

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS  
CIÊNCIAS E ENGENHARIA DE PETRÓLEO**

# **Caracterização Termodinâmica de Reservatórios com Gradiente Térmico Horizontal**

Autor: **Anibal Rubén Maldonado**

Orientador: **Antonio Cláudio de França Corrêa**

07/2005

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS**

# **Caracterização Termodinâmica de Reservatórios com Gradiente Térmico Horizontal**

Autor: **Anibal Rubén Maldonado**  
Orientador: **Antônio Cláudio França Corrêa**

Curso: Ciências e Engenharia de Petróleo

Dissertação de mestrado apresentada à Subcomissão de Pós-Graduação Interdisciplinar de Ciências e Engenharia de Petróleo (FEM e IG), como requisito para a obtenção do título de Mestre em Ciências e Engenharia de Petróleo.

Campinas, 2005  
SP - Brasil

Unidade BCU  
T/UNICAMP

Cutter M253C  
V. Ed.  
Tombo BC 10-24-95  
Proc. 16-94-13  
C D X  
Preço R\$ 11,00  
Data 17/12/13  
Cod. til. 347748

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

M253c Maldonado, Anibal Rubén  
Caracterização termodinâmica de reservatórios com gradiente térmico horizontal / Anibal Rubén Maldonado. --Campinas, SP: [s.n.], 2005.

Orientador: Antônio Cláudio de França Corrêa.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica e Instituto de Geociências.

1. Termodinâmica. 2. Difusão. 3. Métodos de simulação. I. Corrêa, Antônio Cláudio de França. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Instituto de Geociências. IV. Título.

Titulo em Inglês: Termodinamic characterization of the reservoir with horizontal thermal gradient

Palavras-chave em Inglês: Thermodynamics, Diffusion, Simulation methods

Área de concentração: Reservatório e Gestão

Titulação: Mestrado

Banca examinadora: Daniel Nunes Miranda Filho e Denis José Schiozer

Data da defesa: 04.07.2005

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Caracterização Termodinâmica de  
Reservatórios com Gradiente Térmico  
Horizontal**

Autor: **Anibal Rubén Maldonado**

Orientador: **Antônio Cláudio de França Corrêa**

Banca Examinadora:



Prof. Dr. **Antônio Cláudio de França Corrêa**, Presidente  
Faculdade de Engenharia Mecânica- Petrobrás



Dr. **Daniel Nunes Miranda Filho**  
Petrobrás



Prof. Dr. **Denis José Schiozer**  
Faculdade de Engenharia Mecânica

Campinas, 4 de julho de 2005

2013 29 345

## **Dedicatória:**

Dedico este trabalho a minha família, que sem ela, não estaria aqui hoje.

## **Agradecimentos**

Este trabalho não teria sido concluída sem a ajuda de diversas pessoas, às quais expresso aqui meus agradecimentos:

Aos meus pais, pelo incentivo em todos os momentos da minha vida.

Ao meu orientador, pela paciência e principalmente por ter acreditado em mim.

Ao CEPETRO, pela bolsa de estudos fornecida.

A todos os professores e colegas do departamento, que ajudaram de forma direta e indireta na conclusão deste trabalho.

Aos companheiros de curso (especificamente ao Junio Quintão), com os quais aprendi e compartilhei momentos inesquecíveis, embora alguns já não estejam aqui.

## Resumo

MALDONADO, Anibal Rubén. *Caracterização Termodinâmica de Reservatórios com Gradiente Térmico Horizontal*. Campinas: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2005. 85 p. Dissertação (Mestrado).

O principal objetivo deste trabalho é melhorar a caracterização de reservatórios que encontram-se ainda em fase de exploração e apresentam gradientes térmicos verticais e horizontais. Foi construído um modelo matemático aplicado a um sistema homogêneo de três pseudo-componentes em um modelo de reservatório bidimensional com propriedades petrofísicas simplificadas. Com o modelo proposto foi possível resolver simultaneamente o sistema de equações do balanço parcial e global de materiais. O conceito mais importante introduzido no modelo, é o fluxo molecular difusivo acoplado aos balanços de massa. O fluxo difusivo molar de um componente está não só influenciado pelo gradiente do dito componente, como também pelo gradiente dos outros componentes (fluxo molar cruzado) e dos gradientes de pressão e temperatura. Para resolver o sistema de matrizes foi elaborado um algoritmo numérico baseado em diferenças finitas. Este algoritmo parte de um estado inicial de não equilíbrio com composição homogênea do reservatório, o qual atinge o estado estacionário no equilíbrio termodinâmico. Como resultado são gerados mapas bidimensionais de composição e densidade.

### *Palavras Chave*

- pseudo-componentes; termodinâmica, gradiente composicional.

## Abstract

MALDONADO, Anibal Rubén. *Termodinamic Characterization of the reservoir with horizontal thermal gradient*. Campinas: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2005. 85 p. Dissertação (Mestrado).

The main goal of this work is improve the thermodynamics parameters characterization in petroleum reservoirs that have not been produced yet and show vertical and horizontal thermal gradient. We have constructed a mathematical model considering a homogenous system formed by three pseudo components in a two-dimensional reservoir model and simplified petrophysical properties. With the proposed mathematical modeling was possible to solve simultaneously the equations system from the material balance of the components. The most important concept introduced into the mathematical model, is the molecular diffusive flux that is linked to the material balance. The molecular diffusive flux of a given component depends not only on its composition gradient (mutual diffusion), but also on the composition gradient of all other components in the mixture (cross-molecular diffusion) and on pressure and thermal gradients. In order to obtain a resolution matrix system, a numerical algorithm was built based on finite difference. Such numerical algorithm supposes that the initial point is a pseudo-transient state with homogenous composition reservoir that reaches the steady state in the thermodynamic equilibrium. As a result, two-dimensional maps of density and composition were generated.

### Key word

- diffusion; pseudo-components; thermodynamic, compositional gradient.

# Índice

Capítulo 1 .....	1
Introdução.....	1
Capítulo 2 .....	6
Revisão bibliográfica.....	6
Capítulo 3 .....	11
Metodologia.....	11
Capítulo 4 .....	17
Modelagem.....	17
4.1 Aspectos do modelo .....	17
4.2 Premissas do modelo .....	18
4.3 Equações do modelo.....	19
4.3.1 Cálculo da temperatura em cada bloco do reservatório:.....	19
4.3.2 Cálculo da densidade em cada bloco do reservatório:.....	19
4.3.3 Cálculo das pressões e as velocidades em cada bloco do reservatório.....	20
4.3.4 Cálculo do fluxo difusivo em cada bloco do reservatório:.....	21
4.3.5 Cálculo dos coeficientes de difusão .....	22
4.4 Discretização das equações de balanço .....	28
4.5 Método semi-implícito .....	29
4.5.1 Fronteiras e blocos internos.....	31
4.5.2 Condição inicial.....	32
4.5.3 Condições de contorno .....	32
4.5.4 Obtenção do campo de pressões.....	34
4.5.5 Cálculo do fluxo convectivo.....	35
4.5.6 Cálculo do fluxo difusivo .....	35
4.5.7 Cálculo dos perfis composicionais .....	37
4.5.8 Convergência do sistema.....	38
4.6 Método implícito .....	38
4.6.1 Discretização .....	39
4.6.2 Condição inicial.....	41
4.6.3 Condições de contorno .....	41
4.6.4 Cálculos .....	42
4.6.5 Critérios de avaliação e escolha do modelo.....	42
Capítulo 5 .....	44
Aplicações .....	44

5.1 Dados necessários para comparar o modelo.....	44
5.1.1 Propriedades termodinâmicas da mistura ternária.....	45
5.2 Modelo de teste e de óleo real .....	48
5.2.1 Dados necessários para o modelo.....	48
Capítulo 6 .....	50
Análise de Resultados.....	50
6.1 Avaliação do simulador .....	50
6.1.1 Resultados para permeabilidade nula .....	51
6.1.2 Resultados considerando os efeitos difusivos e convectivos.....	52
6.1.3 Tamanho da malha, tempo de simulação e comparação dos resultados obtidos. ....	57
6.1.4 Análise dos resultados da avaliação .....	58
6.2. Resultados das misturas de teste.....	59
6.2.1 Mistura C4 - C8 - C16 .....	60
6.2.2 Mistura de óleo real .....	61
6.2.3 Mistura de óleo real num simulador comercial .....	64
6.2.4 Análise de resultados dos testes .....	64
Capítulo 7 .....	67
Conclusões e Sugestões .....	67
7.1 Conclusões.....	67
7.2 Sugestões para Trabalhos Futuros .....	69
Referências Bibliográficas.....	70
Apêndice A – EOS de Peng Robinson .....	74
Apêndice B – Viscosidade.....	77
Apêndice C - Interface.....	79
Apêndice D – Análise de sensibilidade .....	80
Apêndice E – Método Semi-implícito – Método Implícito.....	82

## Lista de Figuras

<i>Figura 1.1: Reservatório perto do talude marinho, onde as linhas representam isothermas dentro do reservatório. Sendo A o extremo mais frio e B o mais quente do reservatório.....</i>	<i>4</i>
<i>Figura 4.1 fluxograma da seqüência de cálculos para a obtenção dos mapas composicionais no modelo semi-implícito e totalmente implícito.....</i>	<i>27</i>
<i>Figura 4.2: Diagrama representando um bloco do reservatório indicando os possíveis sentidos de fluxo. ....</i>	<i>28</i>
<i>Figura 4.3: Representação esquemática da mudança de sub-índice, de um bloco genérico nas distintas direções. ....</i>	<i>29</i>
<i>Figura 4.4: Sendo F uma variável genérica do bloco, a qual pode ser pressão, composição ou velocidade (método implícito). ....</i>	<i>30</i>
<i>Figura 4.5: Matriz pentadiagonal para a resolução do campo de pressões (sem considerar as condições de contorno).....</i>	<i>30</i>
<i>Figura 4.6: Esquematização das condições de contorno nos extremos do reservatório.....</i>	<i>33</i>
<i>Figura 4.7: Representação do sistema matricial que dá como resultado <math>\bar{P}</math> que representa o campo de pressões do reservatório na iteração k. ....</i>	<i>34</i>
<i>Figura 5.1: Diagrama PT para os casos analisados, sendo os pontos de referência para as simulações os valores indicados por 1, 2, 3, 4, 5 e 6. ....</i>	<i>46</i>
<i>Figura 5.2: Diagrama PT para o caso de óleo real, indicando com um ponto as condições de pressão e temperatura de referência para as simulações. ....</i>	<i>49</i>
<i>Figura 6.1: padrão de apresentação dos resultados.....</i>	<i>50</i>
<i>Figura 6.2: Perfis de composição – resultados obtidos por Firoozabadi (acima) e resultados obtidos no trabalho (abaixo). a) Caso 1 Ponto 1. b) Caso 2 Ponto 6.....</i>	<i>51</i>
<i>Figura 6. 3: Relação entre a composição no topo e no fundo do reservatório para as simulações com permeabilidade nula. ....</i>	<i>52</i>

<i>Figura 6.4: Função Potencial (esquerda) e mapa de densidade (direita) no equilíbrio (Caso 1 Ponto 3 e permeabilidade de 10 mD).</i> .....	53
<i>Figura 6.5: Variações composicionais com o tempo <math>\left(\frac{\partial x_1}{\partial t} \text{ e } \frac{\partial x_2}{\partial t}\right)</math> para cada iteração até atingir o equilíbrio, (Caso 1 Ponto 3 e permeabilidade de 10 mD).</i> .....	53
<i>Figura 6.6: Mapa de composição de metano e etano da mistura ternária (Caso 1 Ponto 3 e permeabilidade de 10 mD).</i> .....	54
<i>Figura 6.7: Perfis de composição - resultados obtidos por Firoozabadi (acima) e resultados obtidos no trabalho (abaixo), Caso 1 Ponto 3 e permeabilidade de 10 mD.</i> .....	54
<i>Figura 6. 8: Relação entre a composição no topo e no fundo do reservatório para as simulações com permeabilidade de 0, 1, 10 e 100 mD.</i> .....	55
<i>Figura 6.9: Representação da velocidade em “y” com a variação da profundidade (z) e das iterações, até atingir o equilíbrio. As velocidades são tomadas em Ny/2.</i> .....	55
<i>Figura 6.10: Representação da velocidade em “z” com a variação do comprimento (y) e das iterações, até atingir o equilíbrio. As velocidades são tomadas em Mz/2.</i> .....	56
<i>Figura 6.11: Mapa indicando o sentido de acumulação de metano e etano para os casos da Tabela 5.4.</i> .....	57
<i>Figura 6.12: Tempo até o equilíbrio para simulações com diferente número de blocos.</i> .....	58
<i>Figura 6.13: Perfis de composição molar para a mistura C4-C8-C16, considerando difusão pura (permeabilidade nula).</i> .....	60
<i>Figura 6.14: Perfis composicionais para a mistura C4-C8-C16, considerando uma permeabilidade de 10 mD.</i> .....	60
<i>Figura 6.15: Perfis de densidade inicial (esquerda) e final (direita) para a mistura C4-C8-C16 e uma permeabilidade de 10 mD.</i> .....	60
<i>Figura 6.16: Perfis de viscosidade inicial (esquerda) e final (direita) para a mistura C4-C8-C16 e uma permeabilidade de 10 mD.</i> .....	61

<i>Figura 6.17: Acima, à esquerda, os perfis e, abaixo, os mapas de composição da mistura C4-C8-C16 com permeabilidade de 1000 mD. Acima, à direita, a distribuição de densidade desta mistura no reservatório. ....</i>	<i>61</i>
<i>Figura 6.18: À esquerda, os perfis de composição e, à direita o mapa de densidade do óleo real caracterizada na Tabela 1 para o caso de difusão pura (permeabilidade nula). ....</i>	<i>62</i>
<i>Figura 6.19: Perfis de composição no equilíbrio 3D (acima) e 2D (abaixo) do óleo real considerando uma permeabilidade de 1mD.....</i>	<i>62</i>
<i>Figura 6.20: Perfis de viscosidade inicial (esquerda), igual para todas as simulações, e final (direita) para a mistura do óleo real e uma permeabilidade de 1 mD .....</i>	<i>63</i>
<i>Figura 6.21: Mapas de composição (esquerda) e de densidade (direita) no equilíbrio do óleo real considerando uma permeabilidade de 1000 mD.....</i>	<i>63</i>
<i>Figura 6.22: Mapas de viscosidade finais para a mistura do óleo real utilizando uma permeabilidade de 100 mD (esquerda) e permeabilidade de 1000 mD (direita) .....</i>	<i>63</i>
<i>Figura 6. 23: Mapas de fração molar obtidas a partir do simulador térmico: STARS da Computer Modeling Group (CMG).....</i>	<i>64</i>
<i>Figura C.1: Tela de início da carga de dados do programa desenvolvido. ....</i>	<i>79</i>
<i>Figura E. 1: Acima, os mapas da composição obtidos por Firoozabadi (2000) para a permeabilidade de 10 mD; no meio, os resultados obtidos pelo método implícito e, abaixo, pelo o método semi-implícito. ....</i>	<i>82</i>
<i>Figura E. 2: Mapas composicionais do óleo real para permeabilidade de 1mD - resolução implícita (acima) e método semi-implícito (abaixo).....</i>	<i>84</i>
<i>Figura E. 3: Mapas composicionais do óleo real para permeabilidade de 1000 mD, usando o método implícito (acima) e o método semi-implícito (abaixo).....</i>	<i>84</i>

## Lista de tabelas

<i>Tabela 4. 1: Parâmetros <math>\alpha'</math> e <math>\beta'</math> para o cálculo da viscosidade dos componentes na <math>T_b</math>.....</i>	<i>23</i>
<i>Tabela 5. 1: Dados relevantes do reservatório.....</i>	<i>44</i>
<i>Tabela 5. 2: Composição molar das misturas ternárias.....</i>	<i>45</i>
<i>Tabela 5. 3: Dados termodinâmicos dos componentes da mistura ternária.....</i>	<i>45</i>
<i>Tabela 5. 4: Pressão, temperatura e composição para os casos em que foram feitas as simulações, segundo pode ser observado na Figura 5.1.....</i>	<i>46</i>
<i>Tabela 5. 5: Propriedades da mistura ternária do Caso 1, nos pontos de referência 1,2 e 3. Firoozabadi (2000).....</i>	<i>47</i>
<i>Tabela 5. 6: Propriedades da mistura ternária do Caso 2, nos pontos de referência 4, 5 e 6. Firoozabadi (2000).....</i>	<i>47</i>
<i>Tabela 5.7: Composição e propriedades de cada pseudo-componente no ponto de referência... </i>	<i>48</i>
<i>Tabela 5.8: Composição e propriedades de cada componente no ponto de referência. ....</i>	<i>49</i>
<i>Tabela 6.1: Relação entre a malha e o número de blocos. ....</i>	<i>57</i>
<i>Tabela 6.2: Relação (<math>r</math>) de composição entre o topo e fundo. Para comparar os resultados da dissertação com os resultados de Firoozabadi quando é aumentada a malha.....</i>	<i>58</i>
<i>Tabela D. 1: Valores de “<math>r</math>” para diferentes valores de temperatura.....</i>	<i>80</i>
<i>Tabela D. 2: Valores de “<math>r</math>” para diferentes valores de composição.....</i>	<i>80</i>
<i>Tabela D. 3: Valores de “<math>r</math>” para diferentes valores de permeabilidade.....</i>	<i>81</i>
<i>Tabela E. 1: Número da iteração necessário para atingir a condição de equilíbrio. ....</i>	<i>83</i>

## Nomenclatura

### Letras Latinas

	<b>Unidade</b>
$c$ : densidade molar total	$\text{mol}/\text{m}^3$
$D_{i d}^M$ : coeficiente de difusão molar do componente “i” no componente “d”	$\text{m}^2/\text{s}$
$D_i^P$ : coeficiente de difusão por pressão do componente “i”	$\text{m}^2/\text{s.Pa}$
$D_i^T$ : coeficiente de difusão térmica do componente “i”	$\text{m}^2/\text{s.Pa}$
$g$ : aceleração da gravidade	$\text{m}/\text{s}^2$
H: altura do reservatório	$\text{m}$
$J$ : fluxo difusivo molar total	$\text{mol}/\text{m}^2.\text{s}$
Ja: matriz Jacobiana	
$K$ : permeabilidade do reservatório	<i>Darcy</i>
L: comprimento do reservatório	$\text{m}$
$M$ : massa molar	$\text{kg}/\text{kmol}$
$M_z$ : número de subdivisões no eixo z	<i>bloco</i>
$N_y$ : número de subdivisões no eixo y	<i>bloco</i>
P: pressão	<i>Pa</i>
Pc: pressão crítica	<i>Pa</i>
T: temperatura	<i>K</i>
Tb: temperatura de Boyle	<i>K</i>

$T_c$ : temperatura crítica	$K$
$T_y$ : gradiente térmico horizontal	$K/m$
$T_z$ : gradiente geotérmico	$K/m$
$V_c$ : volume crítico	$m^3/kmol$
$R$ : constante universal dos gases	$kJoule/K \cdot mol$
$u$ : velocidade de Darcy	$m/s$
$v$ : velocidade intersticial	$m/s$
$\bar{x}$ : vetor composição	$mol/mol$
$x$ : fração molar	$mol/mol$
$y$ : eixo na direção horizontal	<i>bloco</i>
$z$ : eixo na direção vertical	<i>bloco</i>

### Letras Gregas

$\Delta t$ : passo de tempo	$s$
$\Delta z$ : passo na coordenada vertical	$m/bloco$
$\Delta y$ : passo na coordenada horizontal	$m/bloco$
$\nabla = \left( \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right)$ : soma da derivada parcial com respeito	

às coordenadas y e z	$1/m$
$\beta_T$ : coeficiente de expansão térmica	$1/K$
$\beta_{x_i}$ : coeficiente de expansão composicional do componente i	$mol/mol$
$\delta$ ou $\mathcal{E}$ : tolerância ao erro	
$\mu$ : viscosidade	$cP$
$\rho$ : densidade mássica	$kg/m^3$
$\phi$ : porosidade	$vol/vol$

### Sobrescritos

o: estado inicial

n: novo

t: tempo

v: velho

### Subscritos

1: metano

2: componente médio

3: componente pesado

i: coordenada vertical

j: coordenada espacial horizontal

n: último componente da mistura (pesado)

### **Abreviaturas**

2D: bi-dimensional

Ac: fator acêntrico

C<sub>i</sub>: hidrocarboneto formado por i átomos de carbono

PC: ponto crítico

SG: gravidade específica

### **Siglas**

EOS: equação cúbica de estado

EQG: equilíbrio químico-gravitacional

GCV: gradiente composicional vertical

CGO: contato gás-óleo

PVT: pressão, volume, temperatura

PR-EOS: Equação de Estado de Peng Robinson

SRK-EOS: Equação de Estado de Soave Redlich Kwong

# Capítulo 1

## Introdução

A determinação dos gradientes de composição num reservatório envolve basicamente duas áreas de estudo, a engenharia de reservatórios e a simulação numérica de reservatórios.

A engenharia de reservatórios tem como objetivo a análise física da distribuição de petróleo e gás, assim como seu escoamento através das rochas porosas para definir métodos e meios que aumentem sua recuperação final da forma mais econômica possível. Esta área da engenharia analisa as forças hidrodinâmicas, gravitacionais e outras forças envolvidas no sistema rocha-fluido. Por meio desta análise estabelecem-se padrões eficientes de drenagem dos poços, sendo possível prever o desempenho do reservatório de petróleo ou gás, e introduzir métodos para maximizar a eficiência de produção.

Devido à complexidade das equações utilizadas no modelo descrito no Capítulo 4, a realização do cálculo baseia-se no uso da simulação numérica de reservatórios. O método numérico de diferenças finitas é o mais conhecido e utilizado na simulação numérica de reservatórios. Este método considera uma divisão do reservatório em blocos com características próprias nas quais a resposta do problema é dada pela solução das equações de fluxo para cada elemento.

Utilizando a simulação numérica e pela existência de computadores mais velozes, com mais memória e técnicas computacionais otimizadas, pode-se desenvolver simuladores mais completos. Com estes é possível uma melhor caracterização dos reservatórios.

Para realizar uma simulação numérica que caracterize a composição do reservatório antes do início da produção, deve ser tomada uma amostragem e assim realizar uma análise de pressão, volume e temperatura (PVT), sendo este um requisito indispensável para obter propriedades dos fluidos. Para que a amostragem seja representativa, deve ser realizada antes ou no início da vida produtiva do reservatório, por motivos que serão vistos no Capítulo 3. A amostragem é absolutamente necessária para auxiliar as atividades de engenharia de reservatório e dimensionamento das instalações de produção.

A motivação para este trabalho surge da importância da obtenção do gradiente de composição para a caracterização do reservatório, mesmo antes de se iniciar a produção. Com a caracterização completa do reservatório, é possível determinar de uma forma mais precisa a estratégia de produção. Sendo que:

- Por não se considerar o gradiente de composição pode-se obter erros muito grandes na previsão do volume de óleo “*in situ*”. Por exemplo, foram registrados erros de até 20 % em reservatórios de gás condensado do Mar do Norte, Wheaton (1991).

- Para o caso de óleos pesados, devido aos pesos moleculares elevados e ser a viscosidade função do peso molecular, o gradiente composicional provoca diferenças de viscosidade no reservatório. Sendo ela uma variável fundamental na decisão da estratégia de produção, provoca erros não considerar o mapa de composições, Wheaton (1991).

Nestes dois casos, o erro pode ser otimista ou pessimista dependendo da localização onde foi feita a amostragem. O segundo caso é de principal importância no Brasil, a maior parte das descobertas realizadas nos últimos anos tem apresentado óleo com essas características. A Petrobrás está investindo na pesquisa e no desenvolvimento de tecnologias que permitam um aproveitamento melhor dos óleos pesados, porém os custos de extração ainda são altos. Nas bacias de Campos, Santos e Espírito Santo, parte da descoberta desses óleos, não pode ser incorporada às reservas nacionais devido ao custo e às dificuldades técnicas associadas à extração. No passado, o reservatório com óleo pesado era abandonado sem um estudo mais aprofundado. Segundo Farid Schecaira, coordenador do Projeto de Recuperação Avançada de Petróleo (Pravap), "Existem óleos pesados que podem ser explorados. Algumas áreas do campo de

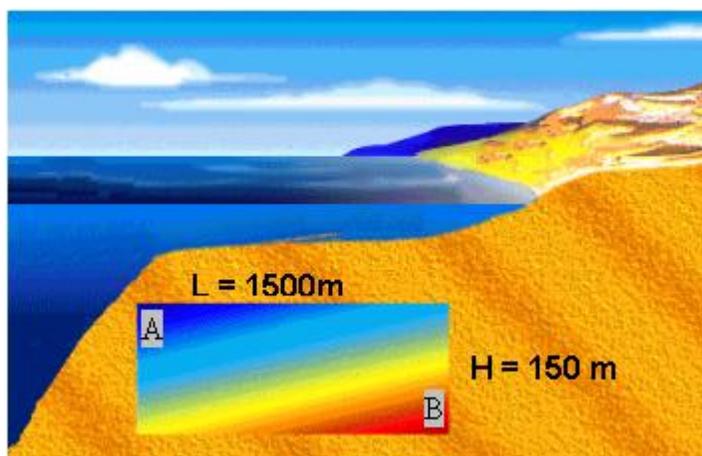
Marlim, por exemplo, têm óleo pesado e, no entanto, o campo é responsável por um terço da produção nacional" (O Desafio do Óleo Pesado: 2002).

Tendo como objetivo aumentar o rendimento de campos novos ou em operação, estratégias de produção têm sido intensamente estudadas com o auxílio de modelos computacionais. Neste caso, pode-se ver a importância de uma boa caracterização do óleo presente no reservatório. Com ela, é possível definir se é viável a produção num reservatório e qual é a metodologia que permite sua extração. Isto é feito sem necessidade de simplificar a distribuição de composição para sua análise econômica. O motivo final do trabalho desenvolvido é a realização de previsões realistas em problemas atuais.

O petróleo é um produto natural e complexo e a variação composicional poderia ter sido causada por várias razões. A composição é controlada por vários processos geológicos que ocorrem antes e depois da acumulação do fluido conforme será visto no Capítulo 3, como por exemplo, a gravidade, o gradiente de temperatura, a heterogeneidade da rocha, a gênese e os processos de acumulação.

O objetivo deste trabalho é determinar o mapa de composições de um reservatório original (reservatório que não começou a produzir) não isotérmico gravitacional no equilíbrio. Para isto é simulado um modelo composicional bidimensional. Neste modelo são várias as considerações usadas as quais serão explicadas no Capítulo 4. Entre elas tem-se um reservatório com gradiente térmico vertical e horizontal, os fluxos podem ser de difusão molecular (térmica, por pressão e por composição) e convecção natural. O mapa é obtido pela resolução de um sistema que pode ser resolvido de duas formas na determinação das concentrações: semi-implícito ou totalmente-implícito.

A simulação será feita considerando o gradiente de temperatura horizontal, o que acontece geralmente quando o reservatório está localizado próximo ao talude marinho (ponto A da Figura 1.1). Neste extremo ele é mais frio devido à menor cobertura da rocha, pois, a grandes profundidades, a temperatura no fundo do mar é constante e igual a 4 °C.



*Figura 1.1: Reservatório perto do talude marinho, onde as linhas representam isotermas dentro do reservatório. Sendo A o extremo mais frio e B o mais quente do reservatório.*

Como será visto no Capítulo 2, o efeito da gravidade sobre a composição em uma coluna estática de fluido vem sendo estudada desde 1800, quando Gibbs criou um modelo teórico avaliando o gradiente composicional vertical (GCV) com temperatura constante. A partir da década de 90, foram realizados muitos trabalhos sobre a variação composicional de reservatórios levando-se em consideração a convecção natural, como o de Bedrikovetskii *et al.* (1993). Pouco depois, Firoozabadi desenvolveu trabalhos baseados no estudo desta modelagem, considerando a variação composicional de misturas de multicomponentes e levando-se em consideração a difusão e a convecção natural em meios porosos.

Com a pretensão de demonstrar de maneira seqüencial o desenvolvimento da metodologia proposta, bem como a aplicação do modelo obtido no processo de interpretação, esta dissertação está organizada em 7 Capítulos:

Neste Capítulo 1, são apresentadas uma introdução sobre os temas abordados no trabalho e a motivação que levou à realização da pesquisa, bem como constam os objetivos a serem alcançados.

No Capítulo 2, é apresentada a revisão bibliográfica sobre o avanço histórico na metodologia para a determinação dos gradientes composicionais.

No Capítulo 3, são descritos os fenômenos que causam os gradientes composicionais, a metodologia existente e a proposta do presente trabalho.

No Capítulo 4, é apresentada a modelagem, ou seja, a construção do modelo matemático e computacional.

No Capítulo 5, é apresentada a aplicação prática do método desenvolvido para avaliação do simulador. É mostrado, também, os dados para a simulação de pseudo-misturas de óleos.

No Capítulo 6, são apresentados os principais resultados das aplicações.

No Capítulo 7, são apresentadas as principais conclusões obtidas nesta pesquisa, bem como as sugestões para futuros trabalhos correlatos.

## Capítulo 2

### Revisão bibliográfica

O efeito da gravidade sobre a composição numa coluna estática de fluido é estudado desde finais de 1800, quando Gibbs criou um modelo teórico para avaliar o gradiente composicional vertical (GCV) com temperatura constante (Gibbs, 1961).

$$\mu_{qi(p,Z,T)} = \mu_{qi(p_{ref},Z_{ref},T_{ref})} - m_i g(h - h_{ref}) \quad 2.1$$

$$\mu_{qi} = \frac{\partial [nRT \ln(f_i)]}{\partial x}$$

$$f_i = f(EOS)$$

onde:

EOS: equação de estado

g: aceleração da gravidade

h: profundidade

i: índice do componente

m: massa

$\mu_q$ : potencial químico

n: número de moles

p: pressão

R: constante universal dos gases

ref: referência

T: temperatura

Z: composição do fluido

Muskat (1930) chegou a uma solução analítica da Equação 2.1 usando uma equação de estado (EOS) simplificada e de mistura ideal, apresentando soluções explícitas de vários casos e discutindo a significância física do gradiente de concentração gravitacional. Com este modelo, o autor concluiu que o campo gravitacional tinha um efeito desprezível sobre o GCV do reservatório.

Sage & Lacey (1938) resolveram um modelo de EOS mais realista e mostraram um significativo GCV, concluindo que nas vizinhanças do ponto crítico (PC) a variação composicional é ainda maior.

Schulte (1980) resolveu, pela primeira vez, a citada equação usando EOS cúbica para determinar a solução do modelo de solução ideal usado por Sage & Lacey. Investigou o efeito das diferentes caracterizações na EOS e finalmente comparou os resultados com dados experimentais obtendo resultados concordantes qualitativamente, sugerindo que a presença de aromáticos no óleo afeta consideravelmente a distribuição de concentração vertical.

Também, em 1980, foram relatados significativos GCV no campo Brendt no Mar do Norte, como também a pouco usual transição gás-óleo, com ausência de contato gás-óleo (CGO) em reservatórios que estão próximos da temperatura crítica e pressões maiores que a pressão crítica (exemplo de CGO sub-saturado).

Holt, Lindberg & Ratje (1983) apresentaram uma publicação com a formulação para o cálculo do GCV incluindo a difusão térmica, porém limitando-se a misturas binárias, dando indícios de que os efeitos térmicos podem ser da mesma magnitude que os efeitos gravitacionais. Mas a formulação dele incluiu gravidade e temperatura independentemente.

Hirschberg (1988) discutiu a influência dos asfaltenos no gradiente composicional usando um modelo simplificado de dois componentes, um representando o asfalto e o outro o óleo remanescente sem asfaltenos. As observações feitas do GCV para óleos pesados (<20°API) têm uma forte influência da quantidade e natureza dos asfaltenos presentes no óleo. Ele também propôs um mecanismo sobre o desenvolvimento do “tapete asfáltico” ou tar-mat.

Rimens, Shulte & Jong (1988) apresentaram uma interessante avaliação do GCV do Campo Borba, em Omã, partindo do equilíbrio químico-gravitacional (EQG) para um campo

mediante medidas de dados PVT, a qual deu como resultado um significativo GCV. Eles também avaliaram a possibilidade da injeção de gás na região sub-saturada onde se poderia desenvolver multi-contatos miscíveis.

Metcalf (1988), por análise experimental de mais de 20 amostras de fluidos recombinadas, encontrou no campo de gás condensado (Anschtz Ranch East) a existência de um GCV o qual podia ser correlacionado linearmente com a profundidade.

Montel & Gouel (1985) sugeriram um algoritmo para resolver o problema de EQG isotérmico, por procedimento aproximado, uma vez que eles incluíram o cálculo da pressão somente no termo hidrostático. Discutiram também os efeitos da caracterização do fluido, pressão e temperatura do reservatório. Finalmente, sugeriram a inclusão da difusão térmica para a obtenção de resultados mais exatos.

Creek & Schrader (1985) relataram, para o campo de East Painter, comparações entre dados medidos e calculados de GCV usando um modelo EQG isotérmico, mencionando também a dificuldade no ajuste da pressão de saturação observada.

A partir da década de 90 são encontrados mais trabalhos sobre a variação composicional de reservatórios levando em conta a convecção natural, citados abaixo.

Belery & da Silva (1990) apresentaram uma formulação descritiva da combinação dos efeitos gravitacionais e difusão térmica para um sistema binário, e estenderam o processo para um sistema multicomponente em reservatórios do Mar do Norte. Esta descrição apresenta qualitativamente o efeito da difusão térmica.

Wheaton (1991) apresentou um modelo EQG incluindo as forças capilares. A simulação utiliza curvas de pressão capilar para determinar a pressão de saturação e a distribuição vertical de pressão no reservatório. Como resultado, ressaltou que não levar em conta o GCV em reservatórios de gás condensado gera erros no cálculo do volume inicial “in situ” de óleo.

Chaback (1992) fez um comentário sobre a publicação de Wheaton afirmando que o efeito não-isotérmico pode ter a mesma ordem de magnitude que o efeito gravitacional, e que o

sistema nunca atinge o equilíbrio (fluxo de energia zero), embora a condição de estado estacionário de fluxo de massa zero seja atingida.

Bedrikovetsky (1993) fez uma extensiva discussão sobre o tratamento matemático do GCV incluindo forças gravitacionais, capilares e térmicas. Porém, a expressão somente pode ser resolvida usando EOS simplificadas e misturas binárias. Contudo, essas forças não foram calculadas para misturas de multicomponentes.

Whiston & Belery (1994) descreveram detalhadamente um método para calcular a GCV causados pela gravidade e pelo gradiente térmico em reservatórios “*Black Oil*” e reservatórios com condições próximas à crítica, usando PR-EOS e SRK-EOS para descrever o modelo termodinâmico. Também descreveram um algoritmo para determinar a localização do CGO. Mencionaram também que infelizmente a física e a termodinâmica da difusão térmica não estão bem entendidas, no entanto, podem ter um forte efeito no gradiente composicional a ponto de eliminá-lo por completo.

Raul Mengual (1992) descreve a formação do tapete asfáltico ou “tar-mat” no campo El Furrial da Venezuela, baseado no perfil composicional dos asfaltenos.

Jacquim (1990) versa sobre a variação composicional em reservatórios de petróleo com convecção livre devido ao gradiente horizontal de temperatura. Riley e Firoozabadi (1998) apresentaram o primeiro trabalho que considera a convecção natural e a difusão em misturas binárias nas condições do reservatório.

Georis (1998) ilustra o potencial impacto da difusão térmica no gradiente composicional (num campo real) e como medir os coeficientes para testar existentes e futuras teorias ou correlações neste fenômeno de difusão térmica.

Firoozabadi e Ghorayeb (2000) apresentaram um trabalho muito completo sobre a variação composicional de misturas de multicomponentes, levando em conta a difusão e a convecção natural em meios porosos, tanto para reservatórios cujas condições estão longe do ponto crítico como também para aqueles reservatórios com condições próximas do ponto crítico.

Jaramillo (2001) indica que modelo é útil em procedimentos para se avaliar o efeito de GCV em reservatórios isotérmicos na determinação do volume de óleo “*in situ*” no caso de reservatórios de óleo volátil e gás condensado.

De acordo com os resultados apresentados nestas referências, o modelo de Firoozabadi (2000) foi o escolhido como base na formulação do presente trabalho, porque os resultados apresentados no trabalho dele servem para avaliar os resultados com os que serão obtidos neste trabalho, pelo menor tempo de desenvolvimento do programa, pela maior simplicidade de construção do modelo e pelo menor tempo de computação quando se trabalha com um pequeno número de componentes.

## Capítulo 3

### Metodologia

#### 3.1 Formação dos Gradientes Composicionais

A primeira etapa do processo de resolução é a análise das amostras da rocha em diferentes pontos do reservatório, bem como também determinar a presença do gradiente térmico vertical e horizontal. No caso do reservatório ficar perto do talude marinho a amostragem é recomendável não só no sentido vertical do reservatório, mas também no sentido longitudinal. Este assunto não será abordado aqui, pois escapa do tema em estudo. Depois de feita a amostragem, segue o desenvolvimento da modelagem baseando-se na metodologia proposta.

Para uma correta modelagem na determinação dos gradientes composicionais, surge a necessidade de saber por que eles são causados. Segundo Statoil e Whitson (2000), muitas condições, separadas ou em combinação, podem conduzir a uma variação significativa na composição do fluido vertical e horizontal, aparentemente não correlacionáveis. Podem ser descritas, entre elas:

- Segregação dos componentes mais pesados para o fundo do reservatório e os mais leves, como metano, em direção ao topo;
- Difusão térmica (geralmente) segrega o componente mais leve em direção ao topo (em direção às baixas temperaturas);

- Convecção termicamente induzida criando um sistema de fluxo “misturado” com uma composição mais ou menos constante, geralmente associada a uma alta permeabilidade ou a um reservatório fraturado;
- Migração e distribuição em equilíbrio de hidrocarbonetos ainda não completa. O tempo requerido para difusão em distâncias de quilômetros pode demorar uns 10 de milhões de anos;
- O fluxo dinâmico de um aquífero passando pela extensão lateral do reservatório pode criar um canal para a depleção contínua dos componentes leves como metano;
- Precipitação de asfaltenos durante a migração, o que pode resultar numa distribuição de vários tipos de óleo nas camadas de alta e baixa permeabilidade no reservatório;
- Precipitação de asfaltenos na parte baixa do reservatório (“tar mats”) causada por forças termodinâmicas e gravitacionais não ideais;
- Biodegradação variando lateralmente com a profundidade pode causar uma variação significativa, como por exemplo, no conteúdo de H<sub>2</sub>S e na densidade API;
- Concentração numa região (10-100 km) de metano pode resultar, para campos próximos, gradações distintas de saturação de gás. Por exemplo, blocos de falhas vizinhas que variam de sistemas saturados gás-óleo para óleos fortemente sub-saturados;
- Migração diferencial originada de múltiplos tipos de rochas entre diferentes camadas e unidades geológicas.

Para um dado reservatório é pouco provável modelar numericamente a maioria destes fenômenos complexos devido à carência de conhecimento físico e químico do sistema e das condições de contorno que são desconhecidas e mudam continuamente. Devido à falta de informação, enquanto as propriedades físicas e geológicas do reservatório necessárias para construir um modelo físico simples destes processos, não serão considerados todos os fenômenos existentes. Porém, pela importância em modelar um reservatório que não começou produzir, que será descrita na Seção seguinte, surge a escolha de uma metodologia representativa dos principais fenômenos descritos anteriormente. Os fenômenos que vão ser considerados no modelo numérico

deste trabalho são: a segregação composicional, difusão dada por fatores térmicos e composicionais.

### 3.2 Importância na escolha da metodologia

O trabalho surge da necessidade de se obter a composição de um reservatório antes de iniciar a produção por vários motivos. Entre eles pode-se destacar:

- A decisão ou não de desenvolver o campo, contando com os gradientes composicionais, evita erros na estimativa da quantidade de óleo no reservatório (“*oil in situ*”);
- A obtenção da composição do petróleo cru nas primeiras etapas do desenvolvimento de um campo auxilia na otimização dos recursos de exploração;
- Por exemplo, sendo o dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) altamente corrosivo, as conseqüências econômicas no desenvolvimento do reservatório de gás vão ser maiores se o reservatório possui altas porcentagens de  $\text{CO}_2$ ;
- Os problemas relacionados com acumulações de asfaltenos e parafinas nas linhas de fluxo também incidem na garantia do escoamento;
- A composição do fluxo pode restringir as quedas de pressão e os gastos admissíveis, evitando assim a condensação dos fluidos;
- Os componentes e a composição do reservatório determinam o comportamento das fases que podem ser indicados em um diagrama de fases. Este diagrama possui três variáveis: pressão, volume e temperatura (PVT). É possível, que durante a depleção, devido à queda da pressão, aconteça uma mudança de fases numa região do reservatório, a qual deve ser prevista pelo engenheiro de reservatórios;
- Pode-se determinar a existência de interconexão de reservatórios. Esta determinação é importante para uma eficiente avaliação e gestão, no planejamento de estratégias de produção (injeção de água ou gás). O método para a determinação de interconexões baseia-se no equilíbrio termodinâmico de amostras de distintas partes do reservatório;

➤ Também pode-se dizer que a determinação das propriedades termodinâmicas do reservatório antes do início da produção, gera um antecedente que beneficia futuros planejamentos no desenvolvimento de poços e dados para a simulação de reservatórios. Caso não seja feita a amostragem previamente à produção, as amostras tomadas não serão representativas de uma “zona limpa”, e sim uma mistura de óleos provenientes de diferentes regiões.

### 3.3 Metodologias

As metodologias existentes para o fenômeno de segregação composicional estão baseadas no método de equilíbrio químico gravitacional com uso da equação de segregação de Gibbs (Equação 3.1). Esta equação só leva em conta a dimensão vertical do reservatório e analisa o fenômeno do ponto de vista puramente termodinâmico (não levando em conta a existência de transporte de matéria por migração convectiva e difusiva).

$$dG_i = -S_i dT + V_i dP + m_i \cdot g \cdot dz \quad 3.1$$

No equilíbrio, não existem variações de temperatura ou pressão, resultando:

$$\left. \begin{array}{l} (dG_i = m_i \cdot g \cdot dz)_{T,P} \\ m_i = n_i PM_i \\ G_i = n_i \mu_{qi} \end{array} \right\} \Rightarrow (d\mu_{qi} = PM_i \cdot g \cdot dz)_{T,P} \quad i = 1, 2, \dots, Nc \quad 3.2$$

onde:

i: índice do componente

m: massa

$\mu_q$ : potencial químico

n: número de moles

$N_c$ : Número de componentes

PM: peso molecular

Esta equação é denominada “**Equação da sedimentação de Gibbs**”, e conceitualmente significa que, em condições isotérmicas, o potencial químico do n-ésimo componente,  $\mu_i$ , é função da posição vertical “z”.

Derivando o potencial químico em função das variáveis independentes pressão (P) e o vetor de composições ( $\bar{x}$ ), tem-se:

$$\left[ d\mu_{qi(P,\bar{x})} = \left( \frac{\partial \mu_{qi}}{\partial P} \right)_{\bar{x}} .dP + \sum_{j=1, j \neq d}^n \left( \frac{\partial \mu_{qi}}{\partial x_j} \right)_{P, x_{i \neq d}} .dx_d \right]_T \quad 3.3$$

Da Equação 3.1 para sistemas fechados a T,  $\bar{x}$  constantes, tem-se:

$$\left[ d\mu_i = V_i .dP \right]_{T, \bar{x}} \quad 3.4$$

Combinando tal relação com a equação de sedimentação de Gibbs, obtém-se:

$$\sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \mu_i}{\partial y_i} \right)_{P, T, y_{c \neq d}} \left( \frac{\partial y_d}{\partial z} \right) = (\rho \bar{v}_i - PM_i) g \quad 3.5$$

Expressando esta equação em forma matricial gera:

$$\begin{matrix} \overbrace{\left[ \begin{array}{cccc} \frac{\partial \mu_{q1}}{\partial x_1} & \frac{\partial \mu_{q1}}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \mu_{q1}}{\partial x_n} \\ \frac{\partial \mu_{q2}}{\partial x_1} & \frac{\partial \mu_{q2}}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \mu_{q2}}{\partial x_{n-1}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial \mu_{qn-1}}{\partial x_1} & \dots & \dots & \frac{\partial \mu_{qn-1}}{\partial x_n} \end{array} \right]}^{[A]} \cdot \overbrace{\left[ \begin{array}{c} \frac{\partial x_1}{\partial h} \\ \frac{\partial x_2}{\partial h} \\ \dots \\ \frac{\partial x_{n-1}}{\partial h} \end{array} \right]}^{[X]} = g \cdot \overbrace{\left[ \begin{array}{c} \rho \bar{v}_1 - PM_1 \\ \dots \\ \rho \bar{v}_2 - PM_2 \\ \dots \\ \rho \bar{v}_{n-1} - PM_{n-1} \end{array} \right]}^{[B]} \end{matrix} \quad 3.6$$

$$[\bar{X}] = [A]^{-1} \cdot [B] \quad 3.7$$

Antes da resolução deste sistema matricial, que fornece a variação composicional em cada ponto da vertical do reservatório, é necessária a utilização de uma EOS para a estimativa da matriz de coeficientes termodinâmicos, como, por exemplo, a EOS de Peng-Robinson, cuja descrição encontra-se no **Apêndice A**.

A base metodológica adotada neste trabalho para a resolução do problema segue aquela desenvolvida por Firoozabadi (2000). Nessa metodologia é considerado o modelo de mistura de multicomponentes (metano, etano e n-butano) que, segundo as condições PVT do problema escolhido, é monofásico. A resolução do problema é abordada a partir de um ponto de vista do equilíbrio termodinâmico para prever as condições em que se encontra o reservatório antes de iniciada a produção.

Nesse modelo adicionam-se tanto as equações de fluxo nos balanços parciais de matéria quanto a Lei de Darcy para relacionar a pressão com a velocidade, que deve ser substituída no balanço de materiais, resultando em:

$$\text{Balanço parcial dos componentes } \frac{\partial(c.x_i)}{\partial t} + \nabla.(c.x_i.v) + \nabla.J_i = 0 \quad \text{com } i=1,2,\dots,Nc-1$$

$$\text{Lei de Darcy: } u = -\frac{K}{\mu} [\nabla.P + \rho.g]$$

Usando a velocidade intersticial ou frontal, ( $v = u / \phi$ ) a qual representa a rapidez em que o fluido se move no espaço dos poros:

$$v = \frac{u}{\phi} = -\frac{K}{\phi.\mu} [\nabla.P + \rho.g]$$

onde

c: densidade molar total

J<sub>i</sub>: fluxo molar difusivo do componente i.

u: velocidade superficial ou de Darcy

v: velocidade intersticial ou frontal

Depois de feita a simulação são obtidos diferentes perfis composicionais quando são consideradas mudanças na temperatura, pressão ou composição da amostra no ponto de referência tomado.

Devido à alta não-linearidade do sistema de equações acopladas resultante, o resultado numérico geralmente apresenta problemas de instabilidade e divergência, cuja solução também é objeto de análise.

## Capítulo 4

### Modelagem

É descrita a seguir a estratégia utilizada para a determinação dos perfis das propriedades termodinâmicas conforme a profundidade ao longo do reservatório.

#### 4.1 Aspectos do modelo

Ao invés de considerar os processos geológicos do fluido conforme citado no Capítulo 3, neste trabalho utiliza-se a estratégia de supor a existência de um estado de não equilíbrio considerando que a composição é homogênea no instante inicial. Não obstante, esta consideração não significa que o sistema está em equilíbrio Termodinâmico.

Com o decorrer do tempo da simulação, o sistema gera fluxos de difusão e convecção (efeito misto), visando atingir o estado estacionário no equilíbrio Termodinâmico. Por ser empregada uma geometria bi-dimensional retangular Cartesiana (y-z), dentro do reservatório pode existir fluxo no sentido vertical “z” e no sentido horizontal “y”.

A condição de equilíbrio dinâmico é obtida quando a soma dos fluxos molares, convectivo e difusivo, é nula ou menor que uma tolerância que permita uma pequena margem de erro para todos os blocos do reservatório entre dois intervalos de tempo. O que conduz na redução da variação composicional temporal. É calculada a variação composicional temporal para os componentes em todos os blocos, e aquele que possui o maior valor é utilizado para comparar com a tolerância ( $\delta$ ), Equação 4.1.

$$\left| \left( x_{i(y,z)} \right)^{t+\Delta t} - \left( x_{i(y,z)} \right)^t \right| \leq \delta; \quad \forall y \in [0, L] \wedge z \in [0, H] \quad 4.1$$

onde:

H: altura do reservatório

$x_i$ : fração molar do componente i

L: comprimento do reservatório

t: tempo

$\delta$ : tolerância

$\Delta t$ : passo de tempo

É oportuno enfatizar que a condição de soma nula dos fluxos não implica que os fluxos difusivos e convectivos sejam nulos individualmente.

Finalmente, tendo atingido o equilíbrio, são gerados os perfis de composição, viscosidade e densidade.

## 4.2 Premissas do modelo

A metodologia iniciou-se a partir de um modelo simplificado para as propriedades físicas do fluido, bem como para as propriedades petrofísicas do reservatório:

- Permeabilidade constante e meio poroso isotrópico;
- Porosidade constante da rocha;
- Reservatório fechado, sem fluxo de fluidos através das fronteiras;
- Não se considera a presença de água (nem conata nem proveniente de aquífero) no reservatório;
- Para o modelo de validação considera-se viscosidade constante;

Por ser a acumulação do petróleo um processo lento, que pode demorar milhões de anos, considera-se que:

➤ A capacidade calorífica da rocha é muito maior que a do fluido, o que nos permite trabalhar com temperatura invariante com o tempo no meio poroso, sem que o fluido influencie o valor da temperatura;

➤ Equilíbrio térmico instantâneo: o fluido do reservatório que migra de uma região para outra, toma rapidamente o valor de temperatura correspondente ao da região do reservatório para o qual migrou.

### 4.3 Equações do modelo

As equações para o cálculo das temperaturas, as densidades, as pressões e os fluxos em cada bloco serão apresentados segundo a ordem dos cálculos.

#### 4.3.1 Cálculo da temperatura em cada bloco do reservatório:

Assumindo-se que a distribuição de temperatura no reservatório seja linear tanto na direção vertical quanto na horizontal, tem-se a temperatura em cada bloco pela seguinte equação:

$$T(y, z) = T_o + T_y (ny - ny_0) \Delta y + T_z (nz - nz_0) \Delta z \quad 4.2$$

onde:

$T_o$ : temperatura no bloco de referência [K], a qual encontra-se no meio do reservatório ( $ny = ny_0, nz = nz_0$ )

$T_z, T_y$ : gradientes térmico vertical  $\left(T_z = \frac{\partial T}{\partial z}\right)$  e horizontal  $\left(T_y = \frac{\partial T}{\partial y}\right)$  do reservatório [K/m], os

quais são considerados constantes em toda a dimensão do reservatório

$\Delta z, \Delta y$ : passo na coordenada vertical e horizontal respectivamente [m/bloco]

$nz, ny$ : numeração dos blocos nas respectivas coordenadas vertical e horizontal [bloco]

#### 4.3.2 Cálculo da densidade em cada bloco do reservatório:

A aproximação de Oberbeck-Boussinesq, extraída de Oberbeck *et al.* (1903), assume que a densidade seja constante, com exceção do termo gravitacional ( $\rho g z$ ), no qual assume-se que a densidade varia linearmente com a temperatura e as frações molares. Portanto, tem-se que:

$$\rho = \rho_0 \left[ 1 - \beta_T (T - T_0) - \sum_{i=1}^{n-1} (\beta_x)_i (x_i - x_{i0}) \right] \quad 4.3$$

onde  $\beta_T$  e  $\beta_{x_i}$  são os coeficientes de expansão térmica e composicional, respectivamente:

$$\beta_T = - \frac{1}{\rho_0} \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_{x_c}$$

$$(\beta_x)_i = - \frac{1}{\rho_0} \left. \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right|_{T, x_d} \quad d = 1, \dots, n-1, d \neq i$$

### 4.3.3 Cálculo das pressões e as velocidades em cada bloco do reservatório

Para obter as pressões são estabelecidas as equações de conservação de massa e das espécies em estado transitório, respectivamente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(c \cdot v) = 0 \quad 4.4$$

$$\frac{\partial(c \cdot x_i)}{\partial t} + \nabla(c \cdot x_i \cdot v) + \nabla J_i = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \quad 4.5$$

onde:

c: densidade molar total

$J_i$ : fluxo molar difusivo para o componente i

v: velocidade intersticial

Quando é aplicada a aproximação de Oberbeck-Boussinesq nas Equações 4.4 e 4.5, estas são simplificadas tendo como resultado:

$$\nabla v = 0 \quad 4.6$$

$$c \left[ \frac{\partial x_i}{\partial t} + \nabla(x_i \cdot v) \right] + \nabla J_i = 0 \quad 4.7$$

A velocidade intersticial é expressa segundo a Lei de Darcy para meios porosos:

$$v = -\frac{K}{\phi \cdot \mu} (\nabla(P - \rho \cdot g \cdot z)) \quad 4.8$$

onde:

g: aceleração da gravidade

K: permeabilidade

$\phi$ : porosidade do meio

P: pressão

$\mu$ : viscosidade

Considerando na Lei de Darcy que  $K$ ,  $\phi$  e  $\mu$  são constantes. Após serem combinadas as Equações 4.3, 4.6 e 4.8, é obtida a Equação 4.9 que permite o cálculo da pressão em cada ponto do reservatório.

$$\nabla^2 P = \rho_0 \cdot g \cdot \left( \beta_T \cdot T_z + \sum_{i=1}^{n-1} (\beta_x)_i \frac{\partial x_i}{\partial z} \right) \quad 4.9$$

#### 4.3.4 Cálculo do fluxo difusivo em cada bloco do reservatório:

O fluxo difusivo é dado pela seguinte equação:

$$J_i = -c \left( \sum_{j=1}^{n-1} D_{i,j}^M \cdot \nabla x_j + D_i^P \cdot \nabla P + D_i^T \cdot \nabla T \right) \quad i = 1..n-1 \quad 4.10$$

Sendo “ $J_i$ ” o fluxo de difusão molar do componente “ $i$ ”, onde:

$D_{ij}^M$ : Coeficiente de difusão molecular do componente  $i$

$D_i^T$ : Coeficiente de difusão térmico do componente  $i$

$D_i^P$ : Coeficiente de difusão por pressão do componente  $i$

Para uma mistura de “ $n$ ” componentes, o fluxo do componente “ $n$ ” é dado por:

$$J_n = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} J_i \quad . \quad \text{Para calcular a composição do componente “n”, vem: } x_n = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} x_i.$$

Lembramos que para um sistema de multicomponentes com “ $n$ ” substâncias, as equações para o componente “ $n$ ” será uma combinação linear das equações de conservação de cada espécie com a equação do balanço total.

### 4.3.5 Cálculo dos coeficientes de difusão

Os coeficientes de difusão devem ser calculados utilizando previamente uma equação de estado para os cálculos dos parâmetros termodinâmicos. O método de cálculo dos parâmetros encontra-se no **Apêndice A**.

Existem várias fontes para calcular o coeficiente de difusão em sistemas binários, Dysthe (1995). Porém, são escassas as correlações para calcular os coeficientes de difusão em misturas de multicomponentes em condições de reservatório. A que mostrou dar melhores resultados (Tyrell, 1984) é a correlação de Kooijman e Taylor (1991), a qual baseia-se em uma generalização da correlação de Vignes (1966) para misturas binárias.

#### 4.3.5.1 Cálculo do coeficiente de difusão molar

Da correlação de Kooijman e Taylor (1991) obtém-se os coeficientes de difusão molar:

$$[D_{ij}^M] = [B]^{-1} [\Gamma]$$

Onde:

$D_{ij}^M$  : coeficiente de difusão molar do componente i no componente j

$$B_{ii} = \frac{x_i}{D_{in}} + \sum_{\substack{k=1 \\ i \neq k}}^n \frac{x_k}{D_{ik}}$$

$$B_{ij} = -x_i \left( \frac{1}{D_{ij}} - \frac{1}{D_{in}} \right)$$

$$\Gamma_{ij} = 1 + x_i \left. \frac{\partial \ln(f_i)}{\partial x_j} \right|_{T, P, x_k, k \neq j=1 \dots n-1}$$

onde:

$f_i$  : fugacidade de componente i

$x_i$  : fração molar do componente i

$$D_{ij} = (\hat{D}_{ij}^0)^{x_j} (\hat{D}_{ji}^0)^{x_i} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^n (\hat{D}_{ik}^0 \hat{D}_{ij}^0)^{x_k / 2}$$

Para calcular  $D_{ij}$  calculam-se os coeficientes de difusão para diluição infinita  $\hat{D}_{ij}^0$  utilizando a correlação de Hayduk e Minhas (1982):

$$\hat{D}_{ij}^0 = 13,3(10^{-8}) T^{1,47} \eta_j^{(10,2/V_i - 0,791)} V_i^{-0,71} \quad i, j = 1 \dots n \quad i \neq j$$

onde:

$\eta_j$  : viscosidade do componente j na temperatura de Boyle

$V_i$  : volume parcial molar do componente i

A viscosidade na temperatura de Boyle é calculada utilizando a correlação de Adamezewskit e Calderwood (1975):

$$\eta_i = 10^{-4} \alpha' \exp(-10^{-4} \beta' T_{bi}) \exp\left[\frac{(2,85T_{bi} - 181,6)}{T}\right] P$$

Sendo  $\alpha'$  e  $\beta'$  função da  $T_b$  segundo a Tabela 4.1:

Tabela 4. 1: Parâmetros  $\alpha'$  e  $\beta'$  para o cálculo da viscosidade dos componentes na  $T_b$ .

	$\alpha'$	$\beta'$
$120 \leq T_b \leq 207$	2,61	3,89
$207 \leq T_b \leq 434$	2,80	7,20
$434 \leq T_b \leq 760$	3,80	13,9
$760 \leq T_b \leq 860$	7,38	22,3

#### 4.3.5.2 Cálculo do coeficiente de difusão por pressão

Para calcular o coeficiente de difusão por pressão é utilizada a seguinte expressão:

$$D_i^P = a_{in} D_{in} \frac{M_i x_i}{RTL_{ij}} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \left[ \sum_{j=1}^{n-1} x_j V_j + \frac{M_n x_n}{M_k} V_k - \frac{1}{c} \right] \quad i = 1 \dots n - 1$$

onde:

c: densidade molar total

M: massa molecular

R: constante universal dos gases

$$a_{in} = \frac{M_i M_n}{M^2} \quad i=1..n-1$$

$$D_{in} = \frac{M^2 R L_{ii}}{c M_i^2 M_n^2 x_i x_n} \quad i=1..n-1$$

os coeficientes fenomenológicos  $L_{ij}$  são obtidos da expressão do coeficiente de difusão molar:

$$D_{ij}^M = a_{in} D_{in} \frac{M_i x_i}{L_{ii}} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \sum_{l=1}^{n-1} \frac{M_l x_l + M_n x_n \Delta}{M_k} \frac{\partial \ln(f_i)}{\partial x_j} \Bigg|_{x_j, T, P} \quad i, j=1..n-1$$

Sendo para 3 componentes:

$$D_{11}^M = a_{13} D_{13} M_1 x_1 \left( c_3 + c_4 \frac{L_{12}}{L_{11}} \right)$$

$$D_{12}^M = a_{13} D_{13} M_1 x_1 \left( c_1 + c_2 \frac{L_{12}}{L_{11}} \right)$$

$$D_{21}^M = a_{23} D_{23} M_2 x_2 \left( c_4 + c_3 \frac{L_{21}}{L_{22}} \right)$$

$$D_{22}^M = a_{23} D_{23} M_2 x_2 \left( c_2 + c_1 \frac{L_{21}}{L_{22}} \right)$$

onde:

$$c_1 = \frac{M_1 x_1 + M_3 x_3}{M_1} \frac{\partial \ln(f_1)}{\partial x_2} \Bigg|_{P, T, x_2} + x_2 \frac{\partial \ln(f_2)}{\partial x_2} \Bigg|_{P, T, x_1}$$

$$c_2 = \frac{M_2 x_2 + M_3 x_3}{M_2} \frac{\partial \ln(f_2)}{\partial x_2} \Bigg|_{P, T, x_1} + x_1 \frac{\partial \ln(f_1)}{\partial x_2} \Bigg|_{P, T, x_1}$$

$$c_3 = \frac{M_1 x_1 + M_3 x_3}{M_1} \frac{\partial \ln(f_1)}{\partial x_1} \Bigg|_{P, T, x_2} + x_2 \frac{\partial \ln(f_2)}{\partial x_1} \Bigg|_{P, T, x_2}$$

$$c_4 = \frac{M_2 x_2 + M_3 x_3}{M_2} \frac{\partial \ln(f_2)}{\partial x_1} \Bigg|_{P, T, x_2} + x_1 \frac{\partial \ln(f_1)}{\partial x_1} \Bigg|_{P, T, x_2}$$

Relacionando as 4 equações do coeficiente de difusão molecular  $D_{ij}^M$  obtêm-se os coeficientes fenomenológicos  $L_{ij}$ , os quais permitem os cálculos dos coeficientes de difusão por pressão  $D_i^P$ :

$$L_{11} = \frac{cM_3x_3}{R(c_2c_3 - c_1c_4)}(c_2D_{11}^M - c_4D_{12}^M)$$

$$L_{12} = \frac{-cM_3x_3}{R(c_2c_3 - c_1c_4)}(c_1D_{11}^M - c_3D_{12}^M)$$

$$L_{21} = \frac{cM_3x_3}{R(c_2c_3 - c_1c_4)}(c_2D_{21}^M - c_4D_{22}^M)$$

$$L_{22} = \frac{-cM_3x_3}{R(c_2c_3 - c_1c_4)}(c_1D_{21}^M - c_3D_{22}^M)$$

#### 4.3.5.3 Cálculo do coeficiente de difusão térmica

Calculam-se os coeficientes de difusão térmica  $D_i^T$  com a seguinte expressão:

$$D_i^T = a_{in} D_{in} M \frac{k_{Ti}}{T} \quad i = 1 \dots n-1$$

onde os coeficientes faltantes para poder calcular a difusão térmica são a relações de difusão térmica  $k_{Ti}$ :

$$k_{Ti} = \frac{M_i x_i M_n x_n}{MRTL_{ii}} \sum_{j=1}^{n-1} L_{ij} \left( \frac{Q_j^*}{M_j} - \frac{Q_n^*}{M_n} \right) \quad i=1 \dots n-1$$

onde o calor de transporte do componente  $i$ ,  $Q_i^*$ , numa mistura de  $n$  componentes é estimado usando a correlação dada por Glasstone (1973):

$$Q_i^* = -\frac{\Delta \bar{U}_i}{\tau_i} + \left[ \sum_{j=1}^n \frac{x_j \Delta \bar{U}_j}{\tau_j} \right] \frac{V_i}{\sum_{j=1}^n x_j V_j} \quad i=1 \dots n$$

Sendo:

$\Delta \bar{U}_i$ : a energia parcial molar interna do componente  $i$ , a qual deriva da equação de Peng Robinson.

$\tau_i$ : representa o tamanho do poro necessário pra ter fluxo viscoso Glasstone (1973).

$$\tau_i = \frac{\Delta U_i^{vap}}{\Delta U_i^{vis}}$$

onde:

$\Delta U_i^{vap}$ : Energia de vaporização

$\Delta U_i^{vis}$ : Energia do fluxo viscoso

Tendo sido descrito anteriormente o Modelo Numérico, pode-se ver a seguir o fluxograma, na Figura 4.1, que representa a seqüência de cálculos para a obtenção dos mapas composicionais no modelo implícito.

O procedimento de cálculo começa determinando a temperatura em cada bloco (Equação 4.2). Da discretização da Equação 4.9, resolve-se a matriz resultante que permite obter o mapa de pressões no reservatório. Conhecendo as temperaturas no reservatório são calculadas as densidades pela Equação 4.3.

Tendo isto, é possível resolver o balanço de massa (Equação 4.5), onde o fluxo convectivo é dado pela lei de Darcy para médios porosos (Equação 4.8) e o fluxo difusivo pela Equação 4.10. Da resolução do balanço obtém-se a composição do intervalo de tempo posterior (em cada bloco), e com estas novas composições são recalculados a densidade, a pressão, a função potencial e o fluxo convectivo e difusivo.

Tendo os fluxos pode-se calcular novamente o mapa de concentrações o qual é comparado com o anterior. O processo é repetido até que o sistema atinja as condições de equilíbrio (Equação 4.1).

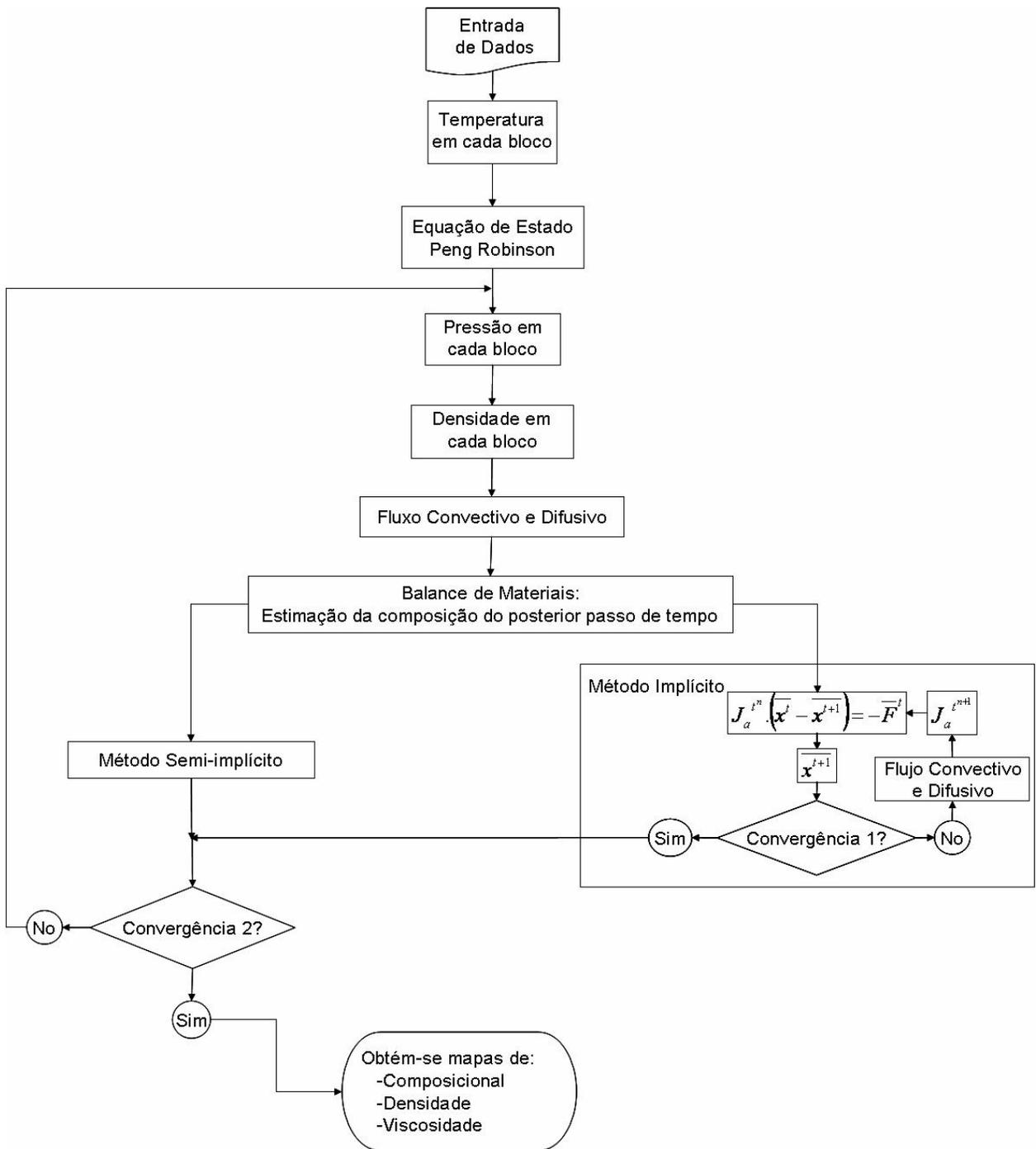


Figura 4.1 fluxograma da seqüência de cálculos para a obtenção dos mapas composicionais no modelo semi-implícito e totalmente implícito.

#### 4.4 Discretização das equações de balanço

Para obter a resolução do sistema de equações diferenciais do modelo numérico discretizam-se estas equações e é incorporada a solução em um algoritmo de resolução numérica.

No modelo é considerado um reservatório retangular o qual é dividido por uma malha com  $M_z$  subdivisões uniformes na direção vertical e  $N_y$  subdivisões uniformes na direção horizontal. Cada bloco tem características próprias (Figura 4.2), definindo-se o bloco como cada unidade em que o reservatório é dividido. Portanto, tem-se o reservatório dividido em células retangulares.

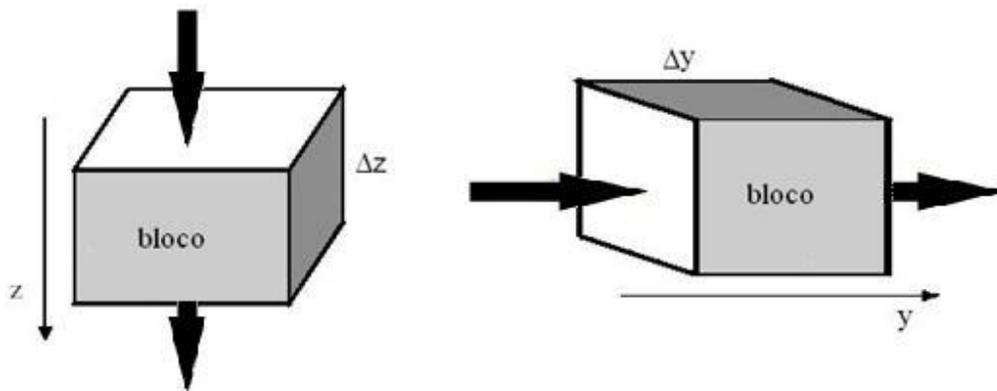


Figura 4.2: Diagrama representando um bloco do reservatório indicando os possíveis sentidos de fluxo.

Em consequência, os passos de discretização nas coordenadas espaciais foram:

$$\text{No passo vertical: } \Delta z = \frac{H}{M_z}$$

$$\text{No passo horizontal: } \Delta y = \frac{L}{N_y}$$

onde:

H: altura do reservatório

L: comprimento do reservatório

$M_z$ : número de blocos na componente vertical

$N_y$ : número de blocos na componente horizontal

Como o problema baseou-se em uma mistura ternária, as equações a serem resolvidas para  $n = 3$  ficam:

Da Equação 4.9:

$$\nabla^2 P = \rho_o \cdot g \cdot \left( \beta_T \cdot T_Z + \beta_{x1} \frac{\partial x_1}{\partial z} + \beta_{x2} \frac{\partial x_2}{\partial z} \right) \quad 4.11$$

$$\text{chamando } b_{ij} = \rho_o \cdot g \cdot \left( \beta_T \cdot T_Z + \beta_{x1} \frac{\partial x_1}{\partial z} + \beta_{x2} \frac{\partial x_2}{\partial z} \right) \quad 4.12$$

#### 4.5 Método semi-implícito

Discretizando a Equação. 4.11 que fornece o perfil de pressão, tem-se:

$$\nabla^2 P = \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = \frac{P_{i-1,j} - 2P_{i,j} + P_{i+1,j}}{\Delta y^2} + \frac{P_{i,j-1} - 2P_{i,j} + P_{i,j+1}}{\Delta z^2} = b_{ij} \quad 4.13$$

Colocando em evidência os termos de pressão na equação diferencial discretizada, vem da Equação 4.13:

$$\Delta z^2 P_{i+1,j} + \Delta y^2 P_{i,j+1} + \Delta z^2 P_{i-1,j} + \Delta y^2 P_{i,j-1} - 2(\Delta y^2 + \Delta z^2) P_{i,j} = b_{ij} \cdot \Delta y^2 \cdot \Delta z^2 \quad 4.14$$

Nesta Equação 4.14, a pressão em cada bloco “i,j” é função das pressões dos blocos que o rodeiam. Mudando-se os índices conforme apresentado na Figura 4.3:

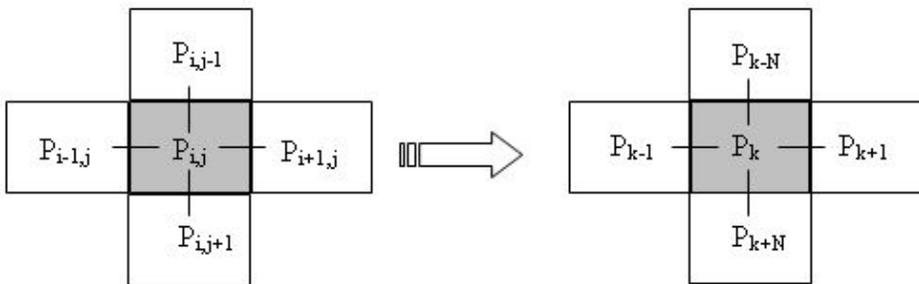


Figura 4.3: Representação esquemática da mudança de sub-índice, de um bloco genérico nas distintas direções.

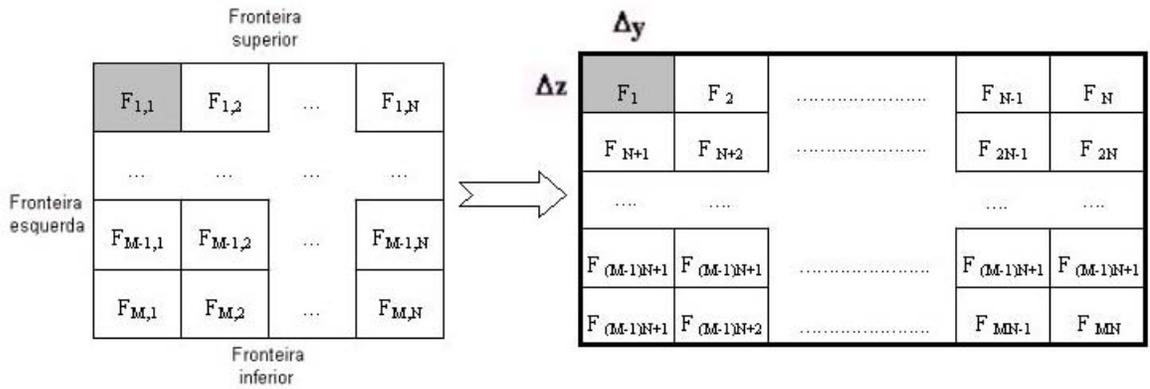


Figura 4.4: Sendo  $F$  uma variável genérica do bloco, a qual pode ser pressão, composição ou velocidade (método implícito).

A equação de Laplace discretizada com a nova indexação ficará:

$$\Delta z^2 P_{k+1} + \Delta y^2 P_{k+N} + \Delta z^2 P_{k-1} + \Delta y^2 P_{k-N} - 2(\Delta y^2 + \Delta z^2) P_k = b_k \cdot \Delta y^2 \cdot \Delta z^2 \quad 4.15$$

Por ser um sistema bi-dimensional, a resolução do campo de pressão enquadra-se na resolução de uma matriz quadrada pentadiagonal de  $Mz.Ny \times Mz.Ny$ . Obtendo a Equação 4.16 que é representada pela Figura 4.5.

$$[A] \cdot \bar{P} = \bar{B} \quad 4.16$$

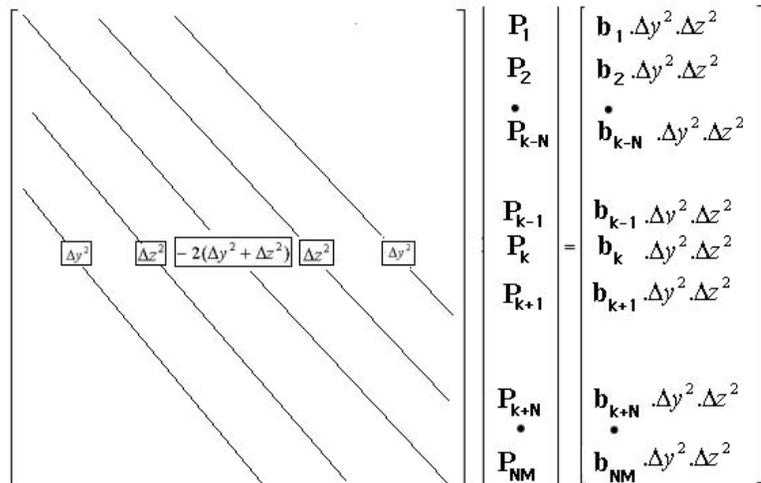


Figura 4.5: Matriz pentadiagonal para a resolução do campo de pressões (sem considerar as condições de contorno).

Na matriz “A” tem-se (sem considerar as condições de contorno):

$$a_{i,i} = -2(\Delta y^2 + \Delta z^2) - \text{coeficientes da diagonal principal}$$

$$a_{i+1,i} = a_{i-1,i} = \Delta z^2 - \text{coeficientes das diagonais superior e inferior}$$

$$a_{i,i-N_y} = a_{i,i+N_y} = \Delta y^2 - \text{coeficientes das diagonais afastadas inferiores e superiores}$$

O termo independente, vetor “ $\bar{B}$ ” é calculado em cada bloco pela seguinte expressão:

$$B_i = \rho^o \cdot g \cdot \left( \beta_T \cdot T_z + \beta_{x1} \frac{\partial x_1}{\partial z} + \beta_{x2} \frac{\partial x_2}{\partial z} \right) \cdot \Delta y^2 \cdot \Delta z^2$$

Sendo “ $\bar{P}$ ” o vetor das pressões as quais são incógnitas. Este vetor possui  $N_y \cdot M_z$  elementos, neste sentido deve ser determinada uma pressão por bloco.

#### 4.5.1 Fronteiras e blocos internos

Antes de começar o processo de discretização dos fluxos, será definido como:

➤ Blocos ou pontos internos: aqueles que não têm contato com a fronteira do reservatório, nomeados com os índices:

$$k = N + 2, N + 3, \dots, 2N - 1, \dots, 2N + 2, 2N + 3, \dots, 3N - 1, \dots, (M - 2)N + 2, (M - 2)N + 3, \dots, (M - 1)N - 1$$

➤ Blocos ou pontos externos: aqueles que pertencem à fronteira do reservatório, podendo ser eles da fronteira superior, inferior, esquerda ou direita:

Definem-se as seguintes fronteiras ou blocos externos:

Fronteira superior:  $k=1, 2, 3, \dots, N_y$

Fronteira inferior:  $k=N_y \cdot (M_z-1)+1, N_y \cdot (M_z-1)+2, N_y \cdot (M_z-1)+3, \dots, M_z \cdot N_y$

Fronteira esquerda:  $k=1, 1 \cdot (N_y+1), 2 \cdot (N_y+1), \dots, N_y \cdot (M_z-1)+1$

Fronteira direita:  $k=1 \cdot N_y, 2 \cdot N_y, 3 \cdot N_y, \dots, M_z \cdot N_y$

#### 4.5.2 Condição inicial

Como condição inicial para o cálculo do mapa de pressão do reservatório tem-se a pressão  $P_i = P_0$ , temperatura  $T_i = T_0$  e propriedades no ponto de referência (porosidade, permeabilidade, composição, densidade e viscosidade), sendo “i” o bloco de referência que, no modelo, é o bloco localizado no meio do reservatório.

#### 4.5.3 Condições de contorno

Este sistema requer dois tipos de condições de contorno:

- Tipo *Dirichlet*: aplicada para fixar o valor da pressão no fundo e no topo do reservatório.
- Tipo *Newman*: aplicada sobre a derivada da pressão, que no caso específico de reservatório selado, representa uma condição de espelho na pressão da fronteira esquerda e direita do reservatório.

O reservatório é selado em seus quatro extremos, impedindo o fluxo através das paredes. Porém, as equações dos blocos das fronteiras, contêm variáveis que são dependentes de valores que estão fora delas. É por isso que são usadas as condições de contorno nos blocos das fronteiras, para determinar o valor da variável em pontos que estão fora da malha. A variável na qual são aplicadas as condições de contorno é a pressão:

$$\begin{cases} \text{fronteira horizontal: } P_{k+1} = P_{k-1} \\ \text{fronteira vertical superior: } P_{k-N} = P_{k+N} - 2\Delta z \cdot \rho \cdot g \\ \text{fronteira vertical inferior: } P_{k+N} = P_{k-N} + 2\Delta z \cdot \rho \cdot g \end{cases} \quad 4.17$$

Na Equação 4.16 são substituídas as condições dadas pela Equação 4.17 nos blocos correspondentes às fronteiras do reservatório, e particularmente nos extremos são consideradas ambas as fronteiras (horizontal e vertical).

O sentido físico da condição de Newman, em caso de reservatórios, implica que não existirá fluxo convectivo nem difusivo através das fronteiras para nenhum componente (Figura 4.6):

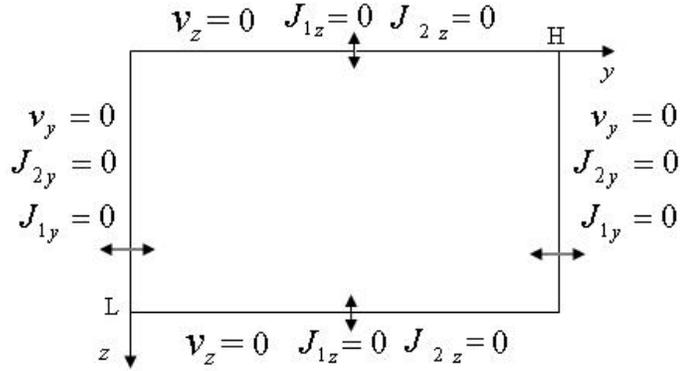


Figura 4.6: Esquematização das condições de contorno nos extremos do reservatório.

Aplicando-se estas duas condições nas fronteiras do reservatório, tem-se:

➤ No fundo do reservatório:  $P_{k+N} = P_{k-N} + 2\Delta z \cdot \rho \cdot g$

Substituindo esta condição na Equação 4.16:

$$\Delta z^2 P_{k+1} + \Delta z^2 P_{k-1} + 2\Delta y^2 P_{k-N} - 2(\Delta y^2 + \Delta z^2)P_k = B_k - 2\Delta z \cdot \Delta y^2 \cdot \rho \cdot g \quad 4.18$$

➤ No topo do reservatório:  $P_{k-N} = P_{k+N} - 2\Delta z \cdot \rho \cdot g$

Substituindo essa condição na Equação 4.16:

$$\Delta z^2 P_{k+1} + 2\Delta y^2 P_{k-N} + \Delta z^2 P_{k-1} - 2(\Delta y^2 + \Delta z^2)P_k = B_k + 2\Delta z \cdot \Delta y^2 \cdot \rho \cdot g \quad 4.19$$

➤ Na fronteira direita do reservatório:  $P_{k+1} = P_{k-1}$

Substituindo essa condição na Equação 4.16:

$$\Delta y^2 P_{k+N} + 2\Delta z^2 P_{k-1} + \Delta y^2 P_{k-N} - 2(\Delta y^2 + \Delta z^2)P_k = B_k \quad 4.20$$

➤ Na fronteira esquerda do reservatório:  $P_{k-1} = P_{k+1}$

Substituindo essa condição na Equação 4.16:

$$2\Delta z^2 P_{k+1} + \Delta y^2 P_{k+N} + \Delta y^2 P_{k-N} - 2(\Delta y^2 + \Delta z^2)P_k = B_k \quad 4.21$$

Do mesmo modo são obtidas as quatro equações que resultariam da combinação das condições de contorno nos extremos com duas fronteiras, as quais seriam de topo esquerdo, topo direito, fundo esquerdo e fundo direito.

#### 4.5.4 Obtenção do campo de pressões

A matriz A e o vetor B fica como esquematizados a seguir, com as condições de contorno já introduzidas:

$$\Rightarrow \bar{P} = [A]^{-1} * \bar{B} \quad 4.22$$

Na Equação 4.22, “A” é a matriz dos coeficientes. Eles são constantes, pois são só dependentes do passo vertical e horizontal. “B” é o vetor dos termos independentes. Ele contém valores do gradiente de concentração que deverão ser avaliados bloco a bloco cada vez que seja necessário recalculer o mapa de pressões.

Conseqüentemente, da resolução do sistema matricial mostrado na Figura 4.7 pode-se obter o campo de pressões “ $\bar{P}$ ”, sendo que este deve ser recalculado em cada passo do tempo, ou seja, em cada atualização da composição no reservatório faz-se necessário voltar a ajustar o campo de pressões.

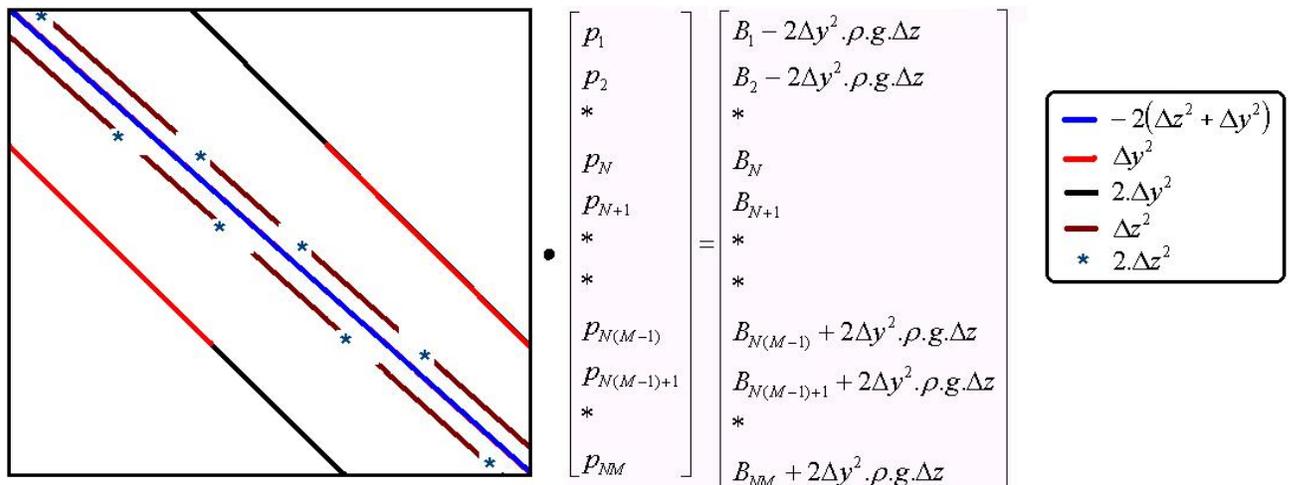


Figura 4.7: Representação do sistema matricial que dá como resultado  $\bar{P}$  que representa o campo de pressões do reservatório na iteração k.

#### 4.5.5 Cálculo do fluxo convectivo

Utilizando a densidade em cada bloco e o campo de pressões obtido, é calculada a função potencial ( $\Phi = P - \rho.g.z$ ) em cada bloco do reservatório, para o cálculo da velocidade intersticial na direção “y” e “z”.

Considerando-se as componentes vertical e horizontal da velocidade da Lei de Darcy para médios porosos (Equação 4.18) a partir da função potencial, e aplicando a condição de fluxo convectivo nulo através da fronteira, obtém-se:

Nos blocos internos do reservatório:

$$(v_z)_k = -\frac{K}{\phi.\mu} \left[ \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right], \quad (v_y)_k = -\frac{K}{\phi.\mu} \left[ \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right]$$

Nas fronteiras superior e inferior:

$$(v_z)_k = 0$$

Nas fronteiras esquerda e direita:

$$(v_y)_k = 0$$

#### 4.5.6 Cálculo do fluxo difusivo

Depois de obtido o campo de pressões é calculado sua derivada em relação aos eixos “y” e “z” para utilizá-lo no cálculo do termo de fluxo difusivo por pressão.

Reescrevendo a Equação 4.10 em termos das componentes cartesianas “y” e “z”, vem:

$$\begin{aligned}
J_{1y} &= -c \left[ D_{11} \left( \frac{\partial x_1}{\partial y} \right) + D_{12} \left( \frac{\partial x_2}{\partial y} \right) + D_1^P \left( \frac{\partial P}{\partial y} \right) + D_1^T \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right] \\
J_{1z} &= -c \left[ D_{11} \left( \frac{\partial x_1}{\partial z} \right) + D_{12} \left( \frac{\partial x_2}{\partial z} \right) + D_1^P \left( \frac{\partial P}{\partial z} \right) + D_1^T \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] \\
J_{2y} &= -c \left[ D_{21} \left( \frac{\partial x_1}{\partial y} \right) + D_{22} \left( \frac{\partial x_2}{\partial y} \right) + D_2^P \left( \frac{\partial P}{\partial y} \right) + D_2^T \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right] \\
J_{2z} &= -c \left[ D_{21} \left( \frac{\partial x_1}{\partial z} \right) + D_{22} \left( \frac{\partial x_2}{\partial z} \right) + D_2^P \left( \frac{\partial P}{\partial z} \right) + D_2^T \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right]
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Para o cálculo do fluxo difusivo nas Equações 4.23, devem ser aplicadas as condições de contorno de fluxo difusivo nulo através das quatro fronteiras do sistema.

Nas fronteiras superior e inferior:

$$J_{iz} = 0,$$

Nas fronteiras direita e esquerda:

$$J_{iy} = 0$$

onde “i” varia de um até dois, por ser no modelo, uma mistura ternária,

Introduzindo nas Equações 4.23 o gradiente térmico vertical  $\left( T_z = \frac{\partial T}{\partial z} \right)$  e o horizontal do reservatório  $\left( T_y = \frac{\partial T}{\partial y} \right)$ , o resto dos blocos do reservatório fica:

$$(J_{iz})_k = - \left[ D_{11} \left( \frac{\partial x}{\partial z} \right) + D_{12} \left( \frac{\partial x}{\partial z} \right) + D_1^P \left( \frac{\partial P}{\partial z} \right) + D_1^T . T_z \right] \text{ para } i=1 \text{ e } 2 \tag{4.24}$$

$$(J_{iy})_k = - \left[ D_{11} \left( \frac{\partial x}{\partial y} \right) + D_{12} \left( \frac{\partial x}{\partial y} \right) + D_1^P \left( \frac{\partial P}{\partial y} \right) + D_1^T . T_y \right] \text{ para } i=1 \text{ e } 2 \tag{4.25}$$

#### 4.5.7 Cálculo dos perfis composicionais

Como neste trabalho é utilizada uma mistura ternária, são necessárias somente duas equações de conservação das espécies químicas, podendo reescrever a Equação 4.7 como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_1}{\partial t} + \frac{\partial(x_1 \cdot v)}{\partial y} + \frac{\partial(x_1 \cdot v)}{\partial z} + \frac{\partial J_1}{c \cdot \partial y} + \frac{\partial J_1}{c \cdot \partial z} &= 0 \\ \frac{\partial x_2}{\partial t} + \frac{\partial(x_2 \cdot v)}{\partial y} + \frac{\partial(x_2 \cdot v)}{\partial z} + \frac{\partial J_2}{c \cdot \partial y} + \frac{\partial J_2}{c \cdot \partial z} &= 0 \end{aligned}$$

Usando a diferença centrada na discretização espacial da concentração e a diferença adiantada na derivada temporal da concentração, a resolução fica explícita:

$$\begin{aligned} \frac{(x_1)_k^{t+1} - (x_1)_k^t}{\Delta t} &= - \frac{\partial(v_y \cdot x_1)}{\partial y} - \frac{\partial(v_z \cdot x_1)}{\partial z} - \frac{\partial J_1}{c \cdot \partial y} - \frac{\partial J_1}{c \cdot \partial z} \\ \frac{(x_2)_k^{t+1} - (x_2)_k^t}{\Delta t} &= - \frac{\partial(v_y \cdot x_2)}{\partial y} - \frac{\partial(v_z \cdot x_2)}{\partial z} - \frac{\partial J_2}{\partial y} - \frac{\partial J_2}{\partial z} \end{aligned}$$

Colocando-se em evidência o valor da concentração da espécie “i” para o próximo intervalo de tempo, vem:

$$(x_i)_k^{t+1} = (x_i)_k^t - \Delta t \cdot \left[ \left( \frac{\partial(v_y \cdot x_i)}{\partial y} \right)_k^t + \left( \frac{\partial(v_z \cdot x_i)}{\partial z} \right)_k^t + \frac{1}{c} \left( \frac{\partial J_i}{\partial z} \right)_k^t + \frac{1}{c} \left( \frac{\partial J_i}{\partial y} \right)_k^t \right] \quad 4.26$$

onde “j” é a coordenada temporal e “k” é a iteração no mesmo intervalo de tempo.

Na equação anterior, os termos que contém o supra-índice “t” já foram calculados e a única incógnita da Equação 4.26 será a “composição atualizada”  $(x_i)_k^{t+1}$ , que por estar dentro de uma equação algébrica pode ser posta em evidência e calculada de forma explícita. Com os novos valores de composição é completada uma iteração do programa recalculando-se o mapa de pressão, o fluxo difusivo e as velocidades.

#### 4.5.8 Convergência do sistema

Como já foi explicado anteriormente, a condição de partida é aquela que apresenta composição homogênea em todo o reservatório, não estando o sistema em equilíbrio termodinâmico.

A condição final ou de convergência é aquela na qual o fluxo convectivo e o difusivo estão em equilíbrio e a composição não varia de um passo de tempo para outro, ou seja, numericamente:  $\left| (x_i)^{t+1} - (x_i)^t \right| \leq \delta = 1.10^{-8}$  em todos os blocos. Quando isto ocorre, podemos afirmar que o sistema atingiu a convergência.

#### 4.6 Método implícito

O campo de pressões é calculado como foi citado no método semi-implícito, mas as novas concentrações são calculadas utilizando o método de Newton multidimensional. Este método é implementado por ter uma maior robustez que o método semi-implícito evitando as oscilações no método semi-implícito que foram observadas no decorrer de algumas simulações.

Da Equação 4.10:

$$\begin{aligned} J_1 &= -c \left( D_{11} \cdot \nabla x_1 + D_{12} \cdot \nabla x_2 + D_1^P \cdot \nabla P + D_1^T \cdot \nabla T \right) \\ J_2 &= -c \left( D_{21} \cdot \nabla x_1 + D_{22} \cdot \nabla x_2 + D_2^P \cdot \nabla P + D_2^T \cdot \nabla T \right) \end{aligned} \quad 4.27$$

Substituindo na Equação 4.7 a Equação 4.27:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_1}{\partial t} + \nabla(v \cdot x_1) - D_{11} \cdot \nabla^2 x_1 - D_{12} \cdot \nabla^2 x_2 - D_1^P \cdot \nabla^2 P - \nabla(D_1^T \cdot \nabla T) &= 0 \\ \frac{\partial x_2}{\partial t} + \nabla(v \cdot x_2) - D_{21} \cdot \nabla^2 x_1 - D_{22} \cdot \nabla^2 x_2 - D_2^P \cdot \nabla^2 P - \nabla(D_2^T \cdot \nabla T) &= 0 \end{aligned} \quad 4.28$$

Substituindo a Equação 4.11 na Equação 4.28:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_1}{\partial t} + \nabla(v \cdot x_1) - D_{11} \nabla^2 x_1 - D_{12} \nabla^2 x_2 - D_1^P \left( \rho^o \cdot g \cdot \left( \beta_T \cdot T_z + \beta_{x1} \frac{\partial x_1}{\partial z} + \beta_{x2} \frac{\partial x_2}{\partial z} \right) \right) - \nabla(D_1^T \cdot \nabla T) &= 0 \\ \frac{\partial x_2}{\partial t} + \nabla(v \cdot x_2) - D_{21} \nabla^2 x_1 - D_{22} \nabla^2 x_2 - D_2^P \left( \rho^o \cdot g \cdot \left( \beta_T \cdot T_z + \beta_{x1} \frac{\partial x_1}{\partial z} + \beta_{x2} \frac{\partial x_2}{\partial z} \right) \right) - \nabla(D_2^T \cdot \nabla T) &= 0 \end{aligned} \quad 4.29$$

Podem ser separados os termos da Equação 4.29 obtendo as equações resultantes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_1}{\partial t} + \frac{\partial(v_y \cdot x_1)}{\partial y} + \frac{\partial(v_z \cdot x_1)}{\partial z} - D_{11} \left( \frac{\partial^2 x_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 x_1}{\partial z^2} \right) - D_{12} \left( \frac{\partial^2 x_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 x_2}{\partial z^2} \right) - \\ + D_1^p \cdot \rho^o \cdot g \cdot \beta_{x1} \frac{\partial x_1}{\partial z} - D_1^p \cdot \rho^o \cdot g \cdot \beta_{x2} \frac{\partial x_2}{\partial z} = D_1^p \cdot \rho^o \cdot g \cdot \beta_T \cdot T_z + \nabla(D_1^T \cdot \nabla T) \end{aligned} \quad 4.30a$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_2}{\partial t} + \frac{\partial(v_y \cdot x_2)}{\partial y} + \frac{\partial(v_z \cdot x_2)}{\partial z} - D_{21} \left( \frac{\partial^2 x_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 x_1}{\partial z^2} \right) - D_{22} \left( \frac{\partial^2 x_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 x_2}{\partial z^2} \right) - \\ + D_2^p \rho^o \cdot g \cdot \beta_{x1} \frac{\partial x_1}{\partial z} - D_2^p \rho^o \cdot g \cdot \beta_{x2} \frac{\partial x_2}{\partial z} = D_2^p \rho^o \cdot g \cdot \beta_T \cdot T_z + \nabla(D_2^T \cdot \nabla T) \end{aligned} \quad 4.30b$$

#### 4.6.1 Discretização

Do mesmo jeito que foi visto no item 4.5, após ter o sistema de equações na forma diferencial, torna-se necessário a sua discretização com a finalidade de poder colocar as equações num modelo computacional.

Para a derivada segunda se utiliza o esquema de discretização centrada como pode ser visto na Equação 4.13. A derivada primeira calcula-se com a aproximação adiantada ou atrasada dependendo do sentido de fluxo dado pela velocidade e coeficientes de difusão nas fronteiras do bloco, por exemplo, para os seguintes termos:

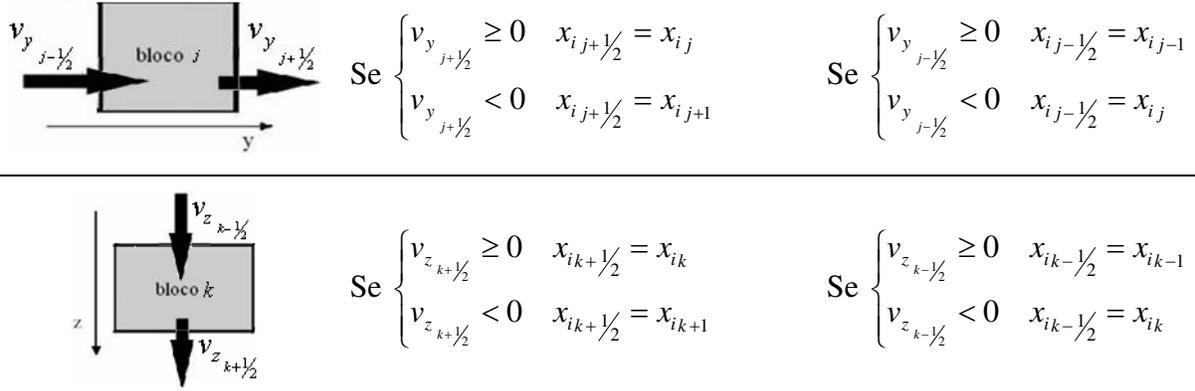
$$\frac{\partial(v_y \cdot x_i)}{dy} \quad \text{e} \quad \frac{\partial(v_z \cdot x_i)}{dz}$$

É considerado o sentido da velocidade nas interfaces do bloco analisado, obtendo-se:

$$\frac{\partial(v_y \cdot x_i)}{dy} = \frac{v_{y,j+1/2} \cdot x_{i,j+1/2} - v_{y,j-1/2} \cdot x_{i,j-1/2}}{\Delta y}$$

$$\frac{\partial(v_z \cdot x_i)}{dz} = \frac{v_{z,k+1/2} \cdot x_{i,k+1/2} - v_{z,k-1/2} \cdot x_{i,k-1/2}}{\Delta z}$$

Os valores de concentração utilizados são os que cumprem as seguintes condições:



Como exemplo da discretização da Equações 4.30a, tem-se:

$$\begin{aligned} & \frac{x_{1k}^{t+1} - x_{1k}^t}{\Delta t} + \frac{(v_y \cdot x_1)_{k+1}^{t+1} - (v_y \cdot x_1)_k^{t+1}}{\Delta y} + \frac{(v_z \cdot x_1)_{k+N}^{t+1} - (v_z \cdot x_1)_k^{t+1}}{\Delta z} - D_{11} \left( \frac{x_{1k+1}^{t+1} - 2x_{1k}^{t+1} + x_{1k-1}^{t+1}}{\Delta y^2} + \frac{x_{1k+N}^{t+1} - 2x_{1k}^{t+1} + x_{1k-N}^{t+1}}{\Delta z^2} \right) + \\ & - D_{12} \left( \frac{x_{2k+1}^{t+1} - 2x_{2k}^{t+1} + x_{2k-1}^{t+1}}{\Delta y^2} + \frac{x_{2k+N}^{t+1} - 2x_{2k}^{t+1} + x_{2k-N}^{t+1}}{\Delta z^2} \right) - D_1^p \cdot \rho^o \cdot g \cdot \beta_{x1} \frac{x_{1k+N}^{t+1} - x_{1k}^{t+1}}{\Delta z} - D_1^p \cdot \rho^o \cdot g \cdot \beta_{x2} \frac{x_{2k+N}^{t+1} - x_{2k}^{t+1}}{\Delta z} + \\ & - D_1^p \cdot \rho^o \cdot g \cdot \beta_T \cdot T_z + (T_z + T_y) \cdot \frac{(D_1^T)_{k+N} - (D_1^T)_k}{\Delta z} + (T_z + T_y) \cdot \frac{(D_1^T)_{k+1} - (D_1^T)_k}{\Delta y} = 0 \end{aligned}$$

Das equações discretizadas obtém-se o sistema seguinte (duas funções por bloco  $F_1$  e  $F_2$ ) do qual se procura a raiz. Os termos convectivo e difusivo do tempo  $t+1$  estão contidos nos coeficientes “a”, ”b”, ”c”, ”d” e ”e” sendo a formulação matemática deles dependentes do sentido das velocidades intersticiais e dos fluxos difusivos nesse bloco de análise,  $f_i$  representa os termos constantes.

$$\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,j+N_y} \\ x_{2,j+N_y} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,j+1} \\ x_{2,j+1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} \\ e_{21} & e_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,j-N_y} \\ x_{2,j-N_y} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,j-1} \\ x_{2,j-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,j} \\ x_{2,j} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} f_{1j} \\ f_{2j} \end{pmatrix}$$

ou:

$$\text{root}(\bar{F}) = d^{t+1} \cdot \bar{x}_{k+N}^{t+1} + b^{t+1} \cdot \bar{x}_{k+1}^{t+1} + e^{t+1} \cdot \bar{x}_{k-N}^{t+1} + c^{t+1} \cdot \bar{x}_{k-1}^{t+1} + a^{t+1} \cdot \bar{x}_k^{t+1} - \bar{f} \quad 4.31$$

Depois de iniciado o sistema de cálculo, no estado de não equilíbrio, as forças impulsionas do fluxo (pressão, temperatura e composição) geram variações de concentração, que são calculadas utilizando-se o método de Newton multidimensional, para o qual é requerido o cálculo do Jacobiano deste sistema. O Jacobiano obtém-se da derivada das funções referente a todas as concentrações em cada bloco.

$$Ja_j = \left[ \begin{array}{c} \left[ \begin{array}{cc} \frac{\partial F_1}{\partial x_{11}} & \frac{\partial F_1}{\partial x_{21}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{11}} & \frac{\partial F_2}{\partial x_{21}} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{cc} \frac{\partial F_1}{\partial x_{12}} & \frac{\partial F_1}{\partial x_{22}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{12}} & \frac{\partial F_2}{\partial x_{22}} \end{array} \right] \cdots \cdots \left[ \begin{array}{cc} \frac{\partial F_1}{\partial x_{1j}} & \frac{\partial F_1}{\partial x_{2j}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{1j}} & \frac{\partial F_2}{\partial x_{2j}} \end{array} \right] \cdots \cdots \left[ \begin{array}{cc} \frac{\partial F_1}{\partial x_{1MN}} & \frac{\partial F_1}{\partial x_{2MN}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{1MN}} & \frac{\partial F_2}{\partial x_{2MN}} \end{array} \right] \end{array} \right]$$

Para calcular a variação de composição em cada bloco, deve-se resolver cada uma destas equações em cada bloco. Cada uma delas depende da outra, no bloco de análise e nos blocos que rodeiam este, isso significa que é um sistema de resolução simultânea. Sabendo que o sistema é bidimensional e que a matriz Jacobiana possui um sistema de equações de duas equações em cada bloco, obtém-se uma matriz pentadiagonal por blocos, o que quer dizer que em cada coeficiente da matriz pentadiagonal existe um sistema de equações para ser resolvido, uma matriz quadrada de tamanho n-1 por n-1, sendo “n” o número de componentes.

O sistema resultante pode simplificar-se segundo a Equação 4.32:

$$Ja.\delta\bar{x} = -\bar{F} \quad 4.32$$

Sendo que:

F: termo independente

Ja: matriz Jacobiana

$$\delta\bar{x} = \bar{x}^t - \bar{x}^{t+1} \Rightarrow \bar{x}^{t+1} = \delta\bar{x} + \bar{x}^t$$

#### 4.6.2 Condição inicial

Como condição inicial para o cálculo das concentrações é utilizada a concentração no ponto de referência:  $x_1 = x_{10}$ ,  $x_2 = x_{20}$  e  $x_3 = x_{30}$ , sendo “0” o bloco de referência.

#### 4.6.3 Condições de contorno

Por estar simulando um reservatório selado em seus quatro extremos, foi usada uma condição de contorno tipo Newman para determinar o valor das concentrações em pontos que estão na fronteiras da malha, segundo foi visto na Figura 4.8.

$$\begin{cases} \text{fronteira horizontal} & x_{k+1} = x_{k-1} \\ \text{fronteira vertical} & x_{k+N} = x_{k-N} \end{cases} \quad 4.33$$

#### 4.6.4 Cálculos

Depois de resolver o sistema (Equação 4.32), aplicando as condições iniciais e de contorno, é esperado obter-se os valores de concentração referentes ao tempo  $t+1$ ,  $\overline{x^{t+1}}$ . Por ser o método implícito, os coeficientes são funções da velocidade intersticial e dos coeficientes de difusão referentes ao  $t+1$ , porém, para inicializar a resolução do sistema utilizando dados do tempo  $t$ . Estes coeficientes são calculados novamente, em um processo iterativo até que os valores de concentração gerados em duas iterações sucessivas sejam pouco diferente da obtida na iteração anterior (menor que a tolerância).

Com as novas concentrações é verificado se a variação da concentração obtida entre o tempo  $t$  e o tempo  $t+1$  é menor que uma tolerância. Se for assim, o sistema atingiu o equilíbrio e são apresentados os resultados, caso contrario, é recalculada a pressão e densidades segundo o fluxograma apresentado na Figura 4.1. Com as novas pressões são calculadas as concentrações do tempo  $t+2$ . O procedimento se repete até atingir o equilíbrio, segundo foi visto na Seção 4.5.8.

#### 4.6.5 Critérios de avaliação e escolha do modelo

O principal motivo da escolha de duas misturas ideais e a de óleo real está fundamentado na comparação de ambos comportamentos e verificar se a tendência de segregação das misturas mais simples (aquelas que são matematicamente mais fáceis de modelar) se correspondem com a do modelo de óleo real.

Para validar a metodologia, são simulados vários testes considerando diferentes propriedades descritas na Seção 5.1. Na validação é utilizada uma mistura ternária formada por metano, etano e n-butano, cujos resultados serão comparados com os obtidos por Firoozabadi (2000) através de comparações qualitativas e quantitativas utilizando diferentes valores de pressão, temperatura, composição e permeabilidade. Para analisar o efeito das forças difusivas frente às convectivas são feitas simulações, as quais têm uma faixa de variação que vão desde a permeabilidade nula, que serve para avaliar o comportamento fenomenológico da difusão molecular pura, até valores altos de permeabilidade, para avaliar os efeitos da convecção natural e por último, os valores de permeabilidade intermédios servirão para avaliar fenômenos de transporte mistos (convectivos e difusivos). Outros resultados também são apresentados, tais

como, a variação da composição com o tempo em função de cada avanço nas iterações, o valor da velocidade (na direção “y” e “z”) com as iterações, o tempo requerido nas simulações dependendo do número de blocos considerados e, finalmente, o balanço de materiais para verificar o princípio de conservação de massa.

Ao final destes testes, é feita a análise dos resultados e são executadas novas simulações utilizando duas misturas: uma delas formada por  $nC_4$ ,  $nC_8$  e  $nC_{16}$ , e a outra formada por uma mistura de pseudo-componentes referente a um óleo real. Este processo de formação dos pseudo-componentes não é trivial, já que as propriedades de cada um deles não é simplesmente a média ponderada dos componentes puros, senão uma série de correlações empíricas e termodinâmicas das propriedades de mistura. Depois, os resultados foram comparados com os obtidos através do simulador térmico comercial.

## Capítulo 5

### Aplicações

Neste capítulo serão apresentadas a validação do modelo proposto, comparando-o com os resultados obtidos por Firoozabadi na Seção 5.1 e a aplicação para uma mistura de óleo real na Seção 5.2.

#### 5.1 Dados necessários para comparar o modelo

Propriedades do reservatório:

*Tabela 5. 1: Dados relevantes do reservatório.*

	<i>Reservatório</i>
<i>Comprimento [m]</i>	<i>1500</i>
<i>Altura [m]</i>	<i>150</i>
<i>Porosidade (<math>\phi</math>)</i>	<i>0,25</i>
<i>Permeabilidade [mD]</i>	<i>0, 1 e 10</i>
<i>Gradiente térmico vertical</i>	<i>3,5 K/100 m</i>
<i>Gradiente térmico horizontal</i>	<i>1,8 K/1000 m</i>

A composição molar inicial das misturas ternárias de todo o reservatório estão dadas na Tabela 5.2 para os casos de análise.

Tabela 5. 2: Composição molar das misturas ternárias.

Componente	Caso 1 Composição (fração molar)	Caso 2 Composição (fração molar)
Metano	0,25	0,35
Etano	0,25	0,35
n-Butano	0,50	0,30

Correspondendo da Tabela 5.2, para o Caso 1 os pontos 1, 2 e 3 e para o Caso 2 os pontos 4, 5 e 6 da Figura 5.1.

### 5.1.1 Propriedades termodinâmicas da mistura ternária

Tabela 5. 3: Dados termodinâmicos dos componentes da mistura ternária.

	$P_c \cdot 10^6$ [Pa]	$T_c$ [K]	$V_c$ [m <sup>3</sup> /mol]	$M$ [kg/kmol]	$SG$	$T_b$ [K]
$C_1$	45.4.10 <sup>6</sup>	305,4	99	16,04	0,300	190,6
$C_2$	48.2.10 <sup>6</sup>	372,8	148	30,07	0,356	184,5
$nC_4$	37.5.10 <sup>6</sup>	425,2	255	58,12	0,584	272,7

onde:

SG: gravidade específica

M: massa molecular

Pc: pressão crítica

Tc: temperatura crítica

Tb: temperatura de ebulição.

Vc: volume crítico

A fim de avaliar o funcionamento do modelo programado segundo as equações do Capítulo 4, analisam-se dois casos de composições distintas (Tabela 5.4), e em cada um são considerados três pontos de referência diferentes, para comparar com os resultados obtidos por Firoozabadi (2000), e assim avaliar o desempenho do simulador em distintas condições.

Para cada ponto de análise da Tabela 5.4 foram feitas simulações para as permeabilidades de 0, 1 e 10 mD.

Tabela 5. 4: Pressão, temperatura e composição para os casos em que foram feitas as simulações, segundo pode ser observado na Figura 5.1.

		Temperatura (K)	Pressão (Pa)
Caso1 x1=0,25 x2=0,25 x3=0,50	Ponto 1	315	$7,0 \times 10^6$
	Ponto 2	345	$7,8 \times 10^6$
	Ponto 3	395	$7,4 \times 10^6$
Caso 2 x1=0,35 x2=0,35 x3=0,30	Ponto 4	290	$8,5 \times 10^6$
	Ponto 5	315	$9,3 \times 10^6$
	Ponto 6	365	$8,8 \times 10^6$

Estes pontos podem ser representados num diagrama P-T, segundo pode ver-se na Figura 5.1.

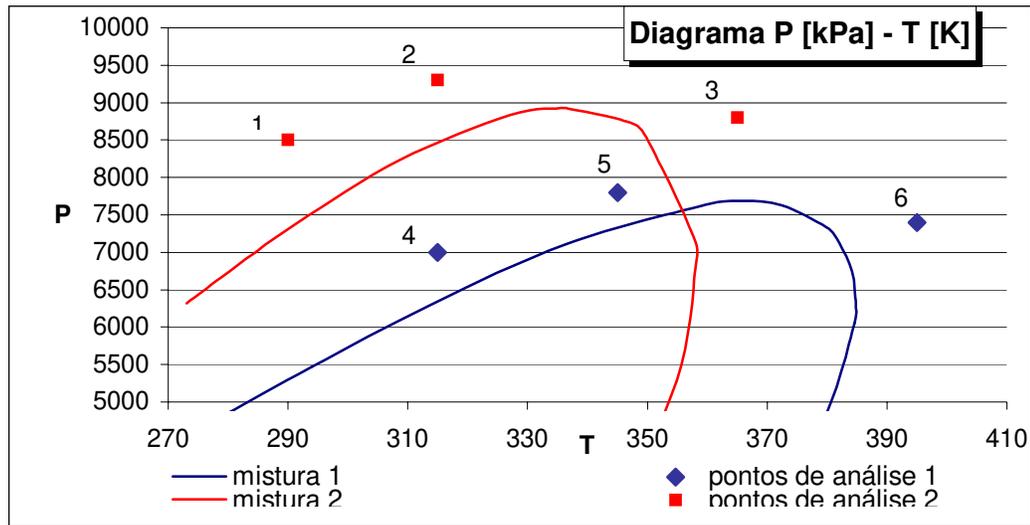


Figura 5.1: Diagrama PT para os casos analisados, sendo os pontos de referência para as simulações os valores indicados por 1, 2, 3, 4, 5 e 6.

Em cada ponto do Diagrama P-T, tem-se diferentes propriedades para as misturas, sendo estas calculadas usando a equação de estado de Peng Robinson, **Apêndice A**. Depois de calculadas, são incorporadas no modelo para o cálculo dos mapas composicionais. As propriedades calculadas das misturas ternárias no ponto de referência podem ser vistas na Tabela 5.5 e na Tabela 5.6.

Tabela 5. 5: Propriedades da mistura ternária do Caso 1, nos pontos de referência 1,2 e 3.  
Firoozabadi (2000)

	$p_0=7.10^6 \text{ Pa}; T_0= 315 \text{ K}$	$p_0=7.8.10^6 \text{ Pa}; T_0= 345 \text{ K}$	$p_0=7.4.10^6 \text{ Pa}; T_0= 395 \text{ K}$
$\rho[\text{kg/m}^3]$	450,35	374,41	175,36
$\mu [\text{cP}]$	0,0667	0,046	0,0202
$\beta_T [K^{-1}]$	0,052	-0,086	-0,0143
$\beta_{x1}$	-1,25	-2,17	-3,98
$B_{x2}$	-0,72	-1,25	-2,44
$D_{11} [\text{m}^2/\text{s}]$	$3,14.10^{-9}$	$3,52.10^{-9}$	$3,96.10^{-9}$
$D_{12} [\text{m}^2/\text{s}]$	$-0,77.10^{-9}$	$-1,68.10^{-9}$	$-3,24.10^{-9}$
$D_{21} [\text{m}^2/\text{s}]$	$-0,32.10^{-9}$	$-0,83.10^{-9}$	$-1,87.10^{-9}$
$D_{22} [\text{m}^2/\text{s}]$	$4,68.10^{-9}$	$6,43.10^{-9}$	$8,76.10^{-9}$
$D_1^P [\text{m}^2/\text{Pa.s}]$	$0,32.10^{-16}$	$0,87.10^{-16}$	$4,54.10^{-16}$
$D_2^P [\text{m}^2/\text{Pa.s}]$	$0,14.10^{-16}$	$0,47.10^{-16}$	$2,86.10^{-16}$
$D_1^T [\text{m}^2/\text{K.s}]$	$-5,13.10^{-12}$	$-8,94.10^{-12}$	$-11,8.10^{-12}$
$D_2^T [\text{m}^2/\text{K.s}]$	$-1,35.10^{-12}$	$-2,71.10^{-12}$	$-4,36.10^{-12}$

Tabela 5. 6: Propriedades da mistura ternária do Caso 2, nos pontos de referência 4, 5 e 6.  
Firoozabadi (2000)

	$p_0=8,5.10^6 \text{ Pa}; T_0=290 \text{ K}$	$p_0=9,3.10^6 \text{ Pa}; T_0= 315 \text{ K}$	$p_0=8,8.10^6 \text{ Pa}; T_0= 365 \text{ K}$
$\rho[\text{kg/m}^3]$	423,20	358,66	178,58
$\mu [\text{cP}]$	0,1016	0,0734	0,0377
$\beta_T [K^{-1}]$	-0,051	-0,0086	-0,0126
$\beta_{x1}$	-1,71	-2,48	-3,98
$B_{x2}$	-0,97	-1,44	-2,44
$D_{11} [\text{m}^2/\text{s}]$	$2,51.10^{-9}$	$2,26.10^{-9}$	$3,11.10^{-9}$
$D_{12} [\text{m}^2/\text{s}]$	$-1,14.10^{-9}$	$-2,03.10^{-9}$	$-3,89.10^{-9}$
$D_{21} [\text{m}^2/\text{s}]$	$0,06.10^{-9}$	$-0,74.10^{-9}$	$-0,56.10^{-9}$
$D_{22} [\text{m}^2/\text{s}]$	$4,87.10^{-9}$	$6,10.10^{-9}$	$9,67.10^{-9}$
$D_1^P [\text{m}^2/\text{Pa.s}]$	$0,43.10^{-16}$	$0,98.10^{-16}$	$4,87.10^{-16}$
$D_2^P [\text{m}^2/\text{Pa.s}]$	$0,12.10^{-16}$	$0,43.10^{-16}$	$2,75.10^{-16}$
$D_1^T [\text{m}^2/\text{K.s}]$	$-6,94.10^{-12}$	$-10,0.10^{-12}$	$-13,2.10^{-12}$
$D_2^T [\text{m}^2/\text{K.s}]$	$0,32.10^{-12}$	$0,11.10^{-12}$	$-0,76.10^{-12}$

Neste modelo, para avaliar o simulador, os valores dos coeficientes de difusão foram mantidos constantes em cada bloco do reservatório e para todo o intervalo de tempo. Tal hipótese é válida sempre que se trabalhe longe do ponto crítico e com variações composicionais e térmicas não muito significativas. Nestes casos, a variação dos coeficientes de difusão é pequena dentro da variação dos parâmetros físicos e termofísicos para a mistura ternária.

## 5.2 Modelo de teste e de óleo real

### 5.2.1 Dados necessários para o modelo

Foi utilizada uma mistura ternária formada a partir de uma mistura de componentes similar à apresentada por Lee *et al.* (1998) nas condições de referência  $P=7.10^6$  Pa e  $T=315$  K. Reduzindo o número de componentes do óleo de reservatório a uma “pseudo-mistura ternária”, a qual será aqui denominada “mistura de óleo real”. As principais propriedades estão definidas na Tabela 5.7, indicando a localização deste ponto de análise no diagrama P-T, dado pela Figura 5.2.

*Tabela 5.7: Composição e propriedades de cada pseudo-componente no ponto de referência.*

Componente	C1-C5	C6-C15	C16-C30
Fração Molar	0,345	0,452	0,203
Massa Molecular [kg/kmol]	26,37	132,71	308,645
Temp. Crítica [K]	263,228	615,605	810,69
Pressão Crítica [Pa]	$46,28 \times 10^6$	$25,5 \times 10^6$	$13,1 \times 10^6$
Volume Crítico [m <sup>3</sup> /mol]	133,5	512	1115,8
Temp. de ebulição normal [K]	204,305	440,665	647,544
Fator Acêntrico	0,05752	0,42997	0,8932
Volume de Correção	-0,11202	0,079406	0,123935

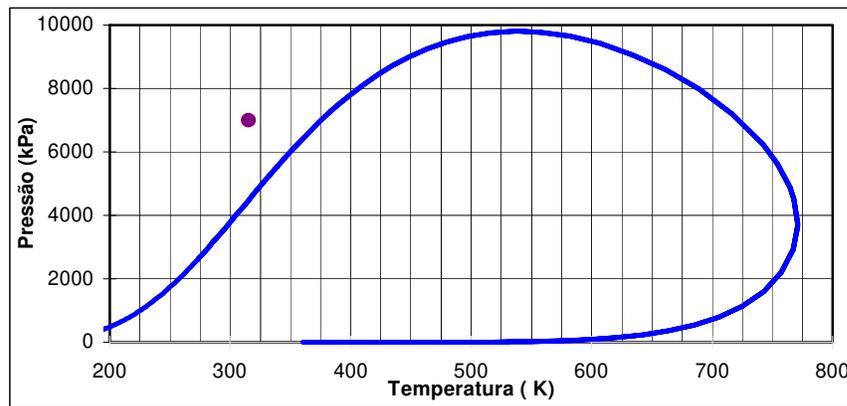


Figura 5.2: Diagrama PT para o caso de óleo real, indicando com um ponto as condições de pressão e temperatura de referência para as simulações.

Para uma melhor avaliação do comportamento da mistura de óleo real, foi também simulada uma mistura ternária de n-butano, n-octano, n-hexadecano para as mesmas condições de pressão e temperatura, isto permite utilizar tal mistura como parâmetro de referência. As propriedades de cada componente estão dadas na Tabela 5.8.

No modelo de teste, foi utilizada a correlação de Lohrenz *et al.* (1964) **Apêndice B** para realizar os cálculos das viscosidades.

Tabela 5.8: Composição e propriedades de cada componente no ponto de referência.

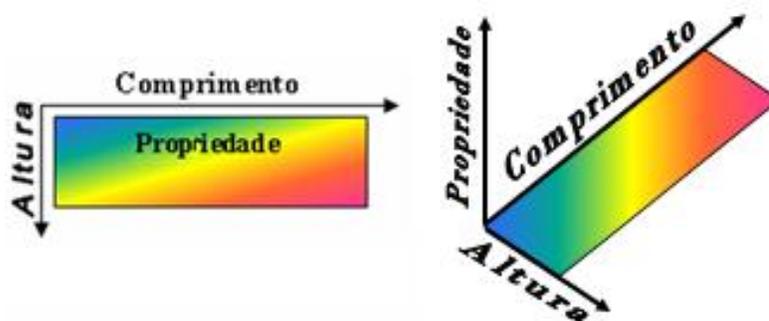
Componente	nC4	nC8	nC16
Fração Molar	0,25	0,25	0,5
Massa Molecular [kg/kmol]	58,124	114,32	226,45
Temp. Crítica [K]	425,2	568,8	717
Pressão Crítica [Pa]	$37,5 \cdot 10^6$	24,5	14
Volume Crítico [m <sup>3</sup> /mol]	255	492	956
Temp. de ebulição normal [K]	272,7	398,8	560
Fator Acêntrico	0,193	0,394	0,742
Volume de Correção	-0.05706	0.04810	0.1529

Com as propriedades dos componentes é iniciado o terceiro passo do fluxograma apresentado na Figura 4.1, o qual consiste na utilização da equação de PR-EOS para calcular principalmente os coeficientes de difusão no reservatório.

## Capítulo 6

### Análise de Resultados

Neste capítulo são apresentados: a avaliação do simulador, os mapas de concentração, de densidade e de viscosidade do reservatório obtidos por meio das simulações como também a análise dos resultados relevantes obtidos. A maioria das figuras de resultados deste capítulo seguem o padrão de representação dado pela Figura 6.1.



*Figura 6.1: padrão de apresentação dos resultados.*

#### 6.1 Avaliação do simulador

Como descrito no Capítulo 5, todas as simulações da avaliação foram feitas utilizando uma mistura ternária formada por metano, etano e n-butano com duas composições iniciais diferentes. Foi feito, também, um diagrama PT para cada uma das composições e foram escolhidos três pontos de referência. Em cada ponto foram feitas três simulações, conforme apresentado na Tabela 5.4.

Os gráficos obtidos do programa de simulação foram comparados com os resultados numéricos gerados por Firoozabadi (2000), de forma qualitativa e quantitativa.

### 6.1.1 Resultados para permeabilidade nula

Para uma análise qualitativa dos resultados, na Figura 6.2 estão representados os perfis de composições do reservatório para permeabilidade nula (somente difusão) para o Caso 1 Ponto 1 e para o Caso 2 Ponto 6 da Tabela 5.4. Este procedimento é feito com objetivo de avaliar o simulador em relação aos resultados obtidos por Firoozabadi (2000) e para conhecer os perfis de composição que seriam gerados no reservatório somente pela influência da difusão pura. Na difusão pura, segundo foi explicado no Capítulo 4, as forças impulsionadoras são os gradientes de pressão, de composição e de temperatura do reservatório.

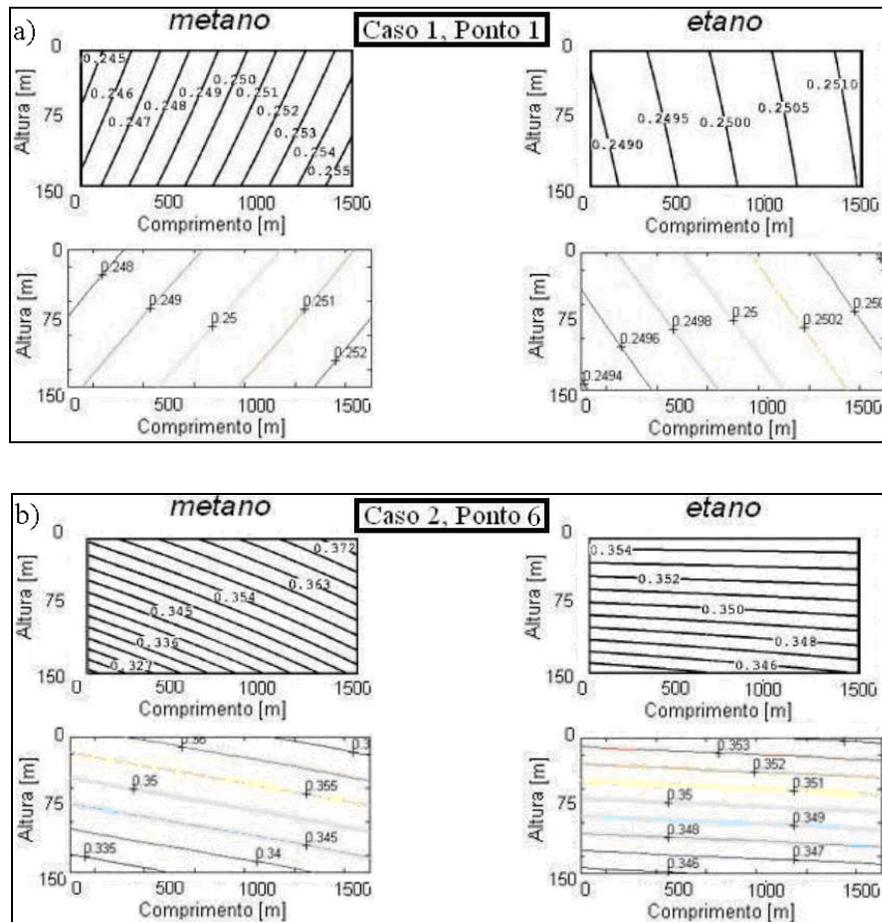


Figura 6.2: Perfis de composição – resultados obtidos por Firoozabadi (acima) e resultados obtidos no trabalho (abaixo). a) Caso 1 Ponto 1. b) Caso 2 Ponto 6

Na Figura 6.3 é apresentada uma comparação quantitativa entre os resultados obtidos nesta pesquisa e os resultados obtidos no trabalho de Firoozabadi. Nessa Figura, “r” representa a relação entre o valor de composição no topo e o valor de composição no fundo do reservatório quando o reservatório encontra-se em estado de equilíbrio.

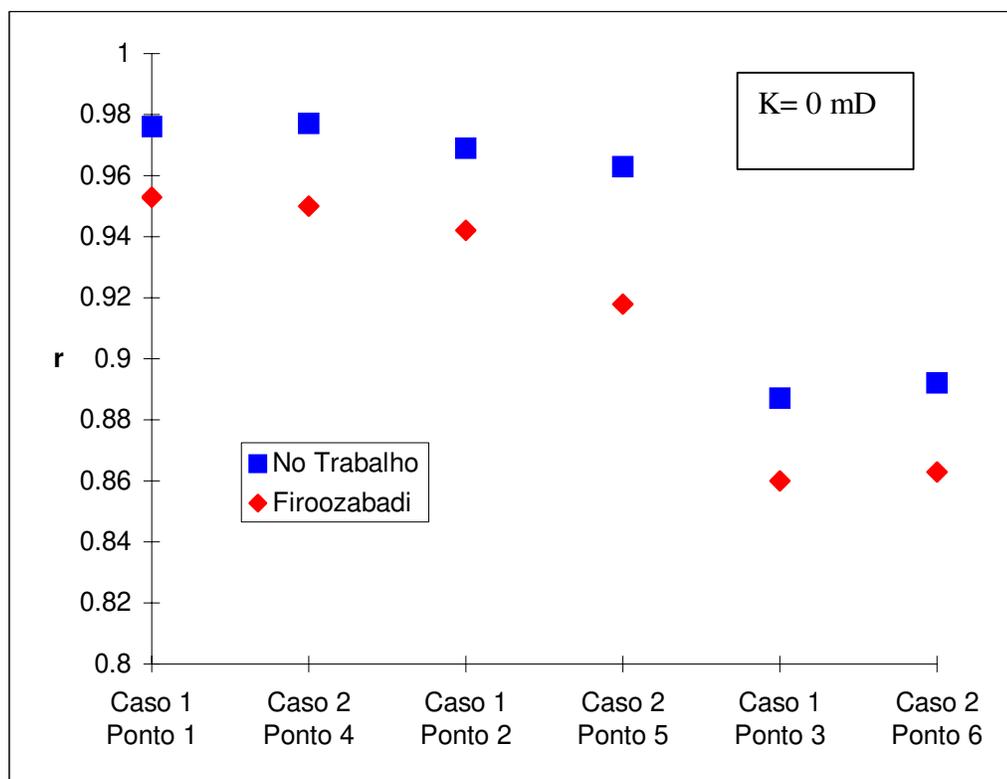


Figura 6. 3: Relação entre a composição no topo e no fundo do reservatório para as simulações com permeabilidade nula.

A comparação dos resultados obtidos (Figura 6.3) comprovam a existência de uma grande semelhança entre os resultados obtidos nesta dissertação e os obtidos por Firoozabadi.

### 6.1.2 Resultados considerando os efeitos difusivos e convectivos

Foram feitas simulações para os pontos indicados na Tabela 5.4, usando os diferentes valores de permeabilidade entre os resultados obtidos, alguns deles são os mapas de densidade e os mapas da função potencial, os quais são apresentados na Figura 6.4, para o Caso 1 Ponto 3 com permeabilidade de 10 mD.

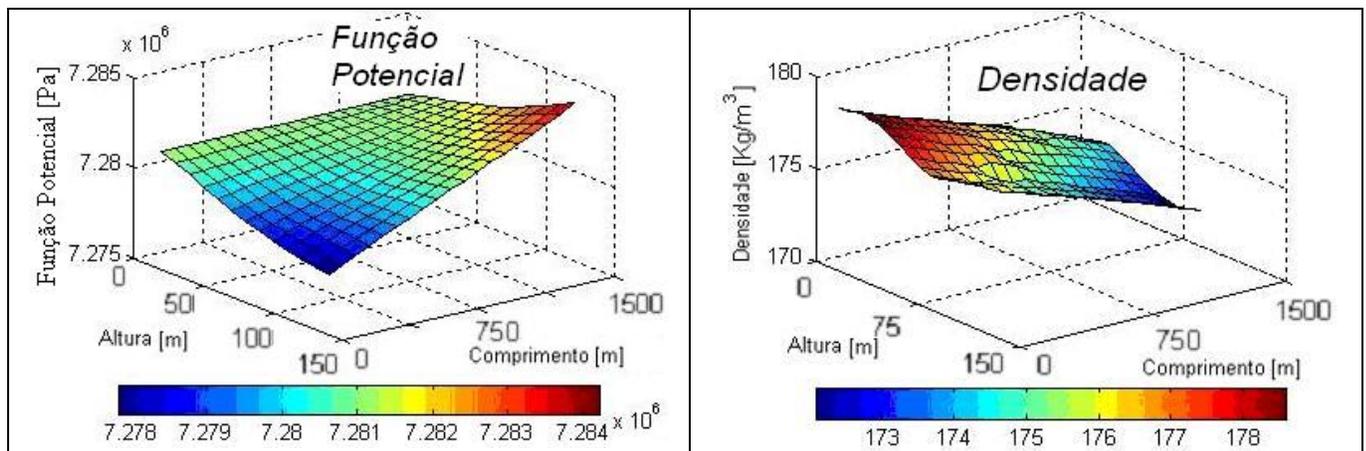


Figura 6.4: Função Potencial (esquerda) e mapa de densidade (direita) no equilíbrio (Caso 1 Ponto 3 e permeabilidade de 10 mD).

Também pode ser vista na Figura 6.5, a variação da composição com o tempo em relação ao avanço das simulações até atingir o equilíbrio.

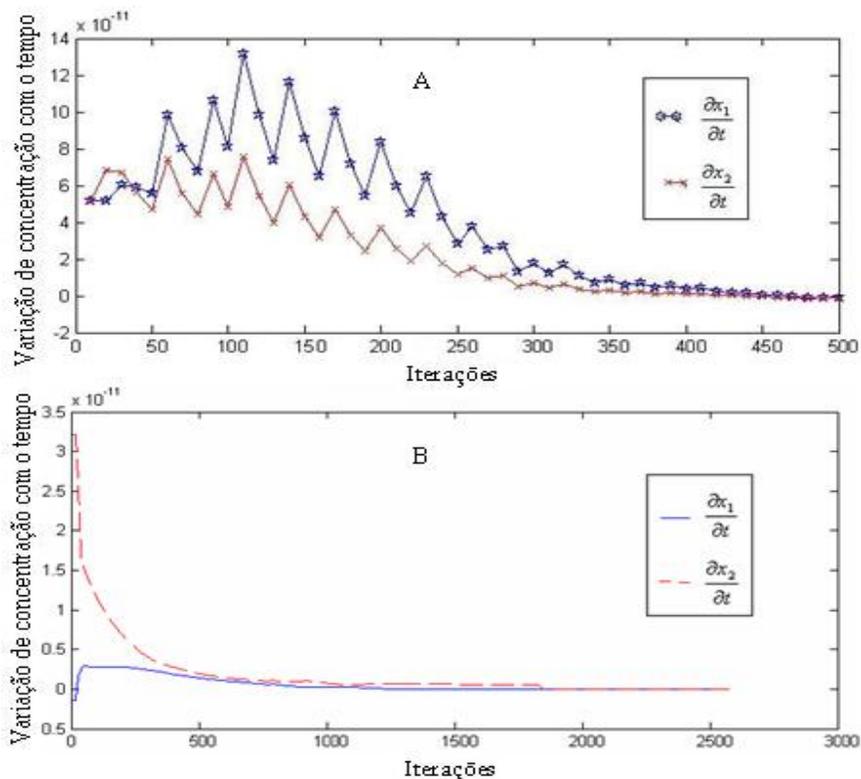


Figura 6.5: Variações composicionais com o tempo  $\left(\frac{\partial x_1}{\partial t} \text{ e } \frac{\partial x_2}{\partial t}\right)$  para cada iteração até atingir o equilíbrio, (Caso 1 Ponto 3 e permeabilidade de 10 mD).

Quando o passo de tempo máximo permitido na simulação é pequeno, da ordem de 30 horas, às curvas obtidas são mais suaves (Figura 6.5b), quando grande, da ordem de um ano (Figura 6.5a) estas curvas tornam-se mais oscilantes.

A Figura 6.5a apresenta uma inclinação positiva no início das simulações devido a que nesta primeira etapa o sentido de segregação apresenta-se contrário do esperado e sofre uma inversão no final desta etapa, nesse momento a curva de variação de concentração com o tempo começa a decrescer até atingir o equilíbrio.

Foram obtidas as composições finais no reservatório, as quais estão representadas em 3D nas Figuras 6.6 e em 2D com os resultados obtidos por Firoozabadi (2000) na Figura 6.7.

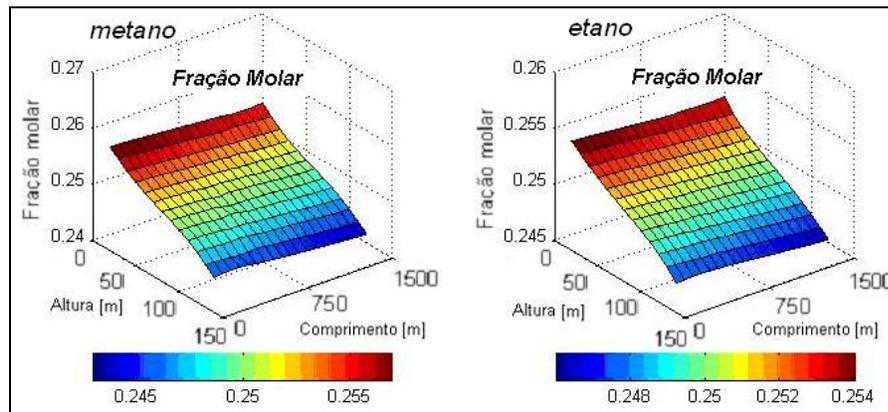


Figura 6.6: Mapa de composição de metano e etano da mistura ternária (Caso 1 Ponto 3 e permeabilidade de 10 mD).

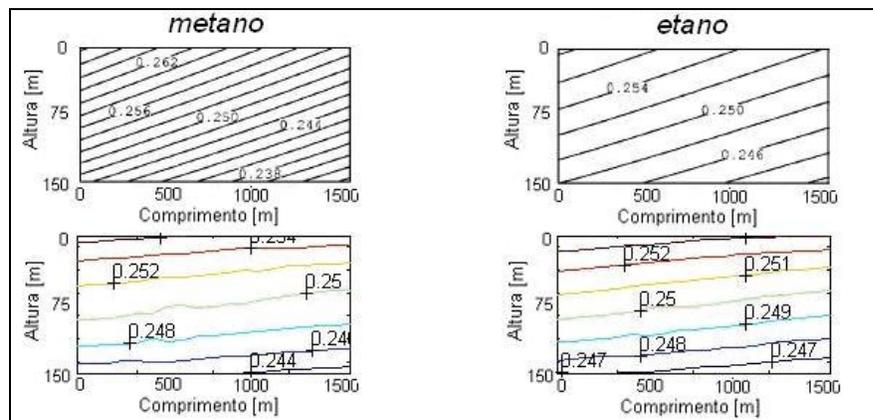


Figura 6.7: Perfis de composição - resultados obtidos por Firoozabadi (acima) e resultados obtidos no trabalho (abaixo), Caso 1 Ponto 3 e permeabilidade de 10 mD.

Do mesmo modo que a Figura 6.3, a Figura 6.8 apresenta uma comparação quantitativa entre os resultados obtidos no trabalho e os resultados obtidos por Firoozabadi. Neste caso, considerando permeabilidades diferentes.

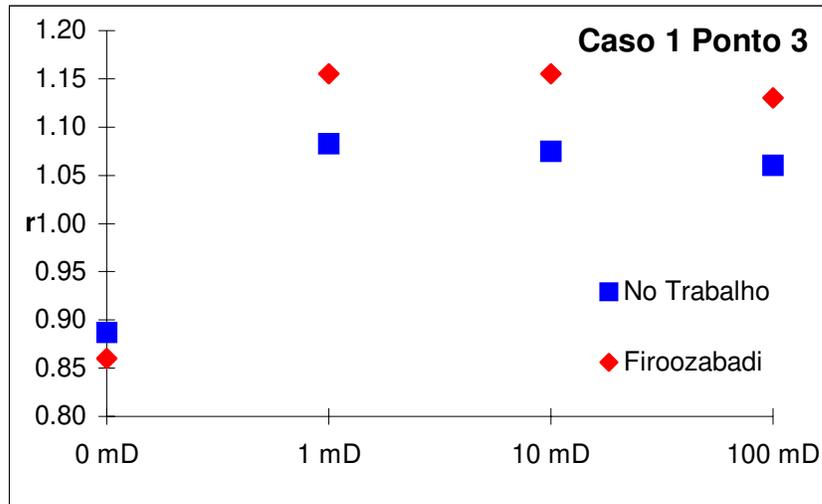


Figura 6. 8: Relação entre a composição no topo e no fundo do reservatório para as simulações com permeabilidade de 0, 1, 10 e 100 mD.

As velocidades com relação à profundidade e ao comprimento foram representadas nas Figuras 6.9 e 6.10, respectivamente. Cada uma delas modifica seu valor com as iterações tendendo para um valor próximo ao nulo no equilíbrio.

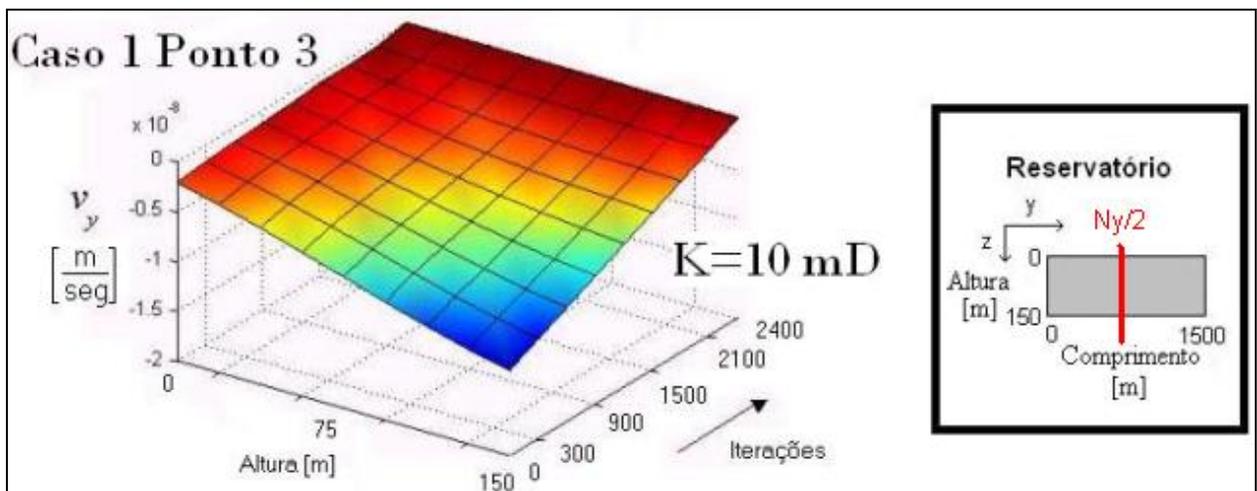


Figura 6.9: Representação da velocidade em “y” com a variação da profundidade (z) e das iterações, até atingir o equilíbrio. As velocidades são tomadas em  $Ny/2$ .

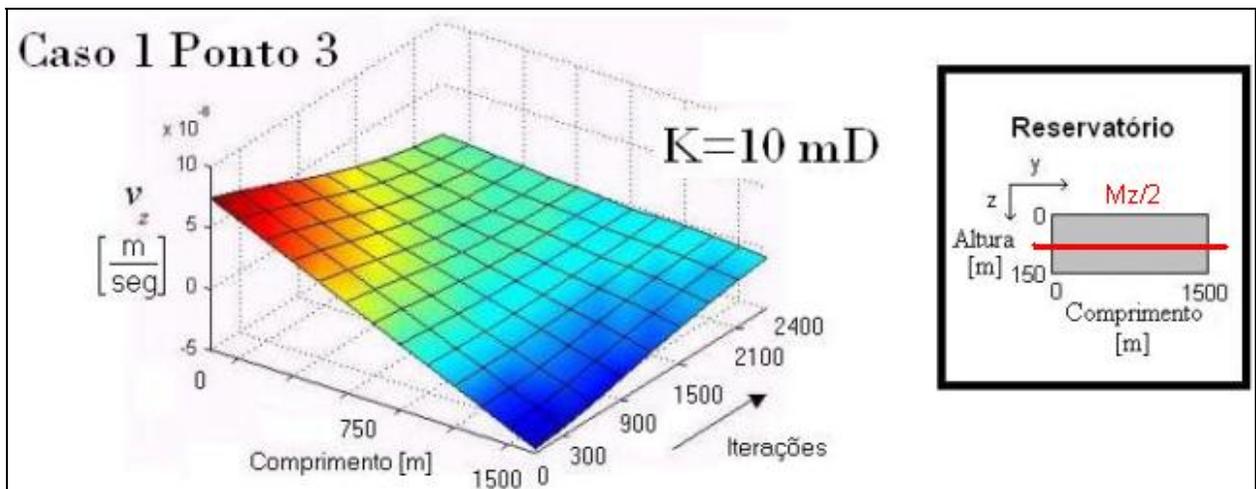


Figura 6.10: Representação da velocidade em “z” com a variação do comprimento (y) e das iterações, até atingir o equilíbrio. As velocidades são tomadas em  $Mz/2$ .

Finalmente, atingido o equilíbrio, é feito o balanço de massa:

$$b.m_{\%} = \left| \frac{m_f - m_i}{m_i} \right| \cdot 100$$

obtendo uma variação relativa percentual entre a massa total final (após a simulação) e a inicial de 0,0154% (Caso 1-Ponto 3) para permeabilidade de 10 mD.

A Figura 6.11 apresenta um resumo dos resultados simulados indicando o sentido de acumulação do componente metano e etano na mistura ternária, para os casos analisados segundo a Tabela 5.4 com permeabilidade de 0,1 e 10 mD.

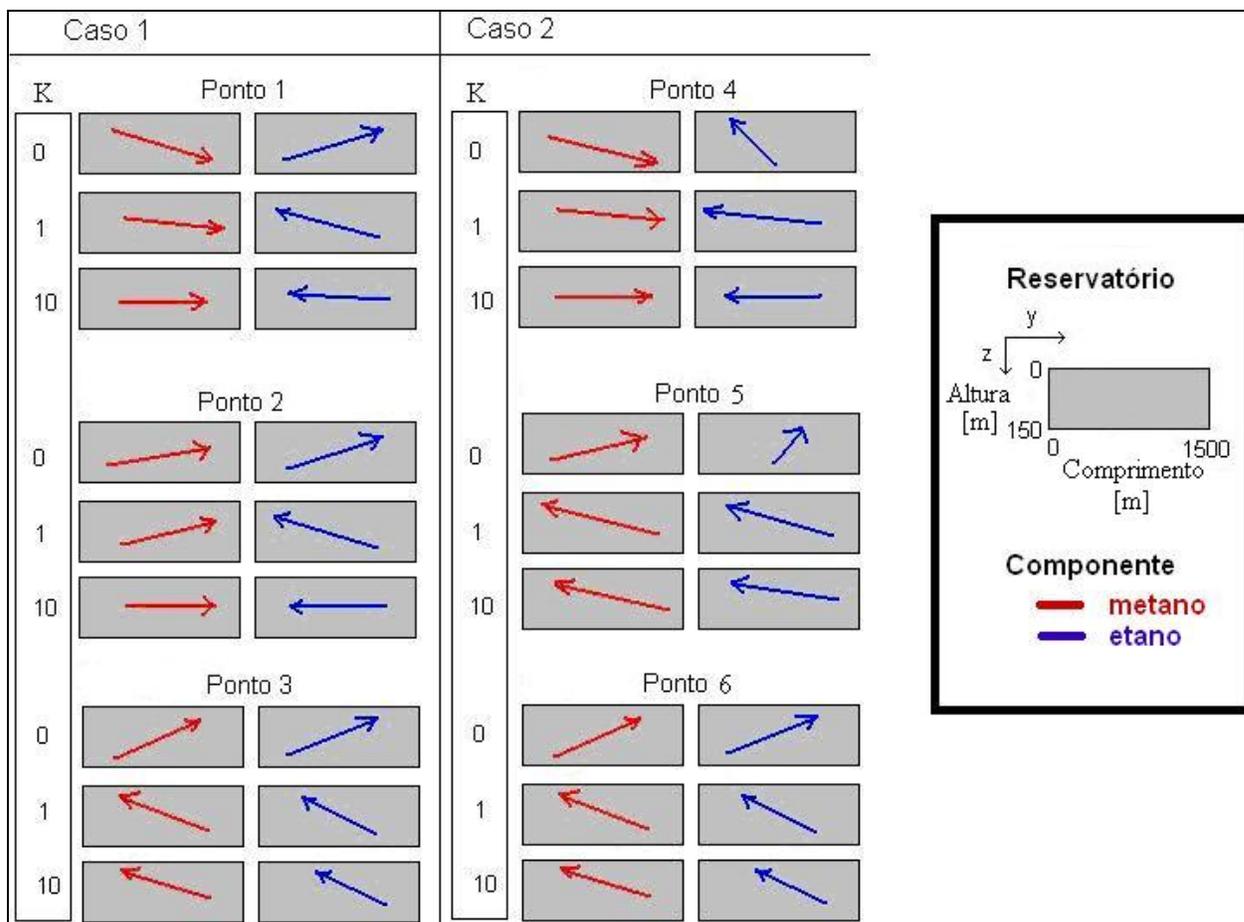


Figura 6.11: Mapa indicando o sentido de acumulação de metano e etano para os casos da Tabela 5.4.

### 6.1.3 Tamanho da malha, tempo de simulação e comparação dos resultados obtidos.

Foram feitas simulações utilizando diferentes números de blocos (Tabela 6.1). Na Figura 6.12 está representada a variação de tempo de simulação (até atingir o equilíbrio) em função do número de blocos considerados (Tabela 6.1), sendo que as simulações foram feitas num computador Pentium IV com configuração de 1Gb de memória RAM.

Tabela 6.1: Relação entre a malha e o número de blocos.

<b>Malha</b>	13 x 9	19 x 9	25 x 9	35 x 9	55 x 9	95 x 9	95 x 21	151 x 31	301 x 41
<b>Blocos</b>	117	171	225	315	495	855	1995	4681	12341

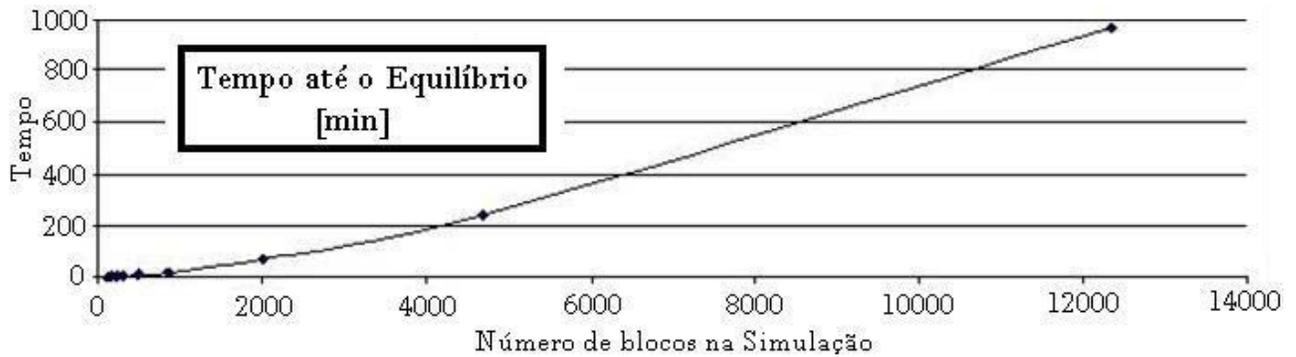


Figura 6.12: Tempo até o equilíbrio para simulações com diferente número de blocos.

Como comparação, na Tabela 6.2 pode-se ver como os resultados da dissertação aproximam-se dos resultados de Firoozabadi à medida que é aumentado o número de blocos (ou tamanho da malha).

Tabela 6.2: Relação ( $r$ ) de composição entre o topo e fundo. Para comparar os resultados da dissertação com os resultados de Firoozabadi quando é aumentada a malha.

<b>Caso 1 Ponto 3 K= 10 mD</b>	$x_{1_{topo}}$	$x_{1_{fundo}}$	$r = \frac{x_{1_{topo}}}{x_{1_{fundo}}}$
Este Trabalho Malha 9 por 13	0,2603	0,2396	1,086
Este Trabalho Malha 41 por 301	0,2617	0,2385	1,097
Firoozabadi	0,268	0,232	1,155

#### 6.1.4 Análise dos resultados da avaliação

➤ Os perfis composicionais, tanto para os casos de difusão pura quanto para os casos com convecção natural (Figuras 6.2, 6.3 6.7 e 6.8), mostraram um comportamento similar ao apresentado por Firoozabadi (2000), o que convalida o funcionamento do modelo;

➤ Nesta dissertação, as oscilações apresentadas na Figura 6.5 são causadas por permitir ao simulador adaptar o passo de tempo em cada iteração. A variação deste passo é limitado especificando uma variação de composição máxima entre iterações. Caso fosse superada esta limitação, o passo do tempo seria diminuído até a metade do valor para evitar divergência no sistema, levando em consequência uma diminuição na variação de composição nas próximas iterações. De toda forma, a oscilação mencionada na atualização do campo de concentrações não gera oscilações para nenhuma das variáveis analisadas. Após um certo número de iterações, as

oscilações são cada vez menores e o sistema tende a atingir o ponto de equilíbrio, e portanto, o passo de tempo vai aumentando, mas a variação de concentração vai sendo cada vez menor;

➤ Foi visualizado nas Figuras 6.9 e 6.10 como o campo de velocidades dentro do reservatório vai diminuindo gradativamente até um valor (não nulo), o qual representa o valor em que o sistema atinge o equilíbrio dinâmico;

➤ Foi testado e verificado que o princípio de conservação da massa foi cumprido em cada um dos casos analisados (sistemas fechados) por não apresentar uma variação significativa, não existindo perda de massa no sistema;

➤ O comportamento das misturas analisadas mostrou uma variação significativa do sistema de difusão pura em relação ao sistema misto (convecção e difusão) nos perfis composicionais (Figura 6.11). Porém, ao ser aumentada a permeabilidade, a forma qualitativa dos mapas composicionais não apresentaram uma variação significativa;

➤ Comparando as Figuras 6.2 (a-b) pode-se visualizar uma maior variação composicional para os pontos mais próximos ao ponto crítico (Figura 6.2.b), como também uma inversão no sentido de migração do componente C1 em relação à Figura 6.1.a.

## **6.2. Resultados das misturas de teste**

Nos testes foram feitas simulações para duas misturas diferentes. Uma delas é a mistura C4 - C8 - C16, e outra é a mistura de óleo real. Com os dados apresentados no Capítulo 5 foram feitas simulações para estas misturas e, depois, os resultados da simulação foram comparados com os obtidos através do simulador térmico comercial que calcula gradientes composicionais em reservatórios.

Nesta Seção, foram feitas simulações somente para um ponto de análise. O motivo é que o comportamento da mistura com as variações de pressão e temperatura, já foi analisado na Seção 6.1.

Na seqüência, Seção 6.2.1, são apresentados os resultados para a mistura C4 - C8 - C16 utilizando as propriedades apresentadas na Tabela 5.8, depois, Seção 6.2.2, os resultados referentes à mistura de óleo real com as propriedades apresentadas na Tabela 5.7 e, finalmente, Seção 6.2.3, os resultados obtidos no simulador comercial para a mistura de óleo real.

### 6.2.1 Mistura C4 - C8 - C16

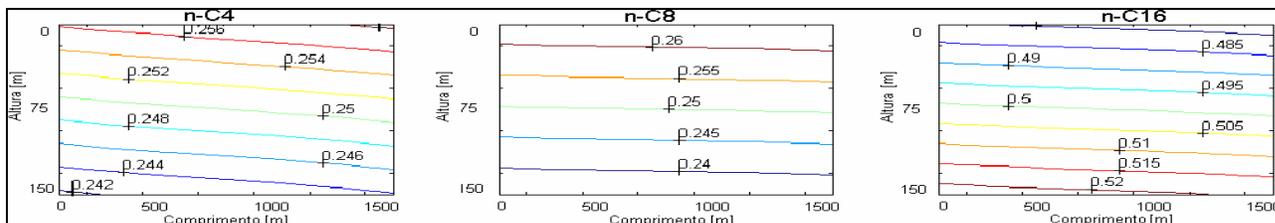


Figura 6.13: Perfis de composição molar para a mistura C4-C8-C16, considerando difusão pura (permeabilidade nula).

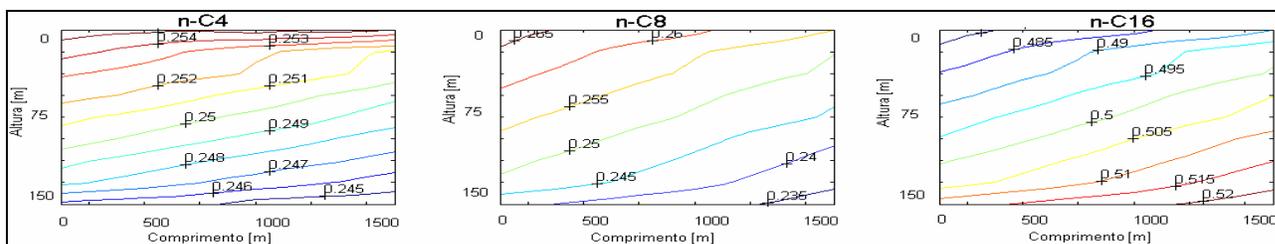


Figura 6.14: Perfis composicionais para a mistura C4-C8-C16, considerando uma permeabilidade de 10 mD

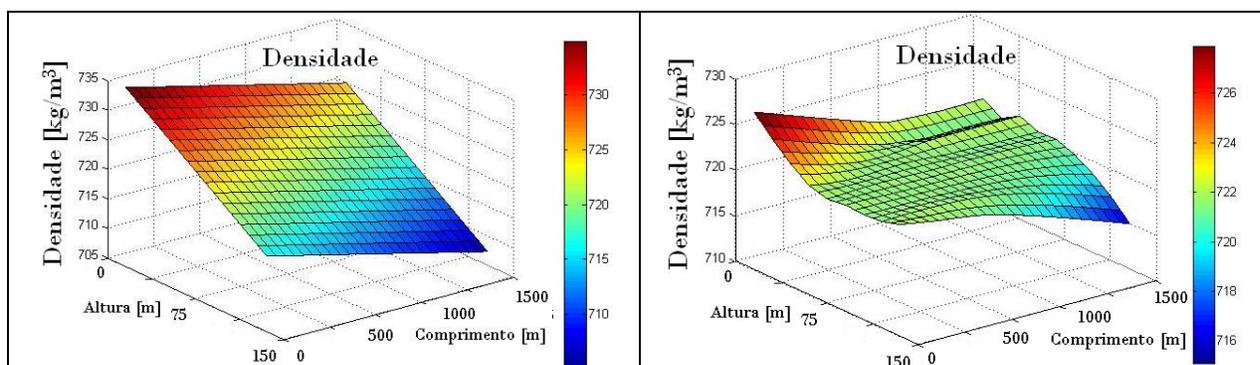


Figura 6.15: Perfis de densidade inicial (esquerda) e final (direita) para a mistura C4-C8-C16 e uma permeabilidade de 10 mD

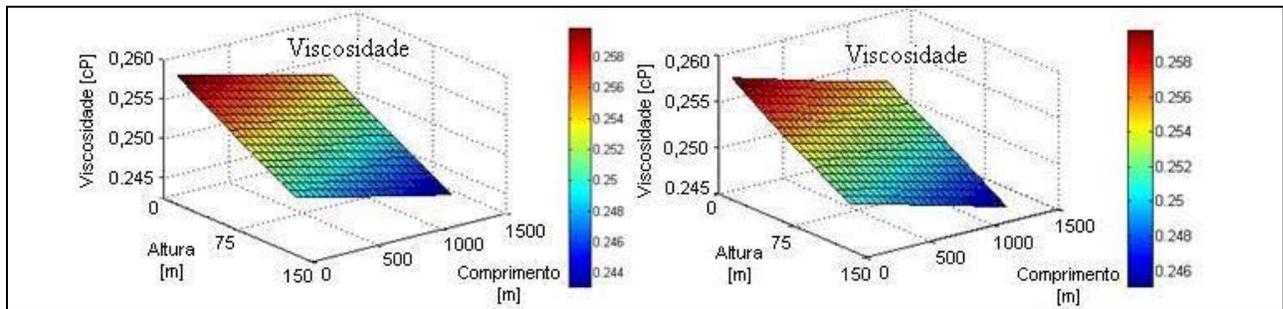


Figura 6.16: Perfis de viscosidade inicial (esquerda) e final (direita) para a mistura C4-C8-C16 e uma permeabilidade de 10 mD

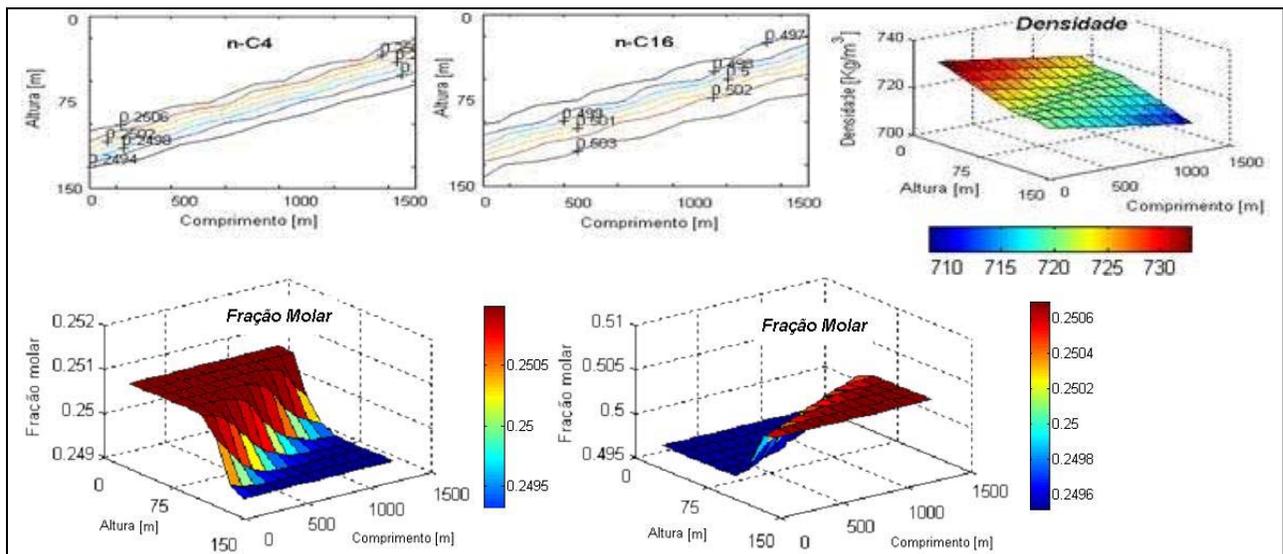


Figura 6.17: Acima, à esquerda, os perfis e, abaixo, os mapas de composição da mistura C4-C8-C16 com permeabilidade de 1000 mD. Acima, à direita, a distribuição de densidade desta mistura no reservatório.

## 6.2.2 Mistura de óleo real

O tempo de simulação para atingir a convergência do sistema foi maior para o caso de óleo real que nos outros casos. Este fato é devido ao sistema tornar-se instável com mais facilidade, ocasionando uma diminuição no passo de tempo.

Foram feitas simulações utilizando diferentes valores de permeabilidade. Na figura 6.18, os resultados foram obtidos com permeabilidade nula; com permeabilidade de 1 mD são os resultados referentes às Figuras 6.19 e 6.20; o mapa de viscosidade da Figura 6.22 (esquerda) foi obtido utilizando uma permeabilidade de 100 mD; e os resultados apresentados nas Figuras 6.21 e 6.22 (direita) para permeabilidade de 1000 mD.

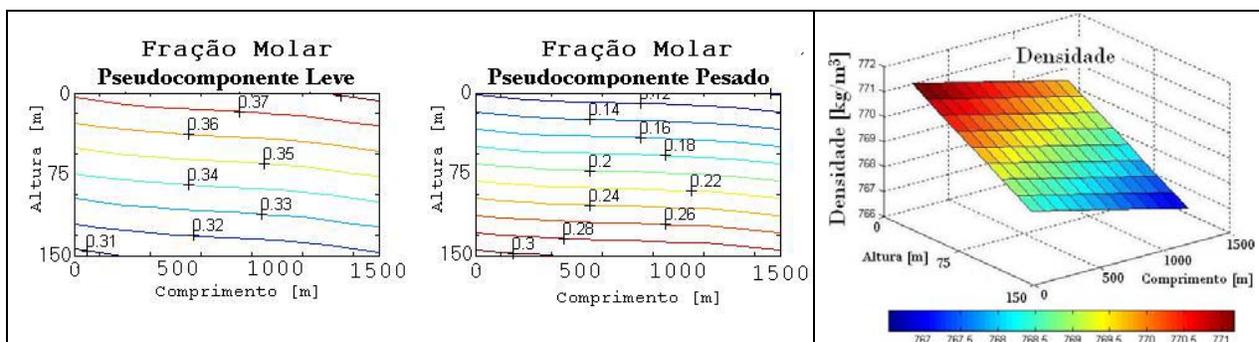


Figura 6.18: À esquerda, os perfis de composição e, à direita o mapa de densidade do óleo real caracterizada na Tabela 1 para o caso de difusão pura (permeabilidade nula).

No modelo de óleo real, para permeabilidade não nula a convergência do sistema é atingida usando a modelagem implícita, obtendo:

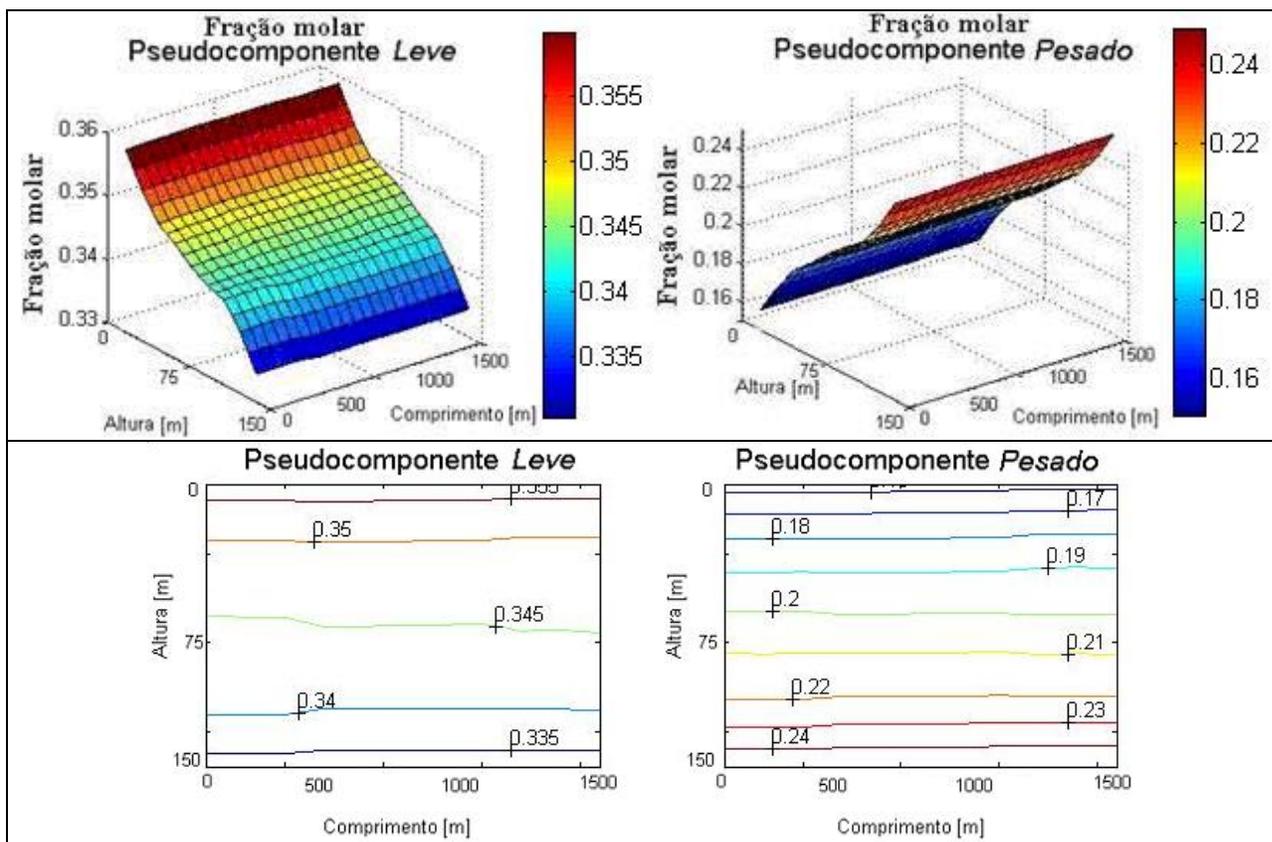


Figura 6.19: Perfis de composição no equilíbrio 3D (acima) e 2D (abaixo) do óleo real considerando uma permeabilidade de 1mD

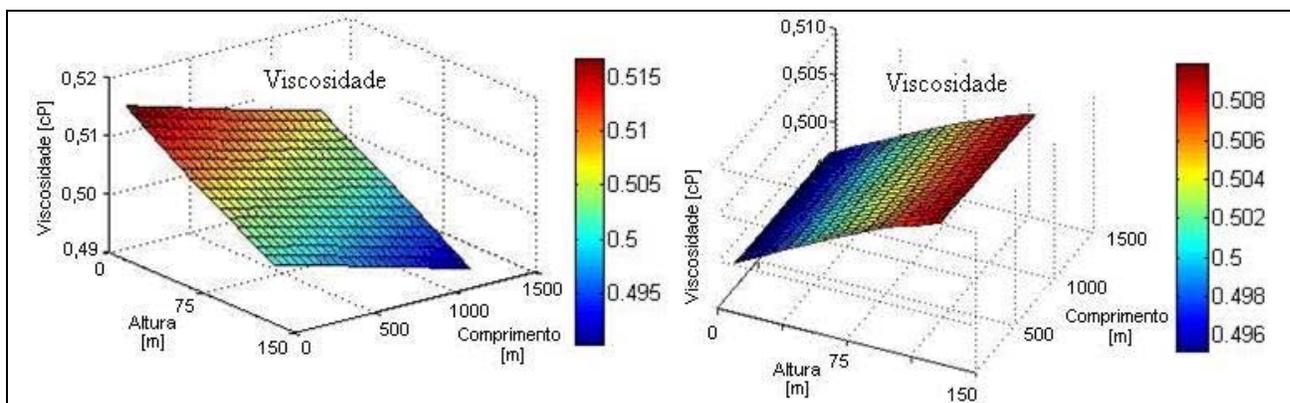


Figura 6.20: Perfis de viscosidade inicial (esquerda), igual para todas as simulações, e final (direita) para a mistura do óleo real e uma permeabilidade de 1 mD

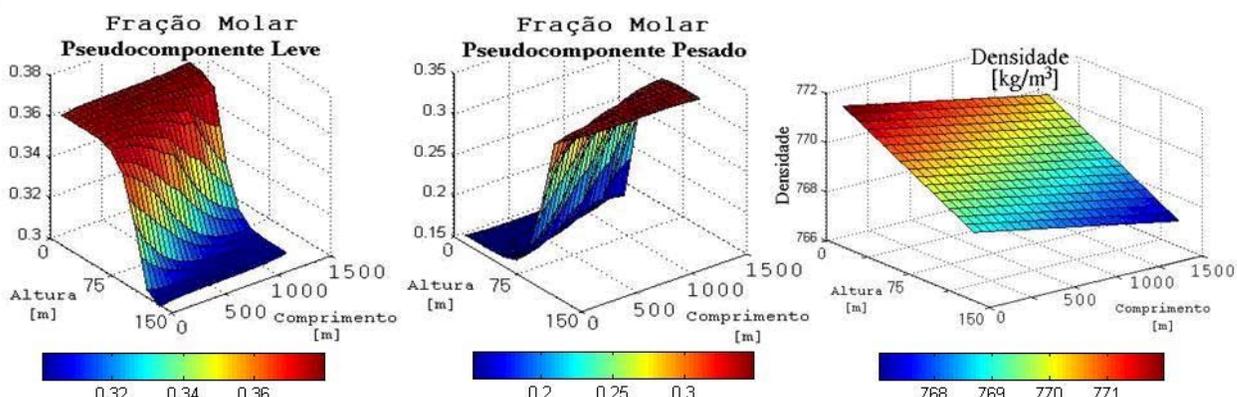


Figura 6.21: Mapas de composição (esquerda) e de densidade (direita) no equilíbrio do óleo real considerando uma permeabilidade de 1000 mD

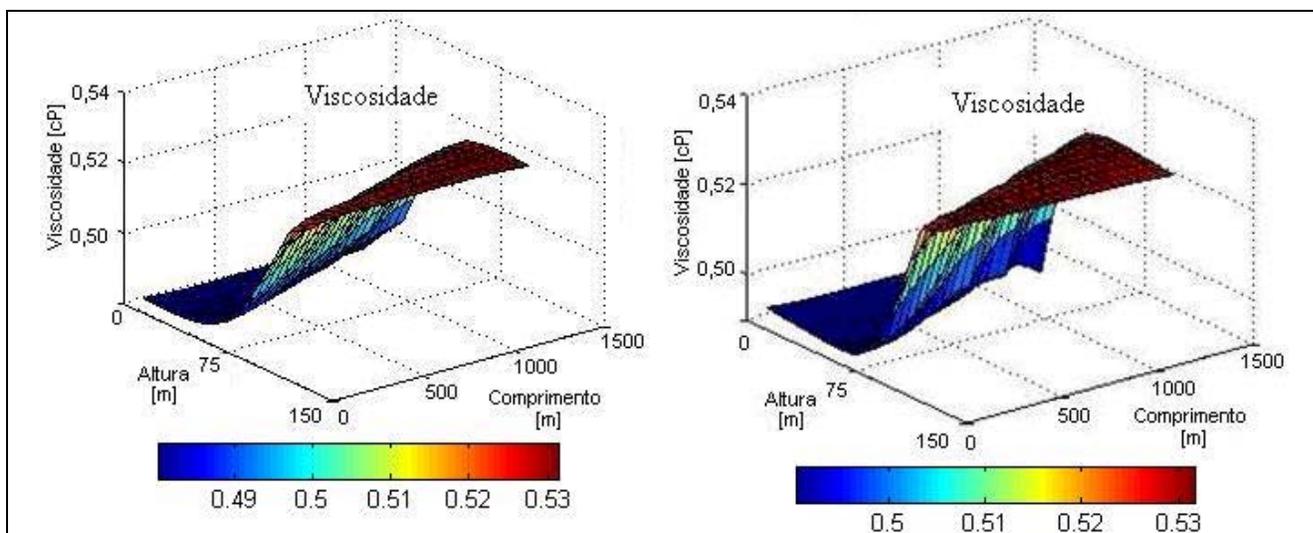


Figura 6.22: Mapas de viscosidade finais para a mistura do óleo real utilizando uma permeabilidade de 100 mD (esquerda) e permeabilidade de 1000 mD (direita)

### 6.2.3 Mistura de óleo real num simulador comercial

No simulador comercial, nas mesmas condições de composição, pressão e temperatura do óleo real analisado na Tabela 5.7, não foram obtidos perfis composicionais. Somente foram obtidos quando aumentada a composição do pseudo-componente leve (mantendo a relação de composição entre os outros dois pseudo-componentes) até que o fluido se encontre na pressão de saturação. Na composição de 0,7 do pseudo-componente leve, foi alcançado o seguinte comportamento:

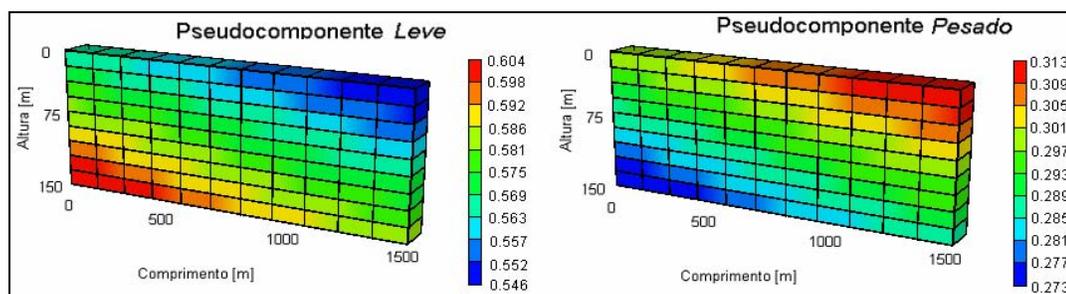


Figura 6. 23: Mapas de fração molar obtidas a partir do simulador térmico: STARS da Computer Modeling Group (CMG)

A principal diferença, entre o resultado obtido no simulador comercial (Figura 6.23) com os obtidos nesta dissertação, é dado pelo fato que o STARS não considera, nas equações de fluxo, o termo difusivo e, segundo explicado pelo suporte da CMG, requerer um sistema de duas fases para obter um gradiente composicional.

O motivo de obter mapas de composição diferentes aos obtidos nesta dissertação, pode ser explicado na Seção 6.1 (pontos de análise perto de mudanças de fase produzem grandes variações nas propriedades dos componentes), onde o sentido de migração tem uma forte dependência com as condições de composição, pressão e temperatura. A mistura que finalmente foi simulada no STARS, possui uma composição diferente que a usada nas simulações com o simulador desenvolvido para esta dissertação, pois o sistema teve que ser adaptado às condições de sub-saturação para que o simulador comercial apresenta perfis composicionais.

### 6.2.4 Análise de resultados dos testes

➤ Quando considerado o sistema de difusão pura, Figura 6.13 e 6.18, a tendência do componente leve é migrar para o extremo quente do topo do reservatório (Figura 1.1). Porém,

quando se leva em conta os efeitos difusivos e convectivos (Figuras 6.14, 6.17, 6.19 e 6.21), o componente leve migra para o extremo mais frio do topo do reservatório. Esta tendência foi visualizada em ambos os sistemas analisados, tanto no óleo real como na mistura ternária;

- Em ambas as misturas, os mapas de distribuição de densidade dentro do reservatório têm o mesmo comportamento que o mapa composicional do componente leve;

- Na Figura 6.19 pode-se visualizar que a variação composicional é vertical e não horizontal, se fosse feito um análise das propriedades somente no sentido horizontal desconsiderando a simulação não poderia se prever a existência do gradiente composicional no reservatório.

- Foi determinada uma maior variação composicional na mistura de óleo real, devido à presença de componentes de grandes massas moleculares e sistemas mais afastados da idealidade;

- Ao comparar as Figuras 6.20 (esquerda) com as Figuras 6.20 (direita) e 6.22 (esquerda e direita), pode-se ressaltar que a viscosidade apresenta maiores valores no ponto frio quando o reservatório é homogêneo, mas a variação é pequena, de 1,5%, a qual é devida somente ao gradiente térmico. Na medida que foi aumentada a permeabilidade foi obtida maior segregação composicional, acumulando-se os componentes pesados no fundo do reservatório e elevando a viscosidade nessa região. A variação da viscosidade devido aos fluxos convectivos e difusivos foi de 12 %, tanto para permeabilidade de 1 mD como para 1000 mD, porém, os mapas de viscosidade são diferentes, tendo-se uma variação brusca para altas permeabilidades. Talvez a mais importante das observações a ressaltar, a partir dos mapas de viscosidade obtidos, é que determinou-se uma dependência muito fraca entre a forma dos mapas e a permeabilidade a partir de valores maiores a 10 mD. Isso quer dizer que, embora a baixas permeabilidades, a relação da concentração dos pseudo-componentes, e conseqüentemente da viscosidade seja bem marcada, a altas permeabilidades estes mapas são praticamente independentes da permeabilidade;

- Por ser as condições de pressão e temperatura destas misturas distantes do ponto crítico, não foi apresentada a inversão do sentido de migração dos componentes. A Figura 6.17 mostra que o resultado condiz com o analisado anteriormente, portanto, o componente leve migra

para o topo quente do reservatório, porém, os perfis de composição e densidade apresentam uma forma mais senoidal devido à maior contribuição de coeficientes de interação devido à forte não idealidade da mistura;

➤ Como explicado no item anterior, o cálculo dos parâmetros termodinâmicos, como os coeficientes de difusão molecular foram mais difíceis de estimar, gerando um maior esforço computacional e tornando a simulação mais demorada. Por tais motivos foi necessário desenvolver um método de resolução implícita para assegurar a estabilidade do sistema,

➤ O resultado apresentado na Figura 6.23, obtido do simulador comercial, serve para reafirmar a existência de migração dos componentes da mistura, porém, a forma qualitativa desta figura não concorda com os resultados obtidos neste trabalho. Numa discussão técnica com o consultor da CMG, Colin C. Card, diretor do serviço de consulta da empresa do simulador comercial e professor auxiliar da Universidade de Calgary, explicou que o simulador somente gera perfis composicionais para misturas nas quais a pressão de bolha seja igual ou superior em relação à pressão do reservatório. Caso não tivesse sido feita a modificação anterior, o resultado apresentado seria de composição homogênea no reservatório.

Concluindo, o modelo apresentou resultados concordantes quando comparado com o trabalho de Firoozabadi (2000), segundo a análise de sensibilidade do Apêndice D conclui-se que o parâmetro fundamental na segregação composicional é composição da mistura. Também foram obtidos mapas de viscosidade, nos quais o engenheiro de reservatórios avalia a relevância para as etapas posteriores de simulação de produção e foi concluído que o simulador térmico-composicional usado não poderia ser aplicado para resolver um sistema semelhante ao resolvido nesta dissertação.

## **Capítulo 7**

### **Conclusões e Sugestões**

Este capítulo apresenta conclusões e sugestões para trabalhos futuros a partir da realização desta pesquisa.

Neste trabalho foi apresentado um modelo que permite obter a composição da mistura ternária no equilíbrio de um reservatório composicional monofásico, utilizando dados de PVT, levando em consideração o efeito gravitacional assim como os gradientes de temperatura horizontal e vertical. O modelo, com as condições de contorno apropriadas, foi resolvido utilizando o método de diferenças finitas. Deste modo, foi construído um modelo de fluxo para caracterizar adequadamente o reservatório.

Ainda que a segregação composicional vertical seja um fenômeno observado em muitos reservatórios, os processos de difusão e convecção apresentados neste trabalho ocorrem somente em certos tipos de reservatórios. Estes reservatórios se encontram perto do talude marinho e, portanto, apresentam gradiente térmico horizontal no reservatório. Esta condição é necessária para a existência de fluxo dentro do reservatório.

#### **7.1 Conclusões**

➤ Os resultados da validação do modelo são semelhantes qualitativa e quantitativamente aos resultados de Firoozabadi, porém, a malha em que o reservatório foi

dividido é menor que a usada por ele. Este fato permitiu reduzir substancialmente o tempo de cálculo com uma aceitável margem de erro segundo explicado na Seção 6.1.

➤ Os resultados das simulações mostram que a presença do gradiente térmico horizontal influencia os mapas de composição do equilíbrio.

➤ A verificação da presença de gradiente térmico horizontal é necessária embora não exista variação das propriedades no sentido horizontal, esta afirmação é justificada através dos mapas composicionais obtidos que não apresentam segregação horizontal de componentes, embora o gradiente térmico horizontal esteja presente no modelo apresentado nesta dissertação.

➤ Nos casos analisados, não se pode determinar o sentido de migração dos componentes sem antes analisar os fenômenos difusivos e convectivos presentes no sistema. Por exemplo, a tendência do metano, quando este tem difusividade térmica negativa, é de migrar para o fundo, isto é oposto ao sentido de segregação pelo efeito da gravidade. Isto leva à diminuição do gradiente de concentração deste componente podendo inverter o sentido do gradiente. Isto é uma possível causa de instabilidade numa simulação.

➤ O modelo composicional semi-implícito foi eficiente na maioria dos casos de estudo para qualquer das permeabilidades testadas, mas não para o óleo real, no qual teve que ser utilizada modelagem implícita.

➤ O sistema apresentou maiores gradientes composicionais quando a permeabilidade era baixa. Enquanto para permeabilidades maiores que 10 mD, o sistema não apresentou variações qualitativas em nenhum dos casos analisados.

➤ A determinação dos mapas composicionais permite determinar se é possível aproximar o fluido do reservatório como uma fase homogênea ou se devem ser considerados os gradientes composicionais nas etapas posteriores de simulação de produção.

## 7.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

- Aumentar o número de pseudo-componentes considerados na mistura, para conseguir uma representação mais real do comportamento dos componentes no reservatório;
- Introduzir um algoritmo que permita calcular a pressão de saturação ponto a ponto no reservatório, bem como outras propriedades, tais como razão de solubilidades e densidade ( $^{\circ}$ API) do óleo morto;
- Simular reservatórios de óleos mais pesados, que são aqueles que têm maior problema devido apresentarem grande variação de viscosidade, tornando assim, inviável a produção nas regiões mais profundas do reservatório, por ser aquele óleo quase sólido;
- Acoplar este modelo termodinâmico a modelos de deposição de asfaltenos no fundo do reservatório (formação de tar-mat).

## Referências Bibliográficas

- ADAMCZEWSKIT I. CALDERWOOD J.H. *Viscosity and Charge Carrier Mobility in The Saturated Hydrocarbons*. Department of Electrical Engineering, University of Salford, Lancs, M54WT. Março de 1975.
- BEDRIKOVETSKY, P. *Mathematical theory of Oil and Gas Recovery, Petroleum Engineering and Development Studies*, n. 4. Kluwer Academic, Horthreth, 1993.
- BELERY, P.; da SILVA, F. V. *Gravity and Thermal Diffusion in Hydrocarbon Reservoir*. In: THIRD CHAIK RESEARCH PROGNUM, Copenhagen, 11 a 12 de Junho de 1990.
- CAMPAGNOLO, E. A. *Determinação do Comportamento Volumétrico e Equilíbrio de Fases de Óleos Asfáltêmico usando Equação de Estado*. Campinas-SP: Faculdade de Engenharia Mecânica, Unicamp, 128p. Dissertação de Mestrado 1992.
- CHABACK, J. J. *Discussion of Treatment of Variations of Composition With Depth in Gas-Condensate Reservoir*. SPERE, p.157-159, Fevereiro de 1992.
- CHAUDRON, J.; Asselineau, L.; Renon, H. *Mixture Properties and Vapor-Liquid Equilibria by Modified Redlich-Kwong Equation of State*. Chem. Eng. Sci., v. 28, p.1991, Fevereiro de 1973.
- CONRAD, P. G.; GRAVIER, J. F. *Peng-Robinson Equation of State Checks Validity of PVT Experiments*. Oil and Gas J., p.77-86, Abril de 1980.
- DYSTHE, D. K.; HAFSKJOLD, B. *Inter - and Intradiffusion in Liquid Mixtures of Methane and n-Decane*. Int. J. Thermophys, v.16, p.1213, 1995.
- FAISSAT, R.; KNUDSEN, K.; STENBY, E. H.; MONTEL, F. *Fundamental Statements; about Thermal Diffusion for a Multicomponent Mixture in a Porous Media*. Fluid Phase Equilibria, p209-220, Setembro de 1994.
- FIROZABAADI, A. *Thermodynamics of Hydrocarbon Reservoirs*. McGraw-Hill – New York. 355 p. 1999.
- GHORAYEB, K.; FIROOZABADI, A. *Molecular, Modeling Multicomponent Diffusion and Convection in Porus Media*. SPE 62168, Maio de 1999.
- GHORAYEB, K.; FIROOZABADI, A. *Molecular, Pressure and Thermal Diffusion in Non-ideal Multicomponent Mixtures*. AIChE J., v.4, n.45, p.883, Maio de 2000.
- GHORAYEB, K.; FIROOZABADI, A. *Numerical Study of Natural Convection and Diffusion in Fractured Porus Media*. SPE 51347, Outubro de 1999.

- GHORAYEB, K.; FIROOZABADI, A. *Theoretical Model of Thermal Diffusion Fact in Multicomponent Mixtures*. AIChE, v.6, n.5, p.892-899, Maio de 2000.
- GIBBS, J.W., *The Scientific Papers of J.W. Gibbs*, Vol.1, Dover publications, 1961.
- GLASSTONE, S. LAIDEN K. J., EYRING, H. *The Theory of Rate Process*, Mc Graw-Hill Book Co., New York City, 1941
- GOOSSENS, A. G. *Prediction of Molecular Weight of Petroleum Fractions*. Ind. Eng. Chem. Res., n.35, p.985-988, 1996.
- GRABOWSKI, M. S.; DAUBERT, T. W. *A Modified Soave Equation of State for Phase Equilibrium Calculations*. I.&E.C. Process Des. Dev., v.17, n.4, p.443-454, 1978.
- HAYDUK, W.; MINHAS, B. S. *Correlations for Predictions of Molecular Diffusivities in Liquids*. Can. J. Chem. Eng., n.60, p.295-299, 1982.
- HIRSTCHBERG A. *Role of Asphaltenes in compositional gradient of a Reservoir's Fluids Column*. SPE 13171, 1984.
- HOLT, T.; LINDEBERG, E.; RATKJE, S. K. *Effect of Gravity and Temperature Gradient on Methane Distribution in Oil Reservoirs*. SPE 11761, 1983.
- JACQUIM, D. *Interaction of Natural Convection and Gravity Segregation in Oil/Gas Reservoirs*. SPERE, p.233-245, Maio de 1990.
- JARAMILLO J.M.; BARRUFET M.A. *Effects in the Determination of Oil Reserves Due to Gravitational Compositional Gradients in Near-Critical Reservoirs*, SPE 71726, 30 de Setembro a 3 de Outubro de 2001.
- KATZ, D. L.; FIROOZABADI, A. *Predicting Phase Behavior of Condensate/Crude-Oil Systems Using Methane Interaction Coefficients*. J. Petrol. Technol., v.30, p.1649-1655, 1978.
- KOOIJMAN, H. A.; TAYLOR, R. *Estimation of Diffusion Coefficient in a Multicomponent Liquid System*. Ind. Eng. Chem. Res., v.30, p.1217, 1991.
- LEE, S. T., CHAVERRA, M. *Modeling and Interpretation of Condensate Banking for Near Critical Cupiagua Field*, SPE 49265, 27 a 30 de Setembro de 1998.
- LOHRENZ, J., BRAY, B.G. CLARK, C.R. *Calculating Viscosities of Reservoir Fluids from Their Compositions*, Trans., AIME, 1964.
- MONTEL, F. *Phase, Equilibria Needs for Petroleum Exploration and Production Industry*. Fluid Phase Equilibria, n.84, p.343-367, 1993.
- MONTEL, F.; GOUEL, P. I. *Prediction of Compositional Grading in a Reservoir Fluid Column*. SPE 14410. In: 68TH ANNUAL TECHNICAL CONFERENCE AND EXHIBITION OF SPE, Las Vegas, Setembro de 22-25, 1985.

- MOREIRA, J. C. C. B. R. *Deposição de asfaltenos: Medidas experimentais e modelagem termodinâmica*. Campinas-SP: Faculdade de Engenharia Mecânica, Unicamp, 159p. Dissertação de Mestrado 1993.
- MUSKAT, M. *Distribution of Non-Reacting Fluids in the Gravitational Field*. Physical Review, v.35, p.1394-1393, Junho de 1930.
- NGHIEM, L. X.; HASSAM, M. S.; NUTAKKI, R.; GEORGE, A. E. D. *Efficient Modeling of Asphaltene Precipitation*. SPE 26642. In: 68TH ANNUAL TECHNICAL CONFERENCE AND EXHIBITION OF SPE, Houston, Texas, 3 a 6 de Outubro de 1993.
- OBERBECK, A; BOUSSINESQ, J. *Théorie Analytique de la Chaleur*, Vol. 2. Gauthier-Villars, Paris, 1903.
- O Desafio do Óleo Pesado*. Revista Power, p20-21, Nro 15, 2002.
- PÁDUA, K. G. *Oil Composition Variation in a Large Deep Water Field*. SPE 38948, May 1998.
- PEDERSEN, K. S.; FREDENSLUND, A.; CHRISTENSEN, P. L.; THOMASSEN, P. *Viscosity of Crude Oils*. Chemical Engineering Science, v.39, n.6, p.1011-1016, 1984.
- PENELOUX, A.; RAUZY, E., FREZE, R. *A Consistent Correction for Redlich-Kwong-Soave Volumes*. Fluid Phase Equil., v.8, p.7-23, 1982.
- PENG, D. Y.; ROBINSON, D. B. *New Two-Constant Equation of State*. Ind. Eng. Chem. Fundam., v.15, p.59-64, 1976.
- RIEMENS, W. G.; SCHULTE, A. M.; JONG, N. *Birba Field PVT Variations Along the Hydrocarbon Column and Confirmatory Field Testes*. JPT, v.40, n.1, p.83 –88, Junho de 1988.
- RILEY, M.; FIROOZABADI A. *Compositional Variation in Hydrocarbons Reservoirs with Natural Convection and Diffusion*. AIChE Journal, v.44, n.2, p.452-465, Fevereiro de 1998.
- SAGE, B. H.; LACEY, W. N. *Gravitational Concentration Gradients in Static Columns of Hydrocarbon Fluids*. AIME, v.132, p.120-131, 1938.
- SANTOS, P. C. S. *Precipitação de Parafina em Mistura de Petróleo: Medidas Experimentais e Modelagem Termodinâmica*. Campinas-SP: Faculdade de Engenharia Mecânica, Unicamp, 227p. Dissertação de Mestrado 1994.
- SCHIOZER, D. J. *Estudo de um Modelo Composicional para Simulação de Reservatórios*. Campinas-SP: Faculdade de Engenharia Mecânica, Unicamp, 128p. Dissertação de Mestrado 1989.
- SCHULTE, A. M. *Compositional Variations within a Hydrocarbon Column due to Gravity*. SPE 9235. In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition, Dallas, 21 a 24 de Setembro de 1980.

SOAVE, G. *Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State*. Chem. Eng. Sci., p.1197-1203, v.27, 1972.

STATOIL, L.H., WHITSON, C. *Compositional Grading – Theory and Practice*. SPE 63085. In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition, Dallas, Texas, Oct 1-4, 2000.

TYRELL, H. J. V., HARRIS, K, R. *Diffusion in Liquids, a Theoretical and Experimental Study*, Butterworths, London, 1984

VIGNES, A. *Diffusion in Binary Solution*. Ind. Eng. Chem. Res., v.5, p.189, 1966.

WHEATON R.J. *Treatment of Variation of Composition with Depth on Gas-Condensate Reservoir*. SPE 18267, Maio de 1991.

WHITSON, C. H. *Characterizing Hydrocarbon Plus Fractions*. SPEJ, v.23, n.4, p.683-694, Agosto de 1983.

WHITSON, H; TRONDHEIM U.; BELERY P. *Compositional Gradients in Petroleum Reservoirs*, Fina Exploration Norway, SPE 2800, Agosto de 1994.

## Apêndice A – EOS de Peng Robinson

As Equações de estado são usadas para obter a fugacidade de cada componente ( $f_i$ ) ou o fator de compressibilidade ( $Z$ ). Uma das equações de estado de melhor resultado, e mais discutida na literatura, é a de Peng-Robinson (1976).

$$F = Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad \text{A.1}$$

Outra forma na qual pode ser encontrada a equação de Peng Robinson é:

$$\ln\left(\frac{f_i}{x_i P}\right) = \frac{b_i}{b}(Z - 1) - \ln(Z - B) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left[ \frac{2\sum_{j=1}^n x_j a_{ij}}{a} - \frac{b_i}{b} \right] \ln\left(\frac{Z + \frac{(1 + \sqrt{2})B}{Z}}{Z + \frac{(1 - \sqrt{2})B}{Z}}\right) \quad \text{A.2}$$

Os parâmetros para o cálculo das fugacidades e o fator de compressibilidade são calculados a seguir.

Com a  $P_c$ , a  $T_c$  e a  $T_b$  é calculado o coeficiente de interação binário para cada componente, usando as seguintes equações:

Cálculo do Fator Acêntrico:

$$\omega = \frac{3}{7} \left[ \frac{\ln(P_c / 101325)}{(T_c / T_b - 1)} \right] - 1 \quad \text{A.3}$$

$$m = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2 \quad \text{A.4}$$

$$\alpha = \left[ 1 + m(1 - T_r^{1/2}) \right]^2 \quad \text{A.5}$$

$$a_i = 0,45724 \frac{(RT_c)^2}{P_c} \quad \text{A.6}$$

$$a_{ij}^{1/2} = (1 - \delta_{ij}) a_i^{1/2} a_j^{1/2} \quad \text{A.7}$$

Após obter-se o coeficiente de interação binário são calculados os parâmetros A e B para resolver a equação de Peng Robinson:

$$a = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j (a_{ij})^{1/2} \quad \text{A.8}$$

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad \text{A.9}$$

$$b_i = 0,07780 \frac{RT_c}{P_c} \quad \text{A.10}$$

$$b = \sum_{i=1}^n x_i b_i \quad \text{A.11}$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad \text{A.12}$$

O cálculo da densidade molar total pode ser feito a partir do fator de compressibilidade:

$$c = \frac{P}{ZRT} \quad \text{A.13}$$

Após obter-se a fugacidade de cada componente, é calculado o volume molar parcial de cada componente avaliando numericamente a seguinte equação:

$$V_i = \left[ R.T. \frac{\partial \ln(f_i)}{\partial p} \right]_{T,x} - V_{correction} \quad \text{A.14}$$

$$\text{onde } V_{EOS} = \frac{ZRT}{P}$$

O coeficiente de expansão térmica é calculado numericamente da seguinte equação:

$$\beta_T = -\frac{1}{\rho} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial T} \right]_{x_i, i=1, \dots, n-1} \quad \text{A.15}$$

$$\beta_{x_i} = -\frac{1}{\rho} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right]_{T, x_j, j=1, \dots, n-1, j \neq i} \quad \text{A.16}$$

Também, desta expressão pode calcular-se a entalpia molar parcial de cada componente:

$$H_i = -RT^2 \left[ \frac{\partial \ln(\gamma_i)}{\partial T} \right]_{P,x} \quad \text{A.17}$$

onde:

$$\gamma_i = \frac{f_i}{x_i \cdot P} \quad \text{A.18}$$

A entalpia de cada componente é definida como:

$$H_i = U_i + P.V_i \quad \text{A.19}$$

O que permite o cálculo da energia molar interna de cada componente para o cálculo dos coeficientes de difusão térmica:

$$U_i = H_i - P.V_i \quad \text{A.20}$$

## Apêndice B – Viscosidade

Correlação para o Cálculo da Viscosidade

A correlação de Lohrenz *et al.* (1964) é uma combinação de várias correlações para o cálculo da viscosidade. Os passos de cálculo envolvidos são apresentados a seguir:

Cálculo da viscosidade do componente puro à baixa pressão  $\hat{\mu}_i$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\mu}_i = \frac{0.00034.T_{ri}^{0.94}}{\zeta_i} \quad \text{para } T_{ri} \leq 1.5 \\ \hat{\mu}_i = \frac{0.000176.(4.58.T_{ri} - 1.67)^{5/8}}{\zeta_i} \quad \text{para } T_{ri} > 1.5 \end{array} \right. \quad \text{B.1}$$

onde:

$T_{ri}$ : Temperatura reduzida

$$\zeta_i = \frac{5.44.T_c^{1/6}}{M_i^{1/2}.P_c^{2/3}} \quad \text{B.2}$$

sendo:

T: Temperatura absoluta, K

P: Pressão absoluta, atm

Cálculo da viscosidade a baixa pressão  $\mu^*$ :

$$\mu^* = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \cdot \hat{\mu}_i \cdot \sqrt{M_i}}{\sum_{i=1}^n x_i \cdot \sqrt{M_i}} \quad \text{B.3}$$

Cálculo da densidade molar reduzida:

$$\xi_r = \xi \cdot \sum_{i=1}^n x_i \cdot V_{ci} \quad \text{B.4}$$

onde:

$\xi$  : Densidade molar [mol/m<sup>3</sup>]

$$\eta = \frac{5.44 \cdot \left[ \sum_{i=1}^n x_i \cdot T_{ci} \right]^{\frac{1}{6}}}{\left[ \sum_{i=1}^n x_i \cdot M_i \right]^{\frac{1}{2}} \left[ \sum_{i=1}^n x_i \cdot P_{ci} \right]^{\frac{2}{3}}} \quad \text{B.5}$$

Cálculo da viscosidade à pressão de interesse:

$$\begin{cases} \mu = \mu^* + 0.000205 \cdot \frac{\xi_r}{\eta} & \text{para } \xi_r \leq 0.18 \\ \mu = \frac{\mu^* + (\chi^4 - 1)}{1.10^4 \cdot \eta} & \text{para } \xi_r > 0.18 \end{cases} \quad \text{B.6}$$

onde:

$\mu$  : Viscosidade da mistura [cP]

$$\chi = 1.023 + 0.23364 \cdot \xi_r + 0.58533 \cdot \xi_r^2 - 0.40758 \cdot \xi_r^3 + 0.093324 \cdot \xi_r^4$$

## Apêndice C - Interface

Pode-se visualizar na Figura 5.1, a tela de início do programa desenvolvido. Após acionar o botão “Calcular”, o programa começa os cálculos do modelo desenvolvido no Capítulo 4.

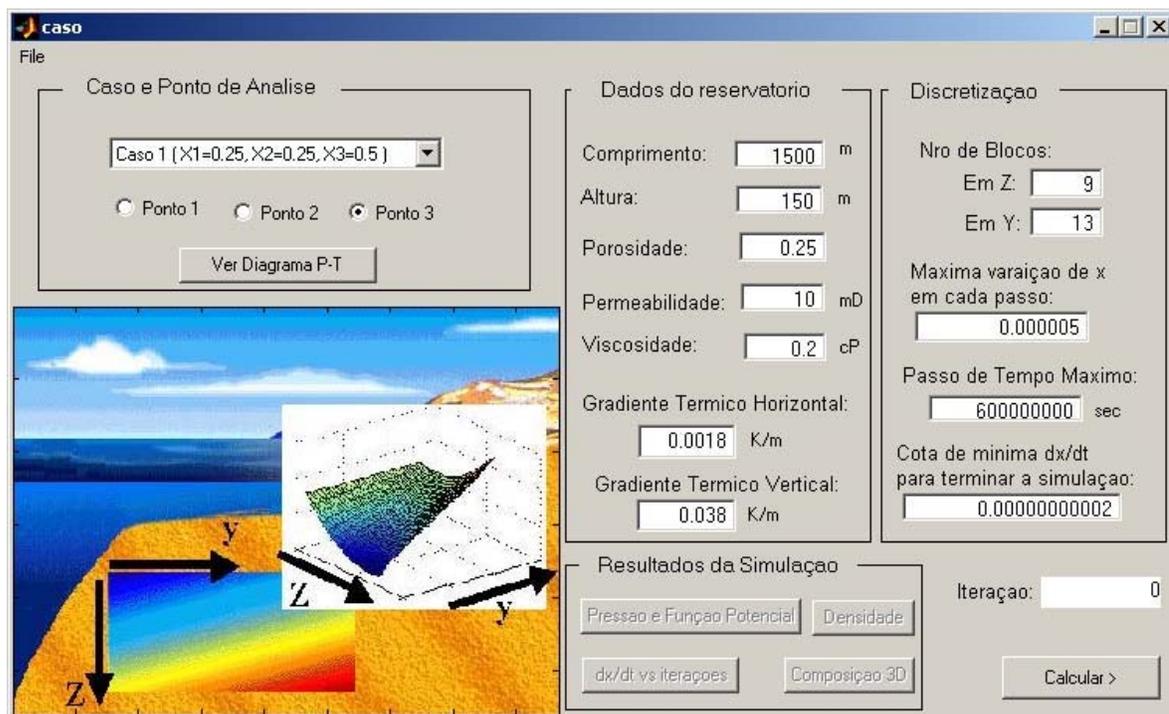


Figura C.1: Tela de início da carga de dados do programa desenvolvido.

Os parâmetros (como os apresentados na Tabela 5.1) podem ser modificados desde a tela de início para poder simular os diferentes casos analisados. Se fossem incorporados dados como os apresentados na Tabela 5.7, no programa, poderiam ser simuladas outras misturas ternárias.

## Apêndice D – Análise de sensibilidade

Para realizar a análise de sensibilidade foi utilizada a variável “r” que caracteriza o sentido de segregação de um determinado componente depois de atingido o equilíbrio. Para este estudo foi tomada como referência a fração leve da mistura de multicomponentes. Visando determinar quais são as variáveis do sistema que têm mais peso ou que representam uma maior variação de “r”, foram mudados os cenários de temperatura, composição e permeabilidade com o objetivo de verificar com que intensidade os componentes da mistura segregam e qual foi o sentido de segregação. Foi escolhido um dos pontos de referência para o análise um ponto já usado, a temperatura de 315 K, pressão de  $7 \cdot 10^6$  Pa, permeabilidade de 10 mD e uma composição da mistura ternária de 0,25 para os componentes leve e intermediário. A dependência de “r” em relação com a temperatura, composição e permeabilidade é apresentada a seguir:

Para a análise de temperatura gerou-se a seguinte Tabela D.1 com os valores de “r” obtidos para o ponto de referência e diferentes temperaturas:

*Tabela D. 1: Valores de “r” para diferentes valores de temperatura.*

T [K]	r
315	0,98
345	1,00
395	1,16

$$\left. \frac{\partial r}{\partial T} \right|_{K, X_i} = 2,3 \cdot 10^{-3} \left[ \frac{1}{\text{K}} \right]$$

Para a análise de composição, foi gerada a Tabela D.2 com os valores de “r” obtidos para o ponto de referência e diferentes composições.

*Tabela D. 2: Valores de “r” para diferentes valores de composição.*

$x_1 - x_2$	r
0,25 - 0,25	0,98
0,30 - 0,30	1,01
0,35 - 0,35	1,02

$$\left. \frac{\partial r}{\partial x_1} \right|_{k,T} = 4.10^{-1}$$

A análise de sensibilidade da relação de segregação do componente leve com a permeabilidade, apresentada na Tabela D.3.

Tabela D. 3: Valores de “r” para diferentes valores de permeabilidade.

K [mD]	r
0	0,88
1	1,15
10	1,15
100	1,13

A análise de sensibilidade, referente à permeabilidade, pode ser separada em dois casos: no primeiro, em que a variação do parâmetro “r” é bem pronunciada e no segundo em que existe uma estabilização da segregação, a permeabilidades maiores que k=1 mD:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left. \frac{\partial r}{\partial K} \right|_{T,X} = 1,7.10^{-1} \left[ \frac{1}{mD} \right] \quad \text{para } K < 1 \\ \left. \frac{\partial r}{\partial K} \right|_{T,X} = -4.10^{-4} \left[ \frac{1}{mD} \right] \quad \text{para } K > 1 \end{array} \right.$$

Por ter os reservatórios de petróleo permeabilidades maiores que 1 mD foi concluindo que o parâmetro que mais contribui na segregação composicional é a variação da composição da mistura em estudo. Isso quer dizer que para uma mesma mistura ternária ou de pseudo-componentes não podemos determinar *a priori* qual será o sentido e a intensidade da segregação sem antes avaliar quantitativamente concentrações das espécies presentes.

## Apêndice E – Método Semi-implícito – Método Implícito

Os esquemas implícito e semi-implícito foram usados para a integração temporal partindo de um estado de não equilíbrio, considerando que a composição é homogênea no instante inicial, iterando até que o sistema esteja em equilíbrio termodinâmico.

As simulações pelo método implícito e semi-implícito foram comparadas a diversas permeabilidades do reservatório, de zero (a difusão pura) até 1000 mD, a diferença entre ambos os métodos era mais pronunciada para permeabilidades elevadas. Neste caso, o método semi-implícito frequentemente não alcançava um estado estável e o resultado dependeu do ponto inicial, tornando-se instável. Por outro lado, o método implícito consegue a convergência incondicionalmente.

Na Figura E.1 são apresentados os mapas de composição obtidos por Firoozabadi (2000) para uma mistura ternária dos hidrocarbonetos metano – etano - butano e também para a permeabilidade de 10 mD, os resultados obtidos pelo método implícito e também os obtidos no método semi-implícito nesta dissertação.

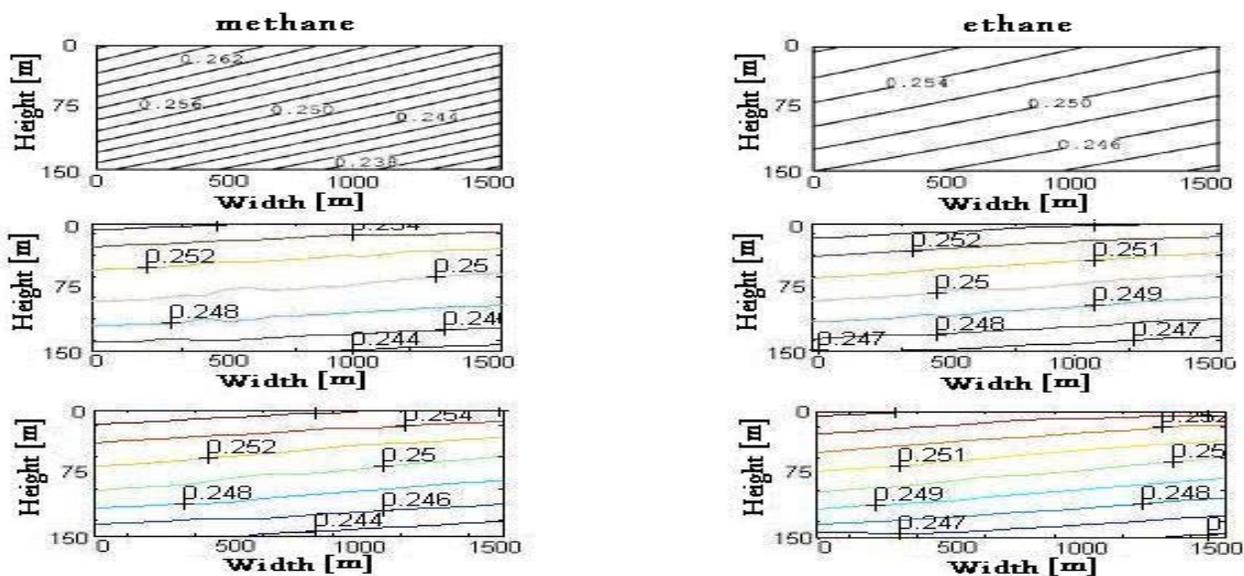


Figura E. 1: Acima, os mapas da composição obtidos por Firoozabadi (2000) para a permeabilidade de 10 mD; no meio, os resultados obtidos pelo método implícito e, abaixo, pelo o método semi-implícito.

Na Tabela E.1 é apresentado o número de iterações necessárias para atingir a condição de equilíbrio, quando o método implícito e semi-implícito é usado para a mistura de óleo real, observando que não foi possível a convergência para permeabilidades maiores que 10 mD no método semi-implícito

*Tabela E. 1: Número da iteração necessário para atingir a condição de equilíbrio.*

Número de Iterações: <b>Óleo Real</b>		
K [mD]	Método Semi-implícito	Método Implícito
0	8340	15340
1	12470	17850
10	não convergência	19120
100	não convergência	19120
1000	não convergência	19120

Os resultados para o óleo real, caracterizados nas Figuras E.2 e E.3, apresentaram maior número de simulações para atingir o estado estacionário e o método semi-implícito mostrou uma tendência de oscilação, especialmente para as simulações nas quais foram consideradas elevadas permeabilidades. Para permeabilidades maiores que 1 mD, os efeitos convectivos começam a ter a mesma ordem de magnitude que os difusivos, afetando assim, o sentido de migração e aumentando a não-linearidade do sistema; para estes casos, o método totalmente implícito se apresenta como o mais estável.

Na Figura E.2 são apresentados os mapas composicionais da fração molar para o óleo real e para permeabilidade de 1mD obtidos pela resolução implícita e usando o método semi-implícito.

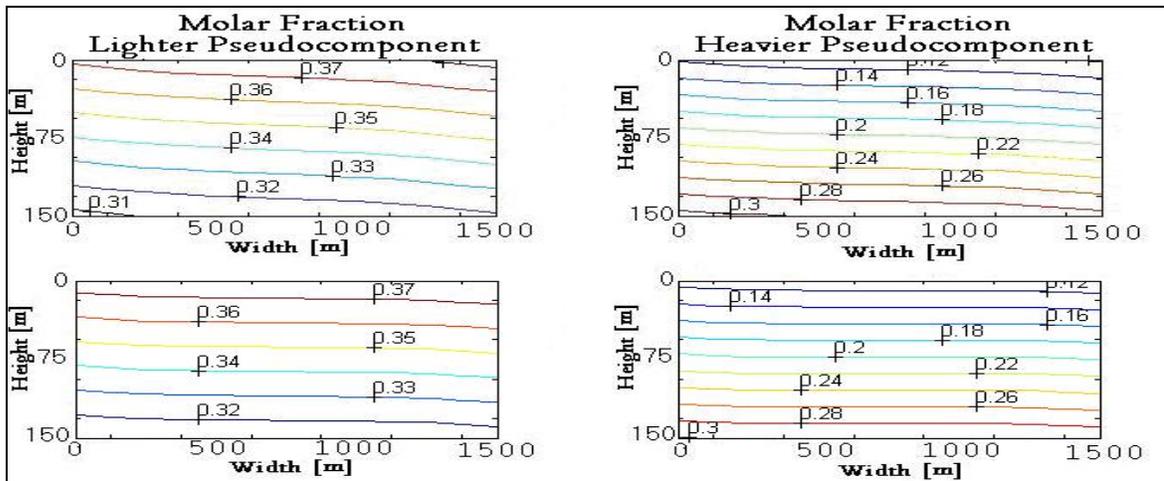


Figura E. 2: Mapas composicionais do óleo real para permeabilidade de 1mD - resolução implícita (acima) e método semi-implícito (abaixo).

Em continuação foi realizado o mesmo tipo de análise para um óleo real, cujos resultados são apresentados na figura E.3.

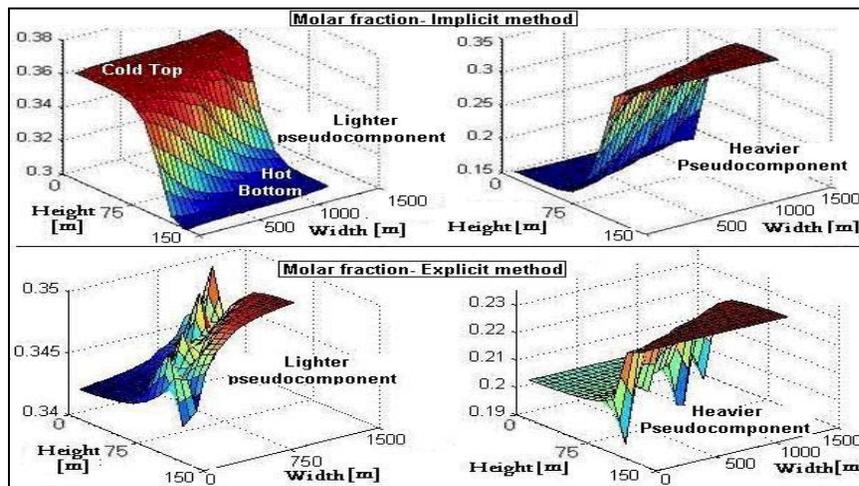


Figura E. 3: Mapas composicionais do óleo real para permeabilidade de 1000 mD, usando o método implícito (acima) e o método semi-implícito (abaixo).

➤ A Figura E.1 apresenta semelhantes resultados entre o método implícito e semi-implícito na mistura ternária para permeabilidades baixas ou elevadas. O mesmo comportamento foi observado quando foram comparados os resultados dos mapas composicionais com os resultados obtidos por Firoozabadi (2000).

➤ Para o caso de óleo real e altas permeabilidades, foi observado nas superfícies da Figura E.3 que o método semi-implícito apresenta picos nos resultados de saída, demonstrando

que a solução oscila e não atinge a convergência. No método implícito, o pseudo-componente leve segrega para ponto topo-frio do reservatório, porém, no método semi-implícito, o mesmo componente segrega para o ponto fundo-quente e sem apresentar a mesma estabilidade.