



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL
SIMULAÇÃO E GERENCIAMENTO DE RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO

IGOR VASCONCELOS DE LACERDA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO COMPOSICIONAL EM
RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO USANDO UMA FORMULAÇÃO
TOTALMENTE IMPLÍCITA**

Recife

2023



CARACTERIZAÇÃO E SIMULAÇÃO DE RESERVATÓRIOS, ENERGIAS RENOVÁVEIS
E BIOTECNOLOGIA AMBIENTAL

Apoio



Gestão



IGOR VASCONCELOS DE LACERDA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO COMPOSICIONAL EM
RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO USANDO UMA FORMULAÇÃO
TOTALMENTE IMPLÍCITA**

Dissertação submetida ao corpo docente do curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de mestre em Engenharia Civil.

Área de Concentração: Simulação e Gerenciamento de Reservatórios de Petróleo.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Roberto Maciel Lyra.

Coorientador: Prof. Dr. Darlan Karlo Elisiário de Carvalho.

Recife

2023

Catálogo na fonte:
Bibliotecário Carlos Moura, CRB-4/1502

L131s Lacerda, Igor Vasconcelos de.
Simulação numérica do escoamento composicional em reservatórios de petróleo usando uma formulação totalmente implícita. / Igor Vasconcelos de Lacerda. – 2023.
105 f.: il.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Roberto Maciel Lyra.
Coorientador: Prof. Dr. Darlan Karlo Elisiário de Carvalho.
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, 2023.
Inclui referências e apêndices.

1. Engenharia civil. 2. Reservatórios de petróleo. 3. Formulação composicional. 4. Abordagem totalmente implícita. I. Lyra, Paulo Roberto Maciel (orientador). II. Carvalho, Darlan Karlo Elisiário de (coorientador). III. Título.

624 (22. ed.)

UFPE
BCTG/2023-063

IGOR VASCONCELOS DE LACERDA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO COMPOSICIONAL EM
RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO USANDO UMA FORMULAÇÃO
TOTALMENTE IMPLÍCITA**

Dissertação em Engenharia Civil da
Universidade Federal de Pernambuco,
Centro de Tecnologia e Geociências,
como requisito para obtenção do título
de Mestre em Engenharia Civil, Área de
Concentração Simulação e
Gerenciamento de Reservatórios de
Petróleo.

Aprovada em 30/01/2023

Orientador: Prof. Dr. Paulo Roberto Maciel Lyra - Universidade Federal de Pernambuco
Coorientador: Prof. Dr. Darlan Karlo Elisiário de Carvalho – Universidade Federal de
Pernambuco

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Ramiro Brito Willmersdorf (examinador interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Márcio Rodrigo de Araújo Souza (examinador externo)
Universidade Federal da Paraíba

Prof. Dr. Fernando Raul Licapa Contreras (examinador externo)
Universidade Federal de Pernambuco

AGRADECIMENTOS

Agradeço profundamente aos meus pais, Gisoneide Bezerra e Severino Lacerda, por todo o suporte durante a realização deste trabalho, e por não medirem esforços para que eu alcançasse meus objetivos. Pelo exemplo de amor, caráter, honestidade e perseverança, mostrando-me que sou capaz de atingir meus sonhos com base no trabalho duro, fé e determinação.

À minha irmã Jéssica Lacerda, pelo exemplo de dedicação e perseverança, sempre me motivando a buscar o melhor de mim.

Aos meus demais parentes e familiares que me apoiaram nos momentos de dificuldade.

A todos os meus amigos, que sempre ajudaram com os momentos de descontração, contribuindo com boas risadas e renovando as energias para continuar o trabalho. Não citarei nomes para não cometer a injustiça de esquecer alguém, mas sintam-se abraçados.

Aos meus orientadores, o professor Dr. Paulo Lyra e o professor Dr. Darlan Carvalho, por me acolherem no grupo de pesquisa PADMEC, por todo o suporte e orientação ao longo desses anos e pela confiança depositada em mim. Foram partes fundamentais para a realização deste trabalho.

A todos os colegas que fazem parte do grupo PADMEC, em especial Maria Eduarda Galindo, por todo o auxílio prestado e todo conhecimento compartilhado, sem os quais este trabalho não seria possível.

À **Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – ANP** e à **Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP**, por meio do Programa de Formação de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – PRH-ANP/FINEP, pelo apoio financeiro, suportado com recursos provenientes do investimento de empresas petrolíferas qualificadas na Cláusula de P, D&I da Resolução ANP nº 50/2015. Em particular ao **PRH 48.1 “Caracterização e Simulação de Reservatórios, Energias renováveis e Biotecnologia Ambiental” (PROCESSO ANP Nº48610.201019/2019-38)**, do Departamento de Energia Nuclear do Centro de Tecnologia e Geociências da UFPE.

RESUMO

Na indústria do petróleo, a simulação numérica de reservatórios é uma ferramenta amplamente utilizada para investigar o efeito de diferentes estratégias de injeção ou produção, uma vez que as equações que regem o modelo matemático de um reservatório não podem ser resolvidas por métodos analíticos para problemas gerais. Dos modelos de fluidos mais adotados, destacam-se o *Black-Oil* e o composicional. O *Black-Oil* é amplamente utilizado na simulação de reservatórios por sua relativa facilidade de implementação e relativo baixo custo computacional. Entretanto, para a simulação de problemas mais complexos, como a aplicação de técnicas de Recuperação Avançada, reservatórios de óleo volátil (exemplo do pré-sal brasileiro) ou de gás condensado, é necessária a aplicação do modelo composicional para atingir resultados mais acurados e fisicamente adequados. A solução do modelo composicional envolve um complexo sistema de equações cuja solução representa, até hoje, um grande desafio do ponto de vista computacional. Vários algoritmos de solução surgem da combinação de diferentes seleções de variáveis primárias e técnicas de desacoplamento. Neste trabalho, apresentamos uma formulação Totalmente Implícita (*Fully Implicit* - FI) com abordagem monolítica, empregando o método de Euler implícito (*Backward Euler*) para a integração no tempo, utilizando uma Equações de Estado para modelagem do comportamento das fases. Adotamos o fluxo de até três fases no reservatório (água, óleo e gás). Para os termos difusivos das equações que descrevem o modelo matemático, discretizamos pelo Método dos Volumes Finitos com a Aproximação de Fluxo por Dois Pontos (*Two-Point Flux Approximation* - TPFA), enquanto nos termos advectivos aplicamos a ponderação à montante de primeira ordem. Esse simulador foi elaborado em um ambiente integrado e em conjunto com outros projetos desenvolvidos por integrantes do grupo PADMEC da UFPE. Utilizou-se a linguagem Python na implementação, recorrendo a vetorização das operações na busca de um melhor desempenho computacional. Nesse ambiente, já foram elaboradas duas formulações sequenciais (uma IMPEC e uma IMPSAT), e como contribuição deste trabalho, uma formulação Totalmente Implícita foi acrescentada. Nossa formulação é avaliada resolvendo problemas de natureza 1-D e 2-D encontrados na literatura, usando malhas cartesianas, e os resultados são promissores, fornecendo uma base para futura implementação de modelos mais complexos, como uma expansão para formulação não isotérmica e adequação para implementação usando malhas não-estruturadas.

Palavras-chave: reservatórios de petróleo; formulação composicional; abordagem totalmente implícita.

ABSTRACT

In the oil industry, the numerical simulation of reservoirs is a widely used tool to investigate the effect of different injection or production strategies, since the equations that govern the mathematical model of a reservoir cannot be solved by analytical methods for general problems. Of the most adopted fluid models, Black-Oil and compositional stand out. The Black-Oil model is widely used in the reservoir simulation due to its relative ease of implementation and relatively low computational cost. However, for the simulation of more complex problems, such as the application of Enhanced Oil Recovery techniques, volatile oil reservoirs (example of the Brazilian pre-salt) or condensate gas, it is necessary to apply the compositional model to achieve results more accurate and physically adequate. The solution of the compositional model involves a complex system of equations whose solution represents, until today, a great challenge from the computational point of view. Several solution algorithms arise from the combination of different primary variable selections and decoupling techniques. In this work, we present a Fully Implicit (FI) formulation with a monolithic approach, employing the Backward Euler method for time integration, using an Equations of State (EOS) for modeling the phases behavior. We adopted the flow of up to three phases in the reservoir (water, oil and gas). For the diffusive terms of the equations describing the mathematical model, we discretize using the Finite Volume Method with the Two-Point Flux Approximation (TPFA), while for the advective terms we apply the first-order upstream weighting. This simulator was created in an integrated environment together with other projects developed by members of the PADMEC group at UFPE. The Python language was used in the implementation, resorting to the vectorization of operations in the search for better computational performance. In this environment, two sequential formulations have already been elaborated (one IMPEC and one IMPSAT), and as a contribution to this work, a Fully Implicit formulation was added. Our formulation is evaluated by solving 1-D and 2-D problems found in literature, using Cartesian meshes, and the results are promising, providing a basis for future implementation of more complex models, such as an expansion to non-isothermal formulation and suitability for implementation using unstructured meshes.

Keywords: petroleum reservoirs; compositional formulation; fully implicit approach.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Modelo esquemático de um reservatório e suas respectivas condições de contorno.	29
Figura 2 - Representação da distância entre os planos tangentes no ponto estacionário para uma mistura binária.....	33
Figura 3 - Representação do volume de controle em uma malha cartesiana 2-D.	41
Figura 4 - Fluxograma da solução.	53
Figura 5 - Modelo do domínio do reservatório para os casos 1-D.	55
Figura 6 - Saturação de água obtida pelo método FI em comparação com a solução semi-analítica.	57
Figura 7 - Saturação de água para a malha de 1.024 CVs comparada com a solução semi-analítica do caso 1.	57
Figura 8 - Variação da norma do erro com o número de volumes de controle do caso 1.	58
Figura 9 - Fração molar de metano na fase óleo para malhas: a) 500; b) 1.000; c) 2.000 volumes de controle.	61
Figura 10 - Fração molar de metano na fase óleo para a malha de 2.000 CVs em todo o domínio.	62
Figura 11 - Curvas de saturação: a) água; b) óleo; c) gás para o caso 3.	65
Figura 12 - Variação da norma do erro da saturação com o número de volumes de controle do caso 3: a) água; b) óleo; c) gás.	67
Figura 13 - Fração molar global do caso 3 para as malhas de 50, 100 e 200 CVs: a) C1; b) C20.	68
Figura 14 - Domínio e malha 2-D para o caso 4.	69
Figura 15 - Campo de saturação de água do caso 4 para malha com a) 20x20; b) 40x40; c) 80x80.	71
Figura 16 - Campo de saturação de água gerado pelo CMG-GEM na malha de 80x80 para o caso 4.	72
Figura 17 - Domínio 2-D com dois campos de permeabilidade para o caso 5.	73
Figura 18 - Fração molar global de metano para o caso 5 na malha de 40x20 volumes de controle.	75
Figura 19 - Solução de referência para a fração molar global de metano na malha de 40x20 volumes de controle.	75

Figura 20 - Fração molar global de metano para $y = 2,5$ m na malha de 40x20 volumes de controle.....	76
Figura 21 - Fração molar global de metano para o caso 5 na malha de 80x40 volumes de controle.....	76
Figura 22 - Solução de referência para a fração molar global de metano na malha de 80x40 volumes de controle.	77
Figura 23 - Fração molar global de metano para $y = 2,5$ m na malha de 80x40 volumes de controle.....	77

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Dados do reservatório do caso 1.....	55
Tabela 2 - Propriedades do componente n-decano.....	56
Tabela 3 - Condições iniciais e de contorno do caso 1.....	56
Tabela 4 - Dados para cálculo da permeabilidade relativa do caso 1.....	56
Tabela 5 - Norma do erro e taxas de convergência para o caso 1.....	58
Tabela 6 - Dados do reservatório do caso 2.....	59
Tabela 7 - Propriedades dos componentes do caso 2.....	59
Tabela 8 - Condições iniciais e de contorno do caso 2.....	60
Tabela 9 - Dados para cálculo da permeabilidade relativa do caso 2.....	60
Tabela 10 - Avaliação do custo computacional do caso 2.....	63
Tabela 11 - Dados do reservatório do caso 3.....	63
Tabela 12 - Propriedades dos componentes do caso 3.....	64
Tabela 13 - Condições iniciais e de contorno do caso 3.....	64
Tabela 14 - Dados para cálculo da permeabilidade relativa do caso 3.....	64
Tabela 15 - Avaliação do custo computacional do caso 3.....	69
Tabela 16 - Dados do reservatório do caso 4.....	70
Tabela 17 - Dados do reservatório do caso 5.....	73
Tabela 18 - Propriedades dos componentes do caso 5.....	73
Tabela 19 - Condições iniciais e de contorno do caso 5.....	74
Tabela 20 - Dados para cálculo da permeabilidade relativa do caso 5.....	74
Tabela 21 - Avaliação do custo computacional do caso 5.....	78
Tabela 22 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 1.....	104
Tabela 23 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 2.....	104
Tabela 24 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 3.....	104
Tabela 25 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 4.....	104
Tabela 26 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 5.....	105

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AIM	Adaptive Implicit Method
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
CMG	Computer Modelling Group
CSP	Compositional Space Parameterization
CV	Control Volumes
EbFVM	Element-based Finite Volume Method
EOR	Enhanced Oil Recovery
EOS	Equations of State
FI	Fully Implicit
FVM	Finite Volume Method
IMPEC	Implicit Pressure Explicit Composition
IMPRESS	Intuitive Multilevel Preprocessor for Smart Simulation
IMPSAT	Implicit Pressure and Saturation
IOR	Improved Oil Recovery
PADMEC	Processamento de Alto Desempenho em Mecânica Computacional
PVI	Pore Volume Injected
SST	Sequential Staging of Tasks
TPD	Tangent Plane Distance
TPFA	Two-point Flux Approximation
WAG	Water Alternating Gas

LISTA DE SÍMBOLOS

g	Aceleração da gravidade [kg.m/s ²]
w	Água
φ_{kj}	Coefficiente de fugacidade do componente k na fase j
δ_{ik}	Coefficiente de interação binária entre os componentes i e k
k	Componentes
y	Composição da fase gás
x	Composição da fase óleo
C	Compressibilidade [1/Pa]
D	Condição de contorno de Dirichlet
N	Condição de contorno de Neumann
R	Constante universal dos gases [J/mol.K]
Γ	Contorno do reservatório
D	Cota em relação ao referencial [m]
ρ	Densidade mássica [kg/m ³]
ξ	Densidade molar [mol/m ³]
$F(y_{SP})$	Distância entre os planos tangentes
Ω	Domínio do reservatório
0	Estado de referência
j	Fases
w	Fator acêntrico
Z	Fator de compressibilidade
F_{kj}	Fluxo do componente k na fase j através da face do volume de controle
\dot{q}	Fluxo molar sendo injetado ou produzido [mol/s]
β	Fração molar
L	Fração molar da fase líquida
V	Fração molar da fase vapor
x_{kj}	Fração molar do componente k na fase j

z	Fração molar global
f_{kj}	Fugacidade do componente k na fase j [Pa]
g	Gás
m	Iteração
M	Massa molecular [kg/mol]
\underline{J}	Matriz jacobiana
$ \alpha ^{\max}$	Máxima velocidade da onda
λ	Mobilidade [1/(Pa.s)]
n_c	Número de componentes hidrocarbonetos
n_p	Número de fases
N	Número de mols
o	Óleo
∇	Operador gradiente
Δt	Passo de tempo
n	Passo de tempo
k_r	Permeabilidade relativa
ϕ	Porosidade
ψ	Potencial hidráulico
σ	Potencial químico
P	Pressão [Pa]
P_c	Pressão crítica
c	Propriedade crítica
K	Razão de equilíbrio
r	Reduzida
R^M	Resíduo da equação de conservação de massa
R^V	Resíduo da equação de restrição de volume poroso
S	Saturação
T	Temperatura [K]
T_c	Temperatura crítica

T_r	Temperatura reduzida do componente
t	tempo [s]
\underline{K}	Tensor de permeabilidade absoluta [m ²]
τ	Transmissibilidade da face
\vec{v}	Velocidade das fases [m/s]
\vec{n}	Vetor área normal
\vec{X}	Vetor de variáveis primárias
μ	Viscosidade [Pa.s]
v	Volume molar [m ³ /mol]
v_c	Volume molar crítico
V_b	Volume total [m ³]

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
1.1	Considerações Iniciais	16
1.2	Objetivos Gerais	19
1.3	Objetivos Específicos	19
1.4	Organização da Dissertação	19
2	REVISÃO DA LITERATURA	21
3	MODELO MATEMÁTICO	25
3.1	Variáveis Primárias	25
3.2	Premissas Básicas	26
3.3	Equação de Conservação de Massa dos Componentes	27
3.4	Restrição de Volume Poroso	27
3.5	Condições Iniciais e de Contorno	28
3.6	Propriedades da Equação de Estado	29
3.6.1	Equação de Estado de Peng e Robinson	29
3.6.2	Fator de Compressibilidade	31
3.6.3	Fugacidade e Coeficiente de Fugacidade	31
3.7	Comportamento das Fases	32
3.7.1	Teste de Estabilidade de Fases	32
3.7.2	Cálculo de <i>Flash</i>	33
3.8	Propriedades das Fases	35
3.8.1	Densidade Molar	35
3.8.2	Densidade Mássica	35
3.8.3	Saturação	36
3.9	Viscosidade	36
3.10	Permeabilidade Relativa	37
3.10.1	Modelo Corey	38

3.10.2	Modelo Stone II Modificado	38
4	FORMULAÇÃO NUMÉRICA	40
4.1	Discretização da Equação de Conservação de Massa	41
4.2	Restrição de Volume Poroso	44
4.3	Processo de Solução	44
4.4	Teste de Estabilidade de Fases	46
4.5	Cálculo de <i>Flash</i>	48
4.6	Seleção do Passo de Tempo	50
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	54
5.1	Caso 1: Problema de Buckley e Leverett	54
5.2	Caso 2: Injeção de Gás em um Reservatório de Óleo Unidimensional	58
5.3	Caso 3: Escoamento Trifásico Unidimensional	63
5.4	Caso 4: Injeção de Água em um Reservatório de Óleo Bidimensional	69
5.5	Caso 5: Escoamento Bidimensional em Reservatório Heterogêneo	72
6.	CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS	79
6.1	Trabalhos Futuros	80
	REFERÊNCIAS	82
	APÊNDICE A – DERIVADAS PARA CONSTRUÇÃO DA MATRIZ JACOBIANA	88
	APÊNDICE B – PARÂMETROS DE CONTROLE DE PASSO DE TEMPO	104

1 INTRODUÇÃO

Nesta seção serão apresentadas as considerações iniciais, os objetivos gerais, os objetivos específicos e a organização dos capítulos que constituem esta dissertação.

1.1 Considerações Iniciais

Usualmente, os processos de recuperação de óleo podem ser subdivididos em três categorias: primária, secundária e terciária, também chamada de recuperação avançada (*Enhanced Oil Recovery* – EOR). Na recuperação primária, o reservatório contém essencialmente um único fluido, como gás ou óleo e a presença de água é, geralmente, negligenciada. Muitas vezes a pressão no reservatório é tão alta que o gás ou óleo é produzido por simples descompressão natural sem qualquer esforço de bombeamento nos poços. Essa etapa termina quando ocorre um equilíbrio de pressão entre o campo de petróleo e a atmosfera, possuindo uma baixa eficiência, já que geralmente deixa de 70% a 85% dos hidrocarbonetos no reservatório (THOMAS, 2001; CHEN, HUAN e MA, 2006).

Quando a pressão do reservatório é reduzida a um ponto em que não é mais eficaz na expulsão do óleo para os poços produtores, um fluido (geralmente água) é injetado em alguns poços (poços de injeção) enquanto o óleo é produzido por meio de outros poços (poços de produção), visando manter a alta pressão do reservatório e as taxas de produção elevadas. Esse processo é chamado de recuperação secundária. Mesmo com a aplicação da recuperação secundária, geralmente 50% ou mais dos hidrocarbonetos permanecem no reservatório, dependendo das propriedades do óleo existente e da formação geológica presente (DONALDSON, CHILINGARIAN e YEN, 1989; CHEN, HUAN e MA, 2006).

Para recuperar mais hidrocarbonetos e aumentar o fator de recuperação, várias técnicas de recuperação avançada foram desenvolvidas. Enquanto a recuperação secundária envolve a injeção de água ou gás para ajudar a deslocar o óleo para os poços de produção sem alterar as propriedades reais dos hidrocarbonetos, as técnicas de EOR envolvem a alteração da composição dos fluidos existentes no reservatório, por meio de processos químicos e térmicos complexos. Exemplos de EOR englobam a recuperação térmica, a injeção alternada de água e gás (*Water Alternating Gas* - WAG), a injeção química, dentre outros (ROSA, CARVALHO e XAVIER, 2006). Em essência, propriedades importantes como densidade e viscosidade do petróleo bruto mudam, facilitando o deslocamento do óleo no reservatório para os poços produtores (MOKHEIMER *et al.*, 2019).

Nesse contexto, é importante citar a Recuperação Melhorada de Óleo (*Improved Oil Recovery* – IOR) e suas diferenças em relação ao EOR, visto que constantemente esses dois termos são usados como sinônimos. A principal diferença entre essas estratégias é que a abordagem EOR é usada para recuperar o óleo móvel que permanece no reservatório após a aplicação dos métodos primários e secundários, enquanto as estratégias IOR são mais amplas, buscando recuperar óleo adicional além dos métodos de recuperação primária ou qualquer atividade que aumente a produção de óleo e aumente o fator de recuperação. Isso implica que o IOR inclui a aplicação de avanços tecnológicos ao longo da vida útil de um campo e abrange todos os métodos de recuperação secundária e terciária (WANG *et al.*, 2017). Os métodos IOR convencionais incluem gerenciamento aprimorado de reservatórios, iniciativas de redução de custos e os métodos EOR.

Na indústria do petróleo, a modelagem de reservatórios é amplamente utilizada para, por exemplo, investigar o efeito de diferentes estratégias de injeção ou produção no desempenho do reservatório, ou ainda para estimar parâmetros envolvidos na solução de problemas inversos ou de ajuste de histórico, otimização da produção e avaliação de incertezas (ABOU-KASSEM, FAROUQ-ALI e ISLAM, 2013). Em geral, as equações que descrevem um modelo matemático de um reservatório não podem ser resolvidas por métodos analíticos. Desde a década de 1950, quando os computadores se tornaram amplamente disponíveis, modelos numéricos têm sido usados para prever, entender e otimizar processos complexos de fluxo de fluidos em reservatórios de petróleo. Avanços recentes em capacidades computacionais, particularmente com o advento de novas arquiteturas paralelas, expandiram muito o potencial para resolver problemas maiores e, portanto, permitir a elaboração de modelos mais próximos da física real (CHEN, HUAN e MA, 2006). Os simuladores de reservatórios são ferramentas utilizadas para atingir tais objetivos e esforços têm sido dedicados para melhorar o desempenho computacional dessas ferramentas ao longo das últimas décadas, o que tem permitido o uso de modelos cada vez mais acurados (QIAO, 2015; FERNANDES, MARCONDES e SEPEHRNOORI, 2021).

Os dois modelos de fluidos mais populares para simulação de reservatórios nas últimas décadas são: o modelo *Black-Oil* e o modelo composicional. O modelo *Black-Oil*, amplamente utilizado na indústria, assume que os fluidos presentes são constituídos de uma fase aquosa explícita e apenas dois pseudocomponentes hidrocarbonetos, distribuídos em um pseudocomponente para a fase óleo e outro para a fase gás (CHANG, POPE e SEPEHRNOORI, 1990). Esse modelo tem sido amplamente utilizado devido à relativa facilidade de implementação, baixo custo computacional, quando comparado aos modelos composicionais mais complexos,

e robustez quando aplicado à simulação de técnicas convencionais de recuperação de óleo, como a injeção de água, onde os processos são essencialmente imiscíveis (QIAO, 2015).

O modelo *Black-Oil* pode ser usado para descrever os processos de depleção de pressão e deslocamento multifásico e, portanto, tem sido amplamente utilizado na simulação de recuperação primária e secundária (QIAO, 2015). Para a simulação das técnicas de EOR, que envolvem a alteração da composição dos fluidos do reservatório, é necessária a aplicação de modelos mais complexos, uma vez que o *Black-Oil* não é capaz de lidar com esse fenômeno de maneira consistente. Nesse contexto é fundamental a aplicação do modelo composicional.

Nos modelos composicionais, o número de pseudocomponentes hidrocarbonetos que descrevem as fases óleo e gás é, em princípio, arbitrário. Logo, o número de fases presentes em equilíbrio, bem como a composição de cada uma das fases dependem das condições termodinâmicas e da concentração total de cada componente (CHEN, HUAN e MA, 2006). Diferente do modelo *Black-oil*, que usa simples correlações PVT (pressão, volume e temperatura) para retratar o comportamento das fases, os modelos composicionais fazem uso de uma Equação de Estado (*Equations of State* - EOS) para descrever o comportamento da mistura de fluidos, permitindo calcular o equilíbrio líquido-vapor de forma acurada e mais próximo da realidade.

As Equações de Estado podem representar com acurácia as propriedades PVT de hidrocarbonetos fluidos, produzindo bons resultados na modelagem de reservatórios nos quais as fases mudam drasticamente em relação à pressão, temperatura e composição, como, por exemplo na aplicação de técnicas EOR, que envolvem um comportamento de fases complexo e estão muito além da capacidade dos simuladores *Black-oil* (QIAO, 2015). Além da simulação das técnicas de EOR, os modelos composicionais também são necessários na simulação de reservatórios de óleo volátil (por exemplo, os do pré-sal brasileiro) ou de gás condensado (CHANG, POPE e SEPEHRNOORI, 1990; LABOISSIERE *et al.*, 2013).

Dessa forma, este trabalho foca no desenvolvimento de um simulador numérico composicional isotérmico para análise do fluxo multifásico e multicomponente em reservatórios de petróleo, usando uma EOS. Utilizamos a formulação Totalmente Implícita com abordagem monolítica proposta por Collins *et al.* (1992), empregando o método de Euler implícito (*Backward Euler*) para a integração no tempo, aplicada a malhas cartesianas e estruturadas em 1-D e 2-D para a simulação composicional de reservatórios. Na formulação numérica, adotamos a forma clássica do Método dos Volumes Finitos (*Finite Volume Method* - FVM), também chamada de esquema com Aproximação de Fluxo por Dois Pontos (*Two-point Flux Approximation* – TPFA) na literatura de simulação de reservatórios de petróleo (Peaceman, 1990) para a discretização dos termos difusivos das equações governantes, bem como o método de ponderação à montante,

upwind ou *upstream* de primeira ordem para a aproximação dos termos de fluxo advectivo. Esse simulador foi implementado em um ambiente integrado e em conjunto com outros projetos desenvolvidos por membros do grupo PADMEC da UFPE (GALINDO, 2021; GALINDO *et al.*, 2022; LACERDA *et al.* 2022). O algoritmo foi implementado na linguagem Python (VAN ROSSUM e DRAKE JR, 1995) de forma vetorizada, buscando reduzir os custos computacionais envolvidos. A formulação original deste simulador consistia em uma formulação IMPEC implementada por Galindo (2021). Como contribuição deste trabalho, a formulação Totalmente Implícita (FI) de Collins *et al.* (1992) foi implementada com sucesso neste estudo.

1.2 Objetivos Gerais

O objetivo geral do presente trabalho é desenvolver um simulador numérico composicional baseado em Equações de Estado para a solução do problema de transporte multifásico e multicomponente em reservatórios de petróleo utilizando uma formulação Totalmente Implícita com abordagem monolítica aplicada a malhas cartesianas estruturadas em 1-D e 2-D.

1.3 Objetivos Específicos

- Estudo e pesquisa sobre a modelagem de escoamentos multifásicos e multicomponentes em reservatórios de petróleo, utilizando o modelo composicional baseado em EOS;
- Implementação de uma formulação composicional Totalmente Implícita para solução do problema de escoamento utilizando a linguagem de programação Python, de maneira vetorizada e computacionalmente eficiente;
- Simulação de casos *benchmark* para verificação das técnicas implementadas e avaliar a acurácia das formulações e esquemas de discretização escolhidos para resolução numérica do problema.

1.4 Organização da Dissertação

Além deste capítulo introdutório, esta dissertação é composta por mais 5 capítulos, descritos a seguir:

- No Capítulo 2 é apresentada uma revisão da literatura com relação à simulação composicional de reservatórios de petróleo;
- No capítulo 3 é apresentado o modelo matemático adotado para o escoamento multifásico e multicomponente em reservatórios de petróleo;
- No capítulo 4 é exibida a formulação numérica adotada para a solução do problema composicional;
- No Capítulo 5 são expostos os resultados obtidos na simulação de casos *benchmark* para verificação das técnicas implementadas no Capítulo 4;
- No Capítulo 6 são apontadas as conclusões extraídas do presente trabalho e apresentadas sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Embora a representação matemática e numérica do fluxo multifásico e multicomponente na simulação de reservatórios de petróleo tenha sido estudada nas últimas décadas, ela ainda é uma tarefa desafiadora. A complexidade é proveniente dos múltiplos fenômenos físico-químico envolvidos, dos extensos modelos matemático e numérico, que resultam na solução de um grande número de equações não lineares, além do cálculo acurado das incógnitas que representam as variáveis físicas do fluxo de fluidos em meios porosos. Diversos autores apresentaram variadas formulações para o tratamento do escoamento composicional, e um breve resumo é apresentado a seguir.

Os primeiros modelos composicionais não usavam Equações de Estado (EOS), com as propriedades físicas avaliadas por meio de correlações, gerando simuladores com vários problemas de convergência e consistência termodinâmica. Fussell e Fussell (1979) foram os primeiros autores a introduzir uma Equação de Estado para calcular o equilíbrio de fases em um simulador composicional de reservatório, superando problemas de não convergência de modelos anteriores, que não usavam Equações de Estado. Empregando uma formulação IMPEC (*Implicit Pressure Explicit Composition*), Fussell e Fussell (1979) usaram as equações de restrição (equações de fugacidade e restrição de volume poroso) como equações primárias em vez das usuais equações de balanço de massa dos componentes.

Coats (1980) desenvolveu um simulador Totalmente Implícito (*Fully Implicit - FI*), tridimensional e trifásico, dispondo de uma equação de estado para o equilíbrio das fases e cálculo das suas propriedades. O conjunto de variáveis primárias foi denominado de variáveis naturais. Nghiem, Fong e Aziz (1981) desenvolveram um simulador composicional trifásico e tridimensional. Eles adotaram o método IMPEC, resolvendo a pressão implicitamente e as composições explicitamente. O referido modelo usa a EOS de Peng e Robinson (1976) para o equilíbrio de fases e cálculo das densidades. Os efeitos da tensão interfacial também foram considerados. Young e Stephenson (1983) relatam que produziram um simulador mais eficiente do que o simulador de Fussell e Fussell (1979), a partir de uma seleção diferente das variáveis primárias. No modelo de Fussell e Fussell (1979), diferentes conjuntos de variáveis primárias eram selecionadas dependendo das condições dos fluidos, enquanto que no de Young e Stephenson (1983) um único conjunto de variáveis primárias foi adotado, independente das condições dos fluidos. Assim, a matriz jacobiana era esparsa e próxima de triangular superior, podendo ser resolvida com mais eficiência. Um novo tipo de formulação foi introduzido por Acs, Doleschall e Farkas (1985), que apresentaram uma equação de pressão para formulação IMPEC

totalmente desacoplada das equações de fugacidade, a partir de uma equação de equilíbrio de volume, resolvendo as pressões implicitamente e as composições explicitamente.

Chien, Lee e Chen (1985) apresentaram outra formulação Totalmente Implícita com variáveis primárias diferentes daquelas de Coats (1980). Eles resolveram para pressão, composição global e constantes de equilíbrio, enquanto que em Coats (1980) as variáveis primárias eram pressão, saturação e composição das fases. Quandalle e Savary (1989) introduziram uma formulação IMPSAT (*Implicit Pressure and Saturation*). Este modelo tem a vantagem de ser mais estável do que uma formulação IMPEC usual, devido ao tratamento implícito das saturações. Além disso, possui um número reduzido de equações em comparação a uma formulação Totalmente Implícita. Chang (1990) desenvolveu um simulador composicional tridimensional com formulação IMPEC. Ele focou na simulação de injeção de gás miscível, de forma que foi necessário o cálculo de equilíbrio termodinâmico capaz de lidar com todas as fases que apareciam durante a simulação (água, óleo, gás e segunda fase líquida não aquosa).

Briens *et al.* (1991) desenvolveram um simulador de reservatório composicional vetorizado totalmente paralelo e introduziram um algoritmo, *Sequential Staging of Tasks* (SST), que pode ser usado para processamento paralelo, visando acelerar a solução de problemas em grande escala. Collins *et al.* (1992) desenvolveram uma formulação Totalmente Implícita, na qual o equilíbrio de fases é desacoplado das equações de balanço de massa. Nessa formulação, são utilizadas variáveis globais (pressão e concentração molar dos componentes), de modo que o equilíbrio de fases pode ser realizado de forma separada. Branco e Rodriguez (1996) desenvolveram outra formulação IMPSAT, que chamaram de formulação semi-implícita. A principal diferença entre essa formulação e a de Quandalle e Savary (1989) é a opção por atualizar as concentrações dos componentes a cada iteração do solucionador de Newton. Wang *et al.* (1997) apresentaram a formulação para um simulador composicional EOS totalmente implícito e paralelo, capaz de simulações em grande escala. Eles dividiram o trabalho em duas partes. Na Parte I, Wang *et al.* (1997) mostraram a formulação matemática e as técnicas de solução numérica, enquanto na Parte II, Parashar *et al.* (1997) abordaram a parte de estrutura de dados, interface para usuários, multiprocessamento e estrutura geral para a implementação usando uma linguagem orientada a objetos.

Cao e Aziz (2002) também desenvolveram um método IMPSAT para simulação de reservatório. Eles atestam que o IMPSAT se torna particularmente atraente à medida que o número de componentes aumenta, além de poder ser usado em uma abordagem implícita adaptativa. Yan *et al.* (2004) desenvolveram um simulador composicional tridimensional e trifásico usando o método das linhas de fluxo (*streamlines*) e o aplicaram ao processo de injeção

alternada de água e gás (*Water Alternating Gas - WAG*). Voskov e Tchelepi (2008) descreveram uma abordagem baseada na parametrização adaptativa do espaço composicional (*Compositional Space Parameterization - CSP*). Voskov e Tchelepi (2012) analisaram várias formulações utilizadas para simulação composicional de reservatório, incluindo diferentes conjuntos de variáveis primárias, usando uma estrutura computacional baseada em diferenciação automática. O método totalmente implícito foi utilizado. Eles avaliaram o comportamento do solucionador não linear baseado em Newton em função do tamanho do passo de tempo para diferentes conjuntos de variáveis.

Santos (2013) comparou uma série de formulações para a simulação composicional de reservatórios, bem como sugeriu modificações visando aprimorar as formulações clássicas com novos recursos. As formulações variaram de sequencial IMPEC, IMPSAT a totalmente implícito. Os novos recursos implementados e testados envolveram a inclusão de dispersão física e aplicações em malhas poligonais não-estruturada. Fernandes (2014) implementou e comparou alguns métodos implícitos e outros semi-implícitos. Ele testou: uma formulação IMPEC, uma formulação IMPSAT e duas formulações Totalmente Implícitas, das quais uma delas foi proposta no trabalho. Ele ainda implementou formulações alternativas do IMPSAT, buscando resolver alguns problemas de inconsistências relatados na literatura. Nesse trabalho os autores usaram o Método dos Volumes Finitos baseado em elementos (*Element-based Finite Volume Method - EbFVM*) para discretizar as equações usando malhas cartesianas e não-estruturadas, para reservatórios 2-D e 3-D.

Qiao (2015) empregou a formulação Totalmente Implícita proposta por Collins *et al.* (1992) para examinar diversos solucionadores algébricos para o sistema de equações não lineares. Em particular, ele propôs uma técnica de desacoplamento analítico e outra de desacoplamento semi-analítico, a partir da qual a equação de pressão está diretamente relacionada a uma equação elíptica e pôde ser resolvida de forma mais eficiente. Por meio de experimentos numéricos, ele demonstrou um bom desempenho em comparação com outros métodos de solução existentes.

Voskov (2017) utilizou uma técnica de diferenciação automática em conjunto com uma nova abordagem para a linearização das equações governantes. A versão discretizada das equações foi escrita na forma de operador, onde cada termo é apresentado como um produto de dois operadores. O primeiro tipo de operador depende das propriedades físicas da rocha e do fluido enquanto o segundo tipo depende das propriedades no espaço. Essa formulação foi chamada de Linearização Baseada em Operadores (*Operator-Based Linearization - OBL*). Moncorgé, Tchelepi e Jenny (2018) propuseram uma nova formulação sequencial implícita baseada em

uma equação não linear de balanço de volume global, usando variáveis naturais (saturações e composições das fases), com o intuito de melhorar a convergência dos métodos sequenciais. Eles relatam que alcançaram propriedades de convergência muito comparáveis às da abordagem FI.

Fernandes, Marcondes e Sepehrnoori (2018) apresentaram uma nova abordagem Totalmente Implícita chamada PZS (pressão, composição global e saturação de água). A formulação considera a pressão, a saturação da água e as composições globais como variáveis primárias, reduzindo o número de incógnitas quando comparada a outras formulações Totalmente Implícitas baseado no equilíbrio de volume. A nova formulação foi comparada com outras formulações baseadas em equilíbrio de volume e com o IMPEC, observando que a abordagem PZS é, em geral, mais rápida que as outras abordagens testadas. Recentemente, Fernandes, Marcondes e Sepehrnoori (2021) apresentaram um novo Método Implícito Adaptativo (*Adaptive Implicit Method* - AIM) combinando uma formulação de variáveis globais Totalmente Implícita e uma abordagem IMPEC. Os blocos da malha são selecionados dinamicamente como FI ou IMPEC com base em um algoritmo de análise de estabilidade. A parte Totalmente Implícita considera a pressão, saturação de água e composições globais como variáveis primárias, enquanto que no IMPEC, as variáveis primárias são a pressão e o número total de mols para cada componente. Além disso, um novo algoritmo de análise de estabilidade é proposto e usado para até quatro fases.

Neste trabalho, adotamos a formulação Totalmente Implícita proposta por Collins *et al.* (1992), que adota a pressão e o número de mols de cada componente como as variáveis primárias, também chamadas de variáveis globais. Nessa abordagem, o cálculo do comportamento de fases é realizado independente do problema de fluxo do sistema principal de equações. Apesar de gerar um número superior de iterações no solucionador não linear, esse desacoplamento permite tratar o cálculo de equilíbrio de fases com certa flexibilidade, como facilitar a expansão para lidar com o equilíbrio trifásico (líquido-líquido-vapor), presente na injeção miscível de CO₂ e em métodos não isotérmicos como a injeção de vapor. Alguns resultados deste trabalho foram apresentados em Lacerda *et al.* (2022).

3 MODELO MATEMÁTICO

As equações que descrevem o escoamento composicional em meios porosos incluem: equação da conservação de massa dos componentes, restrição de volume poroso, correlações que descrevem as propriedades dos fluidos e equações termodinâmicas que representam as relações de equilíbrio locais (COLLINS *et al.*, 1992; SANTOS, 2013; FERNANDES, 2014). Para calcular os fluxos das fases empregou-se a lei de Darcy. Neste modelo, a equação de estado de Peng Robinson (1976) é usada para determinar o equilíbrio entre as fases, de maneira que as propriedades físicas das fases e dos componentes são avaliadas sem necessidade de recorrer a correlações e tabelas PVT (pressão, volume e temperatura). A hipótese de equilíbrio local é normalmente aceita no campo da engenharia de reservatórios e é considerado que cada ponto do reservatório está em equilíbrio termodinâmico na pressão e composição global em que ele se encontra (FERNANDES, 2014).

3.1 Variáveis Primárias

A simulação composicional pode ser dividida em dois tipos, de acordo com a seleção das variáveis primárias: variáveis naturais e variáveis globais. Essa seleção das variáveis é uma parte muito importante do desenvolvimento de um simulador composicional, ditando o restante das etapas de seu desenvolvimento (SANTOS, 2013; HEIDARI, 2014).

No caso da escolha das variáveis naturais, as saturações das fases e as frações molares dos componentes nas fases são atualizadas a cada iteração de Newton. Propriedades de fase são calculadas sem realizar nenhum cálculo de equilíbrio de fases, sendo a maior vantagem desse método em termos de esforço computacional. Além disso, uma vez que as variáveis naturais são apresentadas explicitamente nas equações primárias, a construção da matriz Jacobiana é mais simples e menos sujeita a erros (COATS, 1980).

Como ponto negativo, o maior desafio é o aparecimento e o desaparecimento das fases. Sendo a saturação e fração molar usadas como variáveis primárias, elas dependem da existência dessa fase em questão. No decorrer da simulação, os elementos da malha têm diferentes fases em diferentes momentos, de maneira que as variáveis primárias podem ser diferentes de bloco para bloco. O rastreamento das fases e a necessidade de mudança das variáveis primárias das fases não existentes para as que existem, em cada bloco, adiciona trabalho extra e eleva o nível de dificuldade da implementação computacional (HEIDARI, 2014).

Já no caso da escolha das variáveis globais, utiliza-se o número global de mols dos componentes, não necessitando de troca ou substituição de variável. Uma vez que as variáveis primárias são variáveis globais, e sua existência é independente da existência de fases individuais. Isso facilita a implementação dos solucionadores não lineares, os quais podem ser projetados e otimizados para esse sistema de equações. Uma possível desvantagem de usar variáveis globais é que a cada iteração de Newton e para cada volume de controle da malha um cálculo de equilíbrio de fases deve ser realizado para encontrar o número de fases e as frações molares dos componentes. Contudo, isso permite uma flexibilidade na formulação desse cálculo de equilíbrio, facilitando implementações alternativas do modelo de comportamento de fases (COLLINS *et al.*, 1992; WANG *et al.* 1997).

Como problema desse método, pode-se citar a construção da matriz Jacobiana, mais desafiadora comparada à das variáveis naturais. Para calcular as derivadas de forma analítica, o uso extensivo da regra da cadeia é inevitável na diferenciação da equação residual em relação às variáveis primárias, tornando a construção da matriz Jacobiana difícil e sujeita a erros. O uso de diferenciação numérica torna esse procedimento mais automático e menos suscetível a erros, porém requer cálculos adicionais no equilíbrio de fases para sua obtenção, elevando consideravelmente o custo computacional (SANTOS, 2013; HEIDARI, 2014). Neste trabalho, empregamos as variáveis globais seguindo a formulação proposta por Collins *et al.* (1992), em que a pressão (P) e o número de mols de cada componente (N_k) são as variáveis primárias. Com relação as derivadas para a construção da matriz Jacobiana, obtivemos de forma analítica.

3.2 Premissas Básicas

As premissas associadas ao desenvolvimento do modelo matemático nesta dissertação são as seguintes:

1. Escoamento isotérmico;
2. Equilíbrio termodinâmico local entre as fases;
3. São consideradas até três fases fluidas (água, óleo e gás);
4. Não há transferência de massa entre as fases água e hidrocarbonetos;
5. Não há reações químicas;
6. A viscosidade da água é constante;
7. Não há dispersão física;
8. Desprezar efeitos de capilaridade;
9. Meio poroso levemente compressível;

10. Lei de Darcy para o escoamento multifásico.

3.3 Equação de Conservação de Massa dos Componentes

A equação de conservação da massa estabelece que a taxa de acumulação de cada componente em um dado volume é igual ao fluxo líquido do componente nas fronteiras do volume mais um termo de fonte/sumidouro, representada matematicamente (COLLINS *et al.*, 1992; FERNANDES, 2014) por:

$$\frac{1}{V_b} \frac{\partial(N_k)}{\partial t} + \nabla \cdot \sum_{j=1}^{n_p} (x_{kj} \xi_j \vec{v}_j) = \frac{\dot{q}_k}{V_b}, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad (1)$$

em que N_k é o número de mols do componente k , x_{kj} a fração molar do componente k na fase j , ξ_j é a densidade molar da fase j , \vec{v}_j é a velocidade da fase j , V_b é o volume total e \dot{q}_k é a taxa molar de fonte ou sumidouro do componente k . n_c corresponde ao número de componentes hidrocarbonetos, e em função do balanço de água, tem-se $n_c + 1$ equações de balanço molar.

A lei de Darcy (DARCY, 1856) é usada para calcular a velocidade da fase, e sua forma generalizada (HELMIG, 1997) é dada por:

$$\vec{v}_j = -\underline{K} \lambda_{rj} (\nabla P_j - \rho_j g \nabla D) \quad (2)$$

sendo \underline{K} o tensor de permeabilidade absoluta, g a aceleração da gravidade, λ_{rj} a mobilidade relativa de fase definida como $\lambda_{rj} = k_{rj}/\mu_j$, P é a pressão e D é a cota em relação ao referencial. ρ_j , k_{rj} e μ_j representam a densidade mássica, a permeabilidade relativa e a viscosidade da fase j , respectivamente. O operador ∇ representa o gradiente de uma grandeza escalar.

3.4 Restrição de Volume Poroso

A restrição de volume poroso, também chamada de restrição de saturação, onde o volume poroso é considerado totalmente saturado pelas três fases em questão, é usada como uma equação independente e fornecida pela Equação (3):

$$\sum_{j=1}^{n_p} \frac{N_j}{\xi_j} = V_b \phi \quad (3)$$

onde N_j é o número de mols da fase j e ϕ é a porosidade.

A porosidade é definida como razão de volume poroso pelo volume total. Quando o meio é considerado levemente compressível, a porosidade é calculada segundo a Equação (4):

$$\phi = \phi^0 [1 + C_f (P - P^0)] \quad (4)$$

em que ϕ^0 é a porosidade de referência a uma dada pressão P^0 e C_f é o fator de compressibilidade do volume poroso.

3.5 Condições Iniciais e de Contorno

Para que o problema fique bem estabelecido, é necessária a determinação de um conjunto apropriado de condições iniciais e de contorno. Considerando a Figura 1 como referência, as condições de contorno podem ser definidas da seguinte forma: para o contorno externo, temos a condição de contorno de Dirichlet Γ_D , também chamada de condição de pressão prescrita, dada pela Equação (5); e a condição de contorno de Neumann Γ_N , ou condição de vazão prescrita, expressa pela Equação (6). Γ representa o contorno do domínio Ω do reservatório, de modo que $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ e $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$, vide Figura 1.

$$P(\vec{x}, t) = \bar{P}_D \quad \text{em } \Gamma_D \times [0, t] \quad (5)$$

$$\sum_{j=1}^{n_p} (x_{kj} \xi_j \vec{v}_j) \cdot \vec{n} = \bar{q}_{k,N}, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad \text{em } \Gamma_N \times [0, t] \quad (6)$$

Nas Equações (5) e (6), \bar{P}_D é a pressão na fronteira de Dirichlet e $\bar{q}_{k,N}$ é a taxa molar do componente k na fronteira de Neumann, ambos valores conhecidos, em que \vec{n} representa o vetor área normal. Para os poços injetores e produtores, indicados por Γ_I e Γ_P na Figura 1, são definidas as condições de contorno "internas" de pressão ou vazão prescritas, dadas pelas Equações (7) e (8):

$$\sum_{j=1}^{n_p} (x_{kj} \xi_j \vec{v}_j) \cdot \vec{n} = \bar{q}_{k,I}, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad \text{ou } P(\vec{x}, t) = \bar{P}_I \quad \text{em } \Gamma_I \times [0, t] \quad (7)$$

$$\sum_{j=1}^{n_p} (x_{kj} \xi_j \vec{v}_j) \cdot \vec{n} = \bar{q}_{k,P}, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad \text{ou } P(\vec{x}, t) = \bar{P}_P \quad \text{em } \Gamma_P \times [0, t] \quad (8)$$

onde $\bar{q}_{k,I}$ e $\bar{q}_{k,P}$ são, respectivamente, as taxas molares do componente k nos poços injetores e produtores, \bar{P}_I e \bar{P}_P são as pressões nos poços injetores e produtores, nessa ordem.

Por fim, as condições iniciais são dadas pelas Equações (9), (10) e (11), que representam, respectivamente, o campo de pressão, o campo de saturação de água e a composição global de hidrocarbonetos tomadas no instante inicial (em $t = 0$):

$$P(\vec{x}, 0) = \bar{P}(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (9)$$

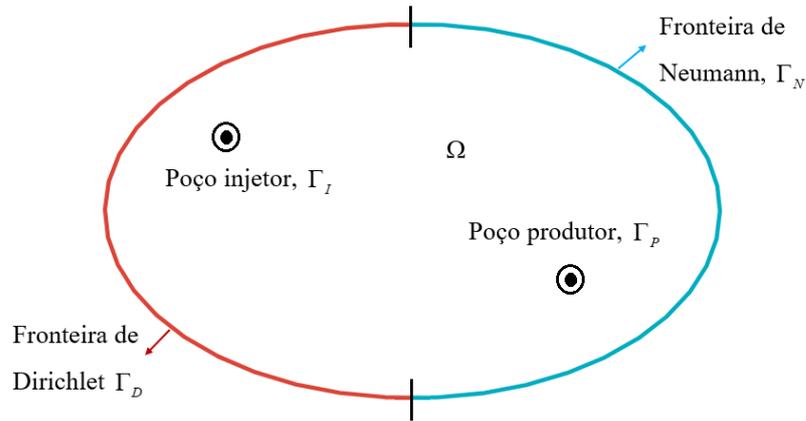
$$S_w(\vec{x}, 0) = \bar{S}_w(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (10)$$

$$z_k(\vec{x}, 0) = \bar{z}_k(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \Omega, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (11)$$

em que z_k é a fração molar global, definida como a razão entre o número de mols de cada componente hidrocarboneto e o número de mols total da mistura, sendo dada por:

$$z_k = \frac{N_k}{\sum_{k=1}^{n_c} N_k}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (12)$$

Figura 1 - Modelo esquemático de um reservatório e suas respectivas condições de contorno.



Fonte: Autor (2023)

3.6 Propriedades da Equação de Estado

Nesta seção serão expostos os cálculos das propriedades da equação de estado, referentes as fases hidrocarbonetos.

3.6.1 Equação de Estado de Peng e Robinson

As equações de estado relacionam as variáveis de estado dos fluidos do reservatório, como pressão, volume e temperatura. Desde a equação de van der Waals em 1876, muitas EOS diferentes foram propostas (SANTOS, 2013). Neste trabalho, a EOS de Peng e Robinson (1976)

foi usada em todas as formulações. Eles propuseram uma equação de estado cúbica, apresentada aqui na Equação (13) para uma fase j :

$$P = \frac{RT}{v_j - b_j} - \frac{a_j}{v_j(v_j + b_j) + b_j(v_j - b_j)}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (13)$$

sendo P é a pressão, R é a constante universal dos gases, T é a temperatura e v_j é o volume molar da fase j . Para um sistema multicomponentes, os parâmetros a_j e b_j são calculados usando uma regra de mistura conforme definido pelas Equações (14) até (16):

$$a_j = \sum_{i=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} x_{ij} x_{kj} a_{i,k} \quad (14)$$

$$a_{i,k} = \sqrt{(a_i a_k)} (1 - \delta_{ik}) \quad (15)$$

$$b_j = \sum_{k=1}^{nc} x_{kj} b_k \quad (16)$$

onde δ_{ik} é o coeficiente de interação binária entre os componentes i e k , definido empiricamente (PENG e ROBINSON, 1976). Os parâmetros para componentes puros a_k e b_k são calculados por meio das Equações (17) e (18):

$$a_k(T) = 0.45748 \frac{R^2 T_{c,k}^2}{P_{c,k}} \alpha_k(T), \quad k = 1, \dots, n_c \quad (17)$$

$$b_k = 0.0778 \frac{RT_{c,k}}{P_{c,k}}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (18)$$

no qual $T_{c,k}$ e $P_{c,k}$ são a temperatura crítica e pressão crítica de cada componente k . $\alpha_k(T)$ é um parâmetro em função da temperatura, definido por:

$$\alpha_k(T) = \left[1 + \kappa_k \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{c,k}}} \right) \right]^2, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (19)$$

com o κ_k dado por:

$$\begin{aligned} \kappa_k &= 0.37464 + 1.54226w_k - 0.26992w_k^2 & w_k < 0.49 \\ \kappa_k &= 0.37964 + 1.48503w_k - 0.164423w_k^2 + 0.01666w_k^3 & w_k \geq 0.49 \end{aligned} \quad (20)$$

em que w_k é o fator acêntrico do componente k .

3.6.2 Fator de Compressibilidade

A EOS de Peng e Robinson (1976), para a fase j , pode ser escrita na forma de equação cúbica como:

$$Z_j^3 + (B_j - 1)Z_j^2 + (A_j - 3B_j^2 - 2B_j)Z_j + (-A_jB_j + B_j^2 + B_j^3) = 0, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (21)$$

sendo Z_j o fator de compressibilidade descrito pela Equação (22), e os parâmetros A_j e B_j pelas Equações (23) e (24):

$$Z_j = \frac{Pv_j}{RT} \quad (22)$$

$$A_j = \frac{a_j P}{(RT)^2} \quad (23)$$

$$B_j = \frac{b_j P}{RT} \quad (24)$$

A Equação (21) pode resultar em até três raízes reais para o fator de compressibilidade, em cada uma das fases. Caso exista mais de uma raiz real, aquela que possuir a menor energia livre de Gibbs é a escolhida.

3.6.3 Fugacidade e Coeficiente de Fugacidade

O coeficiente de fugacidade φ_{kj} para cada componente k em cada fase j é calculado por:

$$\ln(\varphi_{kj}) = \frac{b_k}{b_j} (Z_j - 1) - \ln(Z_j - B_j) - \frac{A_j}{2\sqrt{2}B_j} \left(\frac{2}{a_j} \sum_{i=1}^{n_c} x_{ij} a_{ki} - \frac{b_k}{b_j} \right) \ln \left(\frac{Z_j + (1 + \sqrt{2})B_j}{Z_j + (1 - \sqrt{2})B_j} \right), \quad k = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (25)$$

e a fugacidade por:

$$f_{kj} = \varphi_{kj} x_{kj} P, \quad k = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (26)$$

3.7 Comportamento das Fases

O comportamento da fase envolve a solução local das equações de equilíbrio termodinâmico, dada pela Equação (27) abaixo, sendo por meio dessa relação que se determina o número de fases presentes em cada volume de controle, bem como suas composições e demais propriedades (SANTOS, 2013).

$$f_{k,oil} - f_{k,gas} = 0, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (27)$$

onde $f_{k,oil}$ é a fugacidade do componente k na fase óleo e $f_{k,gas}$ é a fugacidade do componente k na fase gás. Esses parâmetros são calculados pela equação de estado de Peng e Robinson (PENG e ROBINSON, 1976), conforme indicado na Equação (26).

A priori, o número de fases que existem no equilíbrio não é conhecido. Seguindo a formulação proposta por Michelsen, o cálculo do comportamento da fase é feito em duas etapas: Primeiro, realiza-se o teste de estabilidade de fases para se determinar o número de fases presentes no sistema em estudo a uma dada pressão e temperatura (MICHELSEN, 1982a); Em seguida, caso exista mais de uma fase em equilíbrio, o cálculo de *flash* é realizado para se obter a fração molar de cada fase e suas respectivas composições (MICHELSEN, 1982b).

3.7.1 Teste de Estabilidade de Fases

O teste de estabilidade constitui uma etapa importante para a análise do equilíbrio do sistema, uma vez que nele é avaliado se uma fase, a uma determinada composição, pressão e temperatura, pode se dividir em duas fases em equilíbrio. No presente trabalho, foi implementado o método de Michelsen (1982a) da localização dos pontos estacionários com base na distância entre os planos tangentes (*Tangent Plane Distance* - TPD), amplamente empregado na literatura (SANTOS, 2013; FERNANDES, 2014; QIAO, 2015).

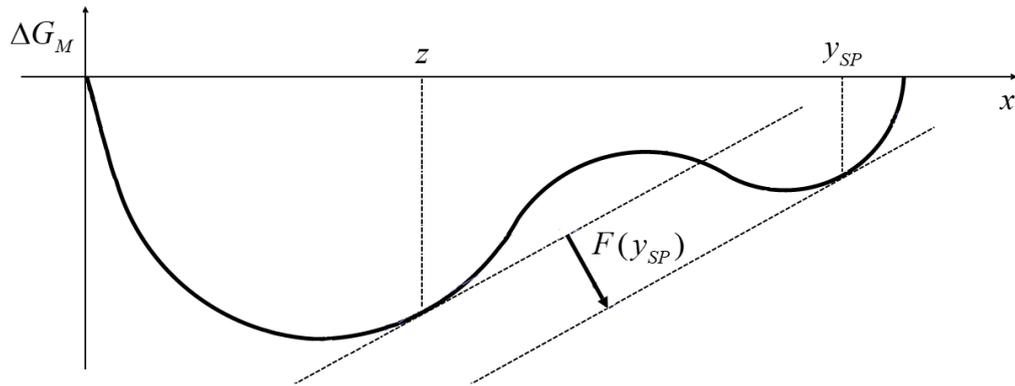
Esse método consiste em examinar se existe uma composição y , diferente da original z , para qual o sistema reduza sua energia livre de Gibbs. Para isso, realiza-se a busca dos chamados pontos estacionários, representados na Figura 2 por y_{sp} , que são pontos onde a tangente à superfície de variação da energia livre de Gibbs molar é paralela à tangente no ponto da composição original z , conforme ilustra a Figura 2 (MICHELSEN, 1982a).

Na Figura 2, o termo $F(y_{sp})$ representa a distância entre os planos tangentes (TPD), a qual pode ser escrita em função dos potenciais químicos (σ) das fases por:

$$F(y_{SP}) = \sigma_k(y_{SP}) - \sigma_k(z), \quad k = 1, \dots, n_c \quad (28)$$

em que a fase é instável caso exista um ponto estacionário para o qual $F(y_{SP}) < 0$. Para uma visão mais detalhada desse critério de estabilidade, ver Apêndice B de Galindo (2021) ou Michelsen (1982a).

Figura 2 - Representação da distância entre os planos tangentes no ponto estacionário para uma mistura binária.



Fonte: Adaptado de Michelsen (1982a).

De forma resumida, a equação a ser resolvida para avaliar a distância entre os planos tangentes é escrita em termos do coeficiente de fugacidade e reorganizada de modo a obter:

$$\ln(Y_k) + \ln(\varphi_k(y)) - h_k = 0, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (29)$$

onde $h_k = \ln(z_k) + \ln(\varphi_k(z))$ e $Y_k = e^{-c} y_k$, sendo que c representa a relação constante da distância entre os planos tangentes. Y_k refere-se ao número molar e y_k a fração molar associada, de modo que ambos se relacionam por:

$$y_k = \frac{Y_k}{\sum_k Y_k}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (30)$$

Michelsen (1982a) utiliza um procedimento iterativo para encontrar os pontos estacionários, consistindo em um método relativamente sensível ao valor inicial proposto, conforme será visto em detalhes na seção 4.4.

3.7.2 Cálculo de *Flash*

Após a realização do teste de estabilidade de fases, caso existam duas fases em equilíbrio (vapor-líquido), realiza-se o cálculo de divisão de fase, também conhecido como o cálculo de

flash. Essa etapa consiste na obtenção das composições que deixam o sistema em equilíbrio, tal que a condição de equilíbrio pode ser definida pela igualdade do potencial químico dos componentes nas fases, expressa pela igualdade das fugacidades na Equação (27).

Para o cálculo das composições, utiliza-se a equação de Rachford e Rice (1952), facilmente obtida a partir das relações mostradas das Equações (31) até (33):

$$y_k = K_k x_k, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (31)$$

$$z_k = Lx_k + Vy_k, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (32)$$

$$L = 1 - V \quad (33)$$

onde y_k e x_k representam a fração molar do componente hidrocarboneto k nas fases gás e óleo, respectivamente, e K_k é o termo que relaciona esses dois fatores, chamada de razão de equilíbrio. Ademais, V e L correspondem à fração molar das fases gás e óleo, de forma que:

$$V = \frac{N_g}{N_o + N_g} \quad (34)$$

onde N_g e N_o representam os números de mols das fases gás e óleo, respectivamente. Substituindo as Equações (31) e (33) em (32) e isolando o termo x_k , chegamos em:

$$x_k = \frac{z_k}{1 + V(K_k - 1)}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (35)$$

Podemos definir uma função objetivo $F(V)$, de forma que $F(V) = \sum_{k=1}^{n_c} y_k - \sum_{k=1}^{n_c} x_k = 0$, e substituindo as Equações (31) e (35), resulta em:

$$F(V) = \sum_{k=1}^{n_c} \frac{z_k (K_k - 1)}{1 + V(K_k - 1)} = 0 \quad (36)$$

A Equação (36) é chamada de equação de Rachford-Rice, em que usamos o método numérico de Newton-Raphson para a sua solução, em função da incógnita V . Esse procedimento de solução será detalhado na seção 4.5, e consiste em buscar uma composição para cada fase que garanta o equilíbrio local - Equação (27). Após resolver a Equação (36) para encontrar a raiz V , os valores de x_k , y_k e K_k são atualizados e o processo iterativo continua até atingir a convergência.

3.8 Propriedades das Fases

Nesta seção serão expostos os cálculos das seguintes propriedades: densidade molar, densidade mássica e saturação das fases.

3.8.1 Densidade Molar

Por definição, a densidade molar da fase é o inverso do volume específico molar. Logo, para as fases formadas por hidrocarbonetos, após o cálculo do fator de compressibilidade da EOS, a densidade molar é obtida por:

$$\xi_j = \frac{1}{v_j} = \frac{P}{Z_j RT} \quad (37)$$

Para a água, considerada uma fase independente que não se mistura com as fases óleo e gás, assume-se que a densidade molar varia diretamente com a compressibilidade, a qual é um dado de entrada do problema. Portanto, considerando que a água é levemente compressível, sua densidade molar pode ser calculada por:

$$\xi_w = \xi_w^0 [1 + C_w (P - P_w^0)] \quad (38)$$

onde ξ_w^0 é a densidade molar tomada em uma pressão de referência P_w^0 e C_w é a compressibilidade da água.

3.8.2 Densidade Mássica

As densidades mássicas das fases hidrocarbonetos são calculadas por:

$$\rho_j = \xi_j \sum_{k=1}^{n_c} x_{kj} M_k, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (39)$$

onde M_k é o peso molecular do componente.

A densidade mássica da água é obtida de maneira análoga à Equação (39), com apenas um componente na fase água, tal que $x_{ww} = 1$, conforme mostra a Equação (40):

$$\rho_w = \xi_w M_w \quad (40)$$

3.8.3 Saturação

Por definição, a saturação de uma fase é definida como a razão entre o volume ocupado por ela e o volume poroso. Para a água, a saturação é calculada por:

$$S_w = \frac{N_w V_w}{V_b \phi} \quad (41)$$

Após obtida a saturação de água, pode-se calcular a saturação de uma das fases hidrocarbonetos pela Equação (42):

$$S_j = (1 - S_w) \frac{\beta_j / \xi_j}{\sum_{j=1}^{np-1} \beta_j / \xi_j} \quad (42)$$

onde β_j é a fração molar da fase j e n_p é o número de fases. A saturação da última fase é então obtida pela restrição de saturações, dada por:

$$S_{np} = 1 - \sum_{j=1}^{np-1} S_j \quad (43)$$

3.9 Viscosidade

A viscosidade da água é assumida constante ao longo da simulação, sendo assim um parâmetro de entrada no simulador. Já para as fases hidrocarbonetos, adotou-se o modelo de Lohrenz, Bray e Clark – LBC (LOHRENZ, BRAY e CLARK, 1964). Nesse modelo, primeiramente são avaliadas as viscosidades dos componentes puros a baixa pressão, seguindo a correlação de Stiel e Thodos (1961) dada por:

$$\tilde{\mu}_k = \begin{cases} \frac{34 \times 10^{-5} T_{r,k}^{0,94}}{\zeta_k} & \text{se } T_{r,k} \leq 1,5 \\ \frac{17,78 \times 10^{-5} (4,58 T_{r,k} - 1,67)^{5/8}}{\zeta_k} & \text{se } T_{r,k} > 1,5 \end{cases}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (44)$$

onde $T_{r,k} = T / T_{c,k}$ representa a temperatura reduzida do componente k e ζ_k é um parâmetro calculado por:

$$\zeta_k = \frac{T_{c,k}^{1/6}}{M_k^{1/2} P_{c,k(atm)}^{2/3}}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (45)$$

onde a pressão deve estar em *atm*, o peso molecular em *g/mol* e a temperatura em *Kelvin*. A viscosidade da mistura completa a baixa pressão é então obtida utilizando a equação de Hering e Zipperer (1936), mostrada na Equação (46):

$$\mu_j^* = \frac{\sum_k (x_{kj} \tilde{\mu}_k \sqrt{M_k})}{\sum_k (x_{kj} \sqrt{M_k})}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (46)$$

Finalmente, a viscosidade de cada fase *j* na pressão *P* é calculada pela relação de Jossi, Stiel e Thodos (1962), expressa por:

$$\mu_j = \mu_j^* + \frac{(\chi_j^4 - 1 \times 10^{-4})}{\zeta_j^*}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (47)$$

onde χ_j é dado por:

$$\chi_j = 1,023 + 0,23364 \xi_{rj} + 0,58533 \xi_{rj}^2 - 0,40758 \xi_{rj}^3 + 0,093324 \xi_{rj}^4, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (48)$$

em que ξ_{rj} é a densidade reduzida da fase, calculada por:

$$\xi_{rj} = \xi_j \sum_{k=1}^{n_c} x_{kj} \nu_{c,k}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (49)$$

sendo $\nu_{c,k}$ o volume molar crítico. O parâmetro de viscosidade de mistura ζ_j^* da Equação (47) é calculado pela Equação (50) abaixo:

$$\zeta_j^* = \frac{[\sum_k (x_{kj} T_{c,k})]^{1/6}}{[\sum_k (x_{kj} M_k)]^{1/2} [\sum_k (x_{kj} P_{c,k})]^{2/3}}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (50)$$

Pelo modelo adotado, a Equação (47) retorna a viscosidade em *cP*. Para converter em *Pa.s*, uma vez que todas as demais unidades estão no SI, deve-se multiplicar a viscosidade por 10^{-3} .

3.10 Permeabilidade Relativa

Neste trabalho, foram utilizados dois modelos de permeabilidade relativa: o modelo Stone II modificado (STONE, 1973) e o modelo Corey (COREY, 1986).

3.10.1 Modelo Corey

Considerando que o sistema é composto por até 3 fases (água, óleo e gás), a permeabilidade relativa de cada fase é obtida segundo as relações mostradas nas Equações (51) a (53) (COREY, 1986; SANTOS, 2013; FERNANDES, 2014):

$$k_{rw} = k_{rw}^0 \left(\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{orw} - S_{gr}} \right)^{e_w} \quad (51)$$

$$k_{ro} = k_{ro}^0 \left(\frac{S_o - S_{or}}{1 - S_{wr} - S_{orw} - S_{gr}} \right)^{e_o} \quad (52)$$

$$k_{rg} = k_{rg}^0 \left(\frac{S_g - S_{gr}}{1 - S_{wr} - S_{orw} - S_{gr}} \right)^{e_g} \quad (53)$$

onde k_{ij}^0 é chamado de permeabilidade relativa de ponto final, e e_j é um expoente da equação, com $j = w, o, g$. Além disso, S_{wr} , S_{or} e S_{gr} são as saturações residuais das fases água, óleo e gás, e S_{orw} é a saturação residual da fase óleo na água. Todos os parâmetros mencionados configuram valores conhecidos, que são parâmetros de entrada do simulador.

3.10.2 Modelo Stone II Modificado

Para um sistema com três fases (água, óleo e gás), a permeabilidade relativa de cada fase é obtida segundo as relações mostradas nas Equações (54) a (56) (STONE, 1973; FERNANDES, 2014):

$$k_{rw} = k_{rw}^0 \left(\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{orw}} \right)^{e_w} \quad (54)$$

$$k_{rg} = k_{rg}^0 \left(\frac{S_g - S_{gr}}{1 - S_{gr} - S_{wr} - S_{org}} \right)^{e_g} \quad (55)$$

$$k_{ro} = k_{row}^0 \left[\left(\frac{k_{row}}{k_{row}^0} + k_{rw} \right) \left(\frac{k_{rog}}{k_{row}^0} + k_{rg} \right) - (k_{rw} + k_{rg}) \right] \quad (56)$$

onde S_{org} é a saturação residual do óleo no gás, k_{row}^0 é a permeabilidade relativa de ponto final do óleo na água, k_{row} e k_{rog} são as permeabilidades relativas do óleo na água e do óleo no gás, respectivamente, e são calculadas por:

$$k_{row} = k_{row}^0 \left(\frac{1 - S_w - S_{orw}}{1 - S_{wr} - S_{orw}} \right)^{e_{ow}} \quad (57)$$

$$k_{rog} = k_{rog}^0 \left(\frac{1 - S_g - S_{wr} - S_{org}}{1 - S_{wr} - S_{gr} - S_{org}} \right)^{e_{og}} \quad (58)$$

onde k_{rog}^0 é a permeabilidade relativa de ponto final do óleo no gás, e_{ow} é o expoente do óleo na água e e_{og} é o expoente do óleo no gás.

4 FORMULAÇÃO NUMÉRICA

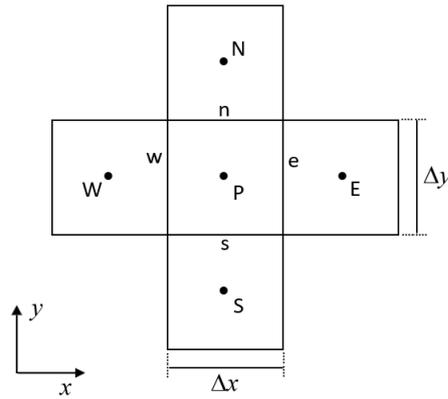
Nesta seção será apresentada a formulação numérica adotada para a solução do modelo matemático apresentado no capítulo 3. O simulador composicional foi desenvolvido na linguagem Python (VAN ROSSUM e DRAKE JR, 1995), em um ambiente conjunto com outros integrantes do grupo de pesquisa PADMEC (Processamento de Alto Desempenho em Mecânica Computacional) da UFPE, do qual o autor também faz parte. Para geração das malhas foi utilizado o *software* Gmsh (GEUZAINÉ e REMACLE, 2009), e para a visualização gráfica dos resultados empregou-se o *software* VisIt (CHILDS *et al.*, 2012), ambos *softwares* livres.

Inicialmente, realizamos o pré-processamento da malha, onde os pontos, faces e volumes são mapeados e todos os dados são armazenados em uma estrutura de dados. Para realizar tal tarefa, foi utilizado o IMPRESS (2020) (*Intuitive Multilevel Preprocessor for Smart Simulation* – Pré-processador Multinível para Simulação Inteligente), ferramenta de pré-processamento criada por integrantes do grupo PADMEC (Silva *et al.*, 2020).

Neste trabalho, adotou-se a formulação Totalmente Implícita com abordagem monolítica, empregando o método de Euler Implícito (*Backward Euler*) na aproximação temporal, bem como o Método dos Volumes Finitos (*Finite Volume Method - FVM*) com Aproximação de Fluxo por Dois Pontos (*Two-point Flux Approximation – TPFA*) na discretização dos termos difusivos, aplicado a malhas cartesianas. Os termos de transmissibilidade para o fluxo advectivo de massa são aproximados com base na ponderação à montante, *upwind* ou *upstream* de primeira ordem. Para os termos de permeabilidade absoluta, utilizou-se a média harmônica. Para a resolução do sistema de equações algébricas não lineares, aplicou-se o método de Newton-Raphson. Nas próximas seções, as equações governantes serão integradas no tempo e no espaço, considerando um volume de controle bidimensional arbitrário ilustrado na Figura 3, e escritas na forma residual, assim como será apresentada a matriz Jacobiana, para a posterior aplicação do método de Newton-Raphson.

Na Figura 3, P representa o volume de controle central. W, E, N e S representam os volumes de controle vizinhos nas direções oeste, leste, norte e sul, respectivamente. De forma análoga, temos as faces w (oeste), e (leste), n (norte) e s (sul). Além disso, Δx e Δy simbolizam as dimensões dos volumes de controle nas duas direções consideradas.

Figura 3 - Representação do volume de controle em uma malha cartesiana 2-D.



Fonte: Autor (2023).

4.1 Discretização da Equação de Conservação de Massa

O conjunto de equações que representa o modelo matemático apresentado no capítulo 3 forma um sistema de equações diferenciais parciais não lineares. Para resolver este sistema aplicando o Método dos Volumes Finitos, integramos a Equação (1) ao longo de todo o domínio Ω do reservatório:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{1}{V_b} \frac{\partial(N_k)}{\partial t} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \left(\nabla \cdot \sum_{j=1}^{n_p} (x_{kj} \xi_j \vec{v}_j) \right) d\Omega - \int_{\Omega} \left(\frac{\dot{q}_k}{V_b} \right) d\Omega = 0, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad (59)$$

Para obter a forma discreta da Equação (59), o domínio do reservatório é discretizado em n_b volumes de controle, tal qual o mostrado na Figura 3. A integral no lado esquerdo da Equação (59) pode ser representada como um somatório de integrais em cada volume de controle Ω_p . Dessa forma, a Equação (59) pode ser escrita como:

$$\sum_{i=1}^{n_b} \int_{\Omega_p} \left(\frac{1}{V_b} \frac{\partial(N_k)}{\partial t} \right) d\Omega_p + \sum_{i=1}^{n_b} \int_{\Omega_p} \left(\nabla \cdot \sum_{j=1}^{n_p} (x_{kj} \xi_j \vec{v}_j) \right) d\Omega_p - \sum_{i=1}^{n_b} \int_{\Omega_p} \left(\frac{\dot{q}_k}{V_b} \right) d\Omega_p = 0, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad (60)$$

Considerando apenas um único volume de controle genérico, representado como P na Figura 3, e substituindo a velocidade pela Equação (2), obtém-se:

$$\int_{\Omega_p} \left(\frac{1}{V_b} \frac{\partial(N_k)}{\partial t} \right) d\Omega_p - \int_{\Omega_p} \left(\nabla \cdot \sum_{j=1}^{n_p} \left[x_{kj} \xi_j \underline{K} \cdot \lambda_{rj} (\nabla P_j - \rho_j g \nabla D) \right] \right) d\Omega_p - \int_{\Omega_p} \left(\frac{\dot{q}_k}{V_b} \right) d\Omega_p = 0, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad (61)$$

Aplicando o Teorema da Divergência, também conhecido como Teorema de Gauss, e o Teorema do Valor Médio, a Equação (61) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial(N_k)}{\partial t} - \int_A \left(\sum_{j=1}^{n_p} \left[x_{kj} \xi_j \tilde{K} \cdot \lambda_{rj} (\nabla P_j - \rho_j g \nabla D) \right] \right) \vec{n} dA - \dot{q}_k = 0, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad (62)$$

onde \vec{n} é o vetor área normal e A representa a área, de forma que essa integral na área representa o fluxo líquido através das interfaces do volume de controle. Realizando a integração no tempo da Equação (62), temos:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial(N_k)}{\partial t} \right) dt - \int_t^{t+\Delta t} \int_A \left(\sum_{j=1}^{n_p} \left[x_{kj} \xi_j \tilde{K} \cdot \lambda_{rj} (\nabla P_j - \rho_j g \nabla D) \right] \right) \vec{n} dA dt - \int_t^{t+\Delta t} \dot{q}_k dt = 0, \quad (63)$$

$$k = 1, \dots, n_c + 1$$

onde, para o termo de acumulação:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial(N_k)}{\partial t} \right) dt = N_k^{n+1} - N_k^n \quad (64)$$

em que $n+1$ representa a variável no novo tempo $t + \Delta t$, e n no tempo t . Logo, a Equação (63) pode ser escrita por:

$$\left(N_k^{n+1} - N_k^n \right) - \Delta t \int_A \left(\sum_{j=1}^{n_p} \left[x_{kj}^{n+1} \xi_j^{n+1} \tilde{K} \cdot \lambda_{rj}^{n+1} (\nabla P_j^{n+1} - \rho_j^{n+1} g \nabla D) \right] \right) \vec{n} dA - \Delta t \dot{q}_k^{n+1} = 0, \quad (65)$$

$$k = 1, \dots, n_c + 1$$

Por se tratar de uma formulação Totalmente Implícita, os parâmetros da Equação (65) são avaliados no tempo $n+1$. Para cada volume de controle P da malha para problemas bidimensionais, a equação de conservação de massa para cada componente pode ser escrita na forma de resíduo por:

$$R_{k,P}^M = (N_{k,P}^{n+1} - N_{k,P}^n) - \Delta t \sum_{j=1}^{n_p} \left[F_{kj,e}^{n+1} - F_{kj,w}^{n+1} + F_{kj,n}^{n+1} - F_{kj,s}^{n+1} \right] - \Delta t \dot{q}_{k,P}^{n+1}, \quad (66)$$

$$k = 1, \dots, n_c + 1$$

Na Equação (66), o primeiro termo do lado direito refere-se ao de acumulação, o segundo é o termo de fluxo e o terceiro o termo de fonte/sumidouro. Além disso, o subscrito P indica o volume de controle em que a integração foi realizada (Figura 3), bem como os subscritos e, w, n e s representam as suas quatro faces, onde os fluxos são computados. Por simplificação, foi considerado que o fluxo existe apenas nas direções x e y, ou seja, o gradiente na direção z é considerado nulo. Ademais, k refere-se ao componente e j indica a fase.

Os termos de fluxo advectivo, por exemplo o $F_{kj,e}^{n+1}$, representa o fluxo do componente k na fase j através da face e . Fazendo o uso de diferenças finitas centrais para aproximar ∇P e ∇D , os fluxos podem ser escritos de maneira expandida como:

$$F_{kj,e}^{n+1} = (x_{kj}^{n+1} \xi_j^{n+1} \lambda_{rj}^{n+1})_e \tau_e (P_E^{n+1} - P_P^{n+1} - \rho_{j,e}^{n+1} g (D_E - D_P)) \quad (67)$$

$$F_{kj,w}^{n+1} = (x_{kj}^{n+1} \xi_j^{n+1} \lambda_{rj}^{n+1})_w \tau_w (P_P^{n+1} - P_W^{n+1} - \rho_{j,w}^{n+1} g (D_P - D_W)) \quad (68)$$

$$F_{kj,n}^{n+1} = (x_{kj}^{n+1} \xi_j^{n+1} \lambda_{rj}^{n+1})_n \tau_n (P_N^{n+1} - P_P^{n+1} - \rho_{j,n}^{n+1} g (D_N - D_P)) \quad (69)$$

$$F_{kj,s}^{n+1} = (x_{kj}^{n+1} \xi_j^{n+1} \lambda_{rj}^{n+1})_s \tau_s (P_P^{n+1} - P_S^{n+1} - \rho_{j,s}^{n+1} g (D_P - D_S)) \quad (70)$$

onde a fração molar, a densidade molar e a mobilidade avaliadas nas faces são determinadas pelo método de ponderação à montante ou *upwind* de primeira ordem. Como exemplo, tomando a face e do volume P , tem-se:

$$(x_{kj}^{n+1} \xi_j^{n+1} \lambda_{rj}^{n+1})_e = (x_{kj}^{n+1} \xi_j^{n+1} \lambda_{rj}^{n+1})_E \quad \text{se } \psi_{j,E}^{n+1} \geq \psi_{j,P}^{n+1} \quad (71)$$

$$(x_{kj}^{n+1} \xi_j^{n+1} \lambda_{rj}^{n+1})_e = (x_{kj}^{n+1} \xi_j^{n+1} \lambda_{rj}^{n+1})_P \quad \text{se } \psi_{j,E}^{n+1} < \psi_{j,P}^{n+1} \quad (72)$$

em que ψ_j é o potencial hidráulico da fase j , dado por:

$$\psi_{j,P}^{n+1} = P_P^{n+1} - \rho_{j,P}^{n+1} g D_P \quad (73)$$

O último termo da Equação (73) é o gravitacional, com D_P representando a cota do volume de controle P da malha, em relação ao referencial. Ainda relacionado as Equações (67) a (70), τ é o termo de transmissibilidade da face, que para malhas ortogonais é calculado pelas Equações (74) a (77):

$$\tau_e = \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \tilde{K}_e \quad (74)$$

$$\tau_w = \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \tilde{K}_w \quad (75)$$

$$\tau_n = \frac{\Delta x \Delta z}{\Delta y} \tilde{K}_n \quad (76)$$

$$\tau_s = \frac{\Delta x \Delta z}{\Delta y} \tilde{K}_s \quad (77)$$

A transmissibilidade da face é calculada pela média harmônica das transmissibilidades dos volumes de controle que concorrem para a mesma. A equação de conservação da água é

análoga às equações de conservação dos demais componentes, com a ressalva de que $x_{ww} = 1$, totalizando um sistema com $n_c + 1$ equações de balanço molar para cada volume de controle, que correspondem aos n_c componentes hidrocarbonetos mais a água.

4.2 Restrição de Volume Poroso

A restrição de volume poroso, apresentada na Equação (3), escrita na forma de resíduo para um volume de controle P da malha é expressa como:

$$R_P^V = \sum_{j=1}^{n_p} \frac{N_j^{n+1}}{\xi_j^{n+1}} - V_{b,P} \phi_P^{n+1} \quad (78)$$

A Equação (78) garante que o volume ocupado pelos fluidos (água, gás e óleo) seja igual ao volume poroso, considerando o meio totalmente saturado. Por fim, temos uma Equação (78) para cada volume de controle do domínio computacional.

4.3 Processo de Solução

Uma vez que todas as variáveis são tratadas implicitamente no tempo, i.e. em $n + 1$, forma-se um sistema de equações não-linear. Este sistema é fortemente acoplado e altamente não linear, necessitando ser resolvido numericamente de forma iterativa. Para resolvê-lo, escrevemos as equações na forma residual, conforme foi feito nas Equações (66) e (78), totalizando um sistema com $n_c + 2$ equações ($n_c + 1$ de conservação da massa e 1 restrição de volume poroso) e $n_c + 2$ incógnitas (pressão e concentração molar global dos n_c hidrocarbonetos e da água) por volume de controle. Para o sistema global, temos $(n_c + 2)n_b$ equações e incógnitas, onde n_b é o número de blocos (i.e., volumes de controle) da malha computacional.

O método de Newton-Raphson (BEN-ISRAEL, 1966) foi usado para linearização do sistema de equações. A iteração de Newton pode ser expressa por:

$$\Delta \vec{X}^{m+1} = -(\underline{J}^m)^{-1} \vec{R}^m \quad (79)$$

em que \vec{R} representa o vetor de resíduos, $\Delta \vec{X}$ é o vetor de incremento das variáveis primárias e \underline{J} é a matriz jacobiana. O sobrescrito m indicada a iteração anterior de Newton e o $m+1$ a iteração atual. Para a primeira iteração, ou seja, $m=0$, utiliza-se a solução no passo de tempo

anterior como aproximação inicial ($\vec{X}^m = \vec{X}^n$). Escrevendo a Equação (79) na forma matricial, temos:

$$\begin{bmatrix} \Delta \vec{X}_1^{m+1} \\ \Delta \vec{X}_2^{m+1} \\ \vdots \\ \Delta \vec{X}_{n_b}^{m+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \tilde{J}_{1,1}^m & \tilde{J}_{1,2}^m & \cdots & \tilde{J}_{1,n_b}^m \\ \tilde{J}_{2,1}^m & \tilde{J}_{2,2}^m & \cdots & \tilde{J}_{2,n_b}^m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{J}_{n_b,1}^m & \tilde{J}_{n_b,2}^m & \cdots & \tilde{J}_{n_b,n_b}^m \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \vec{R}_1^m \\ \vec{R}_2^m \\ \vdots \\ \vec{R}_{n_b}^m \end{bmatrix} \quad (80)$$

onde os subscritos 1, 2, ..., n_b representam os volumes de controle da malha.

Considerando um volume de controle arbitrário i , o vetor de resíduos e de variação das variáveis primárias podem ser escritas de forma detalhada nas Equações (81) e (82), respectivamente:

$$\vec{R}_i = \begin{bmatrix} R_{1,i}^M \\ R_{2,i}^M \\ \vdots \\ R_{n_c+1,i}^M \\ R_i^V \end{bmatrix} \quad (81)$$

$$\Delta \vec{X}_i = \begin{bmatrix} \Delta N_{1,i} \\ \Delta N_{2,i} \\ \vdots \\ \Delta N_{n_c+1,i} \\ \Delta P_i \end{bmatrix} \quad (82)$$

Cada elemento (isto é, cada submatriz) da matriz jacobiana global é composta pela derivada dos resíduos do volume de controle i em função das incógnitas do volume de controle j , conforme indicado na Equação (83):

$$J_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_{1,i}^M}{\partial N_{1,j}} & \frac{\partial R_{1,i}^M}{\partial N_{2,j}} & \cdots & \frac{\partial R_{1,i}^M}{\partial N_{n_c+1,j}} & \frac{\partial R_{1,i}^M}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R_{2,i}^M}{\partial N_{1,j}} & \frac{\partial R_{2,i}^M}{\partial N_{2,j}} & \cdots & \frac{\partial R_{2,i}^M}{\partial N_{n_c+1,j}} & \frac{\partial R_{2,i}^M}{\partial P_j} \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial R_{n_c+1,i}^M}{\partial N_{1,j}} & \frac{\partial R_{n_c+1,i}^M}{\partial N_{2,j}} & \cdots & \frac{\partial R_{n_c+1,i}^M}{\partial N_{n_c+1,j}} & \frac{\partial R_{n_c+1,i}^M}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R_i^V}{\partial N_{1,j}} & \frac{\partial R_i^V}{\partial N_{2,j}} & \cdots & \frac{\partial R_i^V}{\partial N_{n_c+1,j}} & \frac{\partial R_i^V}{\partial P_j} \end{bmatrix} \quad (83)$$

No APÊNDICE A é mostrado em detalhes cada uma das derivadas da Equação (83). Para a solução do sistema indicado na Equação (79), utilizou-se o pacote SciPy (VIRTANEN *et al.*, 2020) disponível na linguagem Python (VAN ROSSUM e DRAKE JR, 1995), por meio da função “spsolve”. Essa função é indicada para a solução de sistemas com matrizes esparsas e assimétricas, empregando a fatoração LU. Após a resolução do sistema, as variáveis primárias são atualizadas como:

$$\vec{X}^{m+1} = \vec{X}^m + \Delta\vec{X}^{m+1} \quad (84)$$

Em seguida, são realizados o teste de estabilidade de fases e, se necessário, o cálculo de *flash*, com a posterior atualização das propriedades das fases vistas no capítulo 3. Para isso, é necessária a atualização da fração molar global z pela Equação (12), uma vez que os parâmetros de entrada para a rotina do comportamento de fases são: fração molar global (z_k) de cada componente k e pressão (P) em cada volume de controle da malha, além da temperatura (T), estabelecida como constante ao longo da simulação. Para atingir a convergência do método iterativo, os resíduos de todos os volumes de controle devem ser próximos de zero. Como critério de parada, adotou-se que o resíduo deve ser inferior a 10^{-9} .

4.4 Teste de Estabilidade de Fases

Segundo Michelsen (1982a), o teste de estabilidade de fases consiste na localização dos pontos estacionários, checando a existência de uma composição y diferente da original z , para qual a energia livre de Gibbs atinge seu mínimo global. Neste caso, diz-se que a fase é termodinamicamente instável, e para garantir uma maior estabilidade ao sistema, ela se subdivide em mais de uma fase.

Para obter tais pontos estacionários, resolvemos a Equação (28), reescrita abaixo, através do método iterativo da substituição sucessiva, assim como proposto por Michelsen (1982a):

$$F(y_{SP}) = \sigma_k(y_{SP}) - \sigma_k(z), \quad k = 1, \dots, n_c$$

Neste procedimento, usualmente utilizam-se duas estimativas iniciais para Y_k , dadas por:

$$Y_k = K_k z_k, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (85)$$

$$Y_k = \frac{z_k}{K_k}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (86)$$

onde K_k é a razão de equilíbrio, estimada inicialmente pela relação de Wilson (1969), escrita como:

$$K_k = \frac{P_{c,k}}{P} e^{\left[5.37(1+w_k)(1-T_{c,k}/T)\right]}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (87)$$

onde $T_{c,k}$, $P_{c,k}$ e w_k são a temperatura crítica, a pressão crítica e o fator acêntrico de cada componente k . T é a temperatura em Kelvin. Dessa forma, o processo de solução é detalhado no Algoritmo 1. Como critério de convergência no Algoritmo 1 adotou-se $TOL1 = 10^{-9}$.

Finalizado o processo iterativo, caso a nova composição retorne $\sum_k y_k > 1$ para um dos dois testes realizados - estimativas iniciais das Equações (85) e (86), a fase é dita termodinamicamente instável, devendo ser dividida em duas fases no chamado equilíbrio vapor-líquido, sendo necessário o cálculo de *flash* para a obtenção da composição de cada uma das fases.

Algoritmo 1: Teste de estabilidade de fases

- 1 Estimativa inicial das razões de equilíbrio pela Equação (87).
- 2 Cálculo da estimativa inicial do número molar Y_k pelas Equações (85) ou (86).
- 3 Cálculo da fração molar y_k pela Equação (30), reescrita abaixo:

$$y_k = \frac{Y_k}{\sum_k Y_k}, \quad k = 1, \dots, n_c$$

4 **Início**

- 5 Cálculo do $\ln(\varphi(y_k))$ utilizando a Equação (25), reescrita abaixo:

$$\ln(\varphi_{kj}) = \frac{b_k}{b_j} (Z_j - 1) - \ln(Z_j - B_j) - \frac{A_j}{2\sqrt{2}B_j} \left(\frac{2}{a_j} \sum_{i=1}^{n_c} x_{ij} a_{ki} - \frac{b_k}{b_j} \right) \ln \left(\frac{Z_j + (1 + \sqrt{2})B_j}{Z_j + (1 - \sqrt{2})B_j} \right), \quad k = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1$$

- 6 Atualização de Y_k por:

$$Y_k = e^{\left[\log(z_k) + \ln(\varphi(z_k)) - \ln(\varphi(y_k))\right]}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (88)$$

- 7 Atualização de y_k pela Equação (30).
- 8 Verificação da convergência, onde $m+1$ representa a iteração atual:

$$\max \left(\text{abs} \left(\frac{Y_k^{m+1}}{Y_k^m} \right) - 1 \right) < TOL1, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (89)$$

9 **Fim**

4.5 Cálculo de *Flash*

O cálculo de *flash* é utilizado para obter as composições do sistema no equilíbrio termodinâmico quando temos mais de uma fase em equilíbrio (MICHELSEN, 1982b). Neste trabalho, consideramos até duas fases hidrocarbonetos em equilíbrio, gás e óleo, expresso pela igualdade das fugacidades na Equação (27). O processo iterativo consiste em obter as razões de equilíbrio K_k e as frações molares das duas fases, x_k e y_k , para a situação de equilíbrio a uma determinada fração molar global z_k , temperatura e pressão.

Para resolver esta equação, primeiramente, necessita-se de uma estimativa inicial das razões de equilíbrio K_k , que pode ser obtida pela Equação (87) da correlação de Wilson (1969). Em seguida, deve-se fornecer uma estimativa inicial para a fração molar da fase gás V , tratada como a incógnita a ser resolvida na equação de Rachford e Rice (1952) – Equação (36) reescrita abaixo.

$$F(V) = \sum_{k=1}^{n_c} \frac{z_k (K_k - 1)}{1 + V (K_k - 1)} = 0$$

Neste trabalho, adotamos como estimativa inicial de V a média entre V_{\min} e V_{\max} , nos limites estabelecidos por Whitson e Michelsen (1989) nas Equações (90) e (91):

$$V_{\min} = \frac{1}{\max(K_k)}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (90)$$

$$V_{\max} = \frac{1}{\min(K_k)}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (91)$$

De modo resumido, o processo iterativo para o cálculo de *flash* é exibido no Algoritmo 2. Para o critério de convergência do Algoritmo 2, $TOL2 = 10^{-10}$. Em seguida, é detalhado o procedimento de solução da equação de Rachford e Rice (1952), referente a etapa 4 do Algoritmo 2. Utilizamos o método de Newton-Raphson para calcular o valor da fração molar da fase gás V , seguindo as etapas detalhadas no Algoritmo 3. Como critério de convergência, a tolerância é a mesma do Algoritmo 1, em que $TOL1 = 10^{-9}$. Com o fim do cálculo de *flash* pode-se computar as demais propriedades do fluido no passo de tempo atual, utilizando as correlações mostradas nas seções 3.8, 3.9 e 3.10.

Algoritmo 2: Cálculo de *flash*

1 Estimativa inicial das razões de equilíbrio pela Equação (87):

$$K_k = \frac{P_{c,k}}{P} e^{[5.37(1+w_k)(1-T_{c,k}/T)]}, \quad k = 1, \dots, n_c$$

2 Estimativa inicial de V pela média de V_{\min} e V_{\max} , indicadas nas Equações (90) e (91).

3 **Início**

4 Resolução da função objetivo de Rachford e Rice (1952) expressa na Equação (36) e reescrita abaixo, em função da variável V , utilizando o método de Newton-Raphson detalhado no Algoritmo 3:

$$F(V) = \sum_{k=1}^{n_c} \frac{z_k (K_k - 1)}{1 + V (K_k - 1)} = 0$$

5 Cálculo do $\ln(\varphi(y_k))$ utilizando a Equação (25):

$$\ln(\varphi_{kj}) = \frac{b_k}{b_j} (Z_j - 1) - \ln(Z_j - B_j) - \frac{A_j}{2\sqrt{2}B_j} \left(\frac{2}{a_j} \sum_{i=1}^{n_c} x_{ij} a_{ki} - \frac{b_k}{b_j} \right) \ln \left(\frac{Z_j + (1 + \sqrt{2})B_j}{Z_j + (1 - \sqrt{2})B_j} \right), \quad k = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1$$

6 Cálculo das fugacidades dos componentes nas fases, f_{kj} , utilizando a Equação (26):

$$f_{kj} = \varphi_{kj} x_{kj} P$$

7 Atualização dos valores de K_k pelo método da substituição sucessiva acelerada de Mehra, Heidemann e Aziz (1983), pela Equação (92):

$$K_k^{m+1} = K_k^m \frac{f_{k,oil}}{f_{k,gas}}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (92)$$

8 Utilizando o critério de convergência proposto por Dandekar (2013), escrito na Equação (93), verificar se o equilíbrio foi atingido para todos os componentes:

$$\sum_{k=1}^{n_c} \left(\frac{f_{k,gas}}{f_{k,oil}} - 1 \right)^2 \leq TOL2 \quad (93)$$

9 **Fim**

Algoritmo 3: Solução da equação de Rachford e Rice

1 **Início**2 Cálculo da função objetivo $F(V)$ pela Equação (36):

$$F(V) = \sum_{k=1}^{n_c} \frac{z_k (K_k - 1)}{1 + V (K_k - 1)}$$

3 Cálculo da derivada de $F(V)$ com relação a V , descrita na Equação (94):

$$\frac{dF(V)}{dV} = - \sum_{k=1}^{n_c} \frac{z_k (K_k - 1)^2}{[1 + V (K_k - 1)]^2} \quad (94)$$

4 Atualização de V por Newton-Raphson:

$$V^{m+1} = V^m - \frac{F(V)}{(dF(V) / dV)} \quad (95)$$

5 Empregando os limites estabelecidos por Whitson e Michelsen (1989), verificar se V está entre os valores de V_{\min} e V_{\max} das Equações (90) e (91). Caso V extrapole esses limites, atualizar o seu valor segundo a Equação (96):

$$V^{m+1} = \begin{cases} 0.5(V_{\max} + V^m), & \text{se } V^{m+1} > V_{\max} \\ 0.5(V_{\min} + V^m), & \text{se } V^{m+1} < V_{\min} \end{cases} \quad (96)$$

6 Verificar se a convergência foi atingida pelo critério de convergência da Equação (97):

$$abs\left(\frac{V^{m+1}}{V^m} - 1\right) < TOL1 \quad (97)$$

7 **Fim**

4.6 Seleção do Passo de Tempo

Neste trabalho, apesar de empregarmos uma formulação Totalmente Implícita, adotamos um critério para a seleção do passo de tempo de maneira a evitar variações muito bruscas nas variáveis primárias, que pode reduzir a acurácia da solução, bem como ocasionar um número elevado de iterações no solucionador de Newton indicado na seção 4.3. Para o cálculo do passo de tempo, foi utilizado um método empírico apresentado em Fernandes (2014) e Qiao (2015), que se fundamenta em quatro critérios: variações da pressão, da saturação, do número de mols e do volume total entre dois passos de tempo. Cada um desses critérios é apresentado nas Equações (98) a (101):

$$\Delta t_p^{n+1} = \Delta t^n \frac{\Delta P_{lim}}{|\Delta P|_{max}} \quad (98)$$

$$\Delta t_s^{n+1} = \Delta t^n \frac{\Delta S_{lim}}{|\Delta S|_{max}} \quad (99)$$

$$\Delta t_N^{n+1} = \Delta t^n \frac{\Delta N_{lim}}{|\Delta N|_{max}} \quad (100)$$

$$\Delta t_V^{n+1} = \Delta t^n \frac{\Delta V_{lim}}{|\Delta V|_{max}} \quad (101)$$

onde os termos com subscrito *max* são calculados pelas Equações (102) a (105):

$$|\Delta P|_{max} = \max \left(\frac{|P_i^{n+1} - P_i^n|}{|P_i^n|} \right), \quad i = 1, \dots, n_b \quad (102)$$

$$|\Delta S|_{max} = \max(|S_{i,j}^{n+1} - S_{i,j}^n|), \quad i = 1, \dots, n_b \quad j = 1, \dots, n_p \quad (103)$$

$$|\Delta N|_{max} = \max \left(\frac{|N_{i,k}^{n+1} - N_{i,k}^n|}{N_{i,k}^n} \right), \quad i = 1, \dots, n_b \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad (104)$$

$$|\Delta V|_{max} = \max \left(\frac{|V_{T,i}^{n+1} - V_{P,i}^{n+1}|}{V_{P,i}^{n+1}} \right), \quad i = 1, \dots, n_b \quad (105)$$

com n_b , n_p e n_c representando o número de volumes de controle da malha, número de fases e número de componentes hidrocarbonetos, respectivamente. $V_{T,i}^{n+1}$ representa o volume total dos fluidos no tempo $n + 1$, enquanto $V_{P,i}^{n+1}$ é o volume poroso no tempo $n + 1$, calculado por $V_{b,i}^{n+1} \phi_i^{n+1}$. Os parâmetros ΔP_{lim} , ΔS_{lim} , ΔN_{lim} , ΔT_{lim} e ΔV_{lim} indicam a tolerância para variação dessas variáveis, sendo parâmetros ajustados empiricamente e definidos pelo usuário, para obter intervalos de tempo que garantam a acurácia da simulação (FERNANDES, 2014). Por fim, o passo de tempo é computado por:

$$\Delta t^{n+1} = \min(\Delta t_p, \Delta t_s, \Delta t_N, \Delta t_V) \quad (106)$$

Complementarmente, Qiao (2015) estabelece que o passo de tempo calculado pela Equação (106) deve estar compreendido entre limites definidos pelo usuário, delimitado por um valor mínimo e máximo, tal qual indica Equação (107). Além disso, pode-se avaliar a condição de estabilidade linear de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), definido pela Equação (108).

$$\Delta t_{\min} \leq \Delta t \leq \min(\Delta t_{CFL}, \Delta t_{\max}) \quad (107)$$

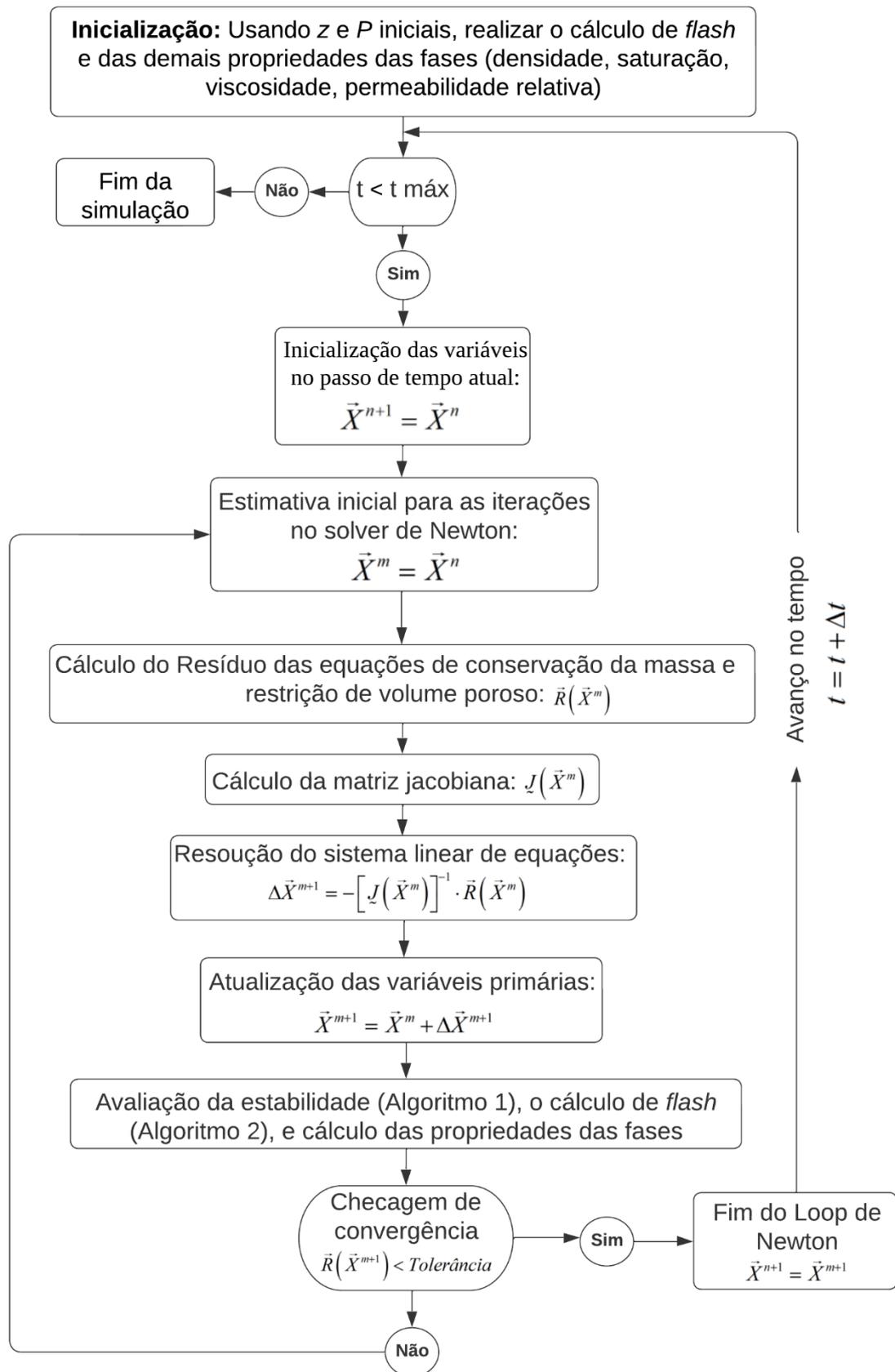
$$CFL = \frac{|\alpha|^{\max} \Delta t_{CFL}}{\Delta x} \quad (108)$$

em que $|\alpha|^{\max}$ é a máxima velocidade da onda da solução global.

Por se tratar de uma formulação Totalmente Implícita, logo, incondicionalmente estável para casos lineares, valores menos restritivos são empregados no passo de tempo desde que não comprometa a acurácia dos resultados finais. Dessa forma, em todos os casos simulados no capítulo 5 empregamos valores de CFL maiores que um.

O fluxograma de toda a formulação numérica é apresentado na Figura 4. A partir da distribuição inicial da pressão e da composição global, realizamos o cálculo de equilíbrio de fases e demais propriedades anunciadas no capítulo 3. Como estimativa inicial das propriedades no novo passo de tempo, necessária para o processo iterativo, usamos os valores do passo de tempo anterior. Todas as simulações numéricas foram realizadas em um computador com CPU Intel core i7 9ª geração e memória RAM DDR4 de 16 GB.

Figura 4 - Fluxograma da solução.



Fonte: Autor (2023).

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção serão apresentados os resultados para alguns problemas 1-D e 2-D disponíveis na literatura, com os quais foi possível verificar a acurácia e robustez do código implementado. Para os casos em que as propriedades dos componentes não foram disponibilizadas, utilizamos as disponíveis em Danesh (1998). As malhas cartesianas foram geradas utilizando o *software* Gmsh (GEUZAINÉ e REMACLE, 2009), e para a visualização dos resultados empregou-se o *software* VisIt (CHILDS *et al.*, 2012). Os parâmetros para seleção do passo de tempo (mostrados na seção 4.5) utilizados nas simulações de cada um dos casos apresentados a seguir encontram-se no APÊNDICE B.

Em alguns casos, para avaliar a acurácia dos resultados alcançados, usamos a norma L_1 , calculada por:

$$E_{L_1} = \sum_{b=1}^{n_b} h_b |u - u^{ref}| \quad (109)$$

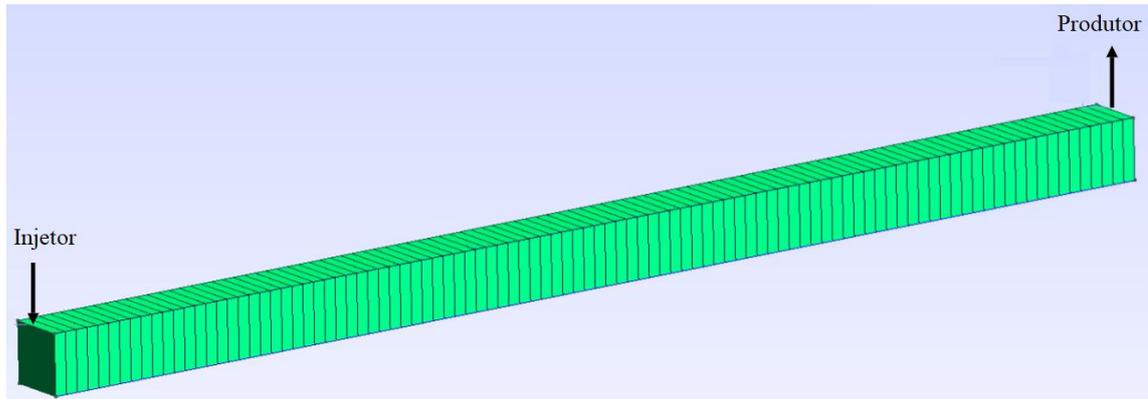
onde u representa o parâmetro a ser avaliado e h_b é o espaçamento da malha, de maneira que, para uma malha uniforme e unidimensional, $h_b = L_x / n_b$ com L_x sendo o comprimento do reservatório e n_b o número de volumes de controle da direção da malha. Além disso, para avaliar a taxa de convergência usando a norma L_1 , empregamos a seguinte relação:

$$R_{L_1} = \frac{\log [E_{L_1}(h_2) / E_{L_1}(h_1)]}{\log (h_2 / h_1)} \quad (110)$$

onde $E_{L_1}(h)$ é o erro calculado com o espaçamento h da malha.

5.1 Caso 1: Problema de Buckley e Leverett

O primeiro caso de estudo é a simulação do clássico problema de escoamento bifásico proposto por Buckley e Leverett (1942), que consiste em um escoamento 1-D de água e óleo em um reservatório de petróleo. Por ser um problema que possui solução semi-analítica, é possível avaliar a acurácia do simulador desenvolvido de maneira detalhada. Neste problema, água é injetada no reservatório, totalmente saturado de óleo, através de um poço localizado na extremidade esquerda, e um poço produtor é mantido na extremidade direita do reservatório, conforme ilustrado na Figura 5. Consideramos o fluxo nulo nos contornos do domínio.

Figura 5 - Modelo do domínio do reservatório para os casos 1-D.

Fonte: Autor (2023).

Seguimos o problema proposto por Li (2012), cujos dados do reservatório e da água são mostrados na Tabela 1, destacando-se que a viscosidade da água e do óleo foram mantidas constantes ao longo da simulação.

Tabela 1 - Dados do reservatório do caso 1.

Comprimento	1,0 m
Temperatura	288,71 K
Porosidade	0,2
Compressibilidade da água	0 Pa ⁻¹
Compressibilidade da rocha	0 Pa ⁻¹
Permeabilidade na direção x	5x10 ⁻¹³ m ²
Viscosidade da água	1 cP
Viscosidade do óleo	20 cP
Densidade da água	1.000 kg/m ³

Fonte: Adaptado de Li (2012).

O óleo presente no reservatório é composto por apenas um componente, o n-decano, cujas propriedades estão indicadas na Tabela 2. As condições iniciais e de contorno do problema são dadas na Tabela 3. Além disso, o modelo de permeabilidade relativa utilizado foi o de Corey (1986), apresentado na seção 3.9.1, cujos parâmetros são apresentados na Tabela 4, bem como os valores das saturações residuais.

Tabela 2 - Propriedades do componente n-decano.

Pressão crítica	2,11 MPa
Temperatura crítica	619,28 K
Volume molar crítico	0,603 m ³ /kmol
Massa molar	142,28 kg/kmol
Fator acêntrico	0,4890

Fonte: Danesh (1998).

Tabela 3 - Condições iniciais e de contorno do caso 1.

Pressão inicial do reservatório	13,79 MPa
Saturação inicial de água	0,2
Taxa de injeção de água	2,83x10 ⁻³ m ³ /dia
Pressão constante no poço produtor	13,79 MPa

Fonte: Adaptado de Li (2012).

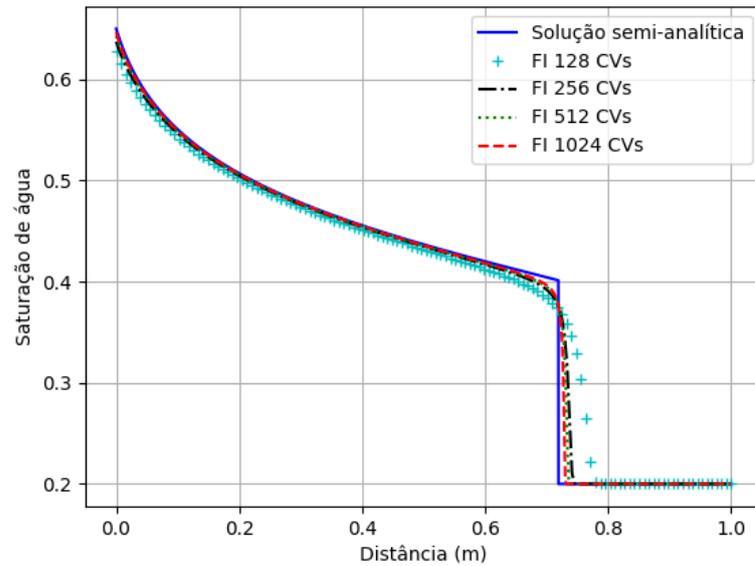
Tabela 4 - Dados para cálculo da permeabilidade relativa do caso 1.

Parâmetro	Óleo	Água
k_r^0	1,0	0,2
S_r	0,35	0,2
e	2,0	2,0

Fonte: Adaptado de Li (2012).

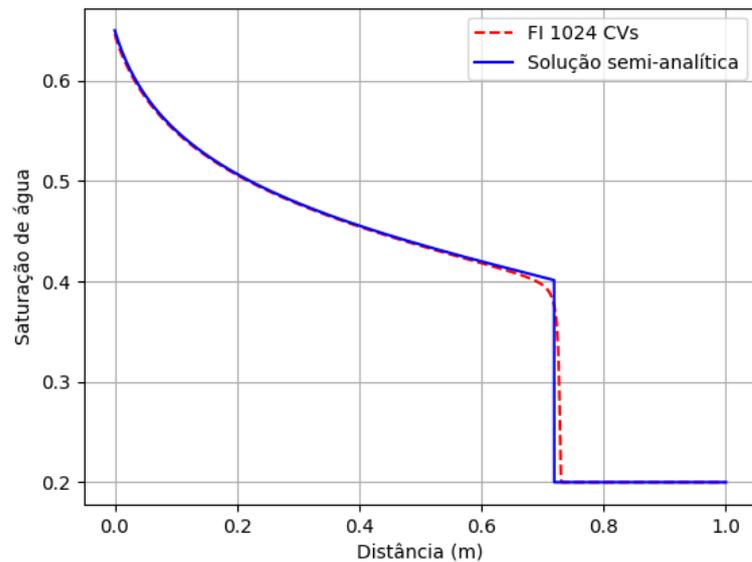
Os resultados da simulação foram obtidos para 0,20 Volume Poroso Injetado (*Pore Volume Injected* - PVI). Comparamos nossas soluções com a solução semi-analítica, mostrada em detalhes por Li (2012). A Figura 6 mostra o estudo de convergência para malhas de 128, 256, 512 e 1.024 volumes de controle (*Control Volumes* – CVs). Podemos observar uma boa concordância com a solução semi-analítica à medida que refinamos a malha, apesar da difusão numérica introduzida pelos métodos de primeira ordem que foram implementados no simulador. A solução com a malha mais refinada é destacada na Figura 7.

Figura 6 - Saturação de água obtida pelo método FI em comparação com a solução semi-analítica.



Fonte: Autor (2023).

Figura 7 - Saturação de água para a malha de 1.024 CVs comparada com a solução semi-analítica do caso 1.



Fonte: Autor (2023).

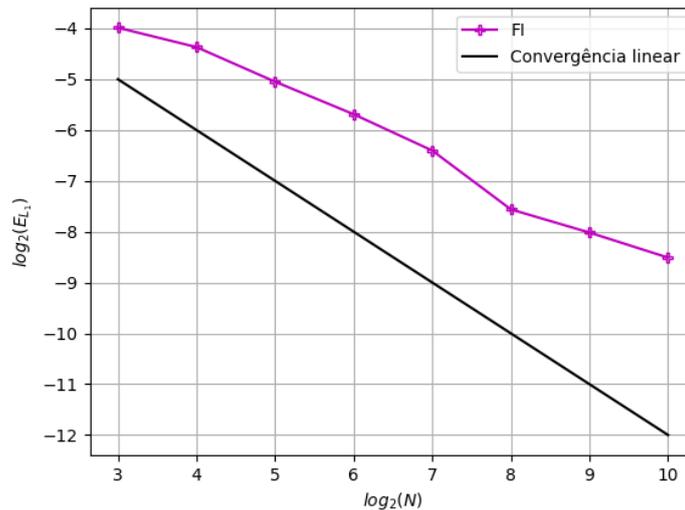
Ademais, uma análise em função do erro foi realizada. Por se tratar de uma solução com a presença de “choque”, empregamos a norma L_1 e a taxa de convergência apresentadas nas Equações (109) e (110), respectivamente, para as malhas de 8 a 1.024 volumes de controle. Os resultados são expressos na Tabela 5, destacando que a solução numérica de fato converge para a solução semi-analítica. Apesar de apresentar uma certa variação na taxa de convergência, observamos que para as malhas mais refinadas, ela foi próxima a 0,5.

Tabela 5 - Norma do erro e taxas de convergência para o caso 1.

Volumes de controle	E_{L1}	R_{L1}
8	0,06308	-
16	0,04842	0,3816
32	0,03020	0,6809
64	0,01938	0,6399
128	0,01181	0,7148
256	0,00529	1,1572
512	0,00386	0,4559
1.024	0,00274	0,4929

Fonte: Autor (2023).

Por fim, na Figura 8 é mostrado o gráfico do logaritmo do erro em função do logaritmo do número de volumes de controle da malha considerada, em que podemos observar um bom desempenho em relação à convergência linear, ressaltando que se trata de um problema de solução não suave e com a presença de um "choque".

Figura 8 - Variação da norma do erro com o número de volumes de controle do caso 1.

Fonte: Autor (2023).

5.2 Caso 2: Injeção de Gás em um Reservatório de Óleo Unidimensional

O caso 2 consiste em um reservatório unidimensional, que originalmente está saturado pela fase óleo, e é submetido a uma injeção de gás. A distribuição dos poços é a mesma adotada

no caso anterior, apresentado na Figura 5, cuja injeção se dá à esquerda do reservatório e a produção à direita, além do fluxo nulo nos contornos do domínio. Esse problema foi adaptado de Moshiri e Manzari (2018), em que a simulação envolve 3 componentes hidrocarbonetos. Esse exemplo foi selecionado para mostrar a eficácia do método FI implementado para lidar com casos compostos por múltiplos componentes, onde as rotinas de comportamento de fases (cálculo de estabilidade e *flash*) são realizadas por completo.

Os dados do reservatório são mostrados na Tabela 6. As propriedades dos componentes hidrocarbonetos estão indicadas na Tabela 7, e considerou-se que os coeficientes de interação binária de todos os componentes eram iguais a zero. As condições iniciais e de contorno do problema são apresentadas na Tabela 8. O modelo de permeabilidade relativa utilizado foi o de Corey (1986), apresentado na seção 3.9.1, cujos parâmetros são apresentados na Tabela 9, onde também se apresentam os valores das saturações residuais.

Tabela 6 - Dados do reservatório do caso 2.

Comprimento	50,0 m
Temperatura	311 K
Porosidade	0,2
Compressibilidade da rocha	0 Pa ⁻¹
Permeabilidade na direção x	9,87x10 ⁻¹⁵ m ²

Fonte: Adaptado de Moshiri e Manzari (2018).

Tabela 7 - Propriedades dos componentes do caso 2.

Componente	C ₁	C ₂	C ₃
Pressão crítica [MPa]	4,60	4,87	4,25
Temperatura crítica [K]	190,56	305,32	369,83
Volume molar crítico [m ³ /kmol]	0,0986	0,1455	0,2
Massa molar [kg/kmol]	16,043	30,070	44,096
Fator acêntrico	0,0115	0,0995	0,1523

Fonte: Danesh (1998).

Tabela 8 - Condições iniciais e de contorno do caso 2.

Componente	C ₁	C ₂	C ₃
Fração molar global inicial	0,0	0,25	0,75
Composição de injeção	0,9	0,1	0,0
Pressão inicial do reservatório	7,0 MPa		
Pressão constante no poço injetor	7,0 MPa		
Pressão constante no poço produtor	6,9 MPa		

Fonte: Moshiri e Manzari (2018).

Tabela 9 - Dados para cálculo da permeabilidade relativa do caso 2.

Parâmetro	Óleo	Gás
k_r^0	1,0	1,0
S_r	0,0	0,0
e	1,0	1,0

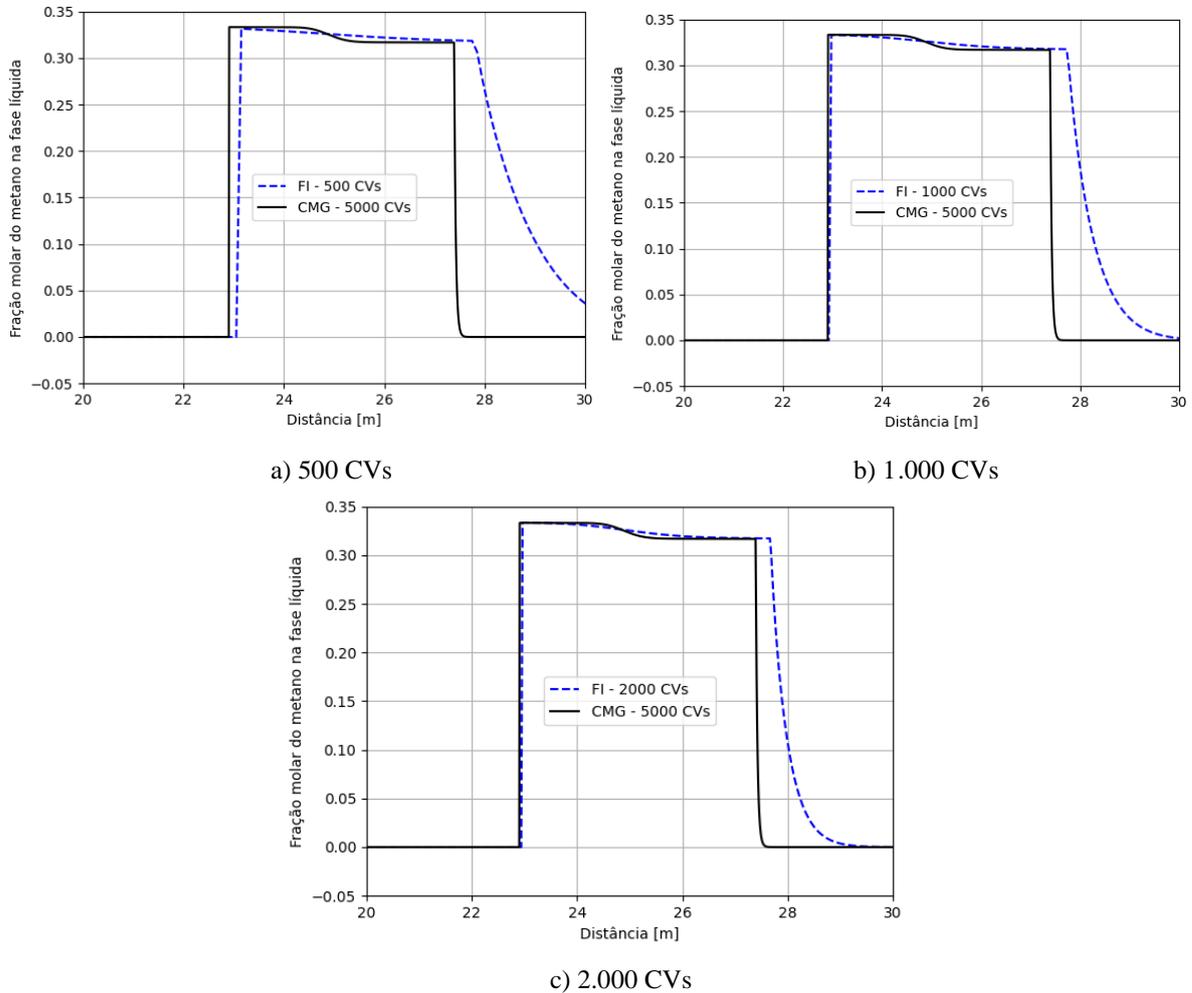
Fonte: Moshiri e Manzari (2018).

O problema foi simulado para $t = 187$ dias. A nossa solução de referência foi obtida através do software GEM da Computer Modelling Group - CMG (CMG, 2019), que utiliza diferenças finitas em sua formulação numérica, para uma malha de 5.000x1x1 volumes de controle. Na Figura 9, são mostradas as frações molares do componente metano (C₁) na fase óleo para três malhas simuladas através da formulação FI implementada neste trabalho: 500x1, 1.000x1 e 2.000x1.

Para melhor visualização dos resultados, foi dado um *zoom* na região do choque na Figura 9. Podemos constatar um resultado coerente em relação a solução de referência, apesar da dificuldade de capturar a solução à jusante do choque na região próxima de $x = 28$ m. Para capturar esse choque de forma mais acurada, seria necessária uma malha extremamente refinada (tal qual a usada para a solução de referência), ou a utilização de métodos de alta ordem para tratar o transporte dos componentes (HOTEIT e FIROOZABADI, 2006; MIKYSKA e FIROOZABADI, 2010; MOSHIRI e MANZARI, 2018; GALINDO e CARVALHO, 2020; GALINDO *et al.*, 2022). Neste trabalho, empregamos um método de primeira ordem notoriamente difusivo para a discretização dos termos advectivos do fluxo, portanto esse resultado exibido na Figura 9 era esperado. Também podemos pontuar a suavização de um leve degrau

apresentado no patamar entre $x = 24$ m e $x = 26$ m, em que a nossa solução foi aproximada linear nessa região.

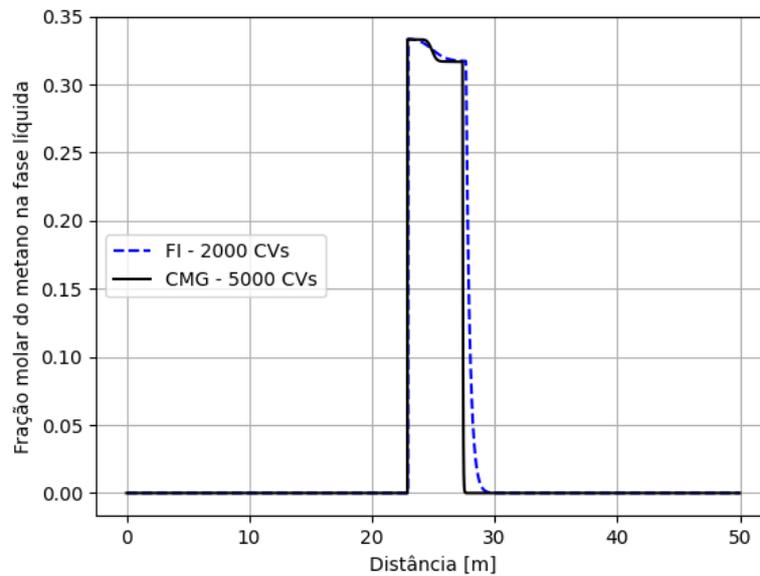
Figura 9 - Fração molar de metano na fase óleo para malhas: a) 500; b) 1.000; c) 2.000 volumes de controle.



Fonte: Autor (2023).

Na Figura 10 apresentamos a solução para a malha mais refinada de 2.000x1 volumes de controle sem o *zoom* aplicado na Figura 9, exibindo a solução em todo o domínio. Sendo assim, por meio desse exemplo foi possível verificar a capacidade da formulação FI em lidar com problemas composicionais mais complexos, que envolvem o equilíbrio bifásico óleo-gás e as rotinas completas de cálculo de estabilidade e *flash*.

Figura 10 - Fração molar de metano na fase óleo para a malha de 2.000 CVs em todo o domínio.



Fonte: Autor (2023).

Apesar de não ser o foco deste trabalho, avaliamos a seguir o custo computacional da formulação FI implementada. Por se tratar de um problema com mais de um componente hidrocarboneto, é interessante realizar esse estudo, uma vez que o número de incógnitas e o tamanho do sistema a ser resolvido depende diretamente do número de componentes e do nível de refinamento da malha. Analisamos o tempo total necessário para a simulação e as porcentagens desse tempo dedicadas às seguintes etapas: cálculo da matriz jacobiana, solução do sistema de equações e cálculo do equilíbrio de fases (estabilidade de fases e *flash*). Essas três etapas correspondem, em geral, a mais de 90% do tempo total despendido na simulação. Os resultados estão indicados na Tabela 10.

Embora o cálculo de estabilidade de fases e o cálculo de *flash* representarem grandes obstáculos do ponto de vista computacional nas simulações composicionais, notamos que a maior parcela do tempo foi empregada na obtenção da matriz jacobiana. À medida em que refinamos a malha, o custo computacional relativo à jacobiana e a solução do sistema de equações aumentou. Essas etapas corresponderam a aproximadamente 70% na malha menos refinada (500 CVs) e 90% na mais refinada (2.000 CVs).

Tabela 10 - Avaliação do custo computacional do caso 2.

Parâmetro\Malha	500x1	1.000x1	2.000x1
Tempo de simulação (min)	4,70	17,10	93,03
Cálculo da matriz jacobiana (%)	57	62	68
Solução do sistema de equações (%)	8	10	15
Cálculo do equilíbrio de fases (%)	27	20	10
Número médio de iterações de Newton, por passo de tempo	3	5	5
Número total de iterações de Newton	678	1.503	2.691

Fonte: Autor (2023).

5.3 Caso 3: Escoamento Trifásico Unidimensional

O caso 3 configura um problema de injeção de água em um reservatório 1-D que contém inicialmente óleo e gás constituído por 6 componentes hidrocarbonetos. Novamente, água é injetada no reservatório através de um poço localizado na extremidade esquerda, e um poço produtor é mantido na extremidade direita do reservatório, seguindo a mesma distribuição destacada na Figura 5, bem como o fluxo nulo nos contornos do domínio. Este caso é uma adaptação de um problema 3-D de Santos (2013), e por meio dele pôde-se avaliar a capacidade do código em lidar com o escoamento trifásico de água, óleo e gás.

Os dados do reservatório e da água são mostrados na Tabela 11. As propriedades dos componentes hidrocarbonetos estão indicadas na Tabela 12, e considerou-se que os coeficientes de interação binária de todos os componentes eram iguais a zero.

Tabela 11 - Dados do reservatório do caso 3.

Comprimento	50,0 m
Temperatura	344,25 K
Porosidade	0,35
Compressibilidade da água	0 Pa ⁻¹
Compressibilidade da rocha	0 Pa ⁻¹
Permeabilidade na direção x	1x10 ⁻¹⁴ m ²
Viscosidade da água	1 cP
Densidade da água	1.000,73 kg/m ³

Fonte: Adaptado de Santos (2013).

Tabela 12 - Propriedades dos componentes do caso 3.

Componente	C ₁	C ₃	C ₆	C ₁₀	C ₁₅	C ₂₀
Pressão crítica [MPa]	4,60	4,25	3,03	2,11	1,48	1,16
Temperatura crítica [K]	190,56	369,83	507,6	617,7	708	768
Volume molar crítico [m ³ /kmol]	0,0986	0,2	0,371	0,6	0,889	1,17
Massa molar [kg/kmol]	16,043	44,096	86,177	142,285	212,419	282,553
Fator acêntrico	0,0115	0,1523	0,3013	0,489	0,6863	0,9069

Fonte: Danesh (1998).

As condições iniciais e de contorno do problema são dadas na Tabela 13. O modelo de permeabilidade relativa utilizado foi o de Stone II modificado (1973), apresentado na seção 3.9.2, cujos parâmetros são apresentados na Tabela 14, bem como os valores das saturações residuais.

Tabela 13 - Condições iniciais e de contorno do caso 3.

Componente	C ₁	C ₃	C ₆	C ₁₀	C ₁₅	C ₂₀
Fração molar global inicial	0,5	0,03	0,07	0,2	0,15	0,05
Pressão inicial do reservatório	10,34 MPa					
Saturação inicial de água	0,3					
Taxa de injeção de água	0,3575 m ³ /dia					
Pressão constante no poço produtor	8,96 MPa					

Fonte: Adaptado de Santos (2013).

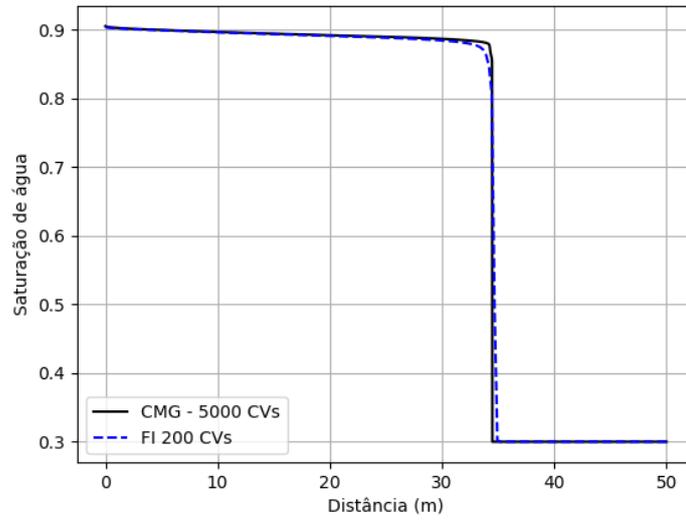
Tabela 14 - Dados para cálculo da permeabilidade relativa do caso 3.

Permeabilidade relativa de ponto final ($k_{rw}^0, k_{row}^0, k_{rog}^0, k_{rg}^0$)	0,4; 0,9; 0,9; 0,9
Saturação residual ($S_{wr}, S_{orw}, S_{org}, S_{gr}$)	0,3; 0,1; 0; 0
Expoentes (e_w, e_{ow}, e_{og}, e_g)	2,0; 2,0; 2,0; 2,0

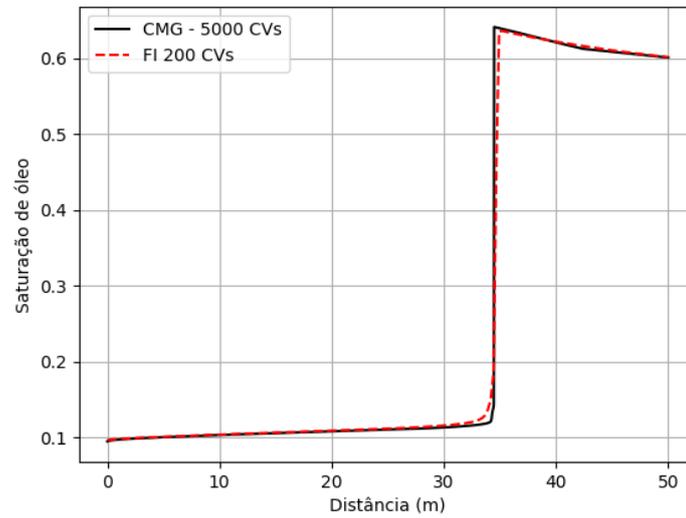
Fonte: Adaptado de Santos (2013).

A solução deste problema foi obtida para $t = 20$ dias, utilizando uma malha de 200x1 volumes de controles para a formulação FI implementada. A solução de referência foi obtida utilizando o *software* GEM da CMG (CMG, 2019) para uma malha de 5.000x1x1 volumes. Na Figura 11 são mostradas as curvas de saturação de água, óleo e gás.

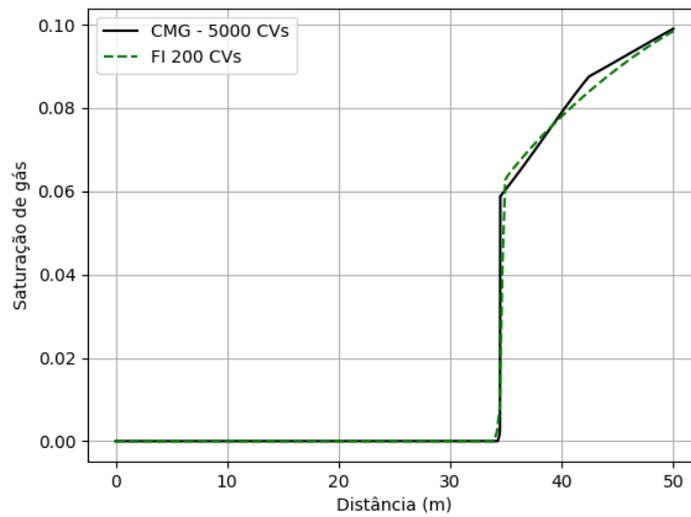
Figura 11 - Curvas de saturação: a) água; b) óleo; c) gás para o caso 3.



a) água



b) óleo



c) gás

Fonte: Autor (2023).

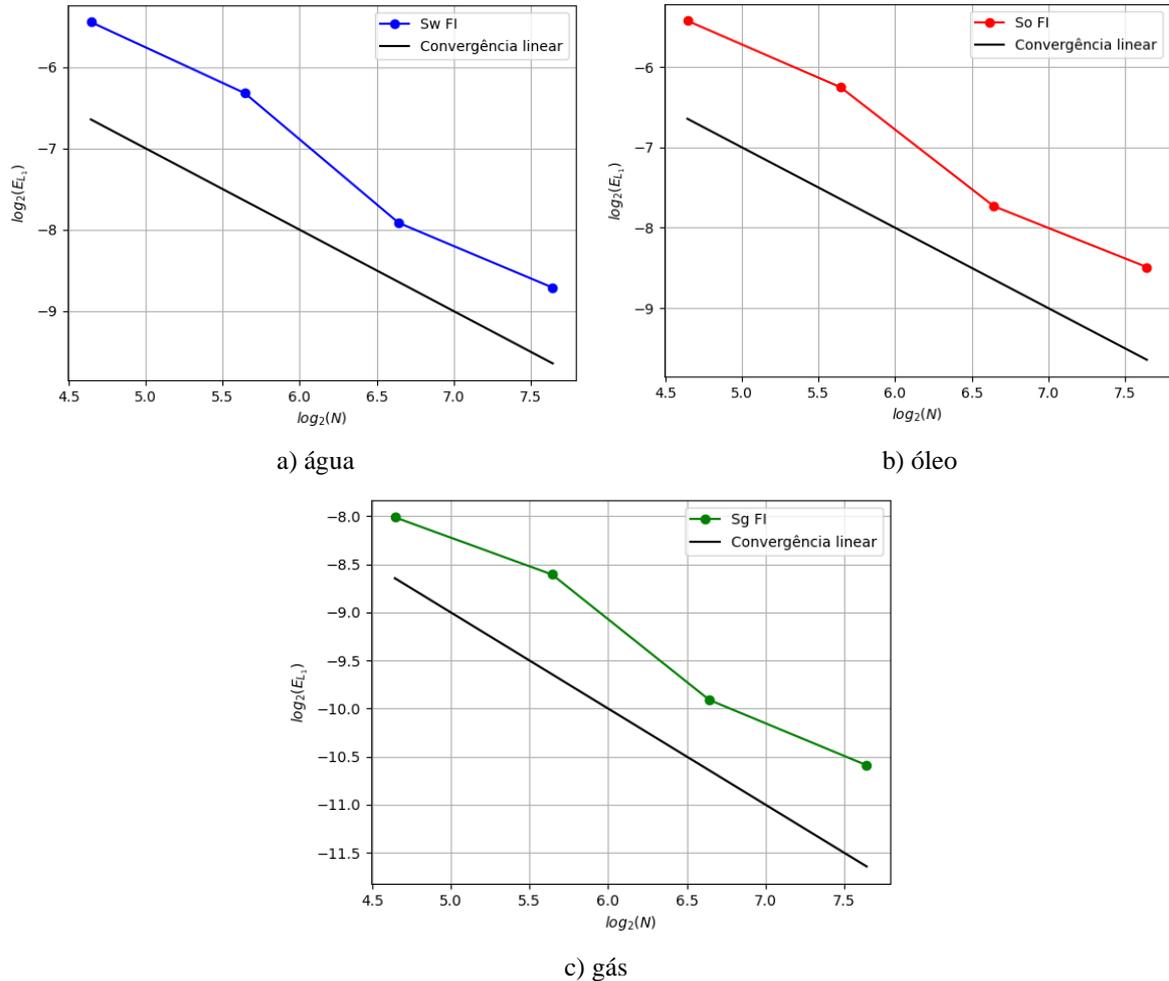
Na Figura 11 (a) observamos que a região de choque apresenta uma difusão numérica, esperada devido aos métodos de primeira ordem que utilizamos. Nas Figura 11 (b) e (c) também notamos a presença do efeito difusivo no choque. Além disso, na região entre $x = 35$ m e $x = 50$ m percebemos uma leve diferença de comportamento entre as soluções, principalmente na Figura 11 (c). Mas destacamos que foi preciso uma aproximação na escala da Figura 11 (c) para apresentarmos essas diferenças, uma vez que a saturação de uma fase se encontra entre os valores de 0 e 1.

Apesar desses efeitos pontuados acima, as soluções da formulação FI implementada encontram-se próximas das soluções de referência, mesmo usando uma malha consideravelmente menos refinada.

A fim de computar a acurácia dos resultados, efetuamos uma investigação do erro usando a norma L_1 apresentada na Equação (109) para as saturações de água, óleo e gás. Optamos por utilizar a norma L_1 pela presença de “choque” nas três soluções. Para obter a solução de referência usada na Equação (109), calculamos o valor médio dos volumes de controle da malha de referência (5.000 CVs) dentro de cada volume de controle das malhas menos refinadas.

Os erros foram calculados para as saturações das três fases, em relação as malhas de 25, 50, 100 e 200 volumes de controle. A Figura 12 apresenta o gráfico do logaritmo do erro em função logaritmo do número de volumes de controle. Destacamos que a solução numérica apresenta um bom desempenho em relação à convergência linear. Com esse exemplo, pode-se avaliar o bom desempenho do simulador para um caso de escoamento trifásico.

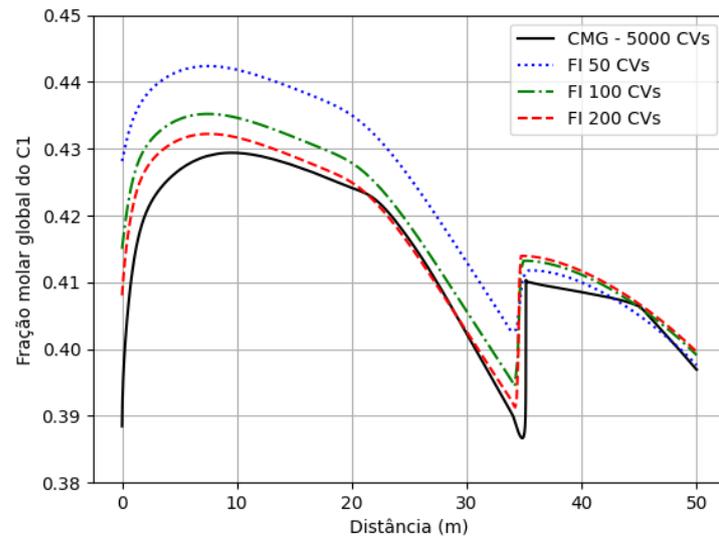
Figura 12 - Variação da norma do erro da saturação com o número de volumes de controle do caso 3: a) água; b) óleo; c) gás.



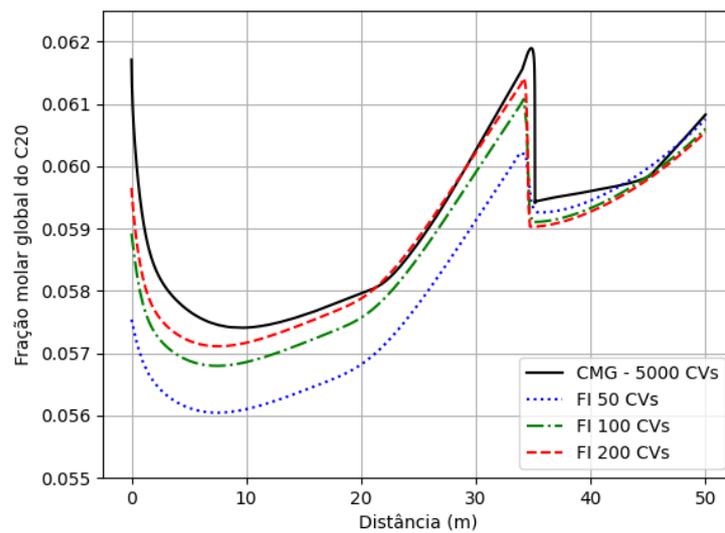
Fonte: Autor (2023).

Na Figura 13 apresentamos a fração molar global de dois componentes, o C1 e o C20, para as malhas de 50, 100 e 200 CVs. Podemos observar um comportamento semelhante à solução de referência, e à medida em que a malha foi refinada, notamos a convergência da nossa solução, embora exista uma discrepância entre os valores em algumas partes do domínio, sobretudo no poço injetor em $x = 0$ m. Também destacamos a região entre $x = 35$ m e $x = 50$ m, onde notamos uma leve diferença entre as soluções. Entretanto, salientamos que foi necessário um ajuste na escala da Figura 13 para apresentarmos essas diferenças, uma vez que a fração molar global de um componente se encontra entre os valores de 0 e 1. Os demais componentes mostraram um desempenho muito similar aos expostos na Figura 13, e para manter os resultados sucintos não os apresentamos.

Figura 13 - Fração molar global do caso 3 para as malhas de 50, 100 e 200 CVs: a) C1; b) C20.



a) C1



b) C20

Fonte: Autor (2023).

Novamente avaliamos o esforço computacional da formulação FI implementada, cujos resultados estão expressos na Tabela 15. Assim como no caso anterior, o principal custo é referente ao cálculo da matriz jacobiana, aumentando conforme a malha foi refinada. Para 25 CVs, essa etapa correspondeu a 54%, enquanto para 200 CVs equivaleu a 70%. Para as malhas menos refinadas, os cálculos de equilíbrio de fases correspondem a uma parcela mais significativa do tempo total.

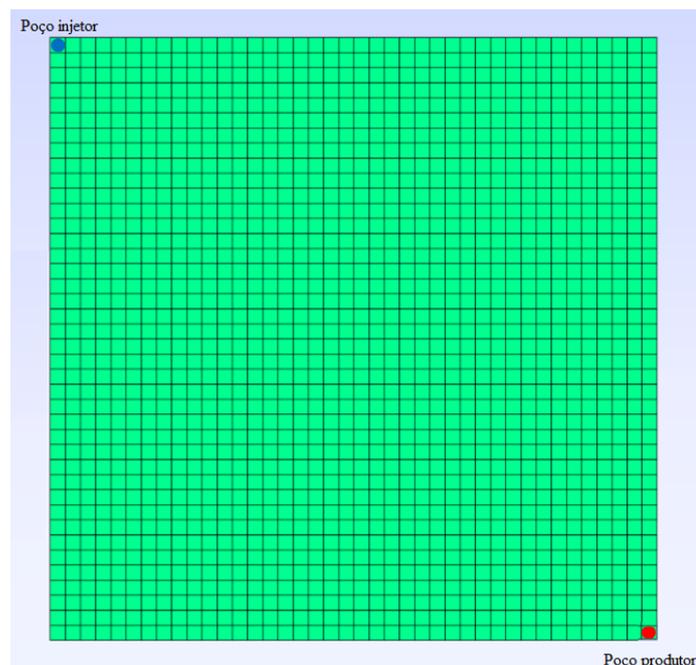
Tabela 15 - Avaliação do custo computacional do caso 3.

Parâmetro\Malha	25x1	50x1	100x1	200x1
Tempo de simulação (min)	9,75	12,35	16,17	43,53
Cálculo da matriz jacobiana (%)	54	58	65	70
Solução do sistema de equações (%)	3	5	7	10
Cálculo do equilíbrio de fases (%)	35	30	22	15
Número médio de iterações de Newton, por passo de tempo	6	7	9	9
Número total de iterações de Newton	1.212	1.414	1.836	2.547

Fonte: Autor (2023).

5.4 Caso 4: Injeção de Água em um Reservatório de Óleo Bidimensional

O caso 4 corresponde a uma adaptação do problema bifásico água-óleo unidimensional descrito em Li (2012), modificado para uma malha 2-D. O intuito deste exemplo é verificar a capacidade do simulador de lidar com escoamento bidimensional. Água é injetada à uma taxa constante em um poço localizado no canto superior esquerdo do reservatório, indicado em azul (Poço injetor) na Figura 14, e óleo é produzido em um poço produtor operando à pressão constante no canto inferior direito, indicado em vermelho (Poço produtor) na mesma figura, em uma configuração clássica de um quarto de *five-spot*. Além disso, adotamos o fluxo nulo nos contornos do domínio.

Figura 14 - Domínio e malha 2-D para o caso 4.

Fonte: Autor (2023).

Os dados do reservatório e da água são mostrados na Tabela 16, e a fase óleo é composta por um único componente hidrocarboneto, o n-decano, cujas propriedades já foram descritas na Tabela 2. As condições iniciais e de contorno do problema são as mesmas do caso 1, dadas na Tabela 3, assim como os parâmetros de permeabilidade relativa e saturação residual, dadas na Tabela 4, para o modelo de Corey (1986), apresentado na seção 3.9.1.

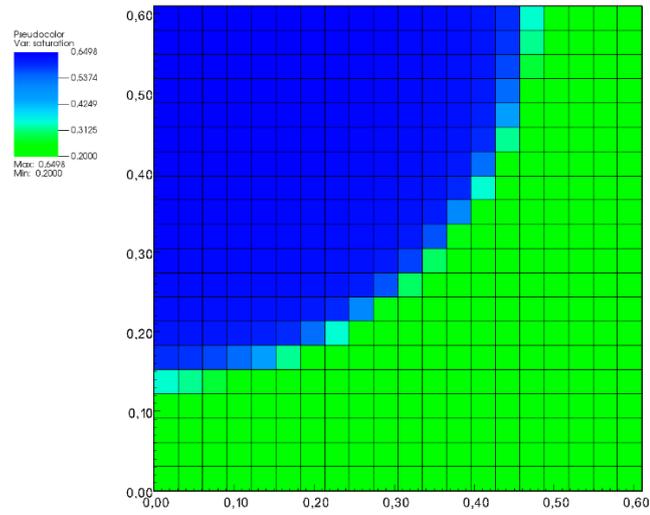
Tabela 16 - Dados do reservatório do caso 4.

Comprimento	0,6096 m
Largura	0,6096 m
Temperatura	288,71 K
Porosidade	0,2
Compressibilidade da água	0 Pa ⁻¹
Compressibilidade da rocha	0 Pa ⁻¹
Permeabilidade na direção x	5x10 ⁻¹³ m ²
Permeabilidade na direção y	5x10 ⁻¹³ m ²
Viscosidade da água	1 cP
Densidade da água	1.000 kg/m ³

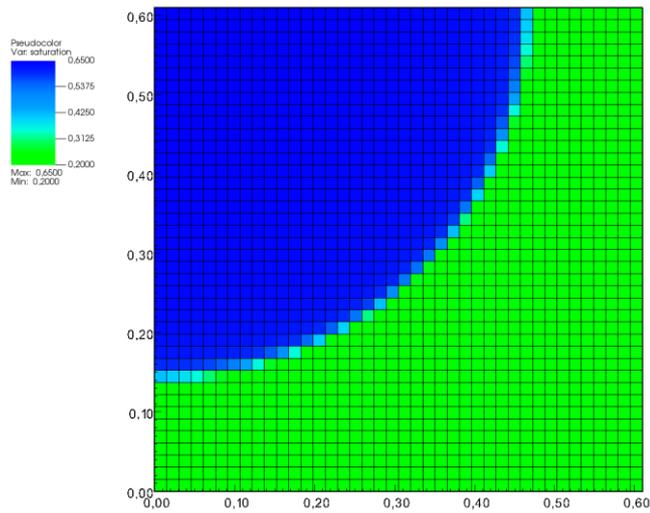
Fonte: Adaptado de Li (2012).

Os resultados da simulação foram obtidos para 0,20 Volume Poroso Injetado, em que a saturação de água é mostrada na Figura 15 para três malhas com diferentes níveis de refinamento: 20x20, 40x40 e 80x80 CVs. Para a visualização gráfica dos resultados em 2-D, utilizou-se o *software* VisIt (CHILDS *et al.*, 2012), e comparamos a solução da formulação FI implementada com o GEM da CMG (CMG, 2019), onde a solução de referência foi calculada com uma malha de 80x80 volumes de controle, indicada na Figura 16.

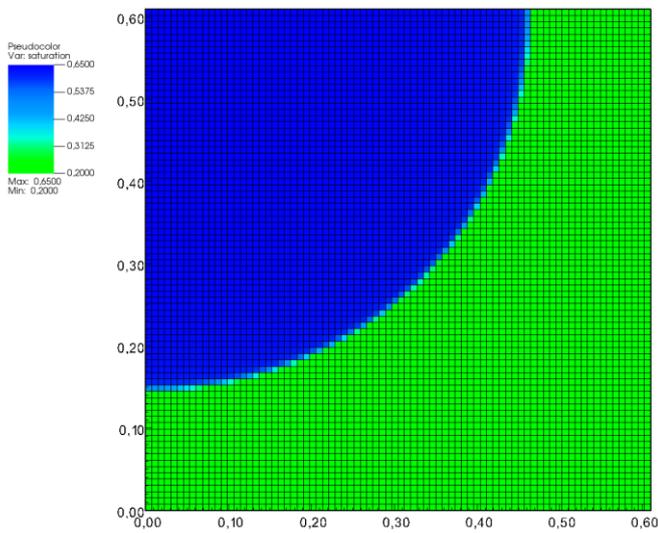
Figura 15 - Campo de saturação de água do caso 4 para malha com a) 20x20; b) 40x40; c) 80x80.



a) 20x20



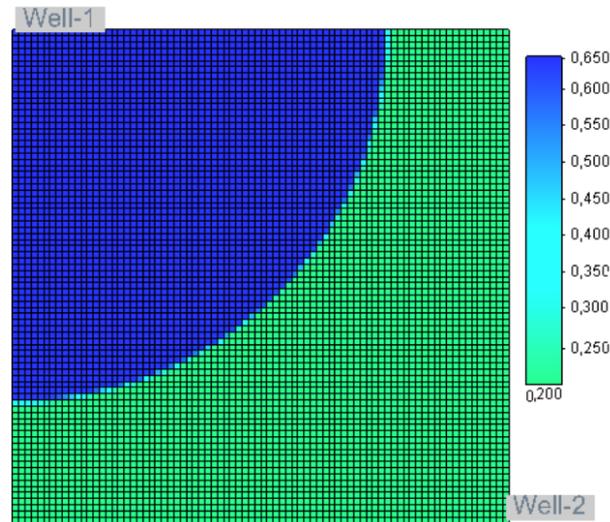
b) 40x40



c) 80x80

Fonte: Autor (2023).

Figura 16 - Campo de saturação de água gerado pelo CMG-GEM na malha de 80x80 para o caso 4.



Fonte: Autor (2023).

Das figuras acima, observa-se que a formulação FI implementada apresenta solução muito similar à de referência, à medida que a malha é refinada. Apresentamos as simulações para um domínio com 400, 1.600 e 6.400 volumes de controle, para um problema que possui uma frente de saturação de água avançando de maneira uniforme em um reservatório homogêneo, do poço injetor em direção ao poço produtor. Esse exemplo demonstra a capacidade do simulador em lidar com casos em 2-D de forma acurada.

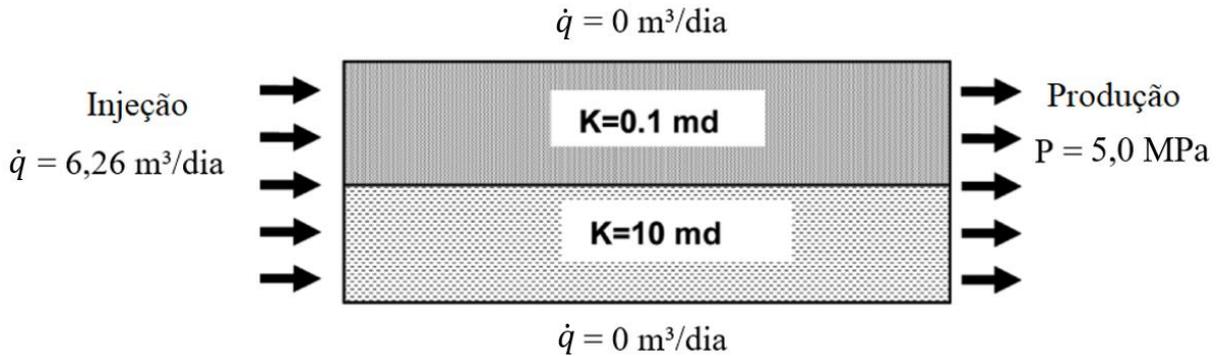
5.5 Caso 5: Escoamento Bidimensional em Reservatório Heterogêneo

O caso 5 foi retirado de Hoteit e Firoozabadi (2006), escolhido para mostrar o desempenho do simulador em um caso com meio poroso heterogêneo com "leitos em paralelo". Esse problema consiste na injeção de gás metano em um reservatório 2-D heterogêneo inicialmente saturado de gás propano, em que o domínio é composto por dois campos homogêneos de permeabilidade absoluta, indicados na Figura 17. A porosidade é a mesma em todo o reservatório, e os dados do mesmo são mostrados na Tabela 17. As propriedades dos componentes são apresentadas na Tabela 18 e todos os coeficientes de interação binária dos componentes são iguais a zero. As condições iniciais e de contorno do problema são expressas na Tabela 19, e por fim os parâmetros de permeabilidade relativa e saturação residual são dados na Tabela 20, em que foi adotado o modelo de Corey (1986), apresentado na seção 3.9.1.

A injeção de gás ocorre ao longo de toda a face esquerda do domínio, em que a taxa de injeção estabelecida na Tabela 19 é uniformemente distribuída em todos os volumes de controle

que descrevem essa região do reservatório. Além disso, a produção se dá em toda a face direita do reservatório, cuja pressão é mantida constante. O modelo do reservatório é indicado na Figura 17. Os fluidos presentes no reservatório nas condições estabelecidas de pressão e temperatura estão no estado gasoso durante toda simulação.

Figura 17 - Domínio 2-D com dois campos de permeabilidade para o caso 5.



Fonte: Adaptado de Hoteit e Firoozabadi (2006).

Tabela 17 - Dados do reservatório do caso 5.

Comprimento	50,0 m
Largura	20,0 m
Temperatura	397 K
Porosidade	0,2
Compressibilidade da rocha	0 Pa^{-1}

Fonte: Adaptado de Hoteit e Firoozabadi (2006).

Tabela 18 - Propriedades dos componentes do caso 5.

Componente	C_1	C_3
Pressão crítica [MPa]	4,60	4,25
Temperatura crítica [K]	190,56	369,83
Volume molar crítico [m^3/kmol]	0,0986	0,2
Massa molar [kg/kmol]	16,043	44,096
Fator acêntrico	0,011	0,1523

Fonte: Danesh (1998).

Tabela 19 - Condições iniciais e de contorno do caso 5.

Componente	C ₁	C ₃
Fração molar global inicial	0,0	1,0
Composição de injeção	1,0	0,0
Pressão inicial do reservatório	5,0 MPa	
Taxa de injeção	6,26 m ³ /dia	
Pressão constante no poço produtor	5,0 MPa	

Fonte: Adaptado de Hoteit e Firoozabadi (2006).

Tabela 20 - Dados para cálculo da permeabilidade relativa do caso 5.

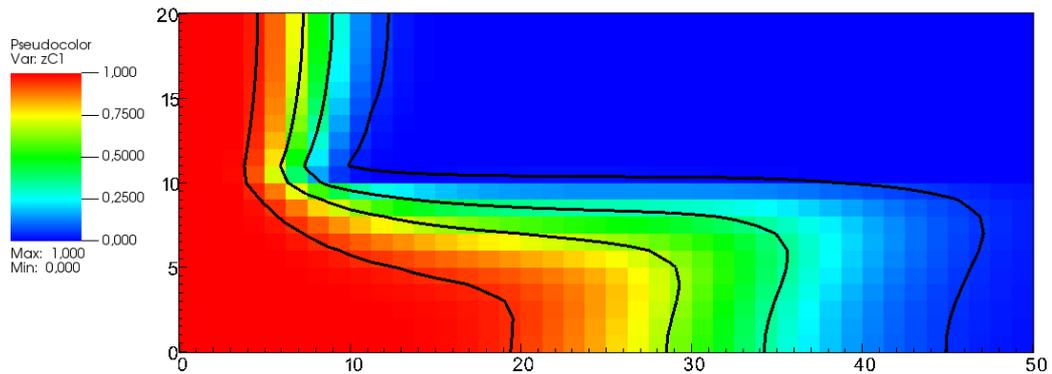
Parâmetro	Óleo	Gás
k_r^0	1,0	1,0
S_r	0,0	0,0
e	1,0	1,0

Fonte: Adaptado de Hoteit e Firoozabadi (2006).

Os resultados foram obtidos para 0,37 Volume Poroso Injetado e para duas malhas, uma de 40x20 e outra de 80x40. As soluções de referência dadas em Hoteit e Firoozabadi (2006) foram calculadas por um simulador comercial. Eles não informaram qual o *software* comercial utilizado, mas indicaram que se tratava de uma formulação baseada no método das diferenças finitas centrado na célula (*cell-centered finite difference method*).

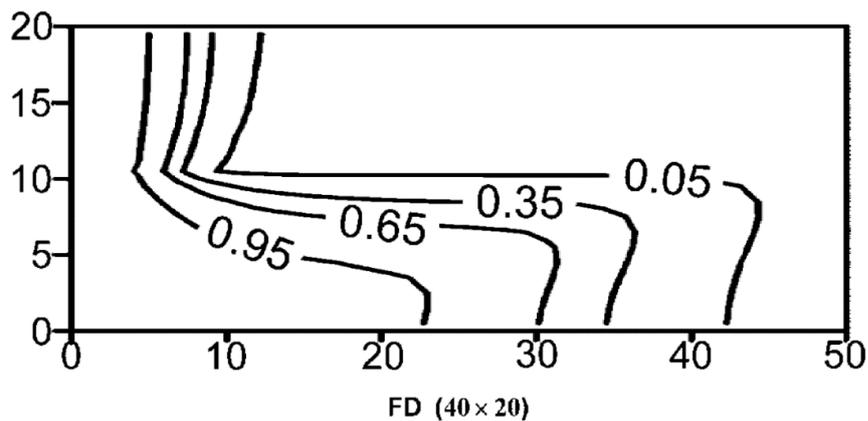
A Figura 18 mostra a distribuição da fração molar global do metano ao longo do reservatório para a malha de 40x20, totalizando 800 volumes de controle, e confrontamos com a referência apresentada na Figura 19. As isolinhas representam a fração molar global de 0,95; 0,65; 0,35 e 0,05 da esquerda para a direita, respectivamente. Podemos observar uma boa aproximação da solução obtida em relação à referência, apesar de notarmos um efeito mais difusivo em nossos resultados.

Figura 18 - Fração molar global de metano para o caso 5 na malha de 40x20 volumes de controle.



Fonte: Autor (2023).

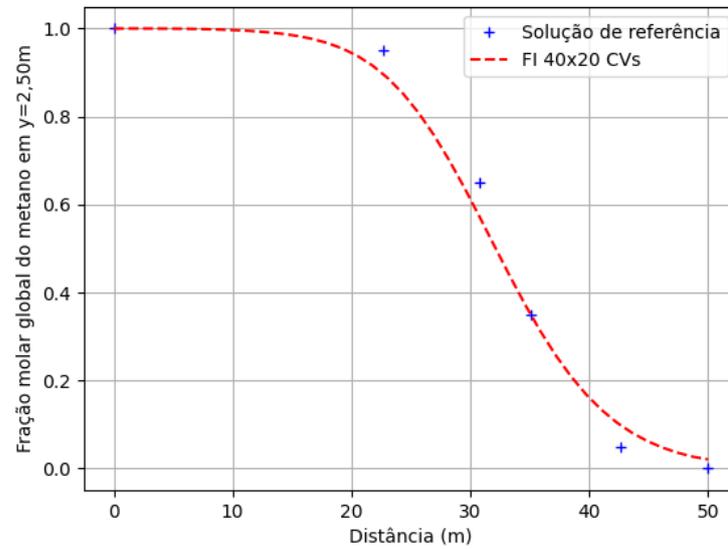
Figura 19 - Solução de referência para a fração molar global de metano na malha de 40x20 volumes de controle.



Fonte: Adaptado de Hoteit e Firoozabadi (2006).

A fim de realizar uma análise quantitativa dos resultados alcançado, na Figura 20 exibimos a fração molar global do metano na região de $y = 2,5$ m. A curva tracejada em vermelho representa a nossa solução, obtida para a malha de 40x20, enquanto que os pontos destacados em azul dizem respeito à solução de referência alcançada por Hoteit e Firoozabadi (2006) e expressa na Figura 19. Esses pontos de referência da Figura 20 foram obtidos utilizando o *software* GetData Graph (DIGITIZER, 2020), capturando as isolinhas ilustradas na Figura 19 para $y = 2,5$ m. Logo, pela Figura 20 podemos notar com clareza que nossa solução é um pouco mais difusiva, o que se deve à difusão adicional inerente das formulações implícitas e o uso da aproximação à montante de primeira ordem nos termos de fluxo advectivo. Além disso, para a isolinha de 0,35 as duas soluções convergiram no mesmo ponto.

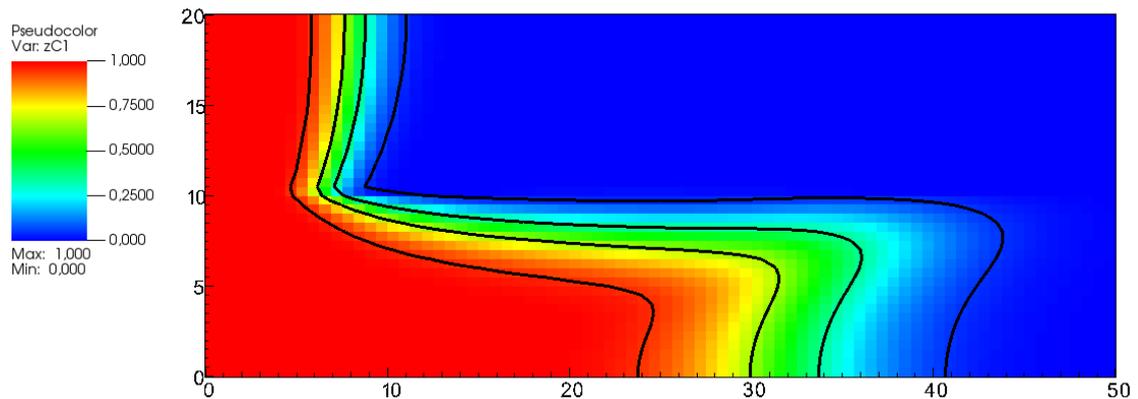
Figura 20 - Fração molar global de metano para $y = 2,5$ m na malha de 40x20 volumes de controle.



Fonte: Autor (2023).

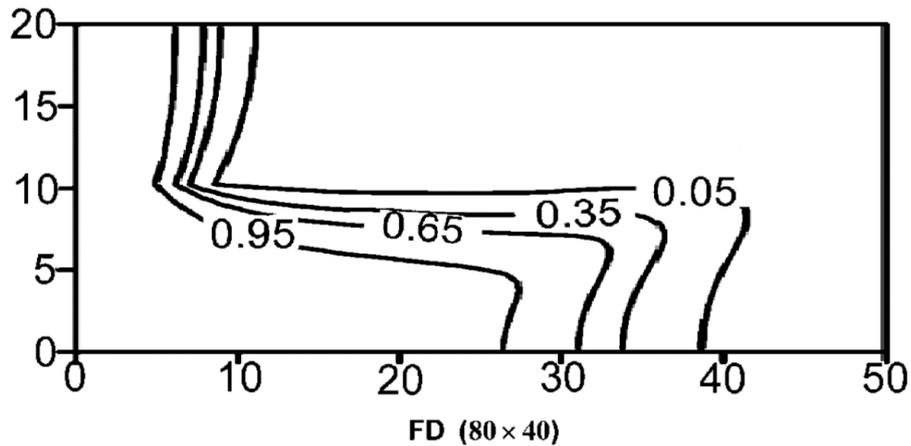
Na Figura 21, apresentamos a malha de 80x40, totalizando 3.200 volumes de controle, e confrontamos com a solução da malha de referência apresentada na Figura 22. Novamente, notamos que os resultados ficaram próximos dos alcançados por Hoteit e Firoozabadi (2006), mostrando a capacidade do simulador em lidar com reservatórios heterogêneos bidimensionais para um problema com mistura monofásica de dois componentes hidrocarbonetos.

Figura 21 - Fração molar global de metano para o caso 5 na malha de 80x40 volumes de controle.



Fonte: Autor (2023).

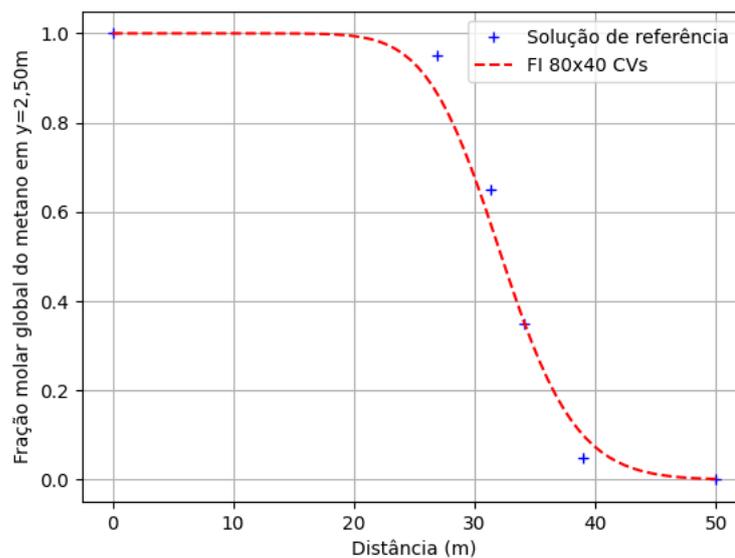
Figura 22 - Solução de referência para a fração molar global de metano na malha de 80x40 volumes de controle.



Fonte: Adaptado de Hoteit e Firoozabadi (2006).

Novamente, efetuamos uma análise quantitativa dos resultados alcançado, onde a fração molar global do metano na região de $y = 2,5$ m para a malha de 80x40 é mostrada na Figura 23. A curva tracejada em vermelho representa a nossa solução e os pontos em azul dizem respeito à solução de referência do Hoteit e Firoozabadi (2006), para as isolinhas apresentadas na Figura 22 e obtidas fazendo uso do *software* GetData Graph (DIGITIZER, 2020). Pela Figura 23 percebemos que nossos resultados são um pouco mais difusivos, e mais uma vez as duas soluções convergiram no mesmo ponto para a isolinha de 0,35.

Figura 23 - Fração molar global de metano para $y = 2,5$ m na malha de 80x40 volumes de controle.



Fonte: Autor (2023).

Por fim, analisamos o esforço computacional da formulação FI implementada para este caso, onde os resultados estão apresentados na Tabela 21. Seguindo a tendência dos casos 2 e 3, o maior custo envolve o cálculo da matriz jacobiana, superando os 70% nas duas malhas simuladas. Esse caso em específico, por constituir um problema monofásico (apenas a fase gasosa), a redução do esforço computacional do cálculo de equilíbrio de fases já era esperada, pois o cálculo de *flash* não é realizado ao longo de toda a simulação.

Tabela 21 - Avaliação do custo computacional do caso 5.

Parâmetro\Malha	40x20	80x40
Tempo de simulação (min)	18,40	127,86
Cálculo da matriz jacobiana (%)	71	77
Solução do sistema de equações (%)	9	14
Cálculo do equilíbrio de fases (%)	11	3
Número médio de iterações de Newton, por passo de tempo	3	4
Número total de iterações de Newton	2.688	4.820

Fonte: Autor (2023).

6. CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

No presente trabalho foi desenvolvido um simulador numérico implementado na linguagem Python para a modelagem e simulação composicional, usando a Equação de Estado de Peng e Robinson (1976), em reservatórios de petróleo. Para esse propósito, utilizou-se uma formulação Totalmente Implícita com abordagem monolítica proposta por Collins et al. (1992), onde empregou-se o método de Euler implícito para a integração no tempo. Essa formulação utiliza a pressão e as composições globais como variáveis primárias, desacoplando o cálculo do equilíbrio de fases das equações de balanço de massa.

Aplicamos o Método dos Volumes Finitos com Aproximação de Fluxo por Dois Pontos (TPFA) na discretização dos termos difusivos, e a ponderação à montante, *upwind* ou *upstream*, de primeira ordem no tratamento dos termos advectivos do fluxo de massa dos componentes. Esse simulador foi elaborado em um ambiente integrado e em conjunto com outros projetos desenvolvidos por membros do grupo PADMEC da UFPE, utilizando a linguagem Python no contexto da programação orientada a objetos, em que se empregou a vetorização em boa parte do código desenvolvido, além de ser planejado para uma posterior expansão para casos tridimensionais. Além disso, essa é a primeira formulação Totalmente Implícita implementada para a simulação composicional do grupo, construindo uma base para futuras pesquisas, onde algumas serão apresentadas na seção de trabalhos futuros a seguir.

Para a verificação das técnicas implementadas e avaliação da acurácia das formulações e esquemas de discretização escolhidos para resolução numérica do problema de escoamento composicional, foram simulados casos *benchmarks* encontrados na literatura. Esses testes incluíram problemas uni e bidimensionais, utilizando malhas cartesianas.

Com o primeiro caso, pôde-se avaliar a capacidade do simulador em lidar com reservatórios em 1-D. O problema de Buckley-Leverett (1942) apresenta solução semi-analítica, permitindo uma análise detalhada do desempenho e acurácia de nosso simulador para um caso envolvendo o deslocamento imiscível de água e óleo. Com os casos 2 e 3 foi possível analisar a acurácia em processos envolvendo múltiplos componentes e o escoamento trifásico de água, óleo e gás, todos em 1-D. No caso 4, observou-se a capacidade do simulador em resolver problemas em 2-D de forma robusta e acurada. Por fim, no caso 5 pode-se analisar a aplicação em um caso 2-D heterogêneo.

Avaliamos também o custo computacional da formulação FI implementada, especificamente nos exemplos que envolveram mais de um componente hidrocarboneto. Observamos que o principal esforço computacional foi referente à etapa de cálculo das derivadas e montagem da

matriz jacobiana, se tornando mais acentuado à medida em que refinamos as malhas. Dessa forma, conseguimos compreender os obstáculos da implementação desenvolvida e identificamos pontos de melhorias para o desenvolvimento de trabalhos futuro.

Em comparação com formulações explícitas, pudemos empregar passos de tempo menos restritivos durante as simulações, de forma que em todos os experimentos numéricos os valores de CFL foram maiores que um, conforme indicado no APÊNDICE B. Em contrapartida, não adotamos valores tão elevados para os passos de tempo, uma vez que isso afetaria a acurácia dos resultados alcançados. Dessa forma, esse parâmetro foi avaliado caso a caso.

Em todos os exemplos estudados nesse trabalho foi possível verificar o bom comportamento do simulador desenvolvido, apresentando soluções muito próximas às de referência, sejam elas obtidas de forma semi-analítica, por meio de um simulador comercial (CMG, 2019) ou retirada da literatura.

6.1 Trabalhos Futuros

Como trabalhos futuros, podemos sugerir:

- Estudo de alternativas para acelerar o cálculo da matriz jacobiana e a solução do sistema de equações, buscando uma maior eficiência do ponto de vista computacional;
- Expansão do simulador composicional para lidar com problemas em 3-D;
- Implementar um Método dos Volumes Finitos com Aproximação do Fluxo por Múltiplos Pontos (*Multi-Point Flux Approximation* - MPFA) para lidar com reservatórios anisotrópicos e casos em que o efeito de orientação de malha é importante (*Grid Orientation Effect* - GOE), além de possibilitar a utilização de malhas poligonais (em 2-D) ou poliédricas (em 3-D) e não-estruturadas;
- Implementar um modelo não isotérmico para simular problemas envolvendo a Recuperação Avançada de Óleo (EOR), por exemplo a injeção de vapor saturado;
- Estudo e implementação de cálculos de *flash* capazes de identificar a formação de uma segunda fase líquida de hidrocarbonetos, comuns em exemplos que envolvam a injeção de CO₂;
- Inclusão dos efeitos da pressão capilar e da dispersão física;
- Investimento em ferramentas de Inteligência Artificial e Aprendizagem de Máquina (*Machine Learning*) para acelerar a simulação. Uma das aplicações dessa tecnologia

que vem ganhando destaque é a aplicação nos cálculos de equilíbrio de fases, responsáveis por grande parte do custo computacional dos modelos composicionais;

- Expansão do modelo para lidar com a simulação de alguns problemas de interesse em relação ao meio ambiente, como o sequestro de CO₂;
- Implementar um método implícito adaptativo (*Adaptive Implicit Method* - AIM), buscando utilizar as vantagens dos métodos implícitos e explícitos na aplicação de problemas de larga escala. As formulações implícitas se beneficiam de sua estabilidade incondicional linear, mas resultam matrizes jacobianas complexas e computacionalmente caras de resolver. Por outro lado, as formulações sequenciais resultam em sistemas mais simples, mas sofrem limitações no passo de tempo devido a sua estabilidade linear condicional. Combinar os dois métodos é benéfico já que as abordagens FI não precisam ser usadas em todo o domínio do reservatório.

REFERÊNCIAS

- ABOU-KASSEM, J. H.; FAROUQ-ALI, S. M.; ISLAM, M. R. **Petroleum Reservoir Simulations**. Elsevier, 2013.
- ACS, G.; DOLESCHALL, S.; FARKAS, E. General purpose compositional model. **Society of Petroleum Engineers Journal**, v. 25, n. 04, p. 543-553, 1985.
- BEN-ISRAEL, A. A Newton-Raphson method for the solution of systems of equations. **Journal of Mathematical analysis and applications**, v. 15, n. 2, p. 243-252, 1966.
- BRANCO, C. M.; RODRIGUEZ, F. A Semi-Implicit Formulation for Compositional Reservoir Simulation. **SPE Advanced Technology Series**, v. 4, n. 01, p. 171-177, 1996.
- BRIENS, F. J. L.; WU, C. H.; GAZDAG, J.; WANG, H. H. Compositional Reservoir Simulation in Parallel Supercomputing Environments. In: **SPE Symposium on Reservoir Simulation**, OnePetro, 1991.
- BUCKLEY, S. E.; LEVERETT, M. C. Mechanism of fluid displacement in sands. **Transactions of the AIME**, v. 146, n. 01, p. 107-116, 1942.
- CAO, H.; AZIZ, K. Performance of IMPSAT and IMPSAT-AIM Models in Compositional Simulation. In: **SPE Annual Technical conference and Exhibition**. OnePetro, 2002.
- CHANG, Y. B. **Development and application of an equation of state compositional simulator**. The University of Texas at Austin. Tese de Doutorado. 1990.
- CHANG, Y. B.; POPE, G. A.; SEPEHRNOORI, K. A higher-order finite-difference compositional simulator. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 5, p. 35-50, 1990.
- CHEN, Z.; HUAN, G.; MA, Y. **Computational methods for multiphase flows in porous media**. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2006.
- CHIEN, M. C. H.; LEE, S. T.; CHEN, W. H. A New Fully Implicit Compositional Simulator. In: **SPE Reservoir Simulation Symposium**. OnePetro, 1985.
- CHILDS, H.; BRUGGER, E.; WHITLOCK, B.; MEREDITH, J.; AHERN, S.; PUGMIRE, D.; BIAGAS, K.; MILLER, M.; HARRISON, C.; WEBER, G. H.; KRISHNAN, H.; FOGAL, T.; SANDERSON, A.; GARTH, C.; BETHEL, E. W.; CAMP, D.; RÜBEL, O.; DURANT, M.; FAVRE, J. M.; NAVRÁTIL, P. VisIt: An end-user tool for visualizing and analyzing very large data. In: **High Performance Visualization—Enabling Extreme-Scale Scientific Insight**. United States: Lawrence Berkeley National Laboratory, p. 357–372, 2012.
- CMG. **CMG User Guide 2019**. Calgary, Alberta, Canada: Computer Modelling Group Ltd, 2019.
- COATS, K. H. An Equation of State Compositional Model. **Society of Petroleum Engineers Journal**, v. 20, n. 05, p. 363-376, 1980.

COLLINS, D. A.; NGHIEM, L. X.; LI, Y. K.; GRABONSTOTTER, J. E. An Efficient Approach to Adaptive- Implicit Compositional Simulation with an Equation of State. **SPE reservoir engineering**, v. 7, n. 02, p. 259-264, 1992.

COREY, A. T. Mechanics of immiscible fluids in porous media. **Water Resources Publication**, 1986.

DANDEKAR, A. Y. **Petroleum Reservoir Rock and Fluid Properties**. 2nd. ed. Boca Raton, Florida, United States: CRC Press, 2013.

DANESH, A. **PVT and phase behaviour of petroleum reservoir fluids**. Oxford, United Kingdom: Elsevier, 1998.

DARCY, H. **Les fontaines publiques de la ville de Dijon: Exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau: Ouvrage terminé par un appendice relatif aux fournitures d'eau de plusieurs villes, au filtrage des eaux et à la fabrication des tuyaux de fonte, de plomb, de tôle et de bitume**. V. Dalmont, 1856.

DIGITIZER, I. P. **How to extract data from graphs using plot digitizer or getdata graph digitizer**. 2020.

DONALDSON, E. C.; CHILINGARIAN, G. V.; YEN, T. F. **Enhanced oil recovery, II: Processes and operations**. Elsevier, 1989.

FERNANDES, B. R. B. **Implicit and semi-implicit techniques for the compositional petroleum reservoir simulation based on volume balance**. Universidade Federal do Ceará. Dissertação de Mestrado. 2014.

FERNANDES, B. R. B.; MARCONDES, F.; SEPEHRNOORI, K. Development of a fully implicit approach with intensive variables for compositional reservoir simulation. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 169, p. 317-336, 2018.

FERNANDES, B. R. B.; MARCONDES, F.; SEPEHRNOORI, K. A new four-phase adaptive implicit method for compositional reservoir simulation. **Journal of Computational Physics**, v. 435, p. 110263, 2021.

FIROOZABADI, A.; NUTAKKI, R.; WONG, T. W.; AZIZ, K. Eos predictions of compressibility and phase behavior in systems containing water, hydrocarbons, and CO₂. **SPE Reservoir Engineering**, v. 3, n. 2, p. 673–684, 1988.

FUSSELL, L. T.; FUSSELL, D. D. An Iterative Technique for Compositional Reservoir Models. **Society of Petroleum Engineers Journal**, v. 19, n. 04, p. 211-220, 1979.

GALINDO, M. E. S.; Carvalho, D. K. E. Numerical Simulation of Multiphase and Multicomponent Fluid Flow in Petroleum Reservoirs Using an IMPEC Compositional Formulation and a Second Order MUSCL Type Finite Volume Method. In: **CILAMCE - Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering**. 2020.

- GALINDO M. E. S. **Simulação Numérica do Escoamento Composicional em Reservatórios de Petróleo Utilizando uma Formulação IMPEC e o Método MUSCL**. Universidade Federal de Pernambuco. Trabalho de Conclusão de Curso. Recife, 2021.
- GALINDO, M. E. S.; LACERDA, I. V.; GALINDEZ-RAMIREZ, G.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. A Very High Order Flux Reconstruction (FR) Method for the Numerical Simulation of 1-D Compositional Fluid Flow Model in Petroleum Reservoirs. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2022 (Submetido).
- GEUZAINÉ, C.; REMACLE, J. F. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. **International journal for numerical methods in engineering**, v. 79, n. 11, p. 1309-1331, 2009.
- HEIDARI, M. **Equation of state based thermal compositional reservoir simulator for hybrid solvent/thermal processes**. University of Calgary. Tese de Doutorado. 2014.
- HELMIG, R. **Multiphase flow and transport processes in the subsurface: a contribution to the modeling of hydrosystems**. Berlin: Springer, 1997.
- HERNING, F.; ZIPPERER, L. Calculation of the viscosity of technical gas mixtures from the viscosity of individuals gases. **Gas und Wasserfach**, v. 79, p. 49–54, 1936.
- HOTEIT, H.; FIROOZABADI, A. Compositional modeling by the combined discontinuous Galerkin and mixed methods. **SPE Journal**, v. 11, p. 19-34, 2006.
- IMPRESS. Computer Software. **Intuitive Multilevel Preprocessor for Smart Simulation**, 2020. Disponível em: <<https://github.com/padmec-reservoir/impress>>. Acesso em: 2022.
- JOSSI, J. A.; STIEL, L. I.; THODOS, G. The viscosity of pure substances in the dense gaseous and liquid phases. **AIChE Journal**, v. 8, n. 1, p. 59–63, 1962.
- LABOISSIERE, P.; MELLO, S. F.; TREVISAN, O. V.; SCHIOZER, D. J. Relative Permeability Effects on the Miscible CO₂ WAG Injection Schemes Trough Compositional Simulations of Brazilian Small Scale Water-Wet Synthetic Pre-Salt Reservoir. In: **OTC Brasil**. OnePetro, 2013.
- LACERDA, I. V.; GALINDO, M. E. S.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. Numerical Simulation of Multiphase and Multicomponent Fluid Flow in Petroleum Reservoirs Using a Fully Implicit Formulation. In: **CILAMCE - Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering**. 2022.
- LI, X. **A collection of case studies for verification of reservoir simulators**. The University of Texas at Austin. Dissertação de Mestrado. Austin. 2012.
- LOHRENZ, J.; BRAY, B. G.; CLARK, C. R. Calculating viscosities of reservoir fluids from their compositions. **Journal of Petroleum Technology**, v. 16, n. 10, p. 1171-1176, 1964.
- MEHRA, R. K.; HEIDEMANN, R. A.; AZIZ, K. An accelerated successive substitution algorithm. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 61, n. 4, p. 590-596, 1983.

- MICHELSSEN, M. L. The isothermal flash problem. Part I. Stability. **Fluid phase equilibria**, v. 9, n. 1, p. 1-19, 1982a.
- MICHELSSEN, M. L. The isothermal flash problem. Part II. Phase-split calculation. **Fluid phase equilibria**, v. 9, n. 1, p. 21-40, 1982b.
- MIKYSKA, J.; FIROOZABADI, A. Implementation of higher-order methods for robust and efficient compositional simulation. **Journal of Computational Physics**, v. 229, n. 8, p. 2898–2913, 2010.
- MOKHEIMER, E.; HAMDY, M.; ABUBAKAR, Z.; SHAKEEL, M. R.; HABIB, M. A.; MAHMOUD, M. A Comprehensive Review of Thermal Enhanced Oil Recovery: Techniques Evaluation. **Journal of Energy Resources Technology**, v. 141, n. 3, 2019.
- MONCORGÉ, A.; TCHELEPI, A.; JENNY, P. Sequential fully implicit formulation for compositional simulation using natural variables. **Journal of Computational Physics**, v. 371, p. 690-711, 2018.
- MOSHIRI, M.; MANZARI, M. A comparative study of explicit high-resolution schemes for compositional simulations. **International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow**, v. 19, n. 1, p. 94–131, 2018.
- NGHIEM, L. X.; FONG, D. K.; AZIZ, K. Compositional Modeling with an Equation of State. **Society of Petroleum Engineers Journal**, v. 21, n. 06, p. 687-698, 1981.
- PARASHAR, M.; WHEELER, J. A.; POPE, G.; WANG, K.; WANG, P. A New Generation EOS Compositional Reservoir Simulator: Part II - Framework and Multiprocessing. In: **SPE Reservoir Simulation Symposium**. OnePetro, 1997.
- PEACEMAN, D. W. A personal retrospection of reservoir simulation. In: **A history of scientific computing**, p. 106-129, 1990.
- PENG, D. Y.; ROBINSON, D. B. A new two-constant equation of state. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals**, v. 15, n. 01, p. 59-64, 1976.
- QIAO, C. **General purpose compositional simulation for multiphase reactive flow with a fast linear solver**. The Pennsylvania State University. Tese de Doutorado. Pennsylvania. 2015.
- QUANDALLE, P.; SAVARY, D. An Implicit in Pressure and Saturations Approach to Fully Compositional Simulation. In: **SPE Symposium on Reservoir Simulation**. OnePetro, 1989.
- RACHFORD, H. H.; RICE, J. D. Procedure for use of electronic digital computers in calculating flash vaporization hydrocarbon equilibrium. **Journal of Petroleum Technology**, v. 4, n. 10, p. 237-238, 1952.
- ROSA, A. J.; CARVALHO, R. S.; XAVIER, J. A. D. **Engenharia de reservatórios de petróleo**. Interciência, 2006.

SANTOS, L. O. S. dos. **Development of a Multi-formulation Compositional Simulator**. The University of Texas at Austin. Tese de Doutorado. Austin, 2013.

SILVA, R. N. T.; MATOS, G. M.; SOUZA, A. C. R.; LIRA FILHO, R. J. M.; CARVALHO, D. K. E. d.; LYRA, P. R. M. Some Results on the Accuracy of a Classical Upscaling Technique Using an Intuitive Multilevel Preprocessor for Smart Simulation. In: **CILAMCE - Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering**. 2020.

STIEL, L. I.; THODOS, G. The viscosity of nonpolar gases at normal pressures. **AIChE Journal**, v. 7, n. 4, p. 611-615, 1961.

STONE, H. L. Estimation of three-phase relative permeability and residual oil data. **Journal of Canadian Petroleum Technology**, v. 12, n. 04, 1973.

THOMAS, J. E. **Fundamentos de Engenharia de Petróleo**. Interciência, 2001.

VAN ROSSUM, G.; DRAKE JR, F. L. **Python tutorial**. Amsterdam, The Netherlands: Centrum voor Wiskunde en Informatica, 1995.

VARAVEI, A. **Development of an equation-of-state thermal flooding simulator**. The University of Texas at Austin. Tese de Doutorado. 2009.

VIRTANEN, P.; GOMMERS, R.; OLIPHANT, T. E.; HABERLAND, M.; REDDY, T.; COURNAPEAU, D.; BUROVSKI, E.; PETERSON, P.; WECKESSER, W.; BRIGHT, J.; VAN DER WALT, S. J.; BRETT, M.; WILSON, J.; MILLMAN, K. J.; MAYOROV, N.; NELSON, A. R. J.; JONES, E.; KERN, R.; LARSON, E.; CAREY, C. J.; POLAT, I.; FENG, Y.; MOORE, E. W.; VANDERPLAS, J. SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python. **Nature methods**, v. 17, n. 3, p. 261-272, 2020.

VOSKOV, D. V.; TCHELEPI, H. A. Compositional Parametrization for Multi-phase Flow in Porous Media. In: **SPE Symposium on Improved Oil Recovery**. OnePetro, 2008.

VOSKOV, D. V.; TCHELEPI, H. A. Comparison of nonlinear formulations for two-phase multi-component EoS based simulation. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 82, p. 101-111, 2012.

VOSKOV, D. V. Operator-based linearization approach for modeling of multiphase multi-component flow in porous media. **Journal of Computational Physics**, v. 337, p. 275-288, 2017.

WANG, L.; TIEN, Y.; YU, X.; WANG, C.; YAO, B.; WANG, S.; WINTERFELD, P. H.; WANG, X.; YANG, Z.; WANG, Y.; CUI, J.; WU, Y. S. Advances in improved/enhanced oil recovery technologies for tight and shale reservoirs. **Fuel**, v. 210, p. 425-445, 2017.

WANG, P.; YOTOV, I.; WHEELER, M.; ARBOGAST, T.; DAWSON, C.; PARASHAR, M.; SEPEHRNOORI, K. A New Generation EOS Compositional Reservoir Simulator: Part I - Formulation and Discretization. In: **SPE Reservoir Simulation Symposium**. OnePetro, 1997.

WHITSON, C. H.; MICHELSEN, M. L. The negative flash. **Fluid phase equilibria**, v. 53, p. 51-71, 1989.

WILSON, G. M. A modified Redlich-Kwong equation of state, application to general physical data calculations. In: **65th National AIChE Meeting**. Cleveland, OH. 1969.

YAN, W.; MICHELSEN, M. L.; STENBY, E. H.; BERENBLYUM, R. A.; SHAPIRO, A. A. Three-phase Compositional Streamline Simulation and Its Application to WAG. In: **SPE/DOE Symposium on Improved Oil Recovery**. OnePetro, 2004.

YOUNG, C.; STEPHENSON, E. A generalized compositional approach for reservoir simulation. **Society of Petroleum Engineers Journal**, v. 23, n. 05, p. 727-742, 1983.

APÊNDICE A – DERIVADAS PARA CONSTRUÇÃO DA MATRIZ JACOBIANA

Neste apêndice será demonstrado o cálculo das derivadas para obtenção da matriz jacobiana apresentada na seção 4.3. Os cálculos foram realizados com o auxílio dos trabalhos de Firoozabadi et al. (1988), Varavei (2009), Fernandes (2014) e Galindo (2021).

A.1 Derivadas dos Termos da Equação de Estado de Peng e Robinson (1976)

Inicialmente, apresentamos os cálculos das derivadas dos termos que dependem da Equação de Estado, já que elas serão necessárias para o prosseguimento das deduções.

Para obter as derivadas do fator de compressibilidade em relação a pressão, $\partial Z_j / \partial P$, utilizaremos a Equação (21). Derivando-a com relação a pressão e isolando $\partial Z_j / \partial P$, resultamos em:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_j}{\partial P} \left[3Z_j^2 - 2Z_j(1 - B_j) + (A_j - 3B_j^2 - 2B_j) \right] + \frac{\partial A_j}{\partial P} (Z_j - B_j) + \\ \frac{\partial B_j}{\partial P} (Z_j^2 - 6B_j Z_j - 2Z_j - A_j + 2B_j + 3B_j^2) = 0, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

onde, $\partial A_j / \partial P$ e $\partial B_j / \partial P$ são obtidas por meio das Equações (23) e (24), resultando em:

$$\frac{\partial A_j}{\partial P} = \frac{a_j}{(RT)^2}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial B_j}{\partial P} = \frac{b_j}{RT}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.3})$$

Para a derivada do fator de compressibilidade em relação ao número de mol dos componentes hidrocarbonetos k , $\partial Z_j / \partial N_k$, empregamos a Equação (A.4):

$$\frac{\partial Z_j}{\partial N_k} = \sum_{i=1}^{n_c} \frac{\partial Z_j}{\partial N_{ij}} \frac{\partial N_{ij}}{\partial N_k}, \quad k = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.4})$$

De maneira análoga ao cálculo de $\partial Z_j / \partial P$, o termo $\partial Z_j / \partial N_{ij}$ é obtido derivando-se a Equação (21) com respeito ao número de mols do componente i na fase j (N_{ij}) e reorganizando-a para isolar o termo $\partial Z_j / \partial N_{ij}$, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_j}{\partial N_{ij}} \left[3Z_j^2 - 2Z_j(1-B_j) + (A_j - 3B_j^2 - 2B_j) \right] + \frac{\partial A_j}{\partial N_{ij}} (Z_j - B_j) + \\ \frac{\partial B_j}{\partial N_{ij}} (Z_j^2 - 6B_j Z_j - 2Z_j - A_j + 2B_j + 3B_j^2) = 0, \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

e $\partial A_j / \partial N_{ij}$ e $\partial B_j / \partial N_{ij}$ novamente são calculadas por meio das Equações (23) e (24), sucedendo em:

$$\frac{\partial A_j}{\partial N_{ij}} = \frac{P}{(RT)^2} \frac{\partial a_j}{\partial N_{ij}}, \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\partial B_j}{\partial N_{ij}} = \frac{P}{RT} \frac{\partial b_j}{\partial N_{ij}}, \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.7})$$

Por sua vez, $\partial a_j / \partial N_{ij}$ e $\partial b_j / \partial N_{ij}$ são obtidos derivando as Equações (14) e (16) com respeito a N_{ij} . Lembrando que por definição $x_{ij} = N_{ij} / \sum_i N_{ij}$. Aplicando a regra da cadeia e reorganizando as expressões, resultamos em:

$$\frac{\partial a_j}{\partial N_{ij}} = \frac{2}{N_j^2} \left(\sum_{m=1}^{n_c} N_{mj} a_{im} - N_j a_j \right), \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial b_j}{\partial N_{ij}} = \frac{(b_i - b_j)}{N_j}, \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.9})$$

O cálculo de $\partial N_{ij} / \partial N_k$, por não fazer parte da Equação de Estado, será detalhado nas seções a seguir.

A.2 Derivada do Resíduo do Volume Poroso em Relação à Pressão

Derivando a equação de restrição de volume poroso - Equação (78) - de um volume de controle arbitrário em relação à pressão, temos:

$$\frac{\partial R^V}{\partial P} = \frac{\partial}{\partial P} \sum_{j=1}^{n_p} \frac{N_j}{\xi_j} - \frac{\partial (V_b \phi)}{\partial P} \quad (\text{A.10})$$

Podemos reescrever a Equação (A.10) em relação ao volume molar, uma vez que $v_j = 1 / \xi_j$, de forma que:

$$\frac{\partial R^V}{\partial P} = \sum_{j=1}^{n_p} \frac{\partial N_j}{\partial P} v_j + \sum_{j=1}^{n_p} N_j \frac{\partial v_j}{\partial P} - V_b \frac{\partial \phi}{\partial P} \quad (\text{A.11})$$

Para o cálculo da derivada do número de mols das fases em função da pressão, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_j}{\partial P} &= \sum_{k=1}^{n_c} \frac{\partial N_{kj}}{\partial P}, & \text{para } j = \text{óleo ou gás} \\ \frac{\partial N_j}{\partial P} &= 0, & \text{para } j = \text{água} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

onde o cálculo de $\partial N_{kj} / \partial P$, segundo Firoozabadi *et al.* (1988), não pode ser feito de maneira explícita, sendo necessária uma solução implícita, descrita a seguir.

O número de mols total de um componente k pode ser escrito como a soma do número de mols de k contidos em cada fase. Já que consideramos apenas duas fases compostas por hidrocarbonetos (óleo e gás), o número de mols total de cada componente hidrocarbonetos é calculado por:

$$N_k = N_{ko} + N_{kg}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (\text{A.13})$$

onde, N_{ko} e N_{kg} representam os números de mols de cada componente k nas fases óleo e gás, respectivamente. Derivando a Equação (A.13) em relação à pressão, e como N_k é constante temos:

$$\frac{\partial N_k}{\partial P} = \frac{\partial N_{ko}}{\partial P} + \frac{\partial N_{kg}}{\partial P} = 0, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (\text{A.14})$$

Reorganizando a Equação (A.14):

$$\frac{\partial N_{ko}}{\partial P} = -\frac{\partial N_{kg}}{\partial P}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (\text{A.15})$$

O sistema de equações provido pela Equação (A.14) é aplicada a cada componente hidrocarboneto, resultando em n_c equações e $2n_c$ incógnitas. As n_c equações restantes e necessárias para solução do sistema são provenientes das condições de equilíbrio, dadas pelas restrições de fugacidade, escritas na forma logarítmica por:

$$\ln(f_{ko}) = \ln(f_{kg}), \quad k = 1, \dots, n_c \quad (\text{A.16})$$

Derivando a Equação (A.16) com respeito à pressão e aplicando a regra da cadeia (FERNANDES, 2014), obtemos:

$$\frac{\partial \ln(f_{ko})}{\partial P} + \sum_{i=1}^{n_c} \frac{\partial \ln(f_{ko})}{\partial N_{io}} \frac{\partial N_{io}}{\partial P} = \frac{\partial \ln(f_{kg})}{\partial P} + \sum_{i=1}^{n_c} \frac{\partial \ln(f_{kg})}{\partial N_{ig}} \frac{\partial N_{ig}}{\partial P}, \quad k=1, \dots, n_c \quad (\text{A.17})$$

Substituindo a Equação (A.15) na Equação (A.17):

$$\sum_{i=1}^{n_c} \left(\frac{\partial \ln(f_{ko})}{\partial N_{io}} + \frac{\partial \ln(f_{kg})}{\partial N_{ig}} \right) \frac{\partial N_{ig}}{\partial P} = \frac{\partial \ln(f_{ko})}{\partial P} - \frac{\partial \ln(f_{kg})}{\partial P}, \quad k=1, \dots, n_c \quad (\text{A.18})$$

A Equação (A.18) resulta em um sistema de n_c equações e n_c incógnitas, resolvido para $\partial N_{ig} / \partial P$ utilizando a Equação (A.19) (FERNANDES, 2014):

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \ln(f_{1o})}{\partial N_{1o}} + \frac{\partial \ln(f_{1g})}{\partial N_{1g}} & \dots & \frac{\partial \ln(f_{1o})}{\partial N_{n_c o}} + \frac{\partial \ln(f_{1g})}{\partial N_{n_c g}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \ln(f_{n_c o})}{\partial N_{1o}} + \frac{\partial \ln(f_{n_c g})}{\partial N_{1g}} & \dots & \frac{\partial \ln(f_{n_c o})}{\partial N_{n_c o}} + \frac{\partial \ln(f_{n_c g})}{\partial N_{n_c g}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_{1g}}{\partial P} \\ \vdots \\ \frac{\partial N_{n_c g}}{\partial P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \ln(f_{1o})}{\partial P} - \frac{\partial \ln(f_{1g})}{\partial P} \\ \vdots \\ \frac{\partial \ln(f_{n_c o})}{\partial P} - \frac{\partial \ln(f_{n_c g})}{\partial P} \end{bmatrix} \quad (\text{A.19})$$

em que o cálculo da derivada de $\ln(f_{kj})$ é detalhado a seguir. A fugacidade é calculada pela Equação (26), reescrita abaixo:

$$f_{kj} = \varphi_{kj} x_{kj} P, \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1$$

Aplicando o logaritmo na Equação (26), temos:

$$\ln(f_{kj}) = \ln(\varphi_{kj} x_{kj} P), \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.20})$$

onde podemos aplicar as propriedades de logaritmo e reescrevê-la como:

$$\ln(f_{kj}) = \ln(\varphi_{kj}) + \ln(x_{kj} P), \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.21})$$

Podemos diferenciar a Equação (A.21) em relação à pressão, mantendo T e N_{kj} constantes (FIROOZABADI *et al.*, 1988), resultando em:

$$\frac{\partial \ln(f_{kj})}{\partial P} = \frac{\partial \ln(\varphi_{kj})}{\partial P} + \frac{1}{P}, \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.22})$$

Para obter $\partial \ln(\varphi_{kj}) / \partial P$, derivamos a Equação (25), resultando em:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln(\varphi_{kj})}{\partial P} = & c_0 \frac{\partial Z_j}{\partial P} - c_1 \left(\frac{\partial Z_j}{\partial P} - \frac{\partial B_j}{\partial P} \right) - c_2 \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ c_3 \frac{1}{B_j^2} \left(B_j \frac{\partial A_j}{\partial P} - A_j \frac{\partial B_j}{\partial P} \right) + \right. \\ & \left. c_4 \frac{A_j}{B_j} \left(Z_j \frac{\partial B_j}{\partial P} - B_j \frac{\partial Z_j}{\partial P} \right) \right\}, \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

onde c_0, c_1, c_2, c_3 e c_4 são expressos nas Equações (A.24) a (A.28):

$$c_0 = \frac{b_k}{b_j}, \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.24})$$

$$c_1 = \frac{1}{Z_j - B_j}, \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.25})$$

$$c_2 = 2 \sum_{i=1}^{n_c} \frac{x_{ij}}{a_j} a_{ki} - c_0, \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.26})$$

$$c_3 = \ln \left(\frac{Z_j + (1 + \sqrt{2}) B_j}{Z_j + (1 - \sqrt{2}) B_j} \right), \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.27})$$

$$c_4 = \frac{2\sqrt{2}}{Z_j^2 + 2Z_j B_j - B_j^2}, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.28})$$

Para computar $\partial \ln(f_{kj}) / \partial N_{kj}$, a Equação (A.21) é diferenciada com respeito a N_{kj} , mantendo T e P constantes, resultando em:

$$\frac{\partial \ln(f_{kj})}{\partial N_{kj}} = \frac{\partial \ln(\varphi_{kj})}{\partial N_{kj}} + \frac{1}{x_{kj}} \frac{(1 - x_{kj})}{N_j}, \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.29})$$

em que $\partial \ln(\varphi_{kj}) / \partial N_{kj}$ é obtida diferenciando a Equação (25) com respeito ao número de mols de componentes na respectiva fase, resultando em:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln(\varphi_{kj})}{\partial N_{kj}} &= \frac{c_0}{b_j} \left(b_j \frac{\partial Z_j}{\partial N_{kj}} - (Z_j - 1) \frac{\partial b_j}{\partial N_{kj}} \right) - c_1 \left(\frac{\partial Z_j}{\partial N_{kj}} - \frac{\partial B_j}{\partial N_{kj}} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[d_0 + c_3 \frac{A_j}{B_j} \left(\frac{d_1}{N_j a_j} + \frac{c_0}{b_j} \frac{\partial b_j}{\partial N_{kj}} \right) \right], \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

onde d_0 e d_1 são calculadas por:

$$d_0 = c_2 \left[\frac{c_3}{B_j^2} \left(B_j \frac{\partial A_j}{\partial N_{kj}} - A_j \frac{\partial B_j}{\partial N_{kj}} \right) + c_4 \frac{A_j}{B_j} \left(Z_j \frac{\partial B_j}{\partial N_{kj}} - B_j \frac{\partial Z_j}{\partial N_{kj}} \right) \right], \quad (\text{A.31})$$

$$k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1$$

$$d_1 = 2 \left[a_{ki} - \left(\frac{N_j}{a_j} \frac{\partial a_j}{\partial N_{kj}} + 1 \right) \sum_{i=1}^{n_c} x_{ij} a_{ki} \right], \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.32})$$

Com todos os termos do sistema linear calculados, pode-se resolver a Equação (A.19) para $\partial N_{ig} / \partial P$. Em seguida, calcula-se $\partial N_{io} / \partial P$ por meio da Equação (A.15), e com a Equação (A.12) obtemos $\partial N_g / \partial P$ e $\partial N_o / \partial P$.

A próxima etapa é o cálculo de $\partial v_j / \partial P$. Para as fases hidrocarbonetos (óleo e gás), o volume molar é expresso pela Equação (37). Derivando-a em relação à pressão, temos (FERNANDES, 2014):

$$\frac{\partial v_j}{\partial P} = \frac{(\partial Z_j / \partial P) RTP - Z_j RT}{P^2}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.33})$$

Para a água, cujo volume molar é dado pelo inverso da Equação (38), temos:

$$\frac{\partial v_w}{\partial P} = -\frac{\xi_w^0 C_w}{(\xi_w)^2} \quad (\text{A.34})$$

Por fim, para $\partial \phi / \partial P$, derivamos a equação da porosidade escrita na Equação (4):

$$\frac{\partial \phi}{\partial P} = \phi^0 C_f \quad (\text{A.35})$$

Substituindo as Equações (A.12), (A.33), (A.34) e (A.35) na Equação (A.11), calculamos a derivada da equação de restrição de volume poroso em relação à pressão.

A.3 Derivada do Resíduo do Volume Poroso em Relação ao Número de Mols

Derivando a Equação (78) em relação ao número de mols do componente k e escrevendo em termos de volume molar, obtemos:

$$\frac{\partial R^V}{\partial N_k} = \frac{\partial}{\partial N_k} \sum_{j=1}^{n_p} N_j v_j - \frac{\partial (V_b \phi)}{\partial N_k}, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad (\text{A.36})$$

Aplicando a regra da cadeia, em que temos até três fases presentes (água, óleo e gás), e uma vez que a porosidade não depende do número de mols ($\partial (V_b \phi) / \partial N_k = 0$), resulta em:

$$\frac{\partial R^V}{\partial N_k} = \frac{\partial N_o}{\partial N_k} v_o + N_o \frac{\partial v_o}{\partial N_k} + \frac{\partial N_g}{\partial N_k} v_g + N_g \frac{\partial v_g}{\partial N_k} + \frac{\partial N_w}{\partial N_k} v_w + N_w \frac{\partial v_w}{\partial N_k}, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad (\text{A.37})$$

Quando se realiza a derivação em função do número de mols da água ($N_k = N_w$), por ela ser uma fase pura que não se relaciona com as fases hidrocarbonetos, a Equação (A.37) se reduz a (FERNANDES, 2014):

$$\frac{\partial R^V}{\partial N_w} = v_w \quad (\text{A.38})$$

Já para os componentes hidrocarbonetos, a Equação (A.37) assume a forma da Equação (A.39):

$$\frac{\partial R^V}{\partial N_k} = \frac{\partial N_o}{\partial N_k} v_o + N_o \frac{\partial v_o}{\partial N_k} + \frac{\partial N_g}{\partial N_k} v_g + N_g \frac{\partial v_g}{\partial N_k}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (\text{A.39})$$

Para calcular $\partial N_o / \partial N_k$ e $\partial N_g / \partial N_k$, emprega-se:

$$\frac{\partial N_j}{\partial N_k} = \sum_{i=1}^{n_c} \frac{\partial N_{ij}}{\partial N_k}, \quad k = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.40})$$

onde o procedimento para obter $\partial N_{ij} / \partial N_k$ é análogo ao cálculo de $\partial N_{kj} / \partial P$. Derivando a Equação (A.14) com respeito a N_k , temos:

$$\frac{\partial N_i}{\partial N_k} = \frac{\partial N_{io}}{\partial N_k} + \frac{\partial N_{ig}}{\partial N_k} = \delta_{ik}, \quad k = 1, \dots, n_c, \quad i = 1, \dots, n_c \quad (\text{A.41})$$

Reorganizando a Equação (A.41), podemos escrever da forma da Equação (A.42) (FERNANDES, 2014):

$$\frac{\partial N_{io}}{\partial N_k} = \delta_{ik} - \frac{\partial N_{ig}}{\partial N_k}, \quad k = 1, \dots, n_c, \quad i = 1, \dots, n_c \quad (\text{A.42})$$

em que $\delta_{ik} = 1$ para $i = k$ e $\delta_{ik} = 0$ para $i \neq k$.

Para resolver esse sistema, mais uma vez fazemos uso das equações de equilíbrio. Diferenciando a Equação (A.16) com respeito a N_k e aplicando a regra da cadeia, resulta em:

$$\sum_{i=1}^{n_c} \left(\frac{\partial \ln(f_{ko})}{\partial N_{io}} + \frac{\partial \ln(f_{kg})}{\partial N_{ig}} \right) \frac{\partial N_{ig}}{\partial N_k} = \frac{\partial \ln(f_{ko})}{\partial N_{ko}}, \quad k = 1, \dots, n_c \quad (\text{A.43})$$

Aplicando a Equação (A.43) para todos os componentes hidrocarbonetos, é formado um sistema linear mostrado na Equação (A.44) (FERNANDES, 2014):

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \ln(f_{1o})}{\partial N_{1o}} + \frac{\partial \ln(f_{1g})}{\partial N_{1g}} & \dots & \frac{\partial \ln(f_{1o})}{\partial N_{n_c o}} + \frac{\partial \ln(f_{1g})}{\partial N_{n_c g}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \ln(f_{n_c o})}{\partial N_{1o}} + \frac{\partial \ln(f_{n_c g})}{\partial N_{1g}} & \dots & \frac{\partial \ln(f_{n_c o})}{\partial N_{n_c o}} + \frac{\partial \ln(f_{n_c g})}{\partial N_{n_c g}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_{1g}}{\partial N_k} \\ \vdots \\ \frac{\partial N_{n_c g}}{\partial N_k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \ln(f_{1o})}{\partial N_k} \\ \vdots \\ \frac{\partial \ln(f_{n_c o})}{\partial N_k} \end{bmatrix} \quad (\text{A.44})$$

A resolução do sistema resulta no cálculo de $\partial N_{ig} / \partial N_k$ para $i=1, \dots, n_c$ e $k=1, \dots, n_c$, substituindo na Equação (A.42) pode-se obter $\partial N_{io} / \partial N_k$ e por fim calcula-se $\partial N_o / \partial N_k$ e $\partial N_g / \partial N_k$ por meio da Equação (A.40).

Para calcular a derivada do volume molar da fase j em relação ao número de mols do componente k derivamos a Equação (37), resultando em (FERNANDES, 2014):

$$\frac{\partial v_j}{\partial N_k} = \frac{RT}{P} \frac{\partial Z_j}{\partial N_k}, \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.45})$$

Substituindo as Equações (A.40) e (A.45) na Equação (A.39), finalizamos o cálculo da derivada da equação de restrição de volume poroso em relação ao número de mols dos componentes.

A.4 Derivada do Resíduo de Conservação da Massa em Relação à Pressão

Derivando a Equação (66) em relação à pressão, no mesmo de volume de controle arbitrário P apresentado no capítulo 4 e mostrado na Figura 3, temos:

$$\frac{\partial R_{k,P}^M}{\partial P} = \frac{\partial}{\partial P} (N_{k,P}^{n+1} - N_{k,P}^n) - \Delta t \frac{\partial}{\partial P} \sum_{j=1}^{n_p} [F_{kj,e}^{n+1} - F_{kj,w}^{n+1} + F_{kj,n}^{n+1} - F_{kj,s}^{n+1}] - \Delta t \frac{\partial \dot{q}_{k,P}^{n+1}}{\partial P}, \quad (\text{A.46})$$

$$k = 1, \dots, n_c + 1$$

onde o primeiro termo se refere ao termo de acumulação, o segundo é o termo de fluxo e o terceiro corresponde ao termo de fonte/sumidouro. Para facilitar a notação, iremos omitir os sobrescritos $n+1$ nas equações a seguir, uma vez que as derivadas dos valores avaliados no passo de tempo n são iguais a zero ($\partial N_k^n / \partial P = 0$). Logo, podemos reescrever a Equação (A.46) na forma da Equação (A.47):

$$\frac{\partial R_{k,P}^M}{\partial P} = \frac{\partial N_{k,P}}{\partial P} - \Delta t \frac{\partial}{\partial P} \sum_{j=1}^{n_p} [F_{kj,e} - F_{kj,w} + F_{kj,n} - F_{kj,s}] - \Delta t \frac{\partial \dot{q}_{k,P}}{\partial P}, \quad k = 1, \dots, n_c + 1 \quad (\text{A.47})$$

O termo de acumulação ($\partial N_k / \partial P$) já foi apresentado na Equação (A.14). Para o termo de fonte/sumidouro, não empregamos nenhum modelo de poço, de forma que aproximamos $\partial \dot{q}_k / \partial P = 0$. Para o termo de fluxo, tomamos como exemplo a face e , uma vez que o procedimento é análogo para as demais direções. Dessa forma, temos:

$$\frac{\partial F_{kj,e}}{\partial P} = \frac{\partial}{\partial P} \left[(x_{kj} \xi_j \lambda_{rj})_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e (P_E - P_P - \rho_{j,e} g (D_E - D_P)) \right], \quad k=1, \dots, n_c+1 \quad (\text{A.48})$$

Expandindo e aplicando a regra do produto na Equação (A.48), obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{kj,e}}{\partial P} &= \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial P} \xi_j \lambda_{rj} \right)_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e (P_E - P_P - \rho_{j,e} g (D_E - D_P)) \\ &+ \left(x_{kj} \frac{\partial \xi_j}{\partial P} \lambda_{rj} \right)_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e (P_E - P_P - \rho_{j,e} g (D_E - D_P)) \\ &+ \left(x_{kj} \xi_j \frac{\partial \lambda_{rj}}{\partial P} \right)_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e (P_E - P_P - \rho_{j,e} g (D_E - D_P)) \\ &+ (x_{kj} \xi_j \lambda_{rj})_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e \left(-1 - \frac{\partial \rho_{j,e}}{\partial P} g (D_E - D_P) \right), \quad k=1, \dots, n_c+1 \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Para completar o cálculo da Equação (A.49), demonstraremos a seguir: $\partial x_{kj} / \partial P$, $\partial \xi_j / \partial P$, $\partial \lambda_{rj} / \partial P$ e $\partial \rho_j / \partial P$.

A.4.1 Derivada da Fração Molar em Relação à Pressão

Para os componentes hidrocarbonetos (FERNANDES 2014):

$$\frac{\partial x_{kj}}{\partial P} = \frac{1}{N_j} \left(\frac{\partial N_{kj}}{\partial P} - x_{kj} \frac{\partial N_j}{\partial P} \right), \quad k=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p-1 \quad (\text{A.50})$$

onde $\partial N_{kj} / \partial P$ é obtido pelas Equações (A.15) e (A.19), e $\partial N_j / \partial P$ pelas Equação (A.12). Para a água, em que $x_{ww} = 1$, $\partial x_{ww} / \partial P = 0$.

A.4.2 Derivada da Densidade Molar em Relação à Pressão

Para os componentes hidrocarbonetos:

$$\frac{\partial \xi_j}{\partial P} = \frac{Z_j - P (\partial Z_j / \partial P)}{RT (Z_j)^2}, \quad j=1, \dots, n_p-1 \quad (\text{A.51})$$

com $\partial Z_j / \partial P$ calculado pela Equação (A.1). Para a água, temos:

$$\frac{\partial \xi_w}{\partial P} = \xi_w^0 C_w \quad (\text{A.52})$$

A.4.3 Derivada da Mobilidade em Relação à Pressão

Uma vez que $\lambda_{rj} = k_{rj}/\mu_j$, temos:

$$\frac{\partial \lambda_{rj}}{\partial P} = \frac{(\partial k_{rj} / \partial P) \mu_j - k_{rj} (\partial \mu_j / \partial P)}{(\mu_j)^2}, \quad j = 1, \dots, n_p \quad (\text{A.53})$$

onde:

$$\frac{\partial k_{rj}}{\partial P} = \sum_{i=1}^{n_p-1} \frac{\partial k_{rj}}{\partial S_i} \frac{\partial S_i}{\partial P}, \quad j = 1, \dots, n_p \quad (\text{A.54})$$

Para obter $\partial k_{rj} / \partial S_i$, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial k_{rj}}{\partial S_i} &= \frac{-k_{rj} e_j}{S_j - S_{jr}}, \quad \text{para } i \neq j \\ \frac{\partial k_{rj}}{\partial S_i} &= \frac{k_{rj} e_j}{S_j - S_{jr}}, \quad \text{para } i = j \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

e para $\partial S_i / \partial P$, usamos as Equações (A.56) a (A.59) (FERNANDES, 2014):

$$\frac{\partial S_j}{\partial P} = (1 - S_w) \left\{ \frac{\left[\frac{\partial}{\partial P} \left(\frac{\beta_j}{\xi_j} \right) \right] \sum_{i=1}^{n_p-1} \frac{\beta_j}{\xi_j} - \left[\frac{\partial}{\partial P} \sum_{i=1}^{n_p-1} \frac{\beta_j}{\xi_j} \right] \frac{\beta_j}{\xi_j}}{\left(\sum_{i=1}^{n_p-1} \frac{\beta_j}{\xi_j} \right)^2} \right\} \frac{\frac{\beta_j}{\xi_j}}{\sum_{i=1}^{n_p-1} \frac{\beta_j}{\xi_j}} \frac{\partial S_w}{\partial P}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.56})$$

$$\frac{\partial S_w}{\partial P} = -\frac{1}{(V_b \phi \xi_w)^2} \left[N_w V_b \phi \frac{\partial \xi_w}{\partial P} + N_w \xi_w V_b \phi^0 C_f \right] \quad (\text{A.57})$$

$$\frac{\partial}{\partial P} \left(\frac{\beta_j}{\xi_j} \right) = \frac{1}{\xi_j} \left(\frac{\partial \beta_j}{\partial P} - \frac{\beta_j}{\xi_j} \frac{\partial \xi_j}{\partial P} \right), \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.58})$$

$$\frac{\partial \beta_j}{\partial P} = \frac{\frac{\partial N_j}{\partial P} - \beta_j \frac{\partial}{\partial P} \left(\sum_{i=1}^{n_p-1} N_i \right)}{\sum_{i=1}^{n_p-1} N_i}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.59})$$

Para calcular a derivada da viscosidade das fases hidrocarbonetos em relação à pressão, recorreremos ao modelo de Lohrenz, Bray e Clark (1964) apresentado na seção 3.8. Derivando a Equação (47), temos:

$$\frac{\partial \mu_j}{\partial P} = \frac{\partial \mu_j^*}{\partial P} + \frac{\left[\partial(\chi_j^4) / \partial P \right] \zeta_j^* - (\chi_j^4 - 1 \times 10^{-4}) (\partial \zeta_j^* / \partial P)}{(\zeta_j^*)^2}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.60})$$

onde $\partial \mu_j^* / \partial P$ é dado por:

$$\frac{\partial \mu_j^*}{\partial P} = \frac{\left\{ \begin{array}{l} \left[\sum_k \left(\left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial P} \right) \tilde{\mu}_k \sqrt{M_k} \right) + \sum_k \left(x_{kj} \left(\frac{\partial \tilde{\mu}_k}{\partial P} \right) \sqrt{M_k} \right) \right] \sum_k (x_{kj} \sqrt{M_k}) \\ - \sum_k (x_{kj} \tilde{\mu}_k \sqrt{M_k}) \left[\sum_k \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial P} \right) \sqrt{M_k} \right] \end{array} \right\}}{\left[\sum_k (x_{kj} \sqrt{M_k}) \right]^2}, \quad (\text{A.61})$$

$j = 1, \dots, n_p - 1$

Para calcular a Equação (A.61), precisamos obter $\partial x_{kj} / \partial P$, já apresentado na Equação (A.50), e $\partial \tilde{\mu}_k / \partial P$, que depende apenas de valores constantes na pressão. Logo, $\partial \tilde{\mu}_k / \partial P = 0$ e a Equação (A.61) é reduzida na Equação (A.62):

$$\frac{\partial \mu_j^*}{\partial P} = \frac{\left\{ \begin{array}{l} \sum_k \left(\left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial P} \right) \tilde{\mu}_k \sqrt{M_k} \right) \sum_k (x_{kj} \sqrt{M_k}) \\ - \sum_k (x_{kj} \tilde{\mu}_k \sqrt{M_k}) \left[\sum_k \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial P} \right) \sqrt{M_k} \right] \end{array} \right\}}{\left[\sum_k (x_{kj} \sqrt{M_k}) \right]^2}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.62})$$

Para calcular $\partial(\chi_j^4) / \partial P$, usamos:

$$\frac{\partial \chi_j^4}{\partial P} = 4 \chi_j^3 \frac{\partial \chi_j}{\partial P}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.63})$$

onde:

$$\frac{\partial \chi_j}{\partial P} = 0,23364 \frac{\partial \xi_{rj}}{\partial P} + 0,58533 \left(2 \xi_{rj} \frac{\partial \xi_{rj}}{\partial P} \right) - 0,40758 \left(3 \xi_{rj}^2 \frac{\partial \xi_{rj}}{\partial P} \right) + 0,093324 \left(4 \xi_{rj}^3 \frac{\partial \xi_{rj}}{\partial P} \right), \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.64})$$

em que:

$$\frac{\partial \xi_{rj}}{\partial P} = \frac{\partial \xi_j}{\partial P} \sum_{k=1}^{n_c} x_{kj} \nu_{c,k} + \xi_j \sum_{k=1}^{n_c} \frac{\partial x_{kj}}{\partial P} \nu_{c,k}, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.65})$$

Por fim, precisamos calcular $\partial \zeta_j^* / \partial P$ por meio da Equação (A.66):

$$\frac{\partial \zeta_j^*}{\partial P} = \frac{\left[\frac{1}{6} \left[\sum_k (x_{kj} T_{c,k}) \right]^{-5/6} \sum_k \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial P} T_{c,k} \right) \right] \left[\sum_k (x_{kj} M_k) \right]^{1/2} \left[\sum_k (x_{kj} P_{c,k}) \right]^{2/3} - \left[\sum_k (x_{kj} T_{c,k}) \right]^{1/6} \left\{ \frac{1}{2} \left[\sum_k (x_{kj} M_k) \right]^{-1/2} \sum_k \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial P} M_k \right) \left[\sum_k (x_{kj} P_{c,k}) \right]^{2/3} + \left[\sum_k (x_{kj} M_k) \right]^{1/2} \frac{2}{3} \left[\sum_k (x_{kj} P_{c,k}) \right]^{-1/3} \sum_k \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial P} P_{c,k} \right) \right\}}{\left[\sum_k (x_{kj} M_k) \right] \left[\sum_k (x_{kj} P_{c,k}) \right]^{4/3}} \quad (A.66)$$

$j = 1, \dots, n_p - 1$

Substituindo as Equações (A.61), (A.63) e (A.66) na Equação (A.60), obtemos a derivada da viscosidade das fases hidrocarbonetos. Para a água, a viscosidade é constante, logo $\partial \mu_w / \partial P = 0$. Por fim, substituindo as Equações (A.54) e (A.60) na Equação (A.53), finalizamos o cálculo da derivada da mobilidade em relação à pressão.

A.4.4 Derivada da Densidade Mássica em Relação à Pressão

Derivando a Equação (39), para as fases hidrocarbonetos:

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial P} = \frac{\partial \xi_j}{\partial P} \sum_{k=1}^{n_c} x_{kj} M_k + \xi_j \sum_{k=1}^{n_c} \frac{\partial x_{kj}}{\partial P} M_k, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (A.67)$$

Já para a fase água, usamos a Equação (40), que resulta em:

$$\frac{\partial \rho_w}{\partial P} = \frac{\partial \xi_w}{\partial P} M_w \quad (A.68)$$

A.5 Derivada do Resíduo de Conservação da Massa em Relação ao Número de Mols

Derivando a Equação (66) em relação ao número de mols do componente k , no mesmo de volume de controle arbitrário P apresentado na no capítulo 4 e mostrado na Figura 3, além de omitir os sobrescritos $n+1$ nas equações a seguir, uma vez que as derivadas dos valores avaliados no passo de tempo n são iguais a zero ($\partial N_k^n / \partial N_i = 0$), temos:

$$\frac{\partial R_{k,P}^M}{\partial N_i} = \frac{\partial N_{k,P}}{\partial N_i} - \Delta t \frac{\partial}{\partial N_i} \sum_{j=1}^{n_p} [F_{kj,e} - F_{kj,w} + F_{kj,n}^{n+1} - F_{kj,s}^{n+1}] - \Delta t \frac{\partial \dot{q}_{k,P}}{\partial N_i}, \quad (\text{A.69})$$

$$k = 1, \dots, n_c + 1, \quad i = 1, \dots, n_c + 1$$

Para o termo de acumulação, temos a seguinte relação:

$$\frac{\partial N_k}{\partial N_i} = 1, \quad \text{para } k = i$$

$$\frac{\partial N_k}{\partial N_i} = 0, \quad \text{para } k \neq i \quad (\text{A.70})$$

No termo de fonte/sumidouro, assumimos a mesma hipótese da derivada em relação à pressão, logo $\partial \dot{q}_k / \partial N_i = 0$. Para o termo de fluxo, mais uma vez demonstramos os cálculos para a face e , já que o procedimento é análogo para as demais direções. Dessa maneira, temos:

$$\frac{\partial F_{kj,e}}{\partial N_i} = \frac{\partial}{\partial N_i} \left[(x_{kj} \xi_j \lambda_{rj})_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e (P_E - P_P - \rho_{j,e} g (D_E - D_P)) \right], \quad (\text{A.71})$$

$$k = 1, \dots, n_c + 1, \quad i = 1, \dots, n_c + 1$$

Expandindo e aplicando a regra do produto na Equação (A.71):

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{kj,e}}{\partial N_i} &= \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial N_i} \xi_j \lambda_{rj} \right)_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e (P_E - P_P - \rho_{j,e} g (D_E - D_P)) \\ &+ \left(x_{kj} \frac{\partial \xi_j}{\partial N_i} \lambda_{rj} \right)_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e (P_E - P_P - \rho_{j,e} g (D_E - D_P)) \\ &+ \left(x_{kj} \xi_j \frac{\partial \lambda_{rj}}{\partial N_i} \right)_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e (P_E - P_P - \rho_{j,e} g (D_E - D_P)) \\ &+ (x_{kj} \xi_j \lambda_{rj})_e \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} \underline{K}_e \left(-\frac{\partial \rho_{j,e}}{\partial N_i} g (D_E - D_P) \right), \quad k = 1, \dots, n_c + 1, \quad i = 1, \dots, n_c + 1 \end{aligned} \quad (\text{A.72})$$

Para completar o cálculo da Equação (A.72), demonstraremos a seguir: $\partial x_{kj} / \partial N_i$, $\partial \xi_j / \partial N_i$, $\partial \lambda_{rj} / \partial N_i$ e $\partial \rho_j / \partial N_i$.

A.5.1 Derivada da Fração Molar em Relação ao Número de Mols

Para os componentes hidrocarbonetos (FERNANDES 2014):

$$\frac{\partial x_{kj}}{\partial N_i} = \frac{1}{N_j} \left(\frac{\partial N_{kj}}{\partial N_i} - x_{kj} \frac{\partial N_j}{\partial N_i} \right), \quad k = 1, \dots, n_c, \quad i = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.73})$$

onde $\partial N_{kj} / \partial N_i$ é obtido pelas Equações (A.42) e (A.44), e $\partial N_j / \partial N_i$ pelas Equação (A.40).

Como a água é uma fase pura, então $\partial x_{ww} / \partial N_i = 0$.

A.5.2 Derivada da Densidade Molar em Relação ao Número de Mols

Para os componentes hidrocarbonetos:

$$\frac{\partial \xi_j}{\partial N_i} = \frac{-P(\partial Z_j / \partial N_i)}{RT(Z_j)^2}, \quad i = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.74})$$

com $\partial Z_j / \partial P$ calculado pela Equação (A.4). Para a água, a Equação (38) independe do número de mols, portanto $\partial \xi_w / \partial N_w = 0$.

A.5.3 Derivada da Mobilidade em Relação ao Número de Mols

Sendo $\lambda_{rj} = k_{rj} / \mu_j$, temos:

$$\frac{\partial \lambda_{rj}}{\partial N_i} = \frac{(\partial k_{rj} / \partial N_i) \mu_j - k_{rj} (\partial \mu_j / \partial N_i)}{(\mu_j)^2}, \quad i = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.75})$$

onde:

$$\frac{\partial k_{rj}}{\partial N_i} = \sum_{m=1}^{n_p-1} \frac{\partial k_{rj}}{\partial S_m} \frac{\partial S_m}{\partial N_i}, \quad i = 1, \dots, n_c + 1, \quad j = 1, \dots, n_p \quad (\text{A.76})$$

Para obter $\partial k_{rj} / \partial S_m$ temos a Equação (A.55) já definida, e para $\partial S_m / \partial N_i$, usamos as Equações (A.77) a (A.80) (FERNANDES, 2014):

$$\frac{\partial S_j}{\partial N_i} = (1 - S_w) \left\{ \frac{\left[\frac{\partial}{\partial N_i} \left(\frac{\beta_j}{\xi_j} \right) \right] \sum_{i=1}^{n_p-1} \frac{\beta_j}{\xi_j} - \left[\frac{\partial}{\partial N_i} \sum_{i=1}^{n_p-1} \frac{\beta_j}{\xi_j} \right] \frac{\beta_j}{\xi_j}}{\left(\sum_{i=1}^{n_p-1} \frac{\beta_j}{\xi_j} \right)^2} \right\}, \quad i = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.77})$$

$$\frac{\partial S_w}{\partial N_w} = \frac{1}{(V_b \phi \xi_w)^2} \left[V_b \phi \xi_w - N_w V_b \phi \frac{\partial \xi_w}{\partial N_w} \right] \quad (\text{A.78})$$

$$\frac{\partial}{\partial N_i} \left(\frac{\beta_j}{\xi_j} \right) = \frac{1}{\xi_j} \left(\frac{\partial \beta_j}{\partial N_i} - \frac{\beta_j}{\xi_j} \frac{\partial \xi_j}{\partial N_i} \right), \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.79})$$

$$\frac{\partial \beta_j}{\partial N_i} = \frac{\frac{\partial N_j}{\partial N_i} - \beta_j \frac{\partial}{\partial N_i} \left(\sum_{m=1}^{n_p-1} N_m \right)}{\sum_{m=1}^{n_p-1} N_m}, \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.80})$$

Novamente recorreremos ao modelo de Lohrenz, Bray e Clark (1964) para calcular a derivada da viscosidade das fases hidrocarbonetos em relação ao número de mols dos componentes. Derivando a Equação (47), temos:

$$\frac{\partial \mu_j}{\partial N_i} = \frac{\partial \mu_j^*}{\partial N_i} + \frac{\left[\frac{\partial (\chi_j^4)}{\partial N_i} \right] \zeta_j^* - (\chi_j^4 - 1 \times 10^{-4}) \left(\frac{\partial \zeta_j^*}{\partial N_i} \right)}{(\zeta_j^*)^2}, \quad (\text{A.81})$$

$$i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1$$

onde $\partial \mu_j^* / \partial N_i$ é dado por:

$$\frac{\partial \mu_j^*}{\partial N_i} = \frac{\left\{ \begin{array}{l} \sum_k \left(\left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial N_i} \right) \tilde{\mu}_k \sqrt{M_k} \right) \sum_k \left(x_{kj} \sqrt{M_k} \right) \\ - \sum_k \left(x_{kj} \tilde{\mu}_k \sqrt{M_k} \right) \left[\sum_k \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial N_i} \right) \sqrt{M_k} \right] \end{array} \right\}}{\left[\sum_k \left(x_{kj} \sqrt{M_k} \right) \right]^2}, \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.82})$$

em que $\partial x_{kj} / \partial N_i$ é calculado pela Equação (A.73). Para $\partial (\chi_j^4) / \partial N_i$, temos:

$$\frac{\partial \chi_j^4}{\partial N_i} = 4 \chi_j^3 \frac{\partial \chi_j}{\partial N_i}, \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.83})$$

onde:

$$\frac{\partial \chi_j}{\partial N_i} = 0,23364 \frac{\partial \xi_{rj}}{\partial N_i} + 0,58533 \left(2 \xi_{rj} \frac{\partial \xi_{rj}}{\partial N_i} \right) - 0,40758 \left(3 \xi_{rj}^2 \frac{\partial \xi_{rj}}{\partial N_i} \right) + 0,093324 \left(4 \xi_{rj}^3 \frac{\partial \xi_{rj}}{\partial N_i} \right), \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.84})$$

em que:

$$\frac{\partial \xi_{rj}}{\partial N_i} = \frac{\partial \xi_j}{\partial N_i} \sum_{k=1}^{n_c} x_{kj} \nu_{c,k} + \xi_j \sum_{k=1}^{n_c} \frac{\partial x_{kj}}{\partial N_i} \nu_{c,k}, \quad i=1, \dots, n_c, \quad j=1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.85})$$

Por fim, precisamos calcular $\partial \zeta_j^* / \partial N_i$ por meio da Equação (A.86):

$$\frac{\partial \zeta_j^*}{\partial N_i} = \frac{\left[\frac{1}{6} \left[\sum_k (x_{kj} T_{c,k}) \right]^{-5/6} \sum_k \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial N_i} T_{c,k} \right) \right] \left[\sum_k (x_{kj} M_k) \right]^{1/2} \left[\sum_k (x_{kj} P_{c,k}) \right]^{2/3} - \left[\sum_k (x_{kj} T_{c,k}) \right]^{1/6} \left\{ \frac{1}{2} \left[\sum_k (x_{kj} M_k) \right]^{-1/2} \sum_k \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial N_i} M_k \right) \left[\sum_k (x_{kj} P_{c,k}) \right]^{2/3} + \left[\sum_k (x_{kj} M_k) \right]^{1/2} \frac{2}{3} \left[\sum_k (x_{kj} P_{c,k}) \right]^{-1/3} \sum_k \left(\frac{\partial x_{kj}}{\partial N_i} P_{c,k} \right) \right\}}{\left[\sum_k (x_{kj} M_k) \right] \left[\sum_k (x_{kj} P_{c,k}) \right]^{4/3}} \quad (\text{A.86})$$

$i = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1$

Substituindo as Equações (A.81), (A.83) e (A.86) na Equação (A.81), obtemos a derivada da viscosidade das fases hidrocarbonetos. Para a água, a viscosidade é constante, logo $\partial \mu_w / \partial N_w = 0$. Por fim, substituindo as Equações (A.76) e (A.81) na Equação (A.75), e finalizamos o cálculo da derivada da mobilidade em relação ao número de mols dos componentes.

A.5.4 Derivada da Densidade Mássica em Relação ao Número de Mols

Derivando a Equação (39), para as fases hidrocarbonetos:

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial N_i} = \frac{\partial \xi_j}{\partial N_i} \sum_{k=1}^{n_c} x_{kj} M_k + \xi_j \sum_{k=1}^{n_c} \frac{\partial x_{kj}}{\partial N_i} M_k, \quad i = 1, \dots, n_c, \quad j = 1, \dots, n_p - 1 \quad (\text{A.87})$$

Já para a fase água, usamos a Equação (40), que resulta em:

$$\frac{\partial \rho_w}{\partial N_w} = \frac{\partial \xi_w}{\partial N_w} M_w = 0 \quad (\text{A.88})$$

APÊNDICE B – PARÂMETROS DE CONTROLE DE PASSO DE TEMPO

Tabela 22 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 1.

Malha	Δt_{\max} (s)	Δt_{\min} (s)	ΔP_{\lim} (Pa)	ΔS_{\lim}	ΔV_{\lim} (m ³)	ΔN_{\lim} (mol)	CFL
8x1x1	100	1,0	10,0	0,8	100,0	100,0	3,0
16x1x1	100	1,0	10,0	0,8	100,0	100,0	3,0
32x1x1	100	1,0	10,0	0,8	100,0	100,0	3,0
64x1x1	100	1,0	10,0	0,8	100,0	100,0	4,0
128x1x1	100	1,0	10,0	0,8	100,0	100,0	4,0
256x1x1	100	1,0	10,0	0,8	100,0	100,0	4,0
512x1x1	100	1,0	10,0	0,8	100,0	100,0	4,0

Fonte: Autor (2023).

Tabela 23 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 2.

Malha	Δt_{\max} (s)	Δt_{\min} (s)	ΔP_{\lim} (Pa)	ΔS_{\lim}	ΔV_{\lim} (m ³)	ΔN_{\lim} (mol)	CFL
500x1x1	86400,0	8,64	68,95	0,25	0,1	3	2,0
1000x1x1	86400,0	8,64	68,95	0,25	0,1	3	2,0
2000x1x1	86400,0	8,64	68,95	0,25	0,1	3	2,0

Fonte: Autor (2023).

Tabela 24 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 3.

Malha	Δt_{\max} (s)	Δt_{\min} (s)	ΔP_{\lim} (Pa)	ΔS_{\lim}	ΔV_{\lim} (m ³)	ΔN_{\lim} (mol)	CFL
25x1x1	8640,0	0,864	68,95	0,15	0,5	0,5	2,0
50x1x1	8640,0	0,864	68,95	0,15	0,5	0,5	2,0
100x1x1	8640,0	0,864	68,95	0,15	0,5	0,5	2,0
200x1x1	8640,0	0,864	68,95	0,15	0,5	0,5	2,0

Fonte: Autor (2023).

Tabela 25 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 4.

Malha	Δt_{\max} (s)	Δt_{\min} (s)	ΔP_{\lim} (Pa)	ΔS_{\lim}	ΔV_{\lim} (m ³)	ΔN_{\lim} (mol)	CFL
20x20x1	8640,0	0,01	7	0,2	1,0	10	5,0
40x40x1	8640,0	0,01	7	0,2	1,0	10	5,0
80x80x1	8640,0	0,01	7	0,2	1,0	10	10,0

Fonte: Autor (2023).

Tabela 26 - Parâmetros de controle de passo de tempo para o Caso 5.

Malha	Δt_{\max} (s)	Δt_{\min} (s)	ΔP_{\lim} (Pa)	ΔS_{\lim}	ΔV_{\lim} (m ³)	ΔN_{\lim} (mol)	CFL
40x20x1	8640,0	86,4	69,0	0,25	0,004	6,0	3,0
80x40x1	8640,0	86,4	69,0	0,25	0,004	6,0	5,0

Fonte: Autor (2023).