reservatórios", Tese de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, junho 1989.
- [15] Watts, J.W., "A Compositional Formulation of the Pressure and Saturation Equation", Society of Petroleum Engineers, SPE 12244, 1983.
- [16] Acs, G., Doleschall, S. & Farkas, E., "General Purpose Compositional Model", *Soc. Pet. Eng. J.*, (agosto 1985) 543-533.
- [17] Coats, K.H. , "Simulation of Gas Condensate Reservoir Performance", *J. Pet. Tech.*, (outubro 1985) 1870-1886.
- [18] Coats, K.H. & Smart, G.T., "Application of a Regression-Based EOS PVT Program to Laboratory Data", *Soc. Pet. Eng. R.E.*, (maio 1986) 277-299.
- [19] Nutakki, R. et alii., "Development of General Purpose Simulators. Part 2: Use of Equations of State to Calculate Derivatives Required in Compositional Models", Stanford University, Stanford, California, julho 1985.
- [20] Quandalle, P. & Savary, D., "An Implicit in Pressure and Saturations Approach to Fully Compostional Simulation", Society of Petroleum Engineers, SPE 18423, 1989.
- [21] Quandalle, P. & Sabathier, J.C., "Typical Features of a New Multipurpose Reservoir Simulator", Society of Petroleum Engineers, SPE 16007, 1987.

- [22] Garza, F.R., "Notas de Aula da Cadeira de Comportamento de Reservatório", Curso de Mestrado em Engenharia de Petróleo, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, setembro 1989.
- [23] Pedrosa, O., "Use of Hybrid Grid Reservoir Simulation", Tese de Doutorado, Universidade de Stanford, Stanford, dezembro 1984.
- [24] Edminster, W.C. & Lee, B.I., *Applied Hydrocarbon Thermodynamics*, Houston, Gulf Publishing Co., 1984.
- [25] Leverett, M.C., "Capillary Behaviour in Porous Solids", *Trans AIME* (1941) 142-152.
- [26] Sherman, A.H., "NSPIV, A Fortran Subroutine for Sparse Gaussian Elimination With Partial Pivoting", *ACM Trans. Math. Software*.
- [27] Peaceman, D.W., *Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*, Amsterdam, Elsevier, 1977.
- [28] Wheaton, R.J., "Treatment of Variations of Composition With Depth in Gas Condensate Reservoirs", *Society of Petroleum Engineers, SPE* 18267, 1988.
- [29] Firoozabadi, A., "Reservoir-Fluid Phase Behavior and Volumetric Prediction With Equations of State", *J. Pet. Tech.*, (abril 1988) 397-405.
- [30] Soave, G., "Equilibrium Constants From a Modified Redlich Kwong Equation of State", *Chemical Eng. Science*, (1972) 27 1197-1203.
- [31] Firoozabadi, A. et. alii., "EOS Predictions of Compressibility and Phase Behavior in Systems Containing Water, Hydrocarbons and CO<sub>2</sub>", *Soc. Pet. Eng. R.E.*, (maio 1988) 673-684.
- [32] Katz, D.L. & Firoozabadi, A., "Predicting Phase Behavior of Condensate/Crude-Oil Systems Using Methane Interaction Coefficients", *J. Pet. Tech.*, (novembro 1978) 1649-1655.

- [33] Pénéoux, A., Rauzy, E. & Fréze, R., "A Consistent Correction for Redlich-Kwong-Soave Volumes", *Fluid Phase Equilibria*, (1982) 8 7-23.
- [34] Jhavery, B.S. & Youngren, G.K., "Three-Parameter Modification of the Peng-Robinson Equation of State to Improve Volumetric Predictions", Society of Petroleum Engineers, SPE 13118, 1984.
- [35] Alani, G.H. & Kennedy, H.T., "Volume of Liquid Hydrocarbons at High Temperatures and Pressures", *Trans., AIME* (1960) 219 288-292.
- [36] Lohrenz, J., Bray, B.G. & Clark, C.R., "Calculating Viscosities of Reservoir Fluids From Their Compositions", *J. Pet. Tech.*, (agosto 1964) 1171-1176.
- [37] Carr, N.L., Kobayashi, K. & Burrows, D.B., "Viscosity of Hydrocarbons Gases Under Pressure", *Trans.*, (AIME) (1954) 201, 270.
- [38] Lee, A.L. & Gonzalez, M.H., "The Viscosity of Natural Gases", *J. Pet. Tech.*, (agosto 1966) 997-1000.
- [39] Baron, J.D., Roof, J.G. & Wells, F.W., "Viscosity of Nitrogen, Methane, Ethane and Propane at Elevated Temperature and Pressure", *Jour. Chem. Eng. Data*, (1959) 4, 283.
- [40] Fussel, D.D. & Yanosik, J.L., "An Iterative Sequence for Phase-Equilibria Calculations Incorporating the Redlich-Kwong Equation of State", *Soc. Pet. Eng. J.*, (junho 1978) 173-182.
- [41] Nghiem, L.X., Aziz, K. & Li, Y.K., "A Robust Iterative Method for Flash Calculations Using the Soave-Redlich-Kwong or the Peng-Robinson Equation of State", *Soc. Pet. Eng. J.*, (junho 1983) 521-528.

- [42] Jones, J.R. & Raghavan, R., "Interpretation of Flowing Well Response in Gas-Condensate Wells", *Soc. Pet. Eng. F.E.*, (setembro 1988) 578-594.
- [43] Chopra, A.K. & Carter, R.D., "Proof of the Two-Phase Steady-State Theory for Flow Through Porous Media", *Soc. Pet. Eng. F.E.*, (dezembro 1986) 603-608.
- [44] Gomes, H.P., "Modelo Composicional com Formulação Totalmente Implícita", Tese de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, novembro 1990.
- [45] Chopra, A.K., "Transient and Steady-State Aspects of Gas Condensate Well Performance", *Pet. Soc. of CIM Preprint Paper* no. 88-39-42.
- [46] Branco, C.C.M. & Coelho, S.L.P.F., "Testes de Permeabilidade Relativa Água-Óleo, Gás-Óleo e Óleo-Gás em Amostras de Testemunho do Poço 3-RNS-85 Campo de Pescada", PETROBRÁS, CENPES, Comunicação Técnica DIGER-091/87, novembro 1987.
- [47] Hawkins, M. F., "A Note on the Skin Effect", *Trans., AIME* (1956) 356-357.

## APÊNDICE A - DEDUÇÃO DAS EQUAÇÕES DO EQUILÍBRIO DE FASES

Neste apêndice apresentam-se os detalhes da clássica dedução [24] das condições termodinâmicas que regulam o equilíbrio de fases. Partindo-se de um sistema homogêneo fechado, a primeira lei da termodinâmica na sua forma diferencial enuncia que:

$$dU = dQ + dW \quad (A.1)$$

A variação infinitesimal de trabalho reversível  $dW$  pode ser expressa por:

$$dW = -pdV \quad (A.2)$$

A segunda lei da termodinâmica - processo reversível - por sua vez, fornece:

$$dQ = TdS \quad (A.3)$$

Combinando (A.2) e (A.3) em (A.1) obtém-se:

$$dU = TdS - pdV \quad (A.4)$$

Por definição a entidade entalpia  $H$  é:

$$H = U + pV \quad (A.5)$$

A diferencial de (A.5) leva a:

$$dH = dU + pdV + Vdp \quad (A.6)$$

Substituindo (A.4) em (A.6) obtém-se:

$$dH = TdS + Vdp \quad (A.7)$$

Define-se ainda a energia livre de Gibbs  $G$  por:

$$G = H - TS \quad (\text{A.8})$$

Cuja diferencial fica:

$$dG = dH - TdS - SdT \quad (\text{A.9})$$

Usando (A.7) em (A.9) obtém-se:

$$dG = -SdT + Vdp \quad (\text{A.10})$$

As importantes relações (A.4), (A.7) e (A.10), obtidas para um sistema homogêneo fechado, podem ser reescritas para um sistema homogêneo aberto como abaixo:

$$dU = TdS - pdV + \sum_{m=1}^{n_c} \left( \frac{\partial U}{\partial n_m} \right)_{S,V,n_{j,j \neq m}} dn_m \quad (\text{A.11})$$

$$dH = TdS + Vdp + \sum_{m=1}^{n_c} \left( \frac{\partial H}{\partial n_m} \right)_{T,V,n_{j,j \neq m}} dn_m \quad (\text{A.12})$$

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{m=1}^{n_c} \left( \frac{\partial G}{\partial n_m} \right)_{T,P,n_{j,j \neq m}} dn_m \quad (\text{A.13})$$

Onde  $n_m$  é o número de moles do componente  $m$  na mistura.

A derivada parcial  $\left( \frac{\partial U}{\partial n_m} \right)_{S,V,n_{j,j \neq m}}$  é chamada de potencial químico  $\xi$  do componente  $m$ :

$$\xi_m = \left( \frac{\partial U}{\partial n_m} \right)_{S,V,n_{j,j \neq m}} \quad (\text{A.14})$$

Combinando as equações (A.4), (A.10), (A.11) e (A.13) prova-se que o potencial químico também pode ser definido por:

$$\xi_m = \left( \frac{\partial G}{\partial n_m} \right)_{T, P, n_j, j \neq m} \quad (\text{A.15})$$

Um sistema heterogêneo fechado, que no caso representaria um volume de controle no reservatório, pode ser encarado como um conjunto de subsistemas homogêneos abertos ou fases. Na situação de equilíbrio do sistema total não existem diferenças de potencial que induzam fluxo de massa ou de energia através das suas interfaces internas e assim cada um dos subsistemas passa a se comportar como sendo homogêneo fechado. O critério que contempla essa afirmação pode ser deduzido a partir das equações (A.11), (A.12) ou (A.13). Supondo que existam  $F$  fases e  $n_c$  componentes e usando-se a expressão (A.11) escreve-se:

$$\sum_{k=1}^F ds^k = 0 \quad (\text{A.16})$$

$$\sum_{k=1}^F dv^k = 0 \quad (\text{A.17})$$

$$\sum_{k=1}^F dn_m^k = 0 \quad m=1, 2, \dots, n_c \quad (\text{A.18})$$

As relações anteriores valem, visto que não ocorrem mudanças de propriedades no sistema total quando no estado de equilíbrio, ou seja, as somas de variações de entropia, volume e de número de moles de cada componente são nulas. Assim as equações (A.16), (A.17) e (A.18) podem ser rearranjadas para se

isolar as variações numa fase  $l$  particular em função das alterações ocorridas nas demais:

$$ds^l = \sum_{k=1, k \neq l}^F ds^k \quad (\text{A.19})$$

$$dv^l = \sum_{k=1, k \neq l}^F dv^k \quad (\text{A.20})$$

$$dn_m^l = \sum_{k=1, k \neq l}^F dn_m^k \quad m=1, 2, \dots, n_c \quad (\text{A.21})$$

Escrevendo-se agora a equação (A.11) para o sistema total de  $F$  fases onde uma delas - a fase  $l$  - está escrita em função das demais obtém-se:

$$dU = \left( T^l ds^l + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq l}}^F T^k ds^k \right) - \left( p^l dv^l + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq l}}^F p^k dv^k \right) + \sum_{m=1}^{n_c} \left( \xi_m^l dn_m^l + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq l}}^F \xi_m^k dn_m^k \right) = 0 \quad (\text{A.22})$$

Substituindo (A.19), (A.20) e (A.21) em (A.22) obtém-se:

$$dU = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq l}}^F (T^k - T^l) ds^k - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq l}}^F (p^k - p^l) dv^k + \sum_{m=1}^{n_c} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq l}}^F (\xi_m^k - \xi_m^l) dn_m^k = 0 \quad (\text{A.23})$$

Os termos referentes à fase  $k$  são linearmente independentes já que os da fase  $l$ , admitida como dependente, foram escritos em função daqueles. Assim para que se verifique a condição de equilíbrio posta em (A.23), qual seja de variação

nula da energia interna total do sistema, todos os termos em (A.23) devem ser identicamente nulos:

$$T^k - T^1 = 0 \quad k = 1, 2, \dots, F$$

$$\text{logo: } T^1 = T^2 = \dots = T^F \quad (\text{A.24})$$

$$p^k - p^1 = 0 \quad k = 1, 2, \dots, F$$

$$\text{logo: } p^1 = p^2 = \dots = p^F \quad (\text{A.25})$$

$$\xi_m^k - \xi_m^1 = 0$$

$$\text{logo: } \xi_m^1 = \xi_m^2 = \dots = \xi_m^F \quad m=1, 2, \dots, n_c \quad (\text{A.26})$$

As equações (A.24), (A.25) e (A.26) são os critérios para a existência de equilíbrio de fases.

Introduzindo agora o conceito de fugacidade  $f_m$  de um componente  $m$  em uma mistura, definido, para temperatura constante, por:

$$d\bar{G}_m = RT \, d \ln f_m \quad (\text{A.27})$$

Conceito que está sujeito à condição:

$$\lim_{p \rightarrow 0} f_m = p x_m \quad (\text{A.28})$$

Ou seja, em baixas pressões a fugacidade se confunde com a pressão parcial do componente. O termo  $\bar{G}_m$  na equação (A.27) denota uma propriedade molar parcial, no caso a energia livre

molar parcial de Gibbs, definida por:

$$\bar{G}_m = \left( \frac{\partial G}{\partial n_m} \right)_{T, P, n_j, j \neq m} = \xi_m \quad (\text{A.29})$$

Conceito que equivale ao de potencial químico apresentado em (A.14) e (A.15). Voltando à equação (A.27), esta pode ser integrada, à pressão e temperatura constantes, ao longo de  $n_m=1$  (componente puro) até um número  $n_m$  de moles qualquer:

$$\int_{\hat{G}_m}^{\bar{G}_m} d\bar{G}_m = \int_{\hat{f}_m}^{f_m} RT \, d \ln f_m$$

Que resulta em:

$$\bar{G}_m - \hat{G}_m = RT \left( \ln f_m - \ln \hat{f}_m \right) \quad (\text{A.30})$$

Onde  $\hat{G}_m$  e  $\hat{f}_m$  são propriedades do componente puro, funções apenas da pressão e da temperatura e independentes de fase. Logo, sendo  $\hat{G}_m$  e  $\hat{f}_m$  constantes, e como no equilíbrio a condição expressa em (A.26) qual seja:

$$\xi_m^1 = \xi_m^2 = \dots = \xi_m^F \quad m=1, 2, \dots, n_c$$

O que implica em:

$$\bar{G}_m^1 = \bar{G}_m^2 = \dots = \bar{G}_m^F \quad m=1, 2, \dots, n_c$$

Pois  $\bar{G}$  é igual a potencial químico  $\mu$ , de onde se obtém em conjunto com a equação (A.30) que:

$$f_m^1 = f_m^2 = \dots = f_m^F \quad m=1, 2, \dots, n_c \quad (\text{A.31})$$

Assim a igualdade de fugacidades de um componente  $m$  em uma mistura em cada uma das  $F$  fases de um sistema é uma

condição alternativa àquela vista em (A.26) para o equilíbrio de fases.

Finalizando, a fugacidade de um componente  $m$  em uma mistura, definida em (A.27) e (A.28), pode ainda ser escrita, como função de temperatura, volume e frações molares, através da equação [24]:

$$\ln \left( \frac{f_m}{p x_m} \right) = \frac{1}{R T} \int_{\infty}^V \left[ \frac{RT}{V} - \left( \frac{\partial p}{\partial n_m} \right)_{T, V, n_{j, j \neq m}} \right] dV - \ln Z$$

(A.32)

APÊNDICE B - DERIVADAS DAS EQUAÇÕES DE FLUXO E DE EQUILÍBRIO  
LÍQUIDO VAPOR

Neste Apêndice serão apresentadas algumas das derivadas das equações que compõem o modelo composicional e que constituem, portanto, os elementos da matriz jacobiana do sistema de equações. Por sua maior simplicidade iniciar-se-á com as expressões do equilíbrio líquido vapor, mostradas no item 3.2. Para uma célula genérica  $i,k$  elas são:

$$\left( f_{ml} - f_{mv} \right)_{i,k} = 0 \quad (B.1)$$

Onde  $m = 1, 2, \dots, n_c$ ;  $f_{ml}$  e  $f_{mv}$  são as fugacidades nas fases líquida e vapor do componente  $m$ . Como visto nos itens 4.3 e 4.4 essa equação só faz parte do sistema nas células na região de duas fases.

A expressão (B.1) será derivada apenas em relação ao vetor de variáveis primárias da própria célula  $i,k$ , ou seja:

$$\left( p_o, S_g, S_w, x_1, x_2, \dots, x_{n_c-1}, Y_2, Y_3, \dots, Y_{n_c} \right)_{i,k}$$

visto que a equação (B.1) não é dependente das variáveis das células vizinhas. Com o tratamento totalmente implícito adotado, as derivadas dessas equações são calculadas por:

$$\frac{\partial}{\partial p_{o_{i,k}}} \left( f_{ml} - f_{mv} \right)_{i,k} = \frac{\partial f_{ml_{i,k}}}{\partial p_{o_{i,k}}} - \frac{\partial f_{mv_{i,k}}}{\partial p_{o_{i,k}}} \quad (B.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial S_{g_{i,k}}} \left( f_{ml} - f_{mv} \right)_{i,k} = \frac{\partial}{\partial S_{w_{i,k}}} \left( f_{ml} - f_{mv} \right)_{i,k} = 0 \quad (B.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_{j,i,k}} \left( f_{ml} - f_{mv} \right)_{i,k} = \frac{\partial f_{ml,i,k}}{\partial x_{j,i,k}} \quad \text{para } j=1,2,\dots,n_c-1 \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{\partial}{\partial y_{j,i,k}} \left( f_{ml} - f_{mv} \right)_{i,k} = - \frac{\partial f_{mv,i,k}}{\partial y_{j,i,k}} \quad \text{para } j=2,3,\dots,n_c \quad (\text{B.5})$$

Note-se que em (B.4) e (B.5) o índice m se refere à equação do componente m enquanto j indica a variável independente sobre a qual se está derivando. As expressões das derivadas da fugacidade em relação à pressão e composição, obtidas via equação de estado de Peng e Robinson, estão detalhadas no Apêndice D.

As equações de fluxo discretizadas dos componentes hidrocarbonetos, como mostrado no item 4.1, para uma célula genérica i,k, tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \Delta \left[ \left( \alpha x_m^U \lambda_o^U \right) \Delta \left( p_o^{U+1} + \gamma_o^U \Delta z \right) + \left( \alpha y_m^U \lambda_g^U \right) \Delta \left( p_g^{U+1} + \gamma_g^U \Delta z \right) \right]_{i,k} = \\ & = \frac{V_{p,i,k}}{\Delta t} \left[ \left( 1 + c_r \Delta_t p_o \right) \left( x_m^{U+1} \rho_o^{U+1} S_o^{U+1} + y_m^{U+1} \rho_g^{U+1} S_g^{U+1} \right) + \right. \\ & \left. - \left( x_m^n \rho_o^n S_o^n + y_m^n \rho_g^n S_g^n \right) \right]_{i,k} + \left( q_o \rho_o x_m + q_g \rho_g y_m \right)_{i,k}^{U+1} \quad (\text{B.6}) \end{aligned}$$

Onde  $m=1,2,\dots,n_c$ . Além das equações acima, completa o modelo uma equação de balanço volumétrico para o componente água. Esta não será aqui considerada visto que suas derivadas são semelhantes às que serão demonstradas a seguir para os

componentes hidrocarbonetos. Fazendo uso da definição dos operadores de diferenças finitas no espaço "abre-se" a expressão (B.6) que adquire a - extensa - forma abaixo:

$$\begin{aligned}
 & \left[ \begin{array}{c} T_{o \times 2} \\ \uparrow \\ (\alpha \lambda_o) X_m \end{array} \right]_{i+1/2,k} \left[ \begin{array}{c} \text{pot}_{ox2} \\ \uparrow \\ p_{o_{i+1}} - p_{o_i} + \gamma_{o_{i+1/2}} (z_{i+1} - z_i) \end{array} \right]_k + \\
 & - \left[ \begin{array}{c} T_{o \times 1} \\ \uparrow \\ (\alpha \lambda_o) X_m \end{array} \right]_{i-1/2,k} \left[ \begin{array}{c} \text{pot}_{ox1} \\ \uparrow \\ p_{o_i} - p_{o_{i-1}} + \gamma_{o_{i-1/2}} (z_i - z_{i-1}) \end{array} \right]_k + \\
 & + \left[ \begin{array}{c} T_{g \times 2} \\ \uparrow \\ (\alpha \lambda_g) Y_m \end{array} \right]_{i+1/2,k} \left[ \begin{array}{c} \text{pot}_{gx2} \\ \uparrow \\ p_{g_{i+1}} - p_{g_i} + \gamma_{g_{i+1/2}} (z_{i+1} - z_i) \end{array} \right]_k + \\
 & - \left[ \begin{array}{c} T_{g \times 1} \\ \uparrow \\ (\alpha \lambda_g) Y_m \end{array} \right]_{i-1/2,k} \left[ \begin{array}{c} \text{pot}_{gx1} \\ \uparrow \\ p_{g_i} - p_{g_{i-1}} + \gamma_{g_{i-1/2}} (z_i - z_{i-1}) \end{array} \right]_k + \\
 & + \left[ \begin{array}{c} T_{o \times 2} \\ \uparrow \\ (\alpha \lambda_o) X_m \end{array} \right]_{i,k+1/2} \left[ \begin{array}{c} \text{pot}_{oz2} \\ \uparrow \\ p_{o_{k+1}} - p_{o_k} + \gamma_{o_{k+1/2}} (z_{k+1} - z_k) \end{array} \right]_i +
 \end{aligned}$$

(continua na próxima página)

$$\begin{aligned}
& - \left[ \overbrace{\left( \alpha \lambda_o \right) x_m}^{T_{oz1}} \right]_{i, k-1/2} \left[ \overbrace{p_o - p_{o_{k-1}} + \gamma_{o_{k-1/2}} (z_k - z_{k-1})}^{\text{pot}_{oz1}} \right]_i + \\
& + \left[ \overbrace{\left( \alpha \lambda_g \right) y_m}^{T_{gz2}} \right]_{i, k+1/2} \left[ \overbrace{p_{g_{k+1}} - p_{g_k} + \gamma_{g_{k+1/2}} (z_{k+1} - z_k)}^{\text{pot}_{gz2}} \right]_i + \\
& - \left[ \overbrace{\left( \alpha \lambda_g \right) y_m}^{T_{gz1}} \right]_{i, k-1/2} \left[ \overbrace{p_{g_k} - p_{g_{k-1}} + \gamma_{g_{k-1/2}} (z_k - z_{k-1})}^{\text{pot}_{gz1}} \right]_i = \\
& = \frac{V_{p_{i,k}}}{\Delta t} \left[ \overbrace{\left[ \left( 1 + c_r \Delta_t p_o \right) \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right) - \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right) \right]}^{\text{Acum}} \right]_{i,k}^{n+1} + \\
& + \left[ \overbrace{q_o \rho_o x_m + q_g \rho_g y_m}^{\text{Fonte}} \right]_{i,k}^{n+1} \quad (B.7)
\end{aligned}$$

Onde em (B.7) tem-se que:

$$p_g = p_o + P_{cgo} \quad e \quad \lambda_f = \frac{\rho_f k_{rf}}{\mu_f} \quad (f=o, g)$$

Durante o desenvolvimento de (B.7) foram indicadas variáveis auxiliares com o objetivo de facilitar a derivação. Elas representam as diferenças de potencial  $\text{pot}_{f|n}$  e transmissibilidades  $T_{f|n}$  (onde  $f=o, g$ ;  $l=x, z$  e  $n=1, 2$ ), termo de

acumulação "Acum" e termos fonte "Fonte". Fazendo uso dessa nova notação a expressão (B.7) ganha um aspecto mais compacto:

$$\begin{aligned}
 & \left( T_{ox2} x_{m_{i+1/2}}^{pot_{ox2}} \right)_k - \left( T_{ox1} x_{m_{i-1/2}}^{pot_{ox1}} \right)_k + \\
 & + \left( T_{gx2} y_{m_{i+1/2}}^{pot_{gx2}} \right)_k - \left( T_{gx1} y_{m_{i-1/2}}^{pot_{gx1}} \right)_k + \\
 & + \left( T_{oz2} x_{m_{k+1/2}}^{pot_{oz2}} \right)_i - \left( T_{oz1} x_{m_{k-1/2}}^{pot_{oz1}} \right)_i + \\
 & + \left( T_{gz2} y_{m_{k+1/2}}^{pot_{gz2}} \right)_i - \left( T_{gz1} y_{m_{k-1/2}}^{pot_{gz1}} \right)_i = \text{Acum} + \text{Fonte}
 \end{aligned}$$

(B.8)

Na construção da matriz jacobiana, para geometria bidimensional e esquema de cinco pontos, a expressão (B.8) é derivada em relação a cada uma das variáveis dos seguintes vetores de incógnitas:

$$\left( \bar{X}_{i',1,k}, \bar{X}_{i,k-1}, \bar{X}_{i,k}, \bar{X}_{i,k+1}, \bar{X}_{i+1,k} \right) \quad (B.9)$$

$$\text{onde } \bar{X} = \left( p_o, S_g, S_w, x_1, x_2, \dots, x_{n_c-1}, y_2, y_3, \dots, y_{n_c} \right)^T$$

Observar que, por característica da formulação proposta, as derivadas das parcelas de fluxo (lado direito da equação (B.8)) em relação às variáveis composicionais são nulas nas células de duas fases. O tratamento passa a totalmente implícito na variável  $x_{n_c-1}$  nas células de fase única líquido, e em  $y_2$  nas de fase única vapor.

O desenvolvimento neste Apêndice de todas as expressões das derivadas de (B.8) em relação às variáveis em (B.9) seria extremamente repetitivo. Assim sendo apresenta-se abaixo, como exemplo, a derivada da equação de fluxo (B.8) da célula  $i,k$  ( $F_{i,k}$ ) em relação à pressão  $p_{o_{i,k}}$ . As demais derivadas são facilmente deduzidas a partir da técnica exposta a seguir. Assim:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial F_{i,k}}{\partial p_{o_{i,k}}} = & x_{m_{x2}} \left( T_{ox2} \frac{\partial \text{pot}_{ox2}}{\partial p_{o_{i,k}}} + \text{pot}_{ox2} \frac{\partial T_{ox2}}{\partial p_{o_{i,k}}} \right) + \\
 & - x_{m_{x1}} \left( T_{ox1} \frac{\partial \text{pot}_{ox1}}{\partial p_{o_{i,k}}} + \text{pot}_{ox1} \frac{\partial T_{ox1}}{\partial p_{o_{i,k}}} \right) + \\
 & + y_{m_{x2}} \left( T_{gx2} \frac{\partial \text{pot}_{gx2}}{\partial p_{o_{i,k}}} + \text{pot}_{gx2} \frac{\partial T_{gx2}}{\partial p_{o_{i,k}}} \right) + \\
 & - y_{m_{x1}} \left( T_{gx1} \frac{\partial \text{pot}_{gx1}}{\partial p_{o_{i,k}}} + \text{pot}_{gx1} \frac{\partial T_{gx1}}{\partial p_{o_{i,k}}} \right) + \\
 & + x_{m_{z2}} \left( T_{oz2} \frac{\partial \text{pot}_{oz2}}{\partial p_{o_{i,k}}} + \text{pot}_{oz2} \frac{\partial T_{oz2}}{\partial p_{o_{i,k}}} \right) + \\
 & - x_{m_{z1}} \left( T_{oz1} \frac{\partial \text{pot}_{oz1}}{\partial p_{o_{i,k}}} + \text{pot}_{oz1} \frac{\partial T_{oz1}}{\partial p_{o_{i,k}}} \right) + \\
 & + y_{m_{z2}} \left( T_{gz2} \frac{\partial \text{pot}_{gz2}}{\partial p_{o_{i,k}}} + \text{pot}_{gz2} \frac{\partial T_{gz2}}{\partial p_{o_{i,k}}} \right) + \\
 & - y_{m_{z1}} \left( T_{gz1} \frac{\partial \text{pot}_{gz1}}{\partial p_{o_{i,k}}} + \text{pot}_{gz1} \frac{\partial T_{gz1}}{\partial p_{o_{i,k}}} \right) - \frac{\partial \text{Acum}}{\partial p_{o_{i,k}}} - \frac{\partial \text{Fonte}}{\partial p_{o_{i,k}}}
 \end{aligned}
 \tag{B.10}$$

Em (B.10) aparecem termos, denotados por  $x_{m,l,n}$  e  $y_{m,l,n}$  onde  $l=x,z$ ,  $n=1,2$  e  $m=1,2,\dots,n_c$ ; que indicam as frações molares nas fases líquida e vapor nas interfaces da célula. Como já comentado no item 4.1, tais variáveis foram avaliados pela técnica de ponderação com um ponto a montante. Além desses, a equação (B.10) contém termos relativos às derivadas de diferença de potencial, transmissibilidades, termos de acumulação e fonte. Algumas dessas expressões são exemplificadas a seguir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \text{pot}_{ox2}}{\partial p_{o_{i,k}}} &= \frac{\partial}{\partial p_{o_{i,k}}} \left[ p_{o_{i+1}} - p_{o_i} + \gamma_{o_{i+1/2}} (z_{i+1} - z_i) \right]_k = \\ &= -1 + \left( 1 - w_{x_{i+1}} \right) \frac{\partial \gamma_{o_{i,k}}}{\partial p_{o_{i,k}}} (z_{i+1} - z_i)_k \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

A derivada do peso específico na interface de célula,  $\gamma_{o_{i+1/2,k}}$ , única propriedade de interface que é calculada pela média ponderada dos valores que esta assume nas células contíguas (e não por ponderação com um ponto a montante), foi obtida por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \gamma_{o_{i+1/2,k}}}{\partial p_{o_{i,k}}} &= \frac{\partial}{\partial p_{o_{i,k}}} \left[ w_{x_{i+1}} \gamma_{o_{i+1}} + \left( 1 - w_{x_{i+1}} \right) \gamma_{o_i} \right]_k = \\ &= \left( 1 - w_{x_{i+1}} \right) \frac{\partial \gamma_{o_{i,k}}}{\partial p_{o_{i,k}}} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Onde em (B.11) e (B.12) o fator  $w$  de ponderação depende da geometria da malha (para cartesiana  $w=0,5$ ). As demais derivadas de diferença de potencial são obtidas de forma semelhante.

As derivadas das transmissibilidades são calculadas segundo o exemplo:

$$\frac{\partial T_{ox1}}{\partial p_{o_{i,k}}} = \frac{\partial}{\partial p_{o_{i,k}}} \left( \alpha \lambda_o \right)_{i-1/2,k} = \frac{\partial}{\partial p_{o_{i,k}}} \left( \alpha \frac{\rho_o k_{ro}}{\mu_o} \right)_{i-1/2,k} \quad (B.13)$$

Como descrito no item 4.1, os termos  $\rho_o$ ,  $k_{ro}$  e  $\mu_o$  são avaliados com ponderação com um ponto a montante. A derivada em (B.13) dependerá portanto do sentido de fluxo. Assim tem-se que:

-fluxo de i para i-1:

$$\frac{\partial T_{ox1}}{\partial p_{o_{i,k}}} = \frac{\partial}{\partial p_{o_{i,k}}} \left( \alpha \frac{\rho_o k_{ro}}{\mu_o} \right)_{i,k} = \quad (B.14)$$

$$= \alpha k_{ro_{i,k}} \left( \frac{1}{\mu_o} \frac{\partial \rho_o}{\partial p_o} - \frac{\rho_o}{\mu_o^2} \frac{\partial \mu_o}{\partial p_o} \right)_{i,k} = T_{ox1} \left( \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial \rho_o}{\partial p_o} - \frac{1}{\mu_o} \frac{\partial \mu_o}{\partial p_o} \right)_{i,k}$$

-fluxo de i-1 para i: nesse caso os valores de  $\rho_o$ ,  $\mu_o$  e de  $k_{ro}$  serão iguais aos da célula i-1 e a derivada em relação a  $p_{o_{i,k}}$  será nula.  $T_{ox1}$  terá derivada não nula em relação a  $p_{o_{i-1,k}}$ .

Continuando com as derivadas indicadas em (B.10), a do termo de acumulação fica:

$$\frac{\partial \text{Acum}}{\partial p_{o_{i,k}}} = \frac{\partial}{\partial p_{o_{i,k}}} \left[ \frac{V_{p_{i,k}}}{\Delta t} \left[ \left( 1 + c_r \Delta_t p_o \right) \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right)^{U+1} - \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right)^n \right]_{i,k} \right] \quad (\text{continua})$$

$$\frac{\partial \text{Acum}}{\partial p_{o_{i,k}}} = \frac{V_{p_{i,k}}}{\Delta t} \left[ c_r \left( x_m \rho_o S_o + y_m \rho_g S_g \right)^{u+1} + \left( 1 + c_r \Delta_t p_o \right) \left( x_m S_o \frac{\partial \rho_o}{\partial p_{o_{i,k}}} + y_m S_g \frac{\partial \rho_g}{\partial p_{o_{i,k}}} \right) \right]_{i,k} \quad (\text{B.15})$$

Como se observa as derivadas dos termos do passo de tempo n são nulas uma vez que eles são constantes durante o andamento das iterações do passo de tempo n+1.

Por sua particular importância, desenvolvem-se a seguir as derivadas do termo de acumulação em relação às variáveis saturações de gás e de água e frações molares nas fases líquida e vapor (que, obviamente, não farão parte de (B.10) mas que aparecerão nas derivadas das equações de fluxo quando estas forem derivadas em relação a essas variáveis). Assim:

$$\frac{\partial \text{Acum}}{\partial S_{g_{i,k}}} = \frac{V_{p_{i,k}}}{\Delta t} \left[ \left( 1 + c_r \Delta_t p_o \right) \left( y_m \rho_g - y_m S_g \frac{\partial \rho_g}{\partial p_g} \frac{\partial P_{cgo}}{\partial S_g} - x_m \rho_o \right)^{u+1} \right]_{i,k} \quad (\text{B.16})$$

$$\frac{\partial \text{Acum}}{\partial S_{w_{i,k}}} = \frac{V_{p_{i,k}}}{\Delta t} \left[ \left( 1 + c_r \Delta_t p_o \right) \left( - x_m \rho_o \right)^{u+1} \right]_{i,k} \quad (\text{B.17})$$

$$\frac{\partial \text{Acum}_m}{\partial x_j}_{i,k} = \frac{V_{p_{i,k}}}{\Delta t} \left[ \left( 1 + c_r \Delta_t p_o \right) \left( x_m S_o \frac{\partial \rho_o}{\partial x_j} + \rho_o S_o \delta_{m,j} \right)^{u+1} \right]_{i,k} \quad (\text{B.18})$$

$$\frac{\partial \text{Acum}_m}{\partial y_{j,i,k}} = \frac{V_{p_{i,k}}}{\Delta t} \left[ \left( 1 + c_r \Delta p_o \right) \left( y_m S_g \frac{\partial \rho_g}{\partial y_j} + \rho_g S_g \delta_{m,j} \right) \right]_{i,k}^{U+1} \quad (\text{B.19})$$

Onde em (B.18) e (B.19) o índice  $m$  na variável auxiliar  $\text{Acum}$  indica que esta corresponde à equação de fluxo do componente  $m$  (no caso sendo derivada em relação ao componente  $j$ ). O termo  $\delta_{m,j}$  dependerá da identificação de  $m$  e de  $j$  além do componente cuja fração molar é expressa em função da dos demais. Foi adotado que:

$$x_{n_c} = 1 - \sum_{m=1}^{n_c} x_m \quad \text{e} \quad y_1 = 1 - \sum_{m=2}^{n_c} y_m$$

Denotando este componente pelo índice  $q$  ( $q = n_c$  para a fase líquida e  $q = 1$  para a fase vapor) obtém-se os  $\delta_{m,j}$ :

$$\frac{\partial x_m}{\partial x_j} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial y_m}{\partial y_j} = \delta_{m,j} = 1 \quad \text{para } m = j \text{ e } m \neq q;$$

$$\frac{\partial x_m}{\partial x_j} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial y_m}{\partial y_j} = \delta_{m,j} = -1 \quad \text{para } m = q \text{ e } j \text{ qualquer};$$

$$\frac{\partial x_m}{\partial x_j} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial y_m}{\partial y_j} = \delta_{m,j} = 0 \quad \text{para } m \neq j \text{ e } m \neq q$$

Retornando às derivadas indicadas em (B.10), restam por determinar as dos termos fonte. Em relação à pressão:

$$\frac{\partial \text{Fonte}_m}{\partial p_{o_{i,k}}} = \frac{\partial}{\partial p_{o_{i,k}}} \left[ \left( q_o \rho_o x_m + q_g \rho_g y_m \right) \right]_{i,k}^{U+1} \quad (\text{B.20})$$

Operando a derivada em (B.20) obtém-se:

$$\frac{\partial \text{Fonte}_m}{\partial p_{o,i,k}} = \left[ x_m \left( \rho_o \frac{\partial q_o}{\partial p_o} + q_o \frac{\partial \rho_o}{\partial p_o} \right) + y_m \left( \rho_g \frac{\partial q_g}{\partial p_o} + q_g \frac{\partial \rho_g}{\partial p_o} \right) \right]_{i,k} \quad (\text{B.21})$$

As derivadas dos termos fonte em relação as demais variáveis do problema são obtidas de forma semelhante.

Em (B.21) resta determinar as derivadas das vazões volumétricas a nível de reservatório  $q_f$  ( $f=o,g$ ). Seu cálculo, visto em detalhe no item 4.5, emprega a expressão:

$$q_{f,i,k} = IP_{i,k} \frac{k_{rf}}{\mu_f} \Delta p_k \quad (\text{B.22})$$

Onde o diferencial de pressão  $\Delta p_k$  depende da condição de contorno imposta. Assim a derivada das vazões em (B.21) terá expressões diferentes em função do tratamento dado à pressão de fluxo. Duas situações são possíveis:

1) Para pressão de fluxo na base ( $k=ki$ ) das camadas abertas  $p_{wf,i,ki}$  especificada:

$$\Delta p_k = p_{f,i,k} - p_{wf,i,ki} + H_k \quad \text{onde} \quad H_k = \sum_{n=ki}^{k-1} \gamma_{t_{n+1/2}} \left( z_{n-1} - z_n \right) \quad (\text{B.23})$$

Sendo  $H_{ki} = 0$ . Em (B.23) tem-se que:

$$\gamma_{t_{n+1/2}} = \frac{\left( \gamma_o q_o + \gamma_g q_g + \gamma_w q_w \right)_{n+1/2}}{\left( q_o + q_g + q_w \right)_{n+1/2}} \quad (\text{B.24})$$

Neste primeiro caso, as derivadas da vazão  $q_f$  foram implementadas adotando  $H_k$  em (B.23) de forma explícita (na iteração prévia) e desconsiderando diferenças de pressão entre as fases óleo, gás e água. Ou seja, admite-se que  $p_o = p_g = p_w$  e que  $p_{wf_k}$  é constante em qualquer  $k$ . Logo:

$$\frac{\partial q_{f,i,k}}{\partial p_{o,i,k}} = \frac{\partial}{\partial p_{o,i,k}} \left[ IP \frac{k_{rf}}{\mu_f} (p_f - p_{wf}) \right]_{i,k} = \left( \frac{IP k_{rf}}{\mu_f} - \frac{q_f}{\mu_f} \frac{\partial \mu_f}{\partial p_o} \right)_{i,k}$$

(B.25)

As considerações quanto ao tratamento do termo  $H_k$  descritas acima foram motivadas pela complexidade que um tratamento totalmente implícito deste termo geraria na montagem da matriz jacobiana.

2) Para vazão especificada a nível de separação de fluidos em superfície demonstrou-se no item 4.5 que  $\Delta p_k$  é obtido por:

$$\Delta p_k = \frac{q_{os} \rho_{os}}{L_s} \frac{1}{\sum_{k=ki}^{kf} IP_k \left( \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \right)_k}$$

(B.26)

Para vazão de óleo especificada; já para vazão de gás usa-se a expressão:

$$\Delta p_k = \frac{q_{gs} \rho_{gs}}{V_s} \frac{1}{\sum_{k=ki}^{kf} IP_k \left( \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \right)_k}$$

(B.27)

Neste caso as derivadas de  $q_f$  foram calculadas admitindo:

-Tratamento explícito das variáveis composicionais de superfície ( $L_s$ ,  $V_s$ ,  $\rho_{os}$  e  $\rho_{gs}$ ). As razões desta hipótese são discutidas em detalhe no item 4.5;

-Desconsiderando as derivadas do termo em somatório em (B.26) e (B.27) em relação a quaisquer variáveis que não sejam as da própria célula  $i,k$  sob consideração. Adotou-se essa aproximação visando simplificar a montagem da matriz jacobiana;

-Diferença de pressão  $\Delta p_k = \Delta p$  constante para qualquer  $k$ .

Definindo-se agora as variáveis auxiliares:

$$C = \frac{q_{os} \rho_{os}}{L_s} \quad \text{ou} \quad C = \frac{q_{gs} \rho_{gs}}{V_s}$$

conforme tenha-se  $q_{os}$  ou  $q_{gs}$  especificado; e:

$$\tau = \sum_{k=ki}^{kf} IP_k \left( \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \right)_k$$

A derivada da vazão  $q_f$  em relação à pressão fica:

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_{f,i,k}}{\partial p_{o,i,k}} &= \frac{\partial}{\partial p_{o,i,k}} \left[ IP \frac{k_{rf}}{\mu_f} \Delta p \right]_{i,k} = \frac{\partial}{\partial p_{o,i,k}} \left[ IP \frac{k_{rf}}{\mu_f} \frac{C}{\tau} \right]_{i,k} = \\ &= - \left[ \frac{IP k_{rf}}{\mu_f} \left( \frac{\Delta p}{\mu_f} \frac{\partial \mu_f}{\partial p_o} + \frac{C}{\tau^2} \frac{\partial \tau}{\partial p_o} \right) \right]_{i,k} \end{aligned} \quad (B.28)$$

Em (B.28) a derivada da variável  $\tau$  é obtida por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau}{\partial p_{o_{i,k}}} &= \frac{\partial}{\partial p_{o_{i,k}}} \left[ \sum_{k=ki}^{kf} IP_k \left( \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_s \frac{k_{rg}}{\mu_s} \right)_k \right] = \\ &= IP_{i,k} \left[ \frac{k_{ro}}{\mu_o} \left( \frac{\partial \rho_o}{\partial p_o} - \frac{\rho_o}{\mu_o} \frac{\partial \mu_o}{\partial p_o} \right) + \frac{k_{rg}}{\mu_s} \left( \frac{\partial \rho_s}{\partial p_o} - \frac{\rho_s}{\mu_s} \frac{\partial \mu_s}{\partial p_o} \right) \right]_{i,k} \end{aligned} \quad (B.29)$$

As derivadas da vazão em relação as demais variáveis do problema (saturações e frações molares) são calculadas de forma semelhante.

As derivadas das propriedades densidade molar ( $\rho$ ), peso específico ( $\gamma$ ) e viscosidade ( $\mu$ ), que aparecem indicadas ao longo das equações deste Apêndice, são deduzidas nos Apêndices C ( $\rho$  e  $\gamma$ ) e E ( $\mu$ ) respectivamente.

## APÊNDICE C - DERIVADAS DAS DENSIDADES E DO FATOR Z

Revisando o item 5.4, as expressões para o cálculo das densidades molares das fases líquida  $\rho_o$  e vapor  $\rho_g$  incorporando um terceiro parâmetro [34] na equação de estado são:

$$\tilde{v}_l = \frac{1}{\rho_o} = v_l - \sum_{m=1}^{n_c} c_m x_m \quad (C.1)$$

$$\tilde{v}_g = \frac{1}{\rho_g} = v_g - \sum_{m=1}^{n_c} c_m y_m \quad (C.2)$$

Onde  $v$  (com índice  $l$  ou  $v$ ) é o volume molar dado por:

$$v = \frac{Z R T}{p} \quad (C.3)$$

As expressões (C.1) e (C.2) são idênticas, a menos da fração molar que ora assume valores da fase óleo ora da fase gás. O mesmo ocorre com as expressões das derivadas em relação à pressão, escrita genericamente como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial p} = \frac{-v}{\left(\tilde{v}\right)^2} \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial p} - \frac{1}{p} \right) \quad (C.4)$$

As derivadas em relação à composição, por sua vez, dependerão da identificação do componente cuja fração molar é expressa em função da dos demais. No caso da fração líquida este componente é o último, para o gás é o primeiro. Assim:

$$x_{n_c} = 1 - \sum_{m=1}^{n_c-1} x_m \quad y_1 = 1 - \sum_{m=2}^{n_c} y_m$$

Identificar-se-á a seguir esse componente, que não é variável primária, com o índice  $q$ ; assim  $q = n_c$  para a fase líquida e  $q = 1$  para a fase vapor. Indicar-se-á ainda a derivada em relação à uma fração molar genérica  $x_j$ , que ora assumirá os valores do líquido ora do gás, dependendo da situação. Isto posto, a derivada da densidade em relação à composição fica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_j} = \frac{-1}{\left(\bar{v}\right)^2} \left[ \frac{R T}{P} \frac{\partial Z}{\partial x_j} - c_j + c_q \right] \quad (C.5)$$

Onde  $j = 1, 2, \dots, n_c - 1$  para a fase líquida e  $j = 2, 3, \dots, n_c$  para a fase vapor.

Conhecidas as derivadas da densidade molar, o cálculo das derivadas do peso específico é feito de forma direta a partir das anteriores.

As expressões para as derivadas do fator de compressibilidade  $Z$  em relação à pressão e à composição são apresentadas a seguir. Revisando sua equação tem-se:

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad (C.6)$$

$$\text{onde: } A = \frac{a p}{R^2 T^2} \quad \text{e} \quad B = \frac{b p}{R T}$$

Os parâmetros  $a$  e  $b$ , calculados por componente e depois combinados através de regras de mistura, foram definidos no

item 5.3 quando se apresentou a equação de estado de Peng e Robinson. Derivando-se a equação (C.6) em relação a uma variável genérica X, que poderá ser a pressão p ou uma fração molar  $x_m$  ou  $y_m$ , obtém-se:

$$\begin{aligned}
 & 3Z^2 \frac{\partial Z}{\partial X} - 2Z(1 - B) \frac{\partial Z}{\partial X} + Z^2 \frac{\partial B}{\partial X} + (A - 3B^2 - 2B) \frac{\partial Z}{\partial X} + \\
 & + Z \left( \frac{\partial A}{\partial X} - 6B \frac{\partial B}{\partial X} - 2 \frac{\partial B}{\partial X} \right) - \left( A \frac{\partial B}{\partial X} + B \frac{\partial A}{\partial X} - 2B \frac{\partial B}{\partial X} + \right. \\
 & \left. - 3B^2 \frac{\partial B}{\partial X} \right) = 0 \tag{C.7}
 \end{aligned}$$

Isolando-se em (C.7) o termo  $\frac{\partial Z}{\partial X}$  e rearranjando os demais obtém-se a expressão genérica da derivada do fator de compressibilidade:

$$\frac{\partial Z}{\partial X} = \frac{\left\{ \frac{\partial B}{\partial X} \left[ Z(2 + 6B - Z) - B(3B + Z) + A \right] + \frac{\partial A}{\partial X} (B - Z) \right\}}{\left[ Z(3Z + 2B - 2) - B(3B + 2) + A \right]} \tag{C.8}$$

Para completar a procedimento resta determinar as derivadas dos parâmetros A e B em relação à pressão e à composição. Sendo os

parâmetros  $a$  e  $b$  independentes da pressão, obtém-se:

$$\frac{\partial A}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{a p}{R^2 T^2} \right) = \frac{a}{R^2 T^2} = \frac{A}{p} \quad (\text{C.9})$$

$$\frac{\partial B}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{a p}{R T} \right) = \frac{b}{R T} = \frac{B}{p} \quad (\text{C.10})$$

As expressões das derivadas de  $A$  e  $B$  em relação à composição estão escritas abaixo em função de uma fração molar genérica, no caso  $x_j$ , que tanto pode indicar fase vapor ou líquida:

$$\frac{\partial A}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{a p}{R^2 T^2} \right) = \frac{p}{R^2 T^2} \frac{\partial a}{\partial x_j} \quad (\text{C.11})$$

$$\frac{\partial B}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{b p}{R T} \right) = \frac{p}{R T} \frac{\partial b}{\partial x_j} \quad (\text{C.12})$$

As derivadas indicadas em (C.11) e (C.12) serão dadas novamente em função do componente  $q$  cuja fração molar é expressa em função da dos demais. Logo:

$$\frac{\partial b}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \sum_{m=1}^{n_c} b_m x_m \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_{n_c} x_{n_c} \right)$$

Substituindo na expressão anterior a fração molar do componente q por  $x_q = 1 - \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq q}}^{n_c} x_m$  e operando a derivada indicada obtém-se:

$$\frac{\partial b}{\partial x_j} = b_j - b_q \quad \text{onde } q = n_c \text{ para líquido e } q = 1 \text{ para vapor} \quad (\text{C.13})$$

Para  $\frac{\partial a}{\partial x_j}$  usa-se o mesmo procedimento obtendo-se:

$$\frac{\partial a}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \sum_{m=1}^{n_c} \sum_{n=1}^{n_c} a_{m,n} x_m x_n \right) = 2 \sum_{m=1}^{n_c} x_m \left( a_{j,m} - a_{m,q} \right) \quad (\text{C.14})$$

Onde  $q = 1$  para a fase vapor e  $q = n_c$  para a fase líquida. Os passos intermediários para a obtenção de (C.14) são muito extensos - o duplo somatório precisa ser "aberto" - e, portanto, não estão aqui documentados. Aponta-se apenas as importantes relações abaixo, essenciais para a obtenção de (C.14):

$$a_{m,n} = \left( 1 - \delta_{m,n} \right) a_m^{0,5} a_n^{0,5} = a_{n,m} = \text{constante}$$

## APÊNDICE D - DERIVADAS DAS FUGACIDADES

A equação da fugacidade, integrada através da equação de estado de Peng e Robinson, é revista abaixo:

$$\ln \left( \frac{f_{ml}}{p x_m} \right) = \frac{b_m}{b} (Z_l - 1) - \ln(Z_l - B) +$$

$$- \frac{A}{2 \sqrt{2} B} \left( \frac{2 \sum_{n=1}^{n_c} x_n a_{n,m}}{a} - \frac{b_m}{b} \right) \ln \left( \frac{Z_l + 2,414 B}{Z_l - 0,414 B} \right)$$

A expressão acima indica a fugacidade do componente m na fase líquida. A expressão para a fase vapor ( $f_{mv}$ ) bem como a de suas derivadas serão idênticas, sendo que nestas as frações molares a serem usadas são as da fase vapor. Isolando-se a fugacidade na equação anterior obtém-se:

$$f_{ml} = p x_m \frac{1}{(Z_l - B)} \left( \frac{Z_l + 2,414B}{Z_l - 0,414B} \right)^{D_l} \exp \left[ \frac{b_m}{b} (Z_l - 1) \right]$$

(D.1)

$$\text{Onde: } D_l = \frac{-A}{2\sqrt{2} B} \left( \frac{2 \sum_{n=1}^{n_c} x_n a_{n,m}}{a} - \frac{b_m}{b} \right)$$

(D.2)

Definindo-se agora as seguintes variáveis auxiliares:

$$\theta_l = (Z_l - B)$$

(D.3)

$$\omega_l = \left( \frac{Z_l + 2,414B}{Z_l - 0,414B} \right)^{D_l}$$

(D.4)

$$\beta_l = \exp \left[ \frac{b_m}{b} (z_l - 1) \right] \quad (D.5)$$

Usando (D.3), (D.4) e (D.5) em (D.1) obtém-se a expressão compacta:

$$f_{ml} = \frac{p x_m}{\theta_l} \omega_l \beta_l \quad (D.6)$$

Derivando-se agora a equação (D.6) em relação à pressão:

$$\frac{\partial f_{ml}}{\partial p} = \frac{x_m}{\theta_l} \omega_l \beta_l + p x_m \left( \frac{-\omega_l \beta_l}{\theta_l^2} \frac{\partial \theta_l}{\partial p} + \frac{\beta_l}{\theta_l} \frac{\partial \omega_l}{\partial p} + \frac{\omega_l}{\theta_l} \frac{\partial \beta_l}{\partial p} \right)$$

Rearranjando a expressão acima obtém-se:

$$\frac{\partial f_{ml}}{\partial p} = \frac{p x_m}{\theta_l} \left[ \left( \frac{1}{p} - \frac{1}{\theta_l} \frac{\partial \theta_l}{\partial p} \right) \omega_l \beta_l + \beta_l \frac{\partial \omega_l}{\partial p} + \omega_l \frac{\partial \beta_l}{\partial p} \right] \quad (D.7)$$

Resta agora determinar as derivadas apenas indicadas em (D.7).

Assim:

$$\frac{\partial \theta_l}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p} (z_l - B) = \frac{\partial z_l}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial p} \quad (D.8)$$

$$\frac{\partial \omega_l}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{z_l + 2,414B}{z_l - 0,414B} \right)^{D_l} = D_l \left( \frac{z_l + 2,414B}{z_l - 0,414B} \right)^{D_l - 1} I_l \quad (D.9)$$

Note-se que a variável auxiliar  $D_l$ , definida em (D.2) não

depende da pressão. Em (D.9) o termo  $I_l$  dado por:

$$I_l = \frac{\left( Z_l - 0,414B \right) \left[ \frac{\partial Z_l}{\partial p} + 2,414 \frac{\partial B}{\partial p} \right] - \left( Z_l + 2,414B \right) \left[ \frac{\partial Z_l}{\partial p} - 0,414 \frac{\partial B}{\partial p} \right]}{\left( Z_l - 0,414B \right)^2} \quad (D.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \beta_l}{\partial p} &= \frac{\partial}{\partial p} \left\{ \exp \left[ \frac{b_m}{b} (Z_l - 1) \right] \right\} = \beta_l \frac{\partial}{\partial p} \left[ \frac{b_m}{b} (Z_l - 1) \right] = \\ &= \beta_l \frac{b_m}{b} \frac{\partial Z_l}{\partial p} \end{aligned} \quad (D.11)$$

As expressões das derivadas de Z e dos parâmetros A e B já foram mostradas no Apêndice C; a e b não dependem da pressão.

As derivadas em relação à composição, que serão desenvolvidas a seguir, estão indicadas em termos de uma fração molar genérica  $x_j$ , que poderá assumir valores da fração líquida ou da fração vapor conforme o caso. Outra observação diz respeito ao componente cuja fração molar está expressa em função da dos demais (logo não é variável primária). Adotou-se no simulador composicional o seguinte procedimento:

$$x_{n_c} = 1 - \sum_{m=1}^{n_c} x_m \quad \text{e} \quad y_1 = 1 - \sum_{m=2}^{n_c} y_m$$

Daqui por diante este componente será indicado pelo índice q; onde  $q = n_c$  para o líquido e  $q = 1$  para o vapor. Isto posto a

derivada da fugacidade em relação à composição, baseando-se na equação (D.6), fica:

$$\frac{\partial f_{ml}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{p x_m}{\theta_l} \omega_l \beta_l \right) = \frac{p}{\theta_l} \omega_l \beta_l \delta_{m,j} + p x_m \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\omega_l \beta_l}{\theta_l} \right) \quad (D.12)$$

Onde  $j=1,2,\dots,n_c-1$  que são os índices das frações molares variáveis primárias para a fase líquida ( aqui  $q = n_c$  ); e  $j=2,3,\dots,n_c$  para a fase vapor ( aqui  $q = 1$  ); e finalmente  $m=1,2,\dots,n_c$  que são os índices das equações de fugacidade. Em (D.12) o termo  $\delta_{m,j}$  vale:

$$\frac{\partial x_m}{\partial x_j} = \delta_{m,j} = 1 \quad \text{para } m = j \text{ e } m \neq q;$$

$$\frac{\partial x_m}{\partial x_j} = \delta_{m,j} = -1 \quad \text{para } m = q \text{ e } j \text{ qualquer};$$

$$\frac{\partial x_m}{\partial x_j} = \delta_{m,j} = 0 \quad \text{para } m \neq j \text{ e } m \neq q$$

Continuando o desenvolvimento de (D.12) obtém-se:

$$\frac{\partial f_{ml}}{\partial x_j} = \frac{p}{\theta_l} \left[ \omega_l \beta_l \left( \delta_{m,j} - \frac{x_m}{\theta_l} \frac{\partial \theta_l}{\partial x_j} \right) + x_m \left( \beta_l \frac{\partial \omega_l}{\partial x_j} + \omega_l \frac{\partial \beta_l}{\partial x_j} \right) \right] \quad (D.13)$$

Resta agora determinar as derivadas apenas indicadas em (D.13).

Elas são obtidas por:

$$\frac{\partial \theta_l}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (Z_l - B) = \frac{\partial Z_l}{\partial x_j} - \frac{\partial B}{\partial x_j} \quad (D.14)$$

A derivada de  $\omega_l$  (definido em (D.4)) em relação a composição:

$$\frac{\partial \omega_l}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{Z_l + 2,414B}{Z_l - 0,414B} \right)^{D_l}$$

contém termos,  $Z_l$  e  $D_l$  (definido em (D.2)), que são funções da composição. Logo a derivada acima é do tipo:

$$\frac{\partial (u^v)}{\partial x} = u^{v-1} v \frac{\partial u}{\partial x} + u^v (\ln u) \frac{\partial v}{\partial x}$$

Sendo  $u$  e  $v$  funções de  $x$ . Logo obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_l}{\partial x_j} = & D_l \left( \frac{Z_l + 2,414B}{Z_l - 0,414B} \right)^{D_l - 1} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{Z_l + 2,414B}{Z_l - 0,414B} \right) + \\ & + \omega_l \ln \left( \frac{Z_l + 2,414B}{Z_l - 0,414B} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{-A}{2\sqrt{2} B} \left( \frac{2 \sum_{n=1}^{n_c} x_n a_{n,m}}{a} - \frac{b_m}{b} \right) \right] \end{aligned} \quad (D.15)$$

A notação dos índices em (D.15) é um tanto complexa, merecendo assim um breve comentário. Em (D.15)  $m$  indica o número da equação de fugacidade que se está derivando ( $m=1,2,\dots,n_c$ );  $j$  indica a variável independente sobre a qual se está derivando

( $j=1,2,\dots,n_c$  sendo  $j \neq q$ );  $n$  é o índice auxiliar no somatório e, finalmente,  $l$  indica que a fase considerada no exemplo é a líquida. Em (D.15) faltam ser escritas as derivadas apenas indicadas:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{Z_l + 2,414B}{Z_l - 0,414B} \right) = \frac{(Z_l - 0,414B) \left( \frac{\partial Z_l}{\partial x_j} + 2,414 \frac{\partial B}{\partial x_j} \right) - (Z_l + 2,414B) \left( \frac{\partial Z_l}{\partial x_j} - 0,414 \frac{\partial B}{\partial x_j} \right)}{(Z_l - 0,414B)^2} \quad (D.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{-A}{2\sqrt{2} B} \left( \frac{2 \sum_{n=1}^{n_c} a_{n,m} x_n}{a} - \frac{b_m}{b} \right) \right] = II_l + III_l \quad (D.17)$$

Onde em (D.17) os termos  $II_l$  e  $III_l$  são:

$$II_l = \frac{-1}{2\sqrt{2}} \left( \frac{2 \sum_{n=1}^{n_c} a_{n,m} x_n}{a} - \frac{b_m}{b} \right) \left( \frac{B \frac{\partial A}{\partial x_j} + A \frac{\partial B}{\partial x_j}}{B^2} \right) \quad (D.18)$$

$$III_l = \frac{-A}{2\sqrt{2} B} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{2 \sum_{n=1}^{n_c} a_{n,m} x_n}{a} - \frac{b_m}{b} \right) = \quad (D.19)$$

$$= \frac{-A}{2\sqrt{2} B} \left[ \frac{-2}{a^2} \left( \sum_{n=1}^{n_c} a_{n,m} x_n \right) \frac{\partial a}{\partial x_j} + \frac{2}{a} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \sum_{n=1}^{n_c} a_{n,m} x_n \right) + \frac{b_m}{b^2} \frac{\partial b}{\partial x_j} \right]$$

Na expressão (D.19) as derivadas dos parâmetros  $a$  e  $b$  em relação à composição foram determinadas no Apêndice C. Quanto a derivada do somatório indicada em (D.19) tem-se que:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \sum_{n=1}^n a_{n,m} x_n \right) = a_{j,m} - a_{q,m} \quad (D.20)$$

$$\text{pois } \frac{\partial x_j}{\partial x_j} = 1; \quad \frac{\partial x_q}{\partial x_j} = -1 \quad \text{e} \quad \frac{\partial x_m}{\partial x_j} = 0 \quad \text{para } m \neq j \text{ e } m \neq q.$$

Concluída a derivada de  $\omega_l$ , a do termo restante  $\beta_l$ , é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \beta_l}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \exp \left[ \frac{b_m}{b} (z_l - 1) \right] \right\} = \beta_l \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{b_m}{b} (z_l - 1) \right] = \\ &= \beta_l \left[ \frac{-b_m}{b^2} (z_l - 1) \frac{\partial b}{\partial x_j} + \frac{b_m}{b} \frac{\partial z_l}{\partial x_j} \right] \end{aligned} \quad (D.21)$$

Conclui-se assim o cálculo das derivadas da fugacidade em relação à composição. Sua fórmula genérica foi mostrada em (D.13) e suas parcelas estão desenvolvidas em (D.14), (D.15) composta das expressões de (D.18) a (D.20), e de (D.21) logo acima.

## APÊNDICE E - DERIVADAS DE VISCOSIDADE

Como visto no item 5.6, o cálculo das viscosidades pela correlação de Lohrenz et. alii. [36], após uma série de etapas intermediárias, conduz ao final à expressão (5.24), reproduzida abaixo:

$$\mu = \mu^* + \frac{\left( a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4 \right)^4 - a_5}{\zeta} \quad (\text{E.1})$$

Usar-se-á a equação acima como ponto de partida para as derivações da viscosidade. Assim, derivando (E.1) em relação à pressão obtém-se:

$$\frac{\partial \mu}{\partial p} = \frac{4}{\zeta} \left[ \left( a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4 \right)^3 \frac{\partial \rho_r}{\partial p} \cdot \left( a_1 + 2a_2 \rho_r + 3a_3 \rho_r^2 + 4a_4 \rho_r^3 \right) \right] \quad (\text{E.2})$$

Note-se que em (E.1) nem  $\mu^*$  (definido em (5.18) e (5.19)) nem  $\zeta$  (dado em (5.25)) dependem da pressão. Resta apenas determinar a derivada de  $\rho_r$  indicada em (E.2):

$$\frac{\partial \rho_r}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{\rho}{\rho'_c} \right) = \frac{1}{\rho'_c} \frac{\partial \rho}{\partial p} \quad (\text{E.3})$$

O cálculo da derivada da densidade em relação à pressão, indicado em (E.3), já foi visto no Apêndice C. Observe-se que, por imposição do método de Lohrenz et. alii., esta derivada deve ser calculada em lbmol/pé<sup>3</sup>.

As derivadas da viscosidade em relação à composição dependerão do componente cuja fração molar é dada em função da dos demais. No modelo composicional em questão adotou-se:

$$x_{n_c} = 1 - \sum_{m=1}^{n_c-1} x_m \quad y_1 = 1 - \sum_{m=2}^{n_c} y_m$$

Esse componente será identificado daqui em diante pelo índice  $q$  ( $q = n_c$  para a fase líquida e  $q = 1$  para o vapor). As derivadas serão expressas em relação a uma fração molar genérica  $x_j$ , que poderá indicar as frações molares no líquido ou vapor, conforme o caso. Derivando (E.1) em relação à composição obtém-se:

$$\frac{\partial \mu}{\partial x_j} = \frac{\partial \mu^*}{\partial x_j} + \frac{\zeta \frac{\partial \beta}{\partial x_j} - \beta \frac{\partial \zeta}{\partial x_j}}{\zeta^2} \quad (\text{E.4})$$

Note-se que  $\mu^*$  (definido em (5.18) e (5.19)) e  $\zeta$  (definido em (5.25)) dependem da composição. Em (E.4) introduz-se uma variável auxiliar  $\beta$  definida como:

$$\beta = \left( a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4 \right)^4 - a_5 \quad (\text{E.5})$$

Resta operar as derivações indicadas em (E.4). Elas serão determinadas a seguir:

$$\frac{\partial \mu^*}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m \mu_m^* \sqrt{PM_m} \right)}{\sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m \sqrt{PM_m} \right)} \right) = I \quad (\text{E.6})$$

Continuando na equação (E.6):

$$I = \frac{\left( \mu_j^* \sqrt{PM_j} - \mu_q^* \sqrt{PM_q} \right) \sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m \sqrt{PM_m} \right)}{\left[ \sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m \sqrt{PM_m} \right) \right]^2} +$$

$$- \frac{\left( \sqrt{PM_j} - \sqrt{PM_q} \right) \sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m \mu_m^* \sqrt{PM_m} \right)}{\left[ \sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m \sqrt{PM_m} \right) \right]^2} \quad (E.7)$$

A derivada de  $\beta$  em relação a  $x_j$  será:

$$\frac{\partial \beta}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4 \right)^4 - a_5 \right] =$$

$$= 4 \left( a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4 \right)^3 \cdot$$

$$\cdot \left( a_1 + 2a_2 \rho_r + 3a_3 \rho_r^2 + 4a_4 \rho_r^3 \right) \frac{\partial \rho_r}{\partial x_j} \quad (E.8)$$

Onde em (E.8) a derivada de  $\rho_r$  é expressa por:

$$\frac{\partial \rho_r}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho V'_c \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \rho \sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m V_{cm} \right) \right] =$$

$$= \left[ \sum_{m=1}^{n_c} \left( x_m V_{cm} \right) \right] \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \rho \left( V_{cj} - V_{cq} \right) \quad (E.9)$$

Em (E.9) a derivada de  $\rho$  em relação à composição já foi vista no Apêndice C. Note-se que aqui ela deve ser usada em unidades de lbmol/fração.

Resta somente a derivada de  $\zeta$ , que é deduzida abaixo:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m T_{cm} \right)^{1/6}}{\left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m PM_m \right)^{1/2} \left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m P_{cm} \right)^{2/3}} \right] \quad (\text{E.10})$$

A derivada em (E.10) é do tipo:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{u}{v w} \right) = \frac{v w \frac{du}{dx} - u \left( v \frac{dw}{dx} + w \frac{dv}{dx} \right)}{\left( v w \right)^2} \quad (\text{E.11})$$

Sendo  $u$ ,  $v$  e  $w$  funções de  $x$ . Fazendo:

$$\frac{\partial u}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m T_{cm} \right)^{1/6} \right] = \frac{\left( T_{cj} - T_{cq} \right)}{6} \left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m T_{cm} \right)^{-5/6} \quad (\text{E.12})$$

$$\frac{\partial v}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m PM_m \right)^{1/2} \right] = \frac{\left( PM_j - PM_q \right)}{2} \left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m PM_m \right)^{-1/2} \quad (\text{E.13})$$

$$\frac{\partial w}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m P_{cm} \right)^{2/3} \right] = \frac{2(P_{cj} - P_{cq})}{3} \left( \sum_{m=1}^{n_c} x_m P_{cm} \right)^{-1/3}$$

(E.14)

Compondo os termos em (E.12), (E.13) e (E.14) segundo a regra mostrada em (E.11) obtém-se a derivada de  $\zeta$  em relação à composição.

**APÊNDICE F - PROPRIEDADES DOS PSEUDO COMPONENTES E TABELAS DE PRESSÕES CAPILARES**

As propriedades dos pseudo componentes que constituem o gás retrógrado e o óleo volátil usados nas simulações são apresentadas no quadro abaixo:

Variável	Pseudo Componente					
	P1	P2	P3	P4	P5	P6
Peso molecular	16,19	30,39	52,03	108,54	184,41	340,88
Fator acêntrico	0,0084	0,1009	0,1773	0,3758	0,5060	0,8290
Temperatura crítica-°K	190,41	305,70	400,09	555,18	742,39	915,79
Pressão crítica-MPa	4,625	4,951	4,001	2,620	2,203	1,363
Fator Z crítico	0,2897	0,2859	0,2782	0,2652	0,2490	0,2297

Os coeficientes  $\Omega_a$  e  $\Omega_b$  da equação de Peng e Robinson estão individualizados por componente na tabela abaixo:

Pseudo Componente	$\Omega_a$	$\Omega_b$
P1	0,45609774	0,07777048
P2	0,45717847	0,07809970
P3	0,46444995	0,07891221
P4	0,46980425	0,07945527
P5	0,45723553	0,07779607
P6	0,45723553	0,07779607

Os coeficientes de interação binária  $\delta_{m,j}$  entre os pseudo componentes  $m$  e  $j$  são dados na matriz abaixo:

Pseudo Comp.	P1	P2	P3	P4	P5	P6
P1	0,00000	0,00001	-0,00250	0,03069	0,04647	0,05519
P2	0,00001	0,00000	-0,00081	0,00987	0,00987	0,00987
P3	-0,00250	-0,00081	0,00000	0,00236	0,00236	0,00236
P4	0,03069	0,00987	0,00236	0,00000	0,00000	0,00000
P5	0,04647	0,00987	0,00236	0,00000	0,00000	0,00000
P6	0,05519	0,00987	0,00236	0,00000	0,00000	0,00000

Finalmente, as tabelas a seguir apresentam os dados de pressão capilar água óleo ( $P_{cwo}$ ) como função da saturação de água e de pressão capilar gás óleo ( $P_{cgo}$ ), função da saturação de gás.

$S_w$ (fração)	$P_{cwo}$ (KPa)
0,180	68,9476
0,225	38,6101
0,250	26,8896
0,300	16,5474
0,350	7,9290
0,400	6,8948
0,450	4,4816
0,500	3,1026
0,600	1,3790
0,700	1,0342
0,800	0,6895
1,000	0,0000

$S_g$ (fração)	$P_{cgo}$ (KPa)
0,000	0,000
0,100	0,130
0,200	0,270
0,300	0,450
0,400	0,710
0,500	1,020
0,600	1,500
0,700	2,100
0,730	2,150
0,820	2,150

Como comentado nos capítulos 7 e 8, os dados de pressões capilares foram empregados apenas nas simulações de reservatórios de óleo.