

Marcos Paulo Pereira Cabral dos Santos

**Modelo de rede de capilares para o
estudo do escoamento de gás
retrógrado em meios porosos**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Mecânica

Rio de Janeiro
Setembro de 2017



Marcos Paulo Pereira Cabral dos Santos

**Modelo de rede de capilares para o estudo do
escoamento de gás retrógrado em meios
porosos**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Técnico Científico da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Márcio da Silveira Carvalho

Rio de Janeiro
Setembro de 2017



Marcos Paulo Pereira Cabral dos Santos

**Modelo de rede de capilares para o estudo do
escoamento de gás retrógrado em meios
porosos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Técnico Científico da PUC–Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada:

Prof. Márcio da Silveira Carvalho

Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica - PUC-Rio

Prof. Luis Fernando Figueira da Silva

Departamento de Engenharia Mecânica - PUC-Rio

Dr. Daniel Nunes de Miranda Filho

PETROBRAS - Petróleo Brasileiro S.A.

Dr. José Sérgio de Araújo Cavalcante Filho

PETROBRAS - Petróleo Brasileiro S.A.

Prof. Márcio da Silveira Carvalho

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico - PUC–Rio

Rio de Janeiro, 13 de Setembro de 2017

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Marcos Paulo Pereira Cabral dos Santos

Graduado em Engenharia Elétrica pela Escola Politécnica da Universidade de São Paulo (São Paulo, Brasil) e pela École Centrale Paris (Paris, França) em 2010. Especializado em Engenharia de Petróleo e Gás Natural pela Universidade Petrobras (Salvador, Brasil) em 2014.

Ficha Catalográfica

Santos, Marcos Paulo Pereira Cabral dos

Modelo de rede de capilares para o estudo do escoamento de gás retrógrado em meios porosos / Marcos Paulo Pereira Cabral dos Santos; Orientador: Márcio da Silveira Carvalho. — 2017.

91 f: il.(color) ; 29,7 cm

Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica, 2017.

Inclui Bibliografia.

1. Engenharia Mecânica – Teses. 2. Modelagem em escala de poros. 3. Modelos de rede de capilares. 4. Gás condensado. 5. Condensação em capilares. 6. Simulação composicional de reservatórios. I. Carvalho, Márcio da Silveira. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. III. Título.

A meus pais

Agradecimentos

Agradeço aos colegas de trabalho da Petrobras, que muito me ensinaram sobre simulação composicional de reservatórios.

Agradeço ao Márcio pela orientação e pela ajuda na escolha de um tema que colaborou para o meu progresso técnico.

Agradeço à PUC-Rio pela concessão da bolsa de isenção, que possibilitou a realização deste mestrado.

Resumo

Santos, Marcos Paulo Pereira Cabral dos; Carvalho, Márcio da Silveira. **Modelo de rede de capilares para o estudo do escoamento de gás retrógrado em meios porosos**. Rio de Janeiro, 2017. 91p. Dissertação de Mestrado — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A produtividade de poços produtores de gás, que operam com pressões de fundo inferiores à pressão de orvalho, é afetada pelo aparecimento da saturação de líquido em seus entornos. Para entender esse fenômeno, conhecido como bloqueio por condensado, os simuladores em escala de poros são ferramentas úteis na investigação dos parâmetros que influenciam na quantidade e na distribuição da saturação de condensado, assim como seus efeitos na redução do fluxo de gás. Esse trabalho apresenta um modelo de rede de capilares composicional e isotérmico para o estudo do escoamento de gás retrógrado em meios porosos. Forças capilares e gravitacionais não foram consideradas. O escoamento monofásico é comutado para bifásico de padrão anular quando a pressão e a composição do fluido atingem um critério de estabilidade. O método de Newton é aplicado para resolver as equações de fluxo e consistência dos volumes e calcular o transporte de cada um dos componentes ao longo da rede. As propriedades do fluido e o comportamento do escoamento foram testadas contra os resultados de um simulador termodinâmico comercial e soluções analíticas, respectivamente. Após validação, o simulador foi utilizado para obter curvas de permeabilidade relativa gás-líquido através da despressurização de uma rede 2D e alguns resultados são discutidos.

Palavras-chave

Modelagem em escala de poros; Modelos de rede de capilares; Gás condensado; Condensação em capilares; Simulação composicional de reservatórios.

Abstract

Santos, Marcos Paulo Pereira Cabral dos; Carvalho, Márcio da Silveira (Advisor). **Pore network model for retrograde gas flow in porous media**. Rio de Janeiro, 2017. 91p. Dissertação de Mestrado — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Gas well deliverability in retrograde gas reservoirs is affected by the appearance of liquid saturation around the wellbore when the bottom-hole pressure is below the dew point. Pore-scale simulators are used to model this phenomenon, known as condensate blockage, and to investigate parameters that influence the amount and the distribution of condensate saturation, as well as how it chokes the gas flow. Here, a fully-implicit isothermal compositional pore-scale network model is presented for retrograde gas flow in porous media. Capillary and gravitational forces are neglected. The model shifts from single-phase flow to annular flow regime when the pressure and the fluid composition reach a stability criteria. Newton's method is applied on flow and volume consistency equations to calculate the transport of each component through the network. Fluid properties and flow behavior were tested against a commercial thermodynamic simulator and analytical solutions respectively. After validation, the simulator was used to predict gas-liquid relative permeability from a depletion process in a 2D network and some results are discussed.

Keywords

Pore-network models; Network model; Gas-condensate; Capillary condensation; Compositional Reservoir Simulation.

Sumário

1	Introdução	19
1.1	Objetivo	22
	<i>Resumo dos Capítulos</i>	22
2	Revisão Bibliográfica	24
2.1	Modelo de Rede de Capilares	24
2.2	Simulação Composicional	27
3	Modelagem Composicional em Redes de Capilares	30
3.1	Descrição do Meio Poroso	30
3.2	Equação do Balanço Molar	32
3.3	Equação de Estado	32
3.4	Equação da Consistência dos Volumes	34
3.5	Equilíbrio de Fases	35
	<i>Aceleração da Convergência do Equilíbrio de Fases</i>	36
3.6	Identificação do Número de Fases	38
	<i>Aparecimento de uma nova Fase</i>	39
	<i>Aceleração da Convergência do Teste de Estabilidade</i>	42
	<i>Desaparecimento de uma Fase</i>	43
3.7	Critério de Identificação de Fase	43
3.8	Cálculo da Viscosidade	43
3.9	Cálculo das Condutâncias Hidráulicas	45
4	Formulação Numérica	48
4.1	Inicialização do modelo e execução geral do simulador	48
4.2	Cálculo Composicional	48
4.3	Laço Principal	49
	<i>Seleção automática do próximo Time Step</i>	51
4.4	Implementação do método de Newton Raphson	52
	<i>Upwind</i>	56
	<i>Atualização das Saturações, Condutâncias Hidráulicas e Densidades Molares</i>	57
	<i>Critério de Convergência</i>	58
	<i>Quebra do Passo de Tempo</i>	59
5	Validação do Modelo	60
5.1	Verificação do Modelo de Fluido	60
5.2	Validação do Modelo de Escoamento	61
	<i>Produção por Depleção em Reservatório de Gás Seco</i>	61
	<i>Produção por Depleção em Reservatório de Gás Condensado Retrógrado</i>	65
	<i>Escoamento Unidimensional Monofásico de Fluido Pouco Compressível</i>	68

<i>Deslocamento Unidimensional por Fluido Totalmente Miscível</i>	<i>69</i>
6 Curvas de permeabilidade relativa Gás-Líquido	73
6.1 Ensaios em redes 2D	73
6.2 Detalhamento de ensaio em rede 1D e fluido binário	80
7 Considerações Finais	85
7.1 Sugestões para Trabalhos Futuros	85
8 Referências bibliográficas	87

Lista de figuras

Figura 1.1	(a) Envelope de fases em um reservatório de gás condensado e (b) o perfil de pressão a partir do poço em produção, operando com pressão de fundo (BHP) abaixo do pressão de orvalho (DPP)	19
Figura 1.2	Curvas de permeabilidade relativa e sua correspondência espacial a partir do poço (Fan <i>et al.</i> , 2005)	20
Figura 1.3	Resumo das aplicações de modelos de simulação de reservatórios no diagrama de fases pressão-temperatura. (Ertekin <i>et al.</i> , n.d.)	21
Figura 3.1	(a) Imagem 3D de um arenito e sua (b) representação topologicamente equivalente de rede (Valvatne & Blunt, 2004).	30
Figura 3.2	Descrição de uma rede 2D, com $N_x N_y$ nós, simplificada: nós com índice i e arestas com índice j	31
Figura 3.3	Secção longitudinal (à esquerda) e transversal (à direita) da representação de um escoamento anular de gás (círculo de raio R_{int}) e condensado (coroa de raio externo R e interno R_{int}) em um capilar de raio R e comprimento L .	45
Figura 3.4	Perfil de velocidades $u_z(r)$ para um escoamento anular de gás ($0 \leq r \leq R_{int}$) e condensado ($R_{int} \leq r \leq R$) em um capilar de raio R e comprimento L .	46
Figura 4.1	Fluxograma da camada mais externa do simulador: leitura dos dados e rede e de fluido, inicialização do modelo após Cálculo Composicional, chamada do <i>Main Loop</i> (<i>Schedule</i>) e impressão dos resultados	49
Figura 4.2	Fluxograma do Cálculo Composicional, teste de estabilidade e <i>flash</i> .	50
Figura 4.3	Fluxograma do <i>Main Loop</i> : execução do <i>Schedule</i> (variações de Pressão/Vazão de contorno em função do tempo), chamada do cálculo implícito de pressão e composição e seleção do próximo passo de tempo dt	51
Figura 4.4	Fluxograma da implementação do método de <i>Newton Raphson</i> : definição das variáveis primárias, cálculo do vetor de Resíduos e da matriz Jacobiana, atualização das variáveis primárias e verificação da convergência ou da necessidade de quebra de passo de tempo	54
Figura 5.1	Fator de compressibilidade, Massa Específica e Viscosidade do fluido de Coats <i>et al.</i> (1986), submetido à temperatura de 40°C	61
Figura 5.2	Meio contínuo (acima) e esquema da rede de capilares equivalente (abaixo), com 10+2 nós.	62

Figura 5.3	Vazões volumétricas, totais e por fase, na entrada e na saída da rede reportadas respectivamente às pressões da entrada e da saída.	63
Figura 5.4	Pressão e Saturação dos nós da rede, nós 11 e 12 correspondem aos nós da saída e entrada respectivamente. A saturação de gás constante e igual a 100% em todos os nós confirma a premissa de que não houve condensação dentro do meio poroso	63
Figura 5.5	$\frac{P}{Z}$ versus Gp sugerindo comportamento linear e regressão dos pontos(excluindo-se os primeiros)	64
Figura 5.6	Saturação de gás e pressão globais da rede (à esquerda) e Erro de balanço de materiais (à direita) da solução numérica para a rede de 10+2 nós	64
Figura 5.7	Vazões volumétricas, totais e por fase, na entrada e na saída da rede reportadas respectivamente às pressões da entrada e da saída.	66
Figura 5.8	Pressão e Saturação dos nós da rede, nós 11 e 12 correspondem aos nós da saída e entrada respectivamente.	66
Figura 5.9	Gp versus $\frac{P}{Z}$ sugerindo comportamento linear e regressão dos pontos(excluindo-se os primeiros)	67
Figura 5.10	Saturação de gás e pressão globais da rede (à esquerda) e Erro de balanço de materiais (à direita) da solução numérica para a rede de 10+2 nós	67
Figura 5.11	Comparação da solução analítica normalizada (em círculos) com a solução normalizada da rede de 10+2 nós (em contínuo) para k_{medido} e $k_{teorico}$	69
Figura 5.12	Vazões na entrada e saída da rede de 10+2 nós, à esquerda, e erro de balanço de materiais da solução numérica, à direita	70
Figura 5.13	Pressão em cada nó da solução da rede de 10+2 nós	70
Figura 5.14	Comparação da frente de avanço da solução analítica e numérica, para meio volume poroso injetado após o regime permanente, para redes N_{Pe} iguais a 42, 82 e 162	72
Figura 6.1	Envelope de Fases com Linhas de Qualidade do Fluido apresentado na seção 5.1 obtido através do simulador termodinâmico comercial WINPROP(Winprop, 2010).	73
Figura 6.2	Fração molar de líquido (\mathcal{L}), compressibilidade total ($\nu_{liq}S_{liq} + \nu_{gas}S_{gas}$) e viscosidades do gás e do líquido de uma amostra do fluido apresentado em 5.1 submetida a diferentes condições de pressão para às temperaturas constantes de $5^{\circ}C$ e $30^{\circ}C$.	74
Figura 6.3	Rede 2D com $N_x N_y$ nós de meio poroso + 1 nó de entrada + 1 nó de saída, operada por pressão constante P_i na entrada e P_o na saída ($P_o < P_i$)	75

- Figura 6.4 Ensaio de despressurização a $5^{\circ}C$, $P_i = 112.8kgf/cm^2$ e $P_o = 112.7kgf/cm^2$: vazões molares totais e vazões volumétricas reportadas à pressão média da rede na entrada e saída, acima à esquerda; pressões e saturações médias globais da rede, acima à direita; composição global na entrada (em círculo) e na saída (em contínuo); erro de balanço de materiais para cada componente, abaixo à direita. 76
- Figura 6.5 Ensaio de despressurização a $30^{\circ}C$, $P_i = 119.3kgf/cm^2$ e $P_o = 119.2kgf/cm^2$: vazões molares totais e vazões volumétricas reportadas à pressão média da rede na entrada e saída, acima à esquerda; pressões e saturações médias globais da rede, acima à direita; composição global na entrada (em círculo) e na saída (em contínuo); erro de balanço de materiais para cada componente, abaixo à direita. 77
- Figura 6.6 Ensaio de despressurização a $30^{\circ}C$, $P_i = 99.3kgf/cm^2$ e $P_o = 99.2kgf/cm^2$: vazões molares totais e vazões volumétricas reportadas à pressão média da rede na entrada e saída, acima à esquerda; pressões e saturações médias globais da rede, acima à direita; composição global na entrada (em círculo) e na saída (em contínuo); erro de balanço de materiais para cada componente, abaixo à direita. 78
- Figura 6.7 Curvas de permeabilidade relativa gás-líquido obtidas a $5^{\circ}C$ (abaixo da T_c), gráfico superior à direita; e a $30^{\circ}C$ (acima da T_c), gráfico inferior à direita. Saturação e pressão globais médias, atingidas ao final de cada ensaio, obtidas a $5^{\circ}C$ gráfico superior à esquerda; e a $30^{\circ}C$, gráfico inferior à esquerda 79
- Figura 6.8 Fração molar de líquido (\mathcal{L}), Compressibilidade Total ($\nu_{liq}S_{liq} + \nu_{gas}S_{gas}$) e Viscosidades do Gás e do Líquido de uma amostra do fluido binário [77%C1 23%C4] submetida a diferentes condições de pressão para à temperatura constante de $20^{\circ}C$. 80
- Figura 6.9 Ensaio de despressurização a $20^{\circ}C$, $P_i = 90.6kgf/cm^2$ e $P_o = 90.5kgf/cm^2$: vazões molares totais e vazões volumétricas reportadas à pressão média da rede na entrada e saída, acima à esquerda; pressões e saturações médias globais da rede, acima à direita; composição global na entrada (em círculo) e na saída (em contínuo); erro de balanço de materiais para cada componente, abaixo à direita. 81
- Figura 6.10 Evolução temporal das pressões e saturações dos nós do meio poroso do ensaio de despressurização a $20^{\circ}C$. 82

- Figura 6.11 Evolução temporal das frações molares globais e do número de moles dos nós da rede 1D apresentada na Figura 5.2: $x_d = 0$ corresponde ao primeiro nó do meio poroso (nó 1 da Figura 5.2), $x_d = 1$ corresponde ao último nó do meio poroso (nó 10 da Figura 5.2), z_1 e N_1 são as frações molares globais e o número de moles do componente C1, z_2 e N_2 são as frações molares globais e o número de moles do componente C4 83
- Figura 6.12 Sub-rede genérica de rede 1D 83

Lista de símbolos

Símbolos gregos

$\bar{\nu}_i$	compressibilidade do material que contém o nó i
τ	índice de iteração do método de Newton para o cálculo implícito na pressão e nas composições
θ	índice de iteração do método de Newton para o cálculo de <i>flash</i>
φ	índice de iteração do método de Newton para o teste de estabilidade
ΔG_i	variação de energia livre de Gibbs da mistura contida no nó i
δ_{ks}	delta de Kronecker
ΔP_j	queda de pressão na aresta j
η_0^k	viscosidade a baixas pressões do componente k
η_0	viscosidade a baixas pressões da mistura
η_i	viscosidade da mistura à pressão P_i do nó i
η_{gas}	viscosidade da fase gás
η_{liq}	viscosidade da fase líquido
κ	permeabilidade absoluta da Lei de Darcy
λ_{km}	coeficiente de interação binária entre os componentes k e m
$\mu_k(\vec{y}_i)$	potencial químico do componente k da nova fase de composição \vec{y}_i contida no nó i
$\mu_k(\vec{z}_i)$	potencial químico do componente k da mistura monofásica de composição \vec{z}_i contida no nó i
ω_k	fator acêntrico do componente k
ϕ	porosidade do meio
$\phi_{gas}^{k,i}$	coeficiente de fugacidade do componente k da fase gás contida no nó i
$\phi_{liq}^{k,i}$	coeficiente de fugacidade do componente k da fase líquido contida no nó i
ξ_j^{gas}	densidade molar da fase gás que atravessa a aresta j
ξ_j^{liq}	densidade molar da fase líquido que atravessa a aresta j

Símbolos latinos

$(R_C)_i$	elemento do subvetor de vetor $\mathbf{R}(\mathbf{u})$ correspondente às condições de contorno dos termos-fonte do nó i quando aplicável
$(R_N)_i^k$	elemento do subvetor de vetor $\mathbf{R}(\mathbf{u})$ correspondente à equação do balanço molar para o componente k aplicada no nó i
$(R_V)_i$	elemento do subvetor de vetor $\mathbf{R}(\mathbf{u})$ correspondente à equação da consistência dos volumes aplicada no nó i
\bar{P}_i	pressão na qual foi medida a compressibilidade do material que contém o nó i
\dot{n}_j^k	vazão molar do componente k que atravessa a aresta j
\dot{n}_j	vazão molar total que atravessa a aresta j
\mathbf{C}	matriz de incidência
\mathbf{J}	matriz Jacobiana do método de Newton para o cálculo implícito na pressão e nas composições
\mathbf{J}_{flash}	matriz Jacobiana do método de Newton para o cálculo de <i>flash</i>
$\mathbf{J}_{stability}$	matriz Jacobiana do método de Newton para o teste de estabilidade
\mathcal{L}_i	fração molar total de líquido do nó i
$\mathbf{R}(\mathbf{u})$	vetor de resíduos da equação de atualização de \mathbf{u}
t	instante de tempo
\mathbf{u}	vetor de variáveis primárias N_i^k , P_i e s_i para cada nó i do cálculo implícito na pressão e nas composições através do Método de Newton
a_k	parâmetro a da equação de Peng Robinson para o componente k
b_k	parâmetro b da equação de Peng Robinson para o componente k
c_{ij}	elemento ij da matriz de incidência \mathbf{C}
$CONV_{min}$	velocidade de convergência mínima exigida, após se atingir $ITER_{max}$ iterações, para não se quebrar o passo de tempo
dN_i^k	variação da quantidade de moles do componente k no nó i

dN_{max}^k	maxima variação desejada da quantidade de moles do componente k em qualquer nó na rede
dP_i	variação da pressão no nó i
dP_{max}	maxima variação desejada da pressão em qualquer nó na rede
dt_{max}	máximo passo de tempo permitido
dt_{min}	mínimo passo de tempo permitido
EBM^k	erro de balanço de materiais por componente k
f_g^o	fugacidade do componente k na fase gás
f_k^o	fugacidade do componente k na fase óleo
G_p	produção acumulada de gás reportada à pressão atmosférica e a $20^\circ C$
$G_{inicial}$	volume inicial de gás contido no reservatório reportado à pressão atmosférica e a $20^\circ C$
$ITER_{max}$	número mínimo de iterações do método de Newton antes de ser verificada a velocidade convergência
J_{ks}^{flash}	elemento ks da matriz Jacobiana \mathbf{J}_{flash}
$J_{ks}^{stability}$	elemento ks da matriz Jacobiana $\mathbf{J}_{stability}$
j_{pq}	elemento pq da matriz Jacobiana \mathbf{J}
K_i^k	constante de equilíbrio de fases do componente k do fluido contido no nó i
L	comprimento garganta
N_{gas}^k	número de moles do componente k presente na fase gás
N_{liq}^k	número de moles do componente k presente na fase líquido
n_c	número de componentes
N_i	número total de moles do nó i
N_i^k	número de moles do componente k contido no nó i
n_p	número de fases
N_{aresta}	número total de arestas de uma rede
N_{no}	número total de nós de uma rede
P	pressão
P_{ck} ou P_c^k	pressão crítica do componente k

P_i	pressão do nó i
P_{rk} ou P_r^k	pressão reduzida do componente k
R	raio da garganta
$R(\mathcal{L}_i)$	função de Rachford Rice do fluido contido no nó i
$R_{flash}^k(K^k)$	elemento k do vetor de resíduos da equação de atualização de K^k
R_{flu}	constante universal dos gases
R_{int}	raio interno da garganta
$R_{stability}^k(Y^k)$	elemento k do vetor de resíduos da equação de atualização de Y^k
s_i^k	vazão molar do componente k inserida como termo fonte no nó i
S_g	saturação de gás
S_o	saturação de óleo
$ssiITER_{flash}$	número mínimo de iterações durante o <i>flash</i> para migrar do método das substituições sucessivas para o método de Newton
$ssiITER_{stability}$	número mínimo de iterações durante o teste de estabilidade para migrar do método das substituições sucessivas para o método de Newton
S_w	saturação de água
T	temperatura
T_{cmix}	temperatura pseudo-crítica da mistura
T_{ck} ou T_c^k	temperatura crítica do componente k
T_{rk} ou T_r^k	temperatura reduzida do componente k
u_{gas}	velocidade da fase gás
u_{liq}	velocidade da fase líquido
V_i^{gas}	volume da fase gás contido no nó i
V_j^{gas}	volume da fase gás contido na aresta j
V_i^{liq}	volume da fase líquido contido no nó i
V_j^{liq}	volume da fase líquido contido na aresta j
v_k	fator de correção de volume para o componente k

V_i	volume do nó i
x_k	fração molar do componente k na fase óleo
y_k	fração molar do componente k na fase gás
Z^{gas}	fator de compressibilidade da fase gás
Z^{liq}	fator de compressibilidade da fase líquido
z_k	fração molar global do componente k
g_j^{gas}	condutância hidráulica da fase gás da aresta j
g_j^{liq}	condutância hidráulica da fase líquido da aresta j
q_j^{gas}	vazão volumétrica de gás que atravessa a aresta j
q_j^{liq}	vazão volumétrica de líquido que atravessa a aresta j
S_j^{gas}	saturação de gás da aresta j
S_j^{liq}	saturação de líquido da aresta j

1

Introdução

O fenômeno da condensação retrógrada, durante a produção de reservatórios de gás-condensado, é comumente observado nas intermediações de poços produtores que operam com pressão de fundo inferior à pressão de orvalho. O líquido condensado bloqueia parcialmente os canais de escoamento do gás, reduzindo sua produtividade (Barnum *et al.*, 1995).

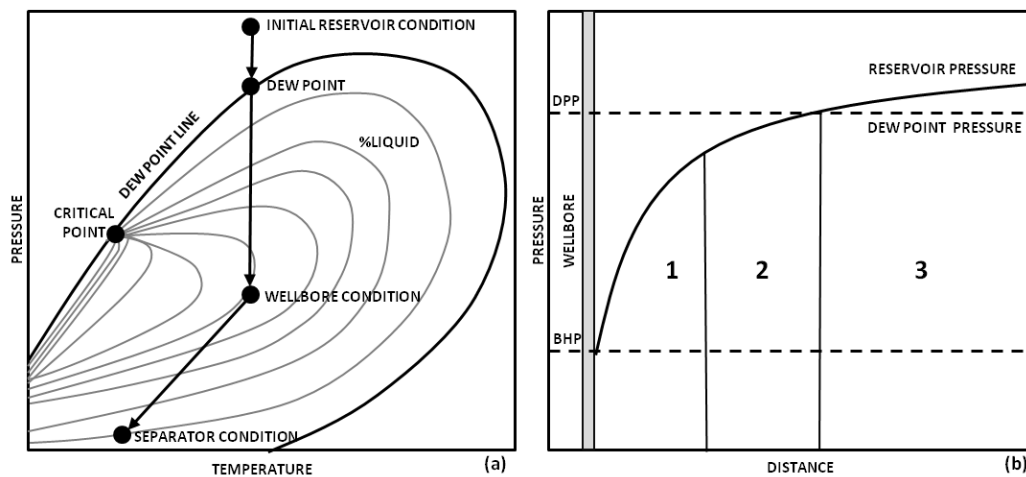


Figura 1.1: (a) Envelope de fases em um reservatório de gás condensado e (b) o perfil de pressão a partir do poço em produção, operando com pressão de fundo (BHP) abaixo do pressão de orvalho (DPP)

Reservatórios, originalmente de gás, que produzem no regime ilustrado pela Figura 1.1 podem ser divididos em 3 regiões principais:

- Região afastada do poço, número 3, onde a pressão ainda está acima do ponto de orvalho e o escoamento de gás é monofásico
- Região intermediária, número 2, onde a pressão começa a ficar abaixo do ponto de orvalho e as primeiras gotas de líquido são formadas, porém apenas a fase gasosa é móvel
- Região próxima ao poço, número 1, onde a pressão já está bem abaixo da pressão de orvalho e o líquido já satura o meio poroso suficientemente para escoar junto com o gás (saturação crítica)

Em uma abordagem macroscópica, o bloqueio por condensado é modelado utilizando a Lei de Darcy e curvas de permeabilidade relativa gás-líquido,

como mostra a Figura 1.2. Embora imóveis, as primeiras gotas de condensado já bloqueiam os canais de fluxo de gás, diminuindo sua permeabilidade relativa mesmo antes do condensado atingir sua saturação crítica. Essa perda de mobilidade do gás faz a pressão cair ainda mais, liberando mais líquido que, por sua vez, pode se tornar móvel (saturação superior à crítica) e escoar para o poço juntamente com gás.

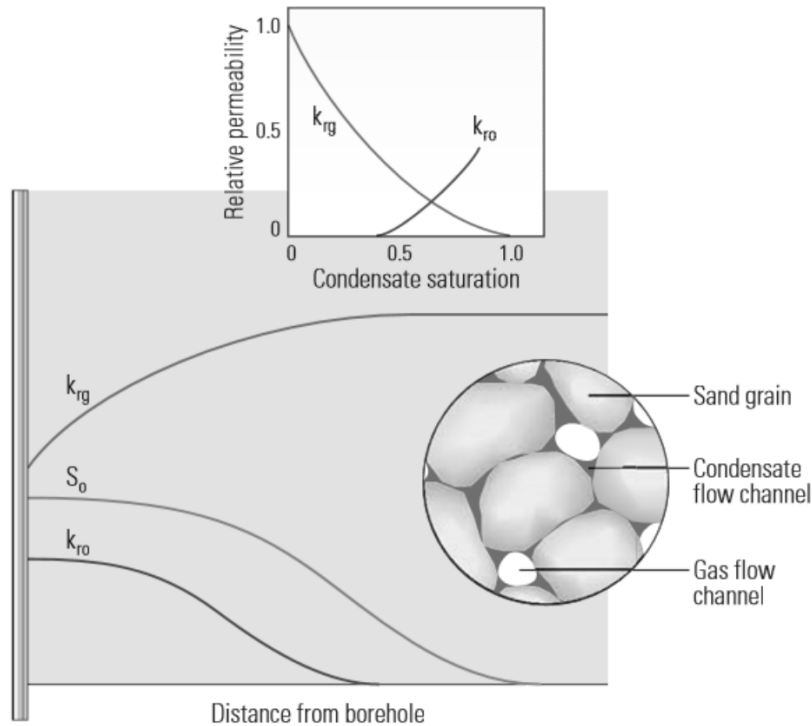


Figura 1.2: Curvas de permeabilidade relativa e sua correspondência espacial a partir do poço (Fan *et al.*, 2005)

O conhecimento das curvas de permeabilidade relativa é fundamental tanto para avaliar a economicidade da jazida, como para conceber as melhores estratégias de recuperação de hidrocarbonetos nesses reservatórios. Para uma melhor compreensão dos fatores que condicionam essas curvas é necessário um simulador que represente, na escala de poros, os fenômenos envolvidos.

Modelos de rede de capilares vêm sendo largamente utilizados para estudar o escoamento multifásico na escala de poro. Nesses modelos, os poros das rochas são representados por nós conectados por arestas que, por sua vez, representam as gargantas. Aplicando as regras que governam o transporte em um volume de controle adequado, são obtidos o valor da pressão nos poros e a vazão através das gargantas. A partir desses valores é possível estimar alguns parâmetros macroscópicos essenciais à simulação convencional de reservatórios, como as permeabilidades absoluta e relativa.

A simulação composicional torna-se necessária quando o processo de recuperação de hidrocarbonetos é sensível a mudanças na composição de suas fases ao longo da vida produtiva do reservatório. Essa técnica consiste em resolver as equações de fluxo para cada componente em cada fase do sistema (Branco *et al.*, 1996). A figura 1.3 sugere a classe de simulador para cada região do envelope de fases em um diagrama (P, T) : os simuladores composicionais são os mais adequados para modelar o escoamento de hidrocarbonetos nas proximidades do ponto crítico; os térmicos, por incluírem Equação de Conservação da Energia, permitem modelar a recuperação de óleos pesados através de métodos térmicos; e os *black-oil*, devido a sua simplicidade e eficiência, permitem modelar todo o espectro restante. Simplificadamente, os problemas de reservatório que exigem tratamento composicional se dividem em dois tipos. O primeiro é a depleção de reservatórios de óleo volátil e de gás e condensado. O segundo é a injeção miscível com miscibilidade de múltiplo contato gerada *in situ* (Coats *et al.*, 1980).

Trabalhos sobre modelagem em escala de poro de reservatórios de gás-condensado não são frequentemente encontrados na literatura (Wang *et al.*, 2000). Se considerada a abordagem composicional, a mais adequada para essa classe de problema como indica a Figura 1.3, a frequência de trabalhos encontrados é ainda menor.

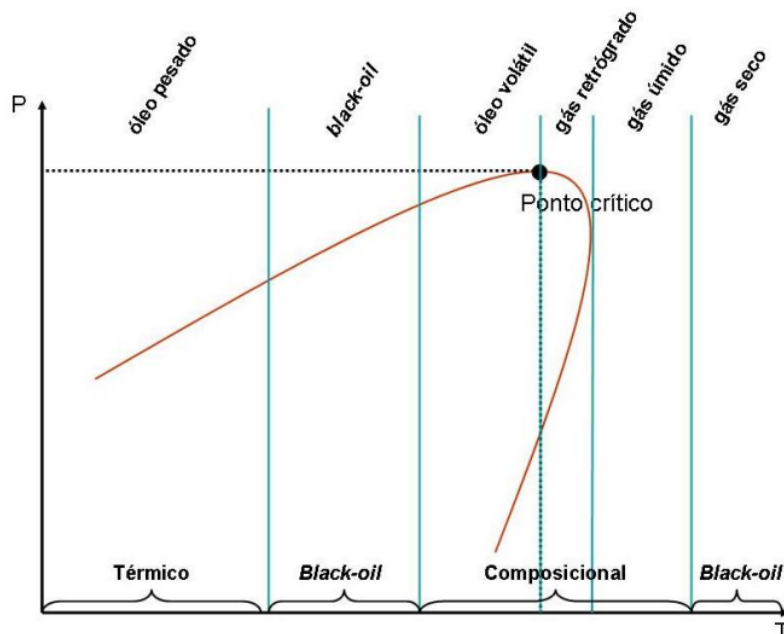


Figura 1.3: Resumo das aplicações de modelos de simulação de reservatórios no diagrama de fases pressão-temperatura. (Ertekin *et al.*, n.d.)

1.1

Objetivo

O objetivo principal deste estudo é a concepção de uma primeira versão de um simulador de rede de capilares com tratamento composicional, cujas propriedades de fluxo são governadas por uma equação de estado cúbica. As equações de conservação são aplicadas para cada componente em um volume de controle correspondente aos poros. Duas fases de hidrocarbonetos são consideradas, uma líquida e outra gasosa, e a equação de estado também é utilizada para modelar o trânsito dos componentes entre elas. A compressibilidade destas fases está implícita na equação de estado, enquanto a viscosidade é calculada através de correlação a partir da pressão, temperatura e composição de cada uma. Não é considerada a fase água e o meio poroso é admitido como pouco compressível. Nessa versão, os efeitos gravitacionais são desconsiderados e o padrão de escoamento nas gargantas é considerado anular. A solução do problema é obtida numericamente através do método de Newton-Raphson.

1.1.1

Resumo dos Capítulos

A motivação e o objetivo desse trabalho foram apresentados neste primeiro capítulo.

O segundo capítulo apresenta uma revisão bibliográfica subdividida em duas partes: uma sobre uso de modelos de redes de capilares em problemas de gás-condensado e outra sobre algumas formulações de simuladores composicionais em escala contínua.

O terceiro capítulo mostra a modelagem matemática do problema composicional na escala de poros: descrição do meio poroso e definição das variáveis, equação de estado, equilíbrio de fases e teste de estabilidade. De posse da composição de cada fase, são calculadas propriedades como viscosidade e as condutâncias hidráulicas para o regime bifásico, para então resolver as equações de fluxo, que são consequência de um balanço molar feito em cada nó.

O quarto capítulo descreve a modelagem numérica da formulação apresentada no capítulo anterior: a discretização das equações de fluxo e a solução do problema não linear para as pressões e para o número de moles de cada componente em todos os nós, a cada passo de tempo.

No quinto capítulo o modelo de fluido e de escoamento são validados. O equilíbrio de fases e o cálculo de propriedades do transporte do modelo de fluido são comparados com os resultados de um simulador termodinâmico comercial. O modelo de fluxo é verificado contra problemas clássicos que possuem solução analítica.

O sexto capítulo traz um exemplo de aplicação do modelo: a obtenção de curvas de permeabilidade relativa gás-líquido através da despressurização de um meio poroso contendo o fluido testado no quarto capítulo.

No sétimo capítulo são apresentadas as conclusões sobre esse trabalho, bem como sugestões para trabalhos posteriores.

2

Revisão Bibliográfica

O *framework* padrão usado para descrever o fluxo bifásico no meio poroso, o qual inclui o caso de gás-condensado, é baseado na lei de Darcy multiplicada por um fator de redução conhecido como permeabilidade relativa. A permeabilidade relativa geralmente é considerada dependente apenas da saturação, hipótese que não diverge muito da realidade quando o padrão de escoamento é dominado por forças capilares (Jamiolahmady *et al.*, 2000). Henderson *et al.* (1998), a partir de ensaios em plugues, concluíram que a permeabilidade relativa de ambas as fases no escoamento de gás retrógrado crescia com o aumento da vazão, relação que se atenuava à medida que a tensão interfacial era incrementada, ou seja, quando se aumentava a contribuição de forças capilares. Tornou-se claro que o comportamento do escoamento de gás-condensado nas intermediações dos poços produtores, onde as velocidades são maiores, é determinado pelo balanço entre forças capilares e viscosas. Nesse contexto, uma modelagem, na escala de poros, do fluxo e do transporte que ocorrem nos sistemas gás-condensado torna-se importante por permitir estudar o escoamento/bloqueio nas gargantas dos poros. Adicionalmente esses modelos devem permitir o aparecimento e o desaparecimento de fase, conforme observado no campo e em experimentos de laboratório.

2.1

Modelo de Rede de Capilares

Modelos em escala contínua não representam os processos físicos na micro escala, mas apenas suas consequências macroscópicas. Os fenômenos na escala de poros são representados por parâmetros ou funções globais, como as curvas de pressão capilar e de permeabilidade relativa. A necessidade de melhor compreender o escoamento multifásico no meio poroso sob efeitos de forças capilares, viscosas e gravitacionais, levou ao desenvolvimento de simuladores na escala de poros. Esses modelos buscam representar a geometria e a topologia do meio poroso e resolver equações de fluxo em um determinado domínio. Dentre os modelos convencionais na escala de poros destacam-se os Modelos de Rede de Capilares (Joekar-Niasar & Hassanizadeh, 2012).

Os modelos de rede de capilares consideram simplificações da geometria do espaço poroso, representando-a através de uma rede de poros conectados por gargantas. Nessa abordagem, leis macroscópicas, como a Lei de Darcy, não são utilizadas diretamente mas são consequência de propriedades médias na escala de poros. Bryant & Blunt (1992) foram os primeiros a implementar um modelo de rede derivado de um meio poroso real. Eles inferiram uma rede a partir de um empacotamento aleatório de esferas com mesmo diâmetro. O modelo conseguiu fornecer previsões de permeabilidade relativa que foram confirmados com experimentos em pacotes de areia, pacotes de esferas e arenitos. Øren & Bakke (2003) reconstruíram um meio poroso real 3D. A partir de imagens microtomográficas, extraíram uma rede para estimar permeabilidade, condutividade, pressão capilar e permeabilidade relativa.

Fang *et al.* (1996) construíram um modelo de rede 2D vertical de tubos de seção circular, cujos raios seguiam uma distribuição log-normal, para estimar a saturação crítica de condensado (saturação a partir da qual a fase líquida torna-se móvel). Inicialmente a rede era totalmente saturada com gás acima do ponto de orvalho. A pressão da rede era então reduzida e as primeiras gotas eram depositadas nos tubos de menor raio (para substâncias puras a pressão de vapor diminui com a redução do raio de curvatura da interface (Princen, 1992)). Uma vez depositadas as gotas, e assumindo que a tensão interfacial era alta o suficiente para que o ângulo de contato fosse maior que zero, uma ponte de condensado de altura h era formada nos tubos verticais. A ponte era estável e só passava a escoar, devido a efeitos gravitacionais, quando o valor de h superava um limite gerado por forças capilares. A formação da pontes também ocorria nos tubos horizontais, porém essas eram estáveis até atingirem as intersecções - que possuíam regras específicas de fluxo - com os tubos verticais. O volume de condensado que escorria até o final da rede era subtraído do total de condensado formado e essa quantidade era então dividida pelo volume da rede, obtendo-se a Saturação Crítica de Condensado, S_{cc} . Ao final do trabalho concluiu-se que S_{cc} aumentava com o aumento da tensão interfacial - IFT- e do ângulo de contato. Comparando esse experimento a uma drenagem e a uma embebição água-óleo para uma mesma rede, também foi estabelecida diferenças entre a Saturação Crítica de Condensado e a Saturação de Óleo Residual: enquanto esta era independente da tensão interfacial (a partir de certo valor de IFT), aquela continuava sendo função desse parâmetro.

Posteriormente Li *et al.* (2000) incluíram o efeito de forças viscosas no trabalho de Fang *et al.* (1996) e conseguiram desenvolver um modelo de permeabilidade relativa para o sistema gás-condensado. Eles utilizaram a lei de Hagen-Poiseuille, para o deslocamento tipo pistão de gás-condensado, como

forma de representar o efeito de forças viscosas entre os nós. Uma vez conhecida a distribuição da saturação de condensado ao longo da rede, uma condutância equivalente efetiva era calculada para cada fase. A razão dessa condutância pela condutância total da rede correspondia a um ponto da curva de permeabilidade relativa. Os estudos concluíram que a Saturação Crítica de Condensado era reduzida por efeitos gravitacionais, que se tornavam pouco relevantes na presença de altas tensões interfaciais ou altos ΔP 's aplicados sobre a rede (forças viscosas predominantes). Embora forças viscosas também influenciem S_{cc} , especialmente a baixas IFT's, o efeito da molhabilidade (representada pelo ângulo de contato) foi considerado o mais preponderante: quanto mais molhável ao gás menor S_{cc} . Influência da mesma natureza foi observada nas curvas de permeabilidade relativa, que foram confirmadas por dados experimentais.

Bustos & Toledo (2003) desenvolveram um modelo mecanicista de condensação retrógrada numa rede 3D sob efeitos gravitacionais. A maioria dos mecanismos implementados foi baseada em observações de experimentos em micro-modelos de vidro. Assim como no modelo de Fang *et al.* (1996), enquanto a pressão da rede se reduzia, pequenas quantidades de condensado eram adicionadas às gargantas a cada instante, que deixaram de ser cilíndricas e passaram a ter seção poligonal. Assim como em Fang *et al.* (1996), uma vez depositado, o condensado permanecia líquido em todas as pressões, ou seja, a revaporização não era permitida. A fase líquida se acumulava na cunhas das gargantas enquanto a pressão capilar fosse maior que a pressão de *snap-off*, momento no qual uma ponte de líquido era formada. As condutâncias hidráulicas das gargantas eram calculadas por uma associação em série dos sistemas gás-condensado das cunhas e das pontes. Ao contrário de Li *et al.* (2000), um balanço de massa nodal foi resolvido para se obter as curvas de permeabilidade relativa: as pressões eram impostas nas extremidades superior e inferior da rede, o campo de pressões era resolvido para todos os nós da rede e a vazão de cada fase era obtida. Uma simulação de Monte Carlo foi utilizada para analisar a sensibilidade dessas curvas quanto ao formato e a distribuição do tamanho de poro. Concluiu-se que a curva de permeabilidade relativa do gás possui uma assinatura em forma de "s invertido" caracterizando 2 regimes distintos: no primeiro a saturação de condensado ainda é baixa e o líquido está presente somente nas cunhas das gargantas e no segundo, quando em altas saturações, o condensado forma pontes diminuindo abruptamente a permeabilidade relativa do gás. Esta também mostrou-se bastante sensível ao formato e a distribuição do tamanho de poro. A permeabilidade relativa do condensado, todavia, apresentou comportamento linear e crescente com a saturação e pouco sensível aos parâmetros anteriormente citados.

Poucos trabalhos de rede de capilares foram desenvolvidos considerando tratamento composicional, aparecimento de fase e subsequente transporte. Chang & Lindquist (2013) apresentaram um modelo de rede de capilares para um fluido composicional composto por água e dióxido de carbono. O modelo era bifásico e considerava a fase líquida incompressível. A formulação consistia em um balanço molar nodal de cada componente nas duas fases e assumia-se que estas atingiam o equilíbrio termodinâmico dentro de cada passo de tempo. A pressão era imposta na entrada e na saída da rede e o problema numérico era resolvido de forma sequencial: primeiro era resolvida a equação da pressão, então eram obtidas as vazões de cada fase pela lei de Hagen-Poiseuille e atualizadas as concentrações de cada componente. Por último era feito o cálculo de equilíbrio de fases e eram atualizadas as saturações e novamente as concentrações. A natureza explícita do método numérico empregado exigiu passos de tempo muito pequenos, onerando o tempo de simulação. Foge ao escopo desse presente estudo discutir as conclusões sobre a física do trabalho de Chang & Lindquist (2013), dedicado ao estudo do descarte de dióxido de carbono em aquíferos.

Nenhum modelo de rede de capilares com tratamento composicional utilizando equação de estado para fluidos reais, considerando aparecimento de fase e subsequente transporte foi encontrado na literatura.

2.2 Simulação Composicional

Simulação composicional é uma técnica que permite modelar o escoamento dos componentes do fluido do reservatório em função do tempo e do espaço, além de calcular o equilíbrio entre as diferentes fases. O balanço de massa (ou balanço molar) é aplicado para cada um dos n_c componentes, tais como metano, propano, etc. É assumido equilíbrio termodinâmico de cada componente presente nas n_p fases do fluido, ou seja, o metano da fase líquida é assumido estar em equilíbrio termodinâmico com o metano da fase gasosa, por exemplo. Através das seguintes simplificações:

- ausência de forças capilares, não permitindo diferença de pressão entre as fases,
- n_c componentes presentes nas fases óleo e gás e em equilíbrio termodinâmico,
- fase água existente somente no estado líquido e não trocando componentes com as fases óleo e gás,

chega-se a um sistema de, para cada volume de controle, $2n_c + 4$ incógnitas:

- $x_1, x_2 \dots x_{n_c}$: n_c frações molares (número de moles do componente dividido pelo número de moles totais) de cada componente da fase óleo
- $y_1, y_2 \dots y_{n_c}$: n_c frações molares (número de moles do componente dividido pelo número de moles totais) de cada componente da fase gás
- P, S_o, S_g, S_w : Pressão e Saturações de óleo, gás e água

e $2n_c + 4$ equações

- n_c equações de balanço molar, uma para cada componente hidrocarboneto
- $f_k^o = f_k^g, k = 1, \dots, n_c$: n_c igualdade das fugacidades (a condição de equilíbrio termodinâmico é assumida) entre cada componente das 2 fases
- 1 equação de balanço de massa para a água
- $S_o + S_g + S_w = 1$: restrição de volume
- $\sum_{k=1}^{n_c} x_i = 1$ e $\sum_{k=1}^{n_c} y_i = 1$: restrição das frações molares

O problema matemático geral consiste em um sistema de $(n_p - 1)n_c + n_p + 1$ equações (onde n_c é o número de componentes e n_p é o número de fases presentes no sistema) e $(n_p - 1)n_c + n_p + 1$ incógnitas (Santos, 2013). As diversas formulações composicionais existentes se diferem pelo modo como resolvem o problema acima, quais variáveis são tratadas explicitamente ou implicitamente, quais equações são eliminadas, etc.

Fussell *et al.* (1978) foram os primeiros autores a introduzir uma equação de estado para calcular o equilíbrio entre fases em um simulador de reservatórios (Wong & Aziz, 1988). A equação de estado Redlich-Kwong modificada (Zudkevitch & Joffe, 1970) foi utilizada para prever o comportamento dos hidrocarbonetos. Diferentemente das demais formulações a seguir, eles utilizaram o método de Newton-Raphson para resolver simultaneamente as equações de equilíbrio de fase e as restrições de saturação, em função da pressão e das composições de uma das fases. As variáveis primárias eram P , \mathcal{L} (fração molar hidrocarbonetos na fase líquida) e $x_2, x_3 \dots x_{n_c}$ (se o volume de controle contiver predominantemente gás) ou P , \mathcal{V} (fração molar hidrocarbonetos na fase gasosa) e $y_2, y_3 \dots y_{n_c}$ (se o volume de controle contiver predominantemente líquido).

Coats *et al.* (1980) propôs uma formulação totalmente implícita e, assim como Fussell *et al.* (1978), utilizou a equação de estado Redlich-Kwong modificada (Zudkevitch & Joffe, 1970). No entanto, após um esquema de eliminação de Gauss, o método de Newton-Raphson era empregado para resolver as equações de balanço molar em função da pressão, saturação de gás, saturação de óleo e composições de uma das fases. As $n_c + 1$ variáveis primárias eram P , S_o , S_g e $y_3, y_4 \dots y_{n_c}$ (para volumes de controle bifásicos), P , S_g e $y_1, y_2 \dots y_{n_c-1}$ (para volumes de controle contendo somente gás) ou P , S_o e $x_1, x_2 \dots x_{n_c-1}$ (para volumes de controle contendo somente óleo). Por ser totalmente implícita, logo incondicionalmente estável, a abordagem permitia o

uso de passos de tempo maiores, entretanto aumentava o esforço computacional uma vez que a matriz Jacobiana do método de Newton continuava grande.

Collins *et al.* (1992) desenvolveram uma formulação totalmente implícita que desacoplava as condições de equilíbrio de fase das equações de balanço de materiais. O método de Newton Raphson era usado para calcular simultaneamente as pressões e o número de moles de cada componente e então o equilíbrio de fases era calculado obtendo-se as saturações e as frações molares das fases. Adicionalmente, seu algoritmo permitia resolver o problema implicitamente em apenas algumas células, resolvendo explicitamente as demais e ganhando eficiência computacional.

Branco *et al.* (1996) apresentaram uma formulação composicional semi-implícita: as composições dos termos de escoamento eram tratadas explicitamente, defasadas de uma iteração, e a próxima iteração do método de Newton era chamada para resolver o sistema para a pressão e as saturações. No entanto as composições dos termos fonte e de acumulação continuavam sendo tratadas implicitamente, conferindo à formulação nível de implicitude intermediário entre IMPEC (implícito nas pressões e explícito nas composições) e totalmente implícito. A estrutura da matriz Jacobiana dessa formulação permitia a redução do sistema para 3 equações e 3 incógnitas para cada volume de controle, independente do número de componentes do sistema. A equação de estado Peng-Robinson (Peng & Robinson, 1976) foi utilizada para prever o comportamento dos hidrocarbonetos.

3

Modelagem Composicional em Redes de Capilares

Para estudar o escoamento de gás e condensado no meio poroso foi construído um modelo de rede de capilares composicional, e considerando as fases líquida e gasosa da mistura dos componentes e desconsiderando a fase água. Essa modelagem tem como premissas:

- sistema isotérmico
- escoamento bifásico anular de Hagen-Poiseuille nas gargantas
- equilíbrio termodinâmico local
- meio poroso pouco compressível
- ausência de reações químicas
- duas fases permitidas: uma líquida e uma gasosa
- ausência de escoamento nas bordas do meio poroso
- ausência de pressão capilar
- ausência de efeitos gravitacionais

3.1

Descrição do Meio Poroso

O meio poroso, que é um conjunto de poros conectados por capilares, pode ser representado por uma rede equivalente de nós conectados por arestas, como mostra a Figura 3.1. O transporte de fluidos no meio poroso depende tanto da topologia e da geometria da rede como das propriedades dos fluidos e sua interação com a matriz sólida

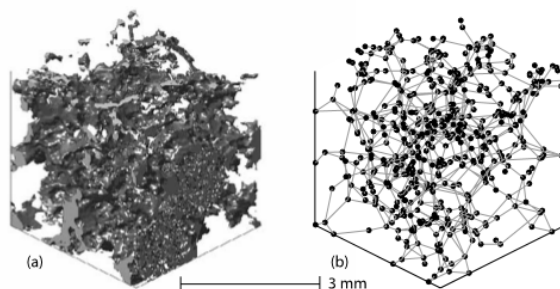


Figura 3.1: (a) Imagem 3D de um arenito e sua (b) representação topologicamente equivalente de rede (Valvatne & Blunt, 2004).

Nesse trabalho, cada nó i , definido como o volume de controle determinado pela área tracejada da Figura 3.2, terá como propriedades:

- P_i : Pressão
- V_i : Volume que corresponde à soma dos volumes de metade dos capilares que partem do nó i , conforme indica área tracejada da Figura 3.2
- $N_i^1, N_i^2 \dots N_i^{nc}$: Número de moles de cada componente
- $s_i^1, s_i^2 \dots s_i^{nc}$: Termos-fonte de cada componente

E a cada aresta j caberá:

- S_j^{gas} e S_j^{liq} : Saturação de gás e de líquido
- q_j^{gas} e q_j^{liq} : Vazões volumétricas de gás e líquido que passam pela aresta j
- g_j^{gas} e g_j^{liq} : Condutâncias hidráulicas da fase gás e líquida, definidas como $g_j^{gas} = q_j^{gas} / \Delta P_j$ e $g_j^{liq} = q_j^{liq} / \Delta P_j$, onde ΔP_j é a diferença de pressão entre nós que definem a aresta j . Para o exemplo da Figura 3.2, $\Delta P_j = P_{i+1} - P_i$. O método de cálculo das condutâncias será abordado em uma seção específica desse texto.

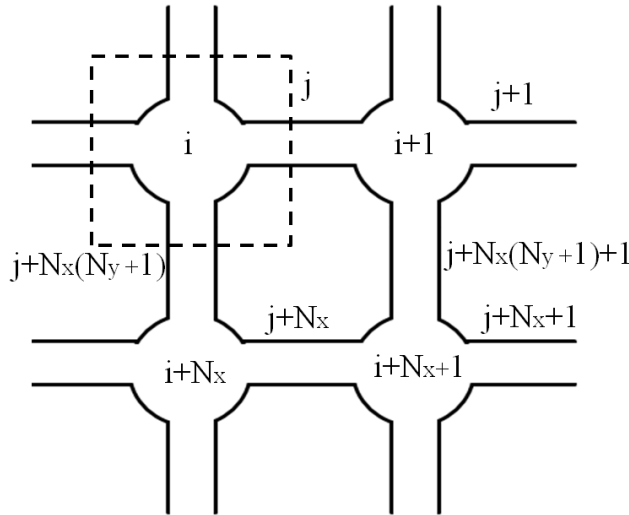


Figura 3.2: Descrição de uma rede 2D, com $N_x N_y$ nós, simplificada: nós com índice i e arestas com índice j

A conectividade da rede é dada pela matriz de incidência C . Os elementos c_{ij} são definidos tais que:

$$c_{ij} = \begin{cases} 0: & \text{aresta } j \text{ não conecta nó } i \\ +1: & \text{aresta } j \text{ sai do nó } i \\ -1: & \text{aresta } j \text{ entra no nó } i \end{cases} \quad (3.1)$$

Através da matriz de incidência \mathbf{C} são obtidas todas as quedas de pressão entre os nós. Em outras palavras, para cada aresta j tem-se:

$$\Delta P_j = \sum_{i=1}^{N_{no}} c_{ij} P_i \quad (3.2)$$

3.2

Equação do Balanço Molar

Pela definição das condutâncias hidráulicas, introduzindo o conceito de densidade molar ξ (número total de moles por volume em cada fase), cujo cálculo será detalhado mais adiante, e admitindo padrão de escoamento anular das fases, são obtidas as vazões molares totais que passam por cada aresta j :

$$\dot{n}_j = (\xi_j^{gas} g_j^{gas} + \xi_j^{liq} g_j^{liq}) \sum_{i=1}^{N_{no}} c_{ij} P_i \quad (3.3)$$

A equação 3.3 pode ser reescrita para cada componente $k = 1, \dots, n_c$ com o uso das frações molares da fase líquida x_k e gasosa y_k :

$$\dot{n}_j^k = (y_j^k \xi_j^{gas} g_j^{gas} + x_j^k \xi_j^{liq} g_j^{liq}) \sum_{i=1}^{N_{no}} c_{ij} P_i \quad (3.4)$$

A equação do balanço molar corresponde à soma líquida das correntes molares, definidas na equação 3.4, acrescida dos termos-fonte $s_i^1, s_i^2 \dots s_i^{n_c}$, para cada nó i :

$$\frac{\partial N_i^k}{\partial t} = - \sum_{j=1}^{N_{aresta}} c_{ij} [(y_j^k \xi_j^{gas} g_j^{gas} + x_j^k \xi_j^{liq} g_j^{liq}) \sum_{m=1}^{N_{no}} c_{mj} P_m] + s_i^k \quad (3.5)$$

3.3

Equação de Estado

A formulação composicional deste estudo utiliza a equação de estado de Peng e Robinson (Peng & Robinson, 1976) para o cálculo do equilíbrio de fases e das propriedades do fluido.

$$P = \frac{R_{flu} T}{\bar{V} - b} - \frac{a(T)}{\bar{V}(\bar{V} + b) + b(\bar{V} - b)} \quad (3.6)$$

A equação 3.6, que deriva da equação de Van der Waals, possui dois parâmetros $a(T)$ e b , que podem ser obtidos através de regras de mistura:

$$a(T) = \sum_{k=1}^{n_c} \sum_{m=1}^{n_c} z_k z_m \sqrt{a_k a_m} (1 - \lambda_{km}) \quad (3.7)$$

$$b = \sum_{k=1}^{n_c} z_k b_k \quad (3.8)$$

Onde z_k são as frações molares de cada componente k da mistura; λ_{km} é o coeficiente de interação binária entre componentes k e m ; e a_k e b_k são os parâmetros da equação para os componentes puros, calculados da seguinte forma:

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{0.45724 R_{flu}^2 T_{ck}^2}{P_{ck}} \alpha_k \\ \alpha_k &= (1 + (0.37464 + 1.54226 \omega_k - 0.26992 \omega_k^2)(1 - T_{rk}^{0.5}))^2 \\ T_{rk} &= \frac{T_k}{T_{ck}} \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$b_k = \frac{0.07780 R_{flu} T_{ck}}{P_{ck}} \quad (3.10)$$

T_{ck} , P_{ck} e ω_k são a temperatura crítica, pressão crítica e fator acêntrico de cada componente k respectivamente.

Introduzindo o fator de compressibilidade $Z = \frac{P\bar{V}}{R_{flu}T}$ a equação 3.6 pode ser reescrita da forma:

$$\begin{aligned} Z^3 - (1 - B) Z^2 + (A - 2B - 3B^2) Z - (AB - B^2 - B^3) &= 0 \\ A = \frac{aP}{R_{flu}^2 T^2} \quad e \quad B = \frac{bP}{R_{flu}T} \end{aligned} \quad (3.11)$$

O polinômio 3.11 pode possuir:

- 3 soluções reais, sendo que a maior é atribuída à fase gás, a menor à líquida e a intermediária descartada
- 1 solução real que é aproveitada e 2 imaginárias que são descartadas

Para essa equação de estado, os coeficientes de fugacidade ϕ_k , que serão abordados mais adiante na imposição da condição de equilíbrio termodinâmico,

para cada componente $k = 1, \dots, n_c$ são calculados da seguinte forma:

$$\ln(\phi_k) = \frac{b_k}{b}(Z-1) - \ln(Z-B) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left(\frac{2}{a} \sum_{m=1}^{n_c} (z_m a_{km}) - \frac{b_k}{b} \right) \ln \left[\frac{Z + (1 + \sqrt{2})B}{Z + (1 - \sqrt{2})B} \right]$$

$$a_{km} = \sqrt{a_k a_m} (1 - \lambda_{km}) \quad (3.12)$$

3.4

Equação da Consistência dos Volumes

A Equação da Consistência dos Volumes tem origem na hipótese de que o volume de um nó é totalmente preenchido pelas duas fases do fluido que o ocupa. Escrevendo os volumes das fases líquida e gasosa em função de N_i^{liq} , N_i^{gas} , P_i e T_i , através da Equação de Estado, e definindo $N_i = \sum_{k=1}^{n_c} N_i^k$ e $\mathcal{L}_i = N_i^{liq}/N_i$ temos:

$$\begin{aligned} V_i &= V_i^{liq} + V_i^{gas} \Rightarrow \\ &= N_i^{liq} \left(\frac{Z_i^{liq} R_{flu} T}{P_i} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k x_k \right) + N_i^{gas} \left(\frac{Z_i^{gas} R_{flu} T}{P_i} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k y_k \right) \Rightarrow \\ &= N_i \left[\mathcal{L}_i \left(\frac{Z_i^{liq} R_{flu} T}{P_i} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k x_k \right) + (1 - \mathcal{L}_i) \left(\frac{Z_i^{gas} R_{flu} T}{P_i} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k y_k \right) \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde $\sum_{k=1}^{n_c} v_k x_k$ e $\sum_{k=1}^{n_c} v_k y_k$ correspondem às correções de volume das fases líquida e gasosa. A equação 3.13 é uma variação de $S_j^{gas} + S_j^{liq} = 1$.

Admitindo que o material que contém o nó i é pouco compressível e possui compressibilidade \bar{v}_i medida na pressão \bar{P}_i

$$\begin{aligned} \bar{v}_i &= \frac{1}{V_i} \frac{\partial V_i}{\partial P_i} \Rightarrow \\ \bar{v}_i &\approx \frac{1}{\bar{V}_i} \frac{V_i - \bar{V}_i}{P_i - \bar{P}} \Rightarrow \\ V_i &\approx \bar{V}_i [1 + \bar{v}_i (P_i - \bar{P})] \end{aligned} \quad (3.14)$$

Igualando as equações 3.13 e 3.14 e rearranjando os termos para que a equação final tenha dimensão de número de moles, tem-se:

$$N_i - \frac{\bar{V}_i [1 + \bar{v}_i (P_i - \bar{P})]}{\mathcal{L}_i \left(\frac{Z_i^{liq} R_{flu} T}{P_i} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k x_k \right) + (1 - \mathcal{L}_i) \left(\frac{Z_i^{gas} R_{flu} T}{P_i} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k y_k \right)} = 0 \quad (3.15)$$

3.5

Equilíbrio de Fases

Denomina-se *flash* o cálculo de separação de fases e componentes de uma dada mistura, fixando-se pressão e temperatura. Em um nó i com N_i^k moles de cada $k = 1, \dots, n_c$ componente, são definidas $z_i^k = N_i^k / (\sum_{k=1}^{n_c} N_i^k)$ como as frações molares totais, x_i^k as frações molares na fase líquida e y_i^k as frações molares na fase gasosa.

O problema consiste em calcular, assumindo P_i e T_i constantes, qual fração \mathcal{L}_i dos N_i moles totais (com composição z_i^k) pertence à fase líquida e qual é sua composição x_i^k , assim como qual fração $1 - \mathcal{L}_i$ pertence à fase gasosa e qual é sua composição y_i^k .

Uma vez que dos N_i^k moles, para cada componente k , parte está na líquida e o complementar dessa parte está na fase gasosa, é possível escrever:

$$\begin{aligned}
 N_i^k &= N_{i_{liq}}^k + N_{i_{gas}}^k \Rightarrow \\
 z_i^k &= \frac{N_{i_{liq}}^k \frac{\sum_{k=1}^{n_c} N_{i_{liq}}^k}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{i_{liq}}^k} + N_{i_{gas}}^k \frac{\sum_{k=1}^{n_c} N_{i_{gas}}^k}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{i_{gas}}^k}}{\sum_{k=1}^{n_c} N_i^k} \Rightarrow \\
 z_i^k &= \frac{x_i^k (\sum_{k=1}^{n_c} N_{i_{liq}}^k) + y_i^k (\sum_{k=1}^{n_c} N_{i_{gas}}^k)}{\sum_{k=1}^{n_c} N_i^k} \Rightarrow \\
 z_i^k &= \mathcal{L}_i x_i^k + (1 - \mathcal{L}_i) y_i^k
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

Para cada componente $k = 1, \dots, n_c$ é definida uma constante de equilíbrio $K_i^k = \frac{y_i^k}{x_i^k}$ permitindo reescrever a equação 3.16 nas seguintes formas

$$x_i^k = \frac{z_i^k}{\mathcal{L}_i + (1 - \mathcal{L}_i) K_i^k} \tag{3.17}$$

$$y_i^k = \frac{K_i^k z_i^k}{\mathcal{L}_i + (1 - \mathcal{L}_i) K_i^k} \tag{3.18}$$

Rachford Jr *et al.* (1952) propuseram substituir 3.17 e 3.18 em $\sum_{k=1}^{n_c} x_i^k = 1$ e $\sum_{k=1}^{n_c} y_i^k = 1$, respectivamente e subtrair as somatórias, chegando à função de Rachford-Rice $R(\mathcal{L}_i)$:

$$R(\mathcal{L}_i) = \sum_{k=1}^{n_c} \frac{(1 - K_i^k) z_i^k}{\mathcal{L}_i + (1 - \mathcal{L}_i) K_i^k} = 0 \tag{3.19}$$

A equação 3.19 permite encontrar \mathcal{L}_i , e conseqüentemente x_i^k e y_i^k , se fixadas as composições globais z_i^k e as constantes K_i^k .

No equilíbrio termodinâmico entre duas fases, a energia livre de Gibbs total do sistema deve ser mínima, conduzindo à condição de que as fugacidades de cada componente nas duas fases devem ser iguais (Abhvani *et al.*, 1987).

$$f_{gas}^{k,i}(T_i, P_i, y_i^k) = f_{liq}^{k,i}(T_i, P_i, x_i^k) \quad (3.20)$$

A partir da definição de coeficiente de fugacidade $\phi_{gas}^{k,i} = \frac{f_{gas}^{k,i}}{y_i^k P_i}$ e $\phi_{liq}^{k,i} = \frac{f_{liq}^{k,i}}{x_i^k P_i}$ e da condição de equilíbrio termodinâmico imposta por 3.20, as constantes K_i^k podem calculadas pela relação:

$$K_i^k = \frac{\phi_{liq}^{k,i}(T_i, P_i, x_i^k)}{\phi_{gas}^{k,i}(T_i, P_i, y_i^k)} \quad (3.21)$$

A atualização dos frações molares x_i^k e y_i^k pela equações 3.17,3.18 e 3.19 modifica os valores de K_i^k segundo a equação 3.21, e vice e versa. Neste trabalho, esse problema foi resolvido através do método de iterações sucessivas seguinte:

1. Estimativa inicial para K_i^k , através da fórmula de Wilson, $\ln(K_i^k) = 5.37(1 + w_i^k)(1 - T_{c_i}^k/T_i^k) + \ln(P_{r_i}^k)$ (Wilson, 1969)
2. Solução da equação 3.19 pelo método de Newton-Raphson e atualização de \mathcal{L}_i , x_i^k e y_i^k
3. Fim da execução se o resultado convergiu, $\max_{k=1}^{n_c} \left| \frac{f_{gas}^{k,i}(T_i, P_i, y_i^k)}{f_{liq}^{k,i}(T_i, P_i, x_i^k)} - 1 \right| \leq \epsilon$, caso contrário atualização de K_i^k pelas equações 3.12 e 3.21 e retorno para o passo 2

3.5.1

Aceleração da Convergência do Equilíbrio de Fases

O método descrito na seção anterior possui convergência lenta (especialmente se operado próximo ao ponto crítico), porém garantida. A aplicação do método de Newton-Raphson para a atualização de K_i^k converge rapidamente, porém a convergência só é garantida se a estimativa inicial estiver suficientemente próxima da solução. Logo, a abordagem mais comum é atualizar K_i^k através da equação 3.21, conhecido como método das substituições sucessivas, até se aproximar da solução real para então utilizar o método de Newton-Raphson para acelerar a convergência (Nghiem *et al.*, 1983).

Nesse trabalho, para acelerar a convergência do equilíbrio de fases, foi utilizado o procedimento proposto por Michelsen (1982b), que consiste em encontrar um vetor $\tilde{\mathbf{K}}$ tal que $\mathbf{R}_{flash}(\tilde{\mathbf{K}}) = 0$, onde:

$$R_{flash}^k(K^k) = [\ln(y^k) + \ln(\phi_{gas}^k(T, P, y^k))] - [\ln(x^k) + \ln(\phi_{liq}^k(T, P, x^k))] \quad (3.22)$$

Uma vez que $K^k = \frac{y^k}{x^k}$, a equação 3.22 é uma variação da equação 3.21. O índice i foi omitido para não sobrecarregar a notação, mas deve-se deixar claro que um *flash* bifásico independente deverá ser realizado para cada nó i quando necessário.

Enquanto o vetor $\mathbf{R}_{flash}(\tilde{\mathbf{K}})$, chamado de vetor de resíduos, não estiver suficientemente próximo de zero, o vetor \mathbf{K} deve ser atualizado segundo a equação 3.23 a cada iteração θ :

$$\begin{aligned} (\mathbf{K})^{\theta+1} &= \exp [\ln((\mathbf{K})^\theta) - (\mathbf{J}_{flash}^{-1} \mathbf{R}_{flash}(\mathbf{K}))^\theta] \\ \mathbf{J}_{flash} &= J_{ks}^{flash} \end{aligned} \quad (3.23)$$

\mathbf{J}_{flash} é a matriz Jacobiana do vetor \mathbf{K} e pode ser obtida da seguinte forma:

$$\begin{aligned} J_{ks}^{flash} &= \frac{\partial R_{flash}^k(K^k)}{\partial \ln(K^s)} \\ &= \frac{\partial}{\partial \ln(K^s)} \left[\ln \left(\frac{y^k}{x^k} \right) + \ln(\phi_{gas}^k(T, P, y^k)) - \ln(\phi_{liq}^k(T, P, x^k)) \right] \\ &= \delta_{ks} + \sum_{m=1}^{n_c} \left(\frac{\partial \ln(\phi_{gas}^k(T, P, y^k))}{\partial N_{gas}^m} \frac{\partial N_{gas}^m}{\partial \ln(K^s)} - \frac{\partial \ln(\phi_{liq}^k(T, P, x^k))}{\partial N_{liq}^m} \frac{\partial N_{liq}^m}{\partial \ln(K^s)} \right) \end{aligned} \quad (3.24)$$

A derivadas parciais dos coeficientes de fugacidade, $\phi_{liq}^k(T, P, x^k)$ e $\phi_{gas}^k(T, P, y^k)$, com relação a N_{liq}^k e N_{gas}^k , podem ser obtidas analiticamente a partir da equação de estado exposta na seção 3.3 e encontram-se detalhadamente descritas em Chang (1990).

Pela definição de K^k , x^k e y^k é possível escrever:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln(K^k)}{\partial \ln(K^s)} &= \frac{\partial}{\partial \ln(K^s)} [\ln(y^k) - \ln(x^k)] \\ \delta_{ks} &= \sum_{m=1}^{n_c} \left(\frac{\partial \ln(y^k)}{\partial N_{gas}^m} \frac{\partial N_{gas}^m}{\partial \ln(K^s)} - \frac{\partial \ln(x^k)}{\partial N_{liq}^m} \frac{\partial N_{liq}^m}{\partial \ln(K^s)} \right) \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde:

$$\begin{aligned} x^k &= \frac{N_{liq}^k}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{liq}^k} \Rightarrow \frac{\partial \ln(x^k)}{\partial N_{liq}^m} = \frac{\delta_{km}}{N_{liq}^k} - \frac{1}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{liq}^k} \\ y^k &= \frac{N_{gas}^k}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{gas}^k} \Rightarrow \frac{\partial \ln(y^k)}{\partial N_{gas}^m} = \frac{\delta_{km}}{N_{gas}^k} - \frac{1}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{gas}^k} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Como $N^k = N_{liq}^k + N_{gas}^k$ e a variação de K^k apenas faz migrar os componentes de uma fase para outra, não alterando a composição global, conclui-se que:

$$\frac{\partial N_{gas}^m}{\partial \ln(K^s)} = - \frac{\partial N_{liq}^m}{\partial \ln(K^s)} \quad (3.27)$$

A partir das equações 3.24, 3.25, 3.26 e 3.27, chega-se a expressão final de cálculo de \mathbf{J}_{flash} 3.28.

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{flash} &= \mathbf{I} + \left[\frac{\partial \ln(\phi_{gas})}{\partial \mathbf{N}_{gas}} + \frac{\partial \ln(\phi_{liq})}{\partial \mathbf{N}_{liq}} \right] \mathbf{M}^{-1} \\ \mathbf{I} &= \delta_{km} \\ \frac{\partial \ln(\phi_{gas})}{\partial \mathbf{N}_{gas}} &= \frac{\partial \ln(\phi_{gas}^k(T, P, y^k))}{\partial N_{gas}^m} \\ \frac{\partial \ln(\phi_{liq})}{\partial \mathbf{N}_{liq}} &= \frac{\partial \ln(\phi_{liq}^k(T, P, x^k))}{\partial N_{liq}^m} \\ \mathbf{M} &= \delta_{km} \left(\frac{1}{N_{gas}^m} + \frac{1}{N_{liq}^m} \right) - \left(\frac{1}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{gas}^k} + \frac{1}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{liq}^k} \right) \end{aligned} \quad (3.28)$$

A rotina de cálculo de *flash* implementada nesse trabalho atualiza K^k pela equação 3.21 durante as primeiras $ssiITER_{flash}$ (número estabelecido *a priori*) iterações para então migrar pelo método de Newton Raphson. Quando, durante a execução do método de Newton Raphson, as matrizes \mathbf{J}_{flash} ou \mathbf{M} forem mal condicionadas, volta-se a atualizar K^k pela equação 3.21.

3.6

Identificação do Número de Fases

Dado a natureza da aplicação deste simulador, é fundamental que ele seja capaz de identificar o aparecimento de uma nova fase, uma vez determinados (P_i, T_i, z_i^k) , bem como o desaparecimento de uma fase existente.

3.6.1

Aparecimento de uma nova Fase

O inconveniente do cálculo de *flash* é não saber de antemão o número de fases. Uma abordagem tradicional seria assumir a mistura como *a priori* bifásica e sempre realizar o cálculo de *flash*, havendo gasto computacional mesmo quando a mistura for monofásica. Michelsen (1982a) propôs um teste de estabilidade que permite decidir se um sistema é termodinamicamente mais estável caso apresente uma fase adicional.

Testar a estabilidade de uma mistura monofásica de hidrocarbonetos, em um volume de controle i , de composição z_i^k com $k = 1, \dots, n_c$ consiste em procurar uma fase nessa mistura que, se combinada ao que sobra da mistura ao retirá-la, reduz a energia livre de Gibbs total do sistema (Chang, 1990). Matematicamente esta condição é expressa como:

$$\begin{aligned} \Delta G_i &= \sum_{k=1}^{n_c} y_i^k [\mu_k(\vec{y}_i) - \mu_k(\vec{z}_i)] \\ \vec{y}_i &= [y_1, y_2, \dots, y_{n_c}]^T \\ \vec{z}_i &= [z_1, z_2, \dots, z_{n_c}]^T \end{aligned} \quad (3.29)$$

Onde $\mu_k(\vec{y}_i)$ e $\mu_k(\vec{z}_i)$ são os potenciais químicos da nova fase e do sistema monofásico corrente, respectivamente, e y_i^k é a fração molar de cada componente k da nova fase. O sistema é dito estável se $\Delta G_i \geq 0$ para toda fração molar y_i^k . Caso contrário, o sistema só é estável com o aparecimento de uma nova fase.

O algoritmo de Michelsen (1982a) consiste inferir a estabilidade da mistura a partir dos pontos estacionários de ΔG_i , ou seja, $\frac{\partial}{\partial y_i^m} \Delta G_i = 0$. Substituindo $y_i^{n_c} = 1 - \sum_{k=1}^{n_c-1} y_i^k$ nessa condição e rearranjando seus termos, chega-se a 3.30 (nessa passagem os índices i serão omitidos para não sobrecarregar a notação):

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial y^m} \Delta G = 0 &\Rightarrow \\
 \frac{\partial}{\partial y^m} \sum_{k=1}^{n_c} y^k [\mu_{n_c}(\vec{y}) - \mu_{n_c}(\vec{z})] &= 0 \Rightarrow \\
 \frac{\partial}{\partial y^m} \left\{ \sum_{k=1}^{n_c-1} y^k [\mu_k(\vec{y}) - \mu_k(\vec{z})] \right\} + \frac{\partial}{\partial y^m} \left\{ \left(1 - \sum_{k=1}^{n_c-1} y^k \right) [\mu_{n_c}(\vec{y}) - \mu_{n_c}(\vec{z})] \right\} &= 0 \Rightarrow \\
 \sum_{k=1}^{n_c-1} \left\{ \delta_{km} [\mu_k(\vec{y}) - \mu_k(\vec{z})] + y^k \left[\frac{\partial \mu_k(\vec{y})}{\partial y^m} - \frac{\partial \mu_k(\vec{z})}{\partial y^m} \right] \right\} & \\
 + \left\{ - \sum_{k=1}^{n_c-1} \delta_{km} [\mu_{n_c}(\vec{y}) - \mu_{n_c}(\vec{z})] + \left(1 - \sum_{k=1}^{n_c-1} y^k \right) \left[\frac{\partial \mu_{n_c}(\vec{y})}{\partial y^m} - \frac{\partial \mu_{n_c}(\vec{z})}{\partial y^m} \right] \right\} &= 0 \Rightarrow \\
 \sum_{k=1}^{n_c-1} \{ \delta_{km} [\mu_k(\vec{y}) - \mu_k(\vec{z}) - \mu_{n_c}(\vec{y}) + \mu_{n_c}(\vec{z})] \} + \sum_{k=1}^{n_c} \left\{ y^k \left[\frac{\partial \mu_k(\vec{y})}{\partial y^m} - \frac{\partial \mu_k(\vec{z})}{\partial y^m} \right] \right\} &= 0 \\
 m = 1, 2, \dots, n_c - 1 & \\
 & \tag{3.30}
 \end{aligned}$$

A P e T constantes, a relação de Gibbs-Duhem anula o segundo somatório de 3.30, chegando-se a condição de estacionariedade 3.31:

$$\mu_k(\vec{y}_i) - \mu_k(\vec{z}_i) = \mu_{n_c}(\vec{y}_i) - \mu_{n_c}(\vec{z}_i) = C \tag{3.31}$$

A partir da definição de potencial químico, $\mu_k^i(\vec{y}_i) = RT_i \ln \frac{\phi_i^k(\vec{y}_i)}{y_i^k P_i}$, considerando P_i e T_i constantes, e da condição anterior 3.31 chega-se a equação 3.32:

$$\ln \phi_i^k(\vec{y}_i) + \ln y_i^k - \ln \phi_i^k(\vec{z}_i) - \ln z_i^k = C \tag{3.32}$$

A equação 3.29 juntamente com a condição 3.31 fornece :

$$\begin{aligned}
 \Delta G_i &= \sum_{k=1}^{n_c} y_i^k C \\
 &= C \sum_{k=1}^{n_c} y_i^k \\
 &= C
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

Logo, para os pontos estacionários, a mistura é estável se $C \geq 0$ e instável caso contrário. Aplicando a mudança de variável $\ln Y_i^k = \ln y_i^k - C$ na equação

3.32 tem-se:

$$\ln \phi_i^k(\vec{y}_i) + \ln Y_i^k - \ln \phi_i^k(\vec{z}_i) - \ln z_i^k = 0 \quad (3.34)$$

Como consequência $y_i^k = Y_i^k e^C$ que, juntamente da condição $\sum_{k=1}^{n_c} y_i^k = 1$, implica em $\sum_{k=1}^{n_c} Y_i^k < 1$ para mistura estável e $\sum_{k=1}^{n_c} Y_i^k > 1$ para mistura instável. Logo, para uma mistura monofásica de composição z_i^k , pode-se proceder o seguinte algoritmo de substituições sucessivas:

1. Estimativa inicial para K_i^k , através da fórmula de Wilson, $\ln(K_i^k) = 5.37(1 + w_i^k)(1 - T_{c_i}^k/T_i^k) + \ln(P_{r_i}^k)$ (Wilson, 1969)
2. Admitindo que a fase corrente é gás, a nova fase a aparecer terá como estimativa inicial de composição Y_i^k/K_i^k
3. Cálculo de $\ln \phi_i^k(\vec{z}_i) - \ln z_i^k$, que será constante ao longo do processo iterativo
4. Cálculo de $\phi_i^k(\vec{y}_i)$ - utilizando a menor raiz real de Z , por se tratar de fase líquida - e atualização de Y_i^k e y_i^k :

$$\begin{aligned} (Y_i^k)^{\varphi+1} &= (\exp[-\ln \phi_i^k(\vec{y}_i) + \ln \phi_i^k(\vec{z}_i) + \ln z_i^k])^{\varphi} \\ (y_i^k)^{\varphi} &= \left(\frac{Y_i^k}{\sum_{k=1}^{n_c} Y_i^k} \right)^{\varphi} \end{aligned} \quad (3.35)$$

5. Interrupção das iterações φ em caso de convergência, $\max_{k=1}^{n_c} \left| \frac{(Y_i^k)^{\varphi+1}}{(Y_i^k)^{\varphi}} - 1 \right| \leq \epsilon$, e execução do passo seguinte; voltar ao passo anterior caso contrário
6. se $\sum_{k=1}^{n_c} Y_i^k > 1$ a mistura é instável, execução é interrompida e será necessário realizar um cálculo de *flash*, podendo utilizar a composição da nova fase como estimativa inicial. Caso contrário, o problema convergiu para solução trivial $Y_i^k = z_i^k$ ou para $\sum_{k=1}^{n_c} Y_i^k < 1$, sendo necessário mudar a premissa do passo 2 através do passo seguinte.
7. Admitindo que a fase corrente é líquida, a nova fase a aparecer terá como estimativa inicial de composição $Y_i^k K_i^k$
8. Cálculo de $\ln \phi_i^k(\vec{z}_i) - \ln z_i^k$, que será constante ao longo do processo iterativo
9. Cálculo de $\phi_i^k(\vec{y}_i)$ - utilizando a maior raiz real de Z , por se tratar de fase gasosa - e atualização de Y_i^k e y_i^k :

$$\begin{aligned} (Y_i^k)^{\varphi+1} &= (\exp[-\ln \phi_i^k(\vec{y}_i) + \ln \phi_i^k(\vec{z}_i) + \ln z_i^k])^{\varphi} \\ (y_i^k)^{\varphi} &= \left(\frac{Y_i^k}{\sum_{k=1}^{n_c} Y_i^k} \right)^{\varphi} \end{aligned} \quad (3.36)$$

10. Interrupção das iterações φ em caso de convergência, $\max_{k=1}^{n_c} \left| \frac{(Y_i^k)^{\varphi+1}}{(Y_i^k)^\varphi} - 1 \right| \leq \epsilon$, e execução do passo seguinte; voltar ao passo anterior caso contrário
11. se $\sum_{k=1}^{n_c} Y_i^k > 1$ a mistura é instável, execução é interrompida e será necessário realizar um cálculo de *flash*, podendo utilizar a composição da nova fase como estimativa inicial. Caso contrário, a solução convergiu para solução trivial $Y_i^k = z_i^k$ ou para $\sum_{k=1}^{n_c} Y_i^k < 1$, indicando que o sistema deve continuar monofásico não sendo necessário um cálculo de flash. Contudo não há a informação se sistema monofásico é líquido ou gasoso, sendo necessário utilizar um critério para identificação de fase.

3.6.2

Aceleração da Convergência do Teste de Estabilidade

Assim como o *flash*, o teste de estabilidade também pode ser acelerado através do método de Newton Raphson. Desta vez o vetor de resíduos 3.37, no qual se procura os zeros $\tilde{\mathbf{Y}}$, é consequência da equação 3.34.

$$R_{stability}^k(Y^k) = [\ln(Y^k) + \ln(\phi^k(\vec{y}))] - [\ln(z^k) + \ln(\phi^k(\vec{z}))] \quad (3.37)$$

O vetor \mathbf{Y} deve ser atualizado segundo a equação 3.38 a cada iteração φ enquanto o vetor de resíduos $\mathbf{R}_{stability}(\tilde{\mathbf{Y}})$, não estiver suficientemente próximo de zero.

$$\begin{aligned} (\mathbf{Y})^{\varphi+1} &= \exp [\ln((\mathbf{Y})^\varphi) - (\mathbf{J}_{stability}^{-1} \mathbf{R}_{stability}(\mathbf{Y}))^\varphi] \\ \mathbf{J}_{stability} &= J_{ks}^{stability} \end{aligned} \quad (3.38)$$

$\mathbf{J}_{stability}$ é a matriz Jacobiana do vetor \mathbf{Y} e pode ser obtida da seguinte forma:

$$\begin{aligned} J_{ks}^{stability} &= \frac{\partial R_{stability}^k(Y^k)}{\partial \ln(Y^s)} \\ &= \frac{\partial}{\partial \ln(Y^s)} [\ln(Y^k) + \ln(\phi^k(\vec{y})) - \ln(z^k) - \ln(\phi^k(\vec{z}))] \\ &= \delta_{ks} + \sum_{m=1}^{n_c} \frac{\partial \ln(\phi^k(T, P, y^k))}{\partial y^m} \frac{\partial y^m}{\partial \ln(Y^s)} \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde

$$y^m = \frac{Y^m}{\sum_{m=1}^{n_c} Y^m} \Rightarrow \frac{\partial y^m}{\partial \ln(Y^s)} = \frac{Y_m \delta_{ms} - x_m Y_s}{\sum_{m=1}^{n_c} Y^m} \quad (3.40)$$

As formas analíticas das derivadas parciais dos coeficientes de fugacidade $\phi^k(T, P, y^k)$, com relação a y^m , encontram-se detalhadamente descritas em Chang (1990).

O teste de estabilidade implementado nesse trabalho atualiza Y^k pela equação 3.35 durante as primeiras $ssiITER_{stability}$ (número estabelecido *a priori*) iterações para então migrar pelo método de Newton Raphson. Quando, durante a execução do método de Newton Raphson, a matriz $\mathbf{J}_{stability}$ for mal condicionada, volta-se a atualizar Y^k pela equação 3.35.

3.6.3

Desaparecimento de uma Fase

Há desaparecimento de fase se, após um *flash* bifásico, $\mathcal{L}_i \geq 1$ ou $\mathcal{L}_i \leq 0$. Como $0 \leq \mathcal{L}_i \leq 1$, após o tratamento do desaparecimento de fase, \mathcal{L}_i tem seu valor corrigido para 0 ou 1 caso ultrapasse um desses limites.

3.7

Critério de Identificação de Fase

Não existe definição amplamente aceita que distingue gás de líquido. Entretanto como os termos óleo e gás são muito utilizados na indústria do petróleo é de interesse estabelecer um critério razoável para diferenciar essas fases (Pedersen *et al.*, 2014). Para misturas monofásicas, pode-se usar como critério a comparação da massa específica da fase com uma massa específica de referência e atribuí-la o rótulo de gás, caso tenha seja inferior, ou de líquido, caso seja superior. Outro critério, seria a comparação da Temperatura do volume de controle T_i com a temperatura pseudo-crítica da fase (calculada a partir de alguma regra de mistura, como a regra apresentada na equação 3.41, por exemplo) $T_{c_{mix}}$. A fase é considerada gás se $T_i \geq T_{c_{mix}}$ ou líquido caso contrário.

$$T_{c_{mix}} = \frac{\sum_{k=1}^{n_c} z^k V_{ck} T_{ck}}{\sum_{k=1}^{n_c} z^k V_{ck}} \quad (3.41)$$

3.8

Cálculo da Viscosidade

Modelos de viscosidade são ferramentas importantes para descrever o comportamento dessa em função da pressão, temperatura e composição. Embora já existam muitos na literatura, sempre são criados novos modelos ou derivações dos existentes (Zéberg-Mikkelsen, 2001).

Devido a sua simplicidade e flexibilidade, a correlação proposta por Lohrenz *et al.* (1964), referida como Lohrenz-Bray-Clark (LBC), é o modelo de viscosidade mais utilizado em simuladores composicionais comerciais (Yang *et al.*, 2007). Em seu trabalho, eles criaram um método para calcular a viscosidade de mistura de hidrocarbonetos usando a mesma equação de Jossi *et al.* (1962) para substâncias puras. Essa foi a correlação empregada nesse estudo por apresentar resultados razoáveis na estimativa da viscosidade de gases e líquidos leves.

A viscosidade η_0^k para cada componente k puro, a baixas pressões, é calculada pela correlação de Stiel & Thodos (1961):

$$\eta_0^k = \begin{cases} \frac{34 \times 10^{-5} (T_{rk})^{0.94}}{\zeta_k}, & \text{se } T_{rk} \leq 1.5 \\ \frac{17.78 \times 10^{-5} (4.58 T_{rk} - 1.67)^{5/8}}{\zeta_k}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.42)$$

$$\zeta_k = \frac{T_{ck}^{1/6}}{M_k^{1/2} P_{ck}^{2/3}}$$

$$T_{rk} = \frac{T_i}{T_{ck}}$$

P_{ck} em atm, T_{ck} em kelvin e M_k em g/mol.

A baixas pressões, a viscosidade da mistura da fase presente em um volume de controle i e com composição x_i^k é obtida pela regra de mistura:

$$\eta_0 = \frac{\sum_{k=1}^{n_c} x_i^k \sqrt{M_k} \eta_0^k}{\sum_{k=1}^{n_c} x_i^k \sqrt{M_k}} \quad (3.43)$$

De posse da viscosidade da mistura a baixas pressões, pode-se calcular a viscosidade η_i na Pressão desejada P_i pela equação de Jossi *et al.* (1962):

$$[(\eta_i - \eta_0)\chi_i + 10^{-4}]^{1/4} = \sum_{j=0}^5 a_j \rho_{ri}^j$$

$$\chi_i = \frac{(\sum_{k=1}^{n_c} x_i^k T_{ck}^i)^{1/6}}{(\sum_{k=1}^{n_c} x_i^k M_k)^{1/2} (\sum_{k=1}^{n_c} x_i^k P_{ck}^i)^{2/3}} \quad (3.44)$$

$$\rho_{ri} = \rho(P_i, T_i) \frac{\sum_{k=1}^{n_c} x_i^k V_{ck}}{\sum_{k=1}^{n_c} x_i^k M_{ck}}$$

$$a_0 = 0.1023 \quad a_1 = 0.023364 \quad a_2 = 0.058533$$

$$a_3 = -0.040758 \quad a_4 = 0.0093324$$

Uma vez resolvida a equação 3.44 tem-se a viscosidade em cP .

3.9

Cálculo das Condutâncias Hidráulicas

Admitindo que a parede do capilar seja totalmente molhável ao condensado (ângulo de contato próximo a 0°) é razoável representar o escoamento bifásico gás-condensado como um escoamento anular como mostra Figura 3.3.

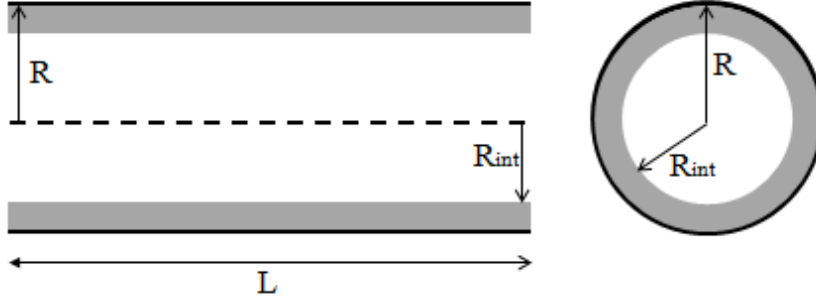


Figura 3.3: Seção longitudinal (à esquerda) e transversal (à direita) da representação de um escoamento anular de gás (círculo de raio R_{int}) e condensado (coroa de raio externo R e interno R_{int}) em um capilar de raio R e comprimento L .

Para um fluido de viscosidade η escoando em um capilar de comprimento L e de seção transversal circular constante de raio R , a equação de Navier-Stokes (em coordenadas cilíndricas) para escoamento em regime permanente, laminar e desenvolvido tem a forma:

$$\eta \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du_z}{dr} \right) = \frac{dP}{dz} \quad (3.45)$$

Cuja solução para

1. $0 \leq r \leq R_{int}$
2. $\eta = \eta_{gas}$
3. $u_{gas}(r = 0) < \infty$ e $u_{gas}(r = R_{int}) = u_{liq}(r = R_{int})$

$$u_{gas}(r) = -\frac{1}{\eta_{gas}} \frac{dP}{dz} (R_{int}^2 - r^2) + u_{liq}(r = R_{int}) \quad (3.46)$$

e para

1. $R_{int} \leq r \leq R$
2. $\eta = \eta_{liq}$
3. $\eta_{liq} \frac{du_z}{dz} \Big|_{r=R_{int}} = \eta_{gas} \frac{du_z}{dz} \Big|_{r=R_{int}}$ e $u_z(r = R) = 0$

$$u_{liq}(r) = -\frac{1}{\eta_{liq}} \frac{dP}{dz} (R^2 - r^2) \quad (3.47)$$

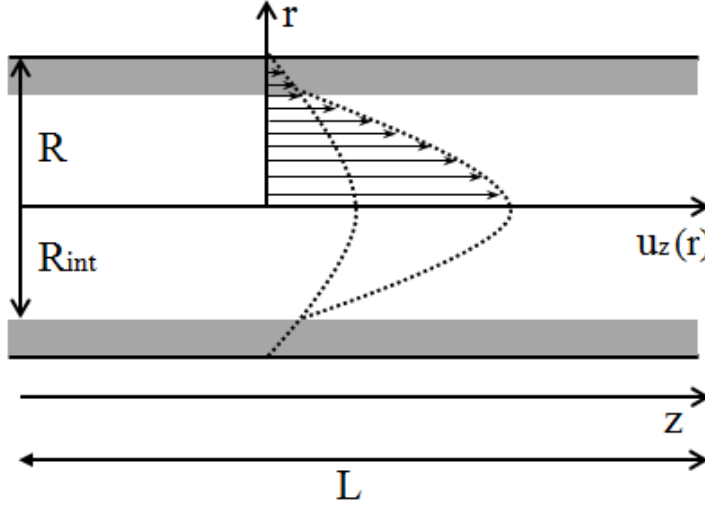


Figura 3.4: Perfil de velocidades $u_z(r)$ para um escoamento anular de gás ($0 \leq r \leq R_{int}$) e condensado ($R_{int} \leq r \leq R$) em um capilar de raio R e comprimento L .

Admitindo que $u_{gas}(r = R_{int}) = u_{liq}(r = R_{int}) = -\frac{1}{\eta_{liq}} \frac{dP}{dz} (R^2 - R_{int}^2)$, conforme ilustra a Figura 3.4, podemos calcular as vazões volumétricas de gás e líquido como:

$$\begin{aligned} q_{gas} &= \int_0^{R_{int}} u_{gas}(r) dr \\ &= \left(-\frac{dP}{dz} \right) \left[\frac{\pi}{8\eta_{gas}} R_{int}^4 + \frac{\pi}{4\eta_{liq}} (R^2 - R_{int}^2) R_{int}^2 \right] \\ q_{liq} &= \int_{R_{int}}^R u_{liq}(r) dr \\ &= \left(-\frac{dP}{dz} \right) \frac{\pi}{8\eta_{liq}} (R^2 - R_{int}^2)^2 \end{aligned} \quad (3.48)$$

Da definição de condutância hidráulica $g = q/\Delta P$ e $\frac{dP}{dz} = -\frac{\Delta P}{L}$ chega-se

a:

$$\begin{aligned} g_{gas} &= \frac{\pi}{8\eta_{gas}L} R_{int}^4 + \frac{\pi}{4\eta_{liq}L} (R^2 - R_{int}^2) R_{int}^2 \\ g_{liq} &= \frac{\pi}{8\eta_{liq}L} (R^2 - R_{int}^2)^2 \end{aligned} \quad (3.49)$$

É importante notar que raio interno R_{int} está relacionado com a saturação de gás S^{gas} da aresta, como mostra a equação 3.50.

$$\begin{aligned} S^{gas} &= \frac{\pi R_{int}^2 L}{\pi R^2 L} \\ &= \left(\frac{R_{int}}{R} \right)^2 \end{aligned} \tag{3.50}$$

4

Formulação Numérica

A partir da formulação matemática do capítulo 3 foi desenvolvido um simulador em MATLAB (Matlab, 2016), linguagem interpretada desenvolvida pela Mathworks, cujas principais rotinas serão descritas a seguir.

4.1

Inicialização do modelo e execução geral do simulador

Após carregar as propriedades de rede e do fluido, como indicado na Figura 4.1 é necessário calcular a quantidade de moles N_i^k , $i = 1, \dots, N_{no}$ e $k = 1, \dots, n_c$, para cada nó i e para cada componente k . Essas quantidades são obtidas através da Equação da Consistência dos Volumes 3.15, uma vez que as pressões P_i iniciais são conhecidas. A invocação prévia do Cálculo Composicional é necessária para se obter \mathcal{L}_i , Z_i^{liq} e Z_i^{gas} .

Inicializado o modelo, é carregado e executado *Schedule*, que consiste numa tabela que relaciona o tempo t com as condições de contorno (vazões ou pressões impostas extremos da rede). Ao final da execução do *Schedule* são impressos os resultados da simulação.

4.2

Cálculo Composicional

Essa rotina é chamada na inicialização do modelo e sempre quando há variação da pressão P_i ou da composição z_i^k do nó i , uma vez que essas variações podem levar a mudança de fase (condensação/vaporização parcial ou total) ou a mudanças nas frações molares da fase líquida e gasosa, x_i^k e y_i^k respectivamente.

O fato do *flash* envolver o cálculo dos zeros da função de Rachford-Rice 3.19 aninhado por um método de substituições sucessivas ou um método de Newton Raphson, além da maior quantidade de operações por iteração, faz com que sua execução tenha custo computacional maior que um teste de estabilidade seguido de um critério identificação de fase, para volumes de controles monofásicos. Logo, o *flash* só é chamado diretamente quando a mistura for considerada *a priori* bifásica, conforme mostra a Figura 4.2.

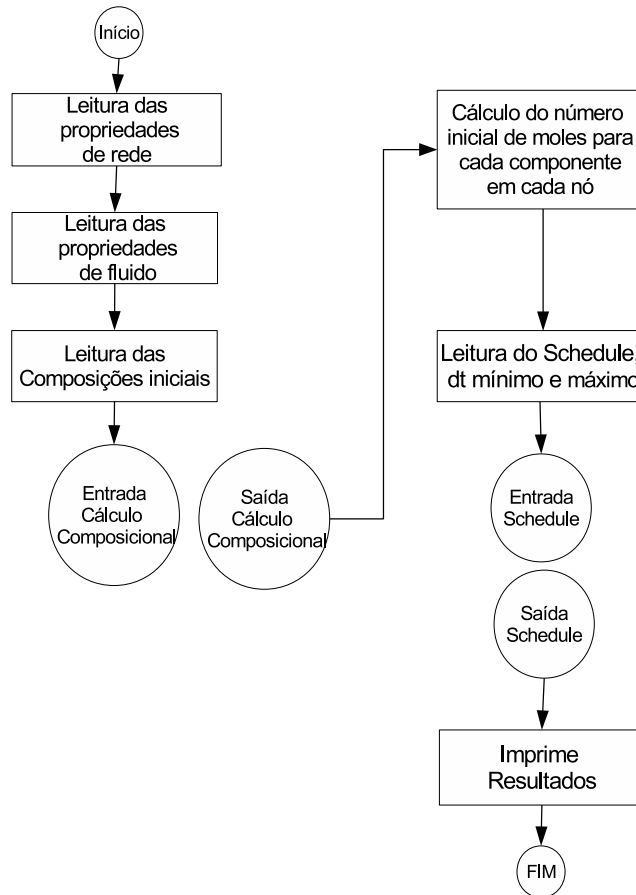


Figura 4.1: Fluxograma da camada mais externa do simulador: leitura dos dados e rede e de fluido, inicialização do modelo após Cálculo Composicional, chamada do *Main Loop* (*Schedule*) e impressão dos resultados

Nesse trabalho, o cálculo composicional executado para o nó i é totalmente independente das variáveis dos nós adjacentes, ou seja, seu resultado é exclusivamente função de P_i , T_i e z_i . Essa característica permitiu paralelizar facilmente o cálculo composicional de todos os nós da rede (o cálculo composicional é chamado de dentro de um laço paralelo varrendo todos os nós da rede), reduzindo o tempo de simulação.

4.3 Laço Principal

Nessa seção são lidas as condições de contorno na entrada e saída da rede para o instante t para as quais é chamado o cálculo implícito de Pressões/Composições. Não sendo necessário quebrar o passo de tempo dt , cujos motivos serão abordados mais adiante, o cálculo implícito é validado e a variável tempo t é incrementada, como indicado na Figura 4.3. O incremento de t permite consultar novas condições de contorno (ou a manutenção das corren-

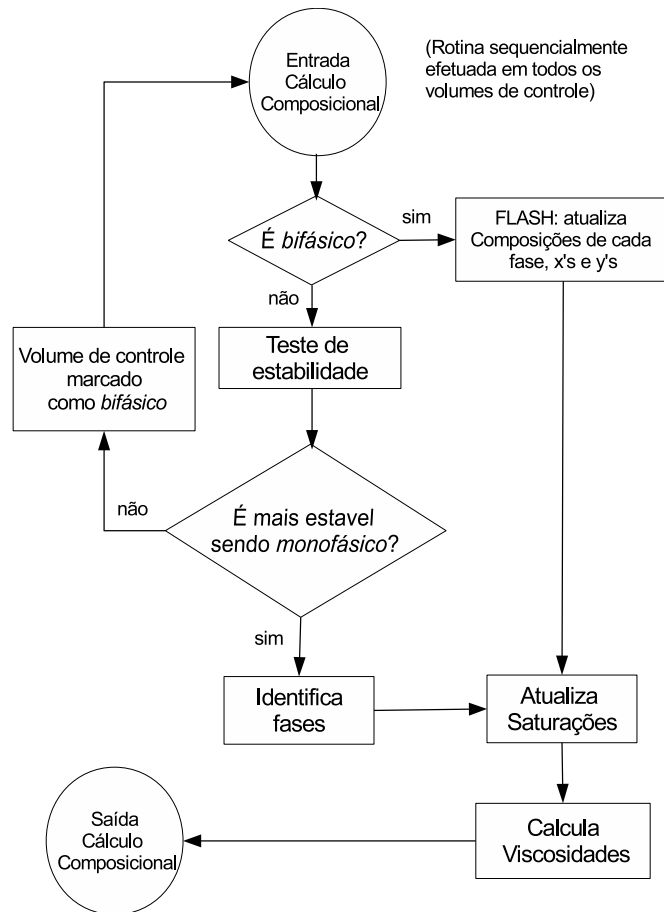


Figura 4.2: Fluxograma do Cálculo Composicional, teste de estabilidade e *flash*.

tes) na tabela *Schedule*. Na necessidade de se quebrar o passo de tempo dt , o cálculo implícito é invalidado e chamado novamente para as mesmas condições de contorno, porém com um passo de tempo dt reduzido.

Após a validação do cálculo implícito, para cada instante \mathbf{t} , são gravadas propriedades que se tem interesse em acompanhar sua evolução temporal, tais como pressão e composição de cada nó, saturação de cada aresta, erro de balanço de materiais (definido na equação 4.1), entre outras.

$$EBM^k(\mathbf{t}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_{no}} (s_i^k)^{\mathbf{t}} dt}{\sum_{i=1}^{N_{no}} [(N_i^k)^{\mathbf{t}} - (N_i^k)^{\mathbf{t}-1}]} \quad (4.1)$$

A equação 4.1 calcula os desvios da lei de conservação, a qual impõe que, para cada componente $k = 1, \dots, n_c$, o número de moles que entraram/saíram pelos termos fonte s_i^k no instante \mathbf{t} deve ser igual ao incremento/decremento do número de moles da rede com relação ao instante anterior $\mathbf{t}-1$.

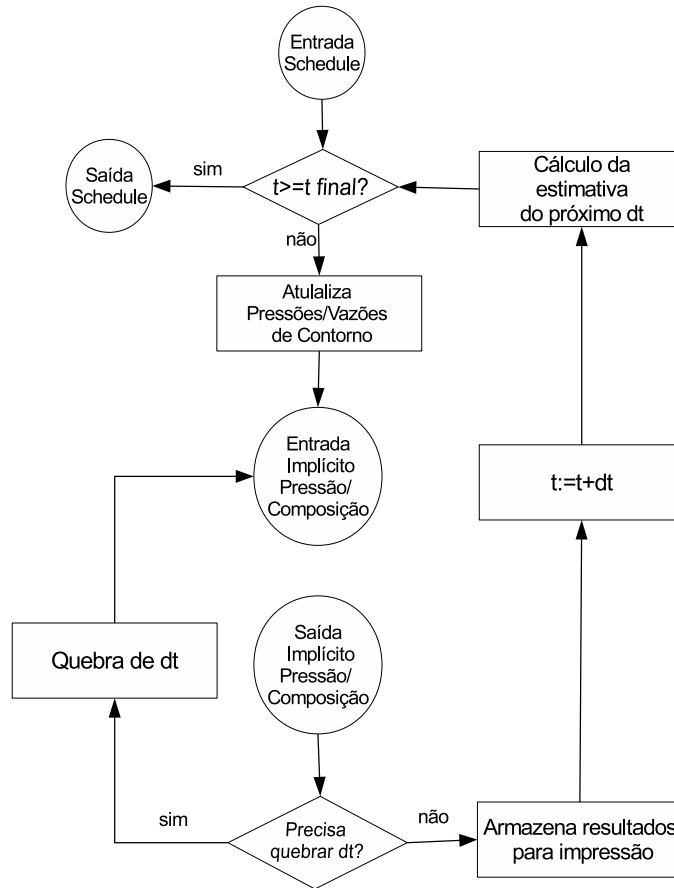


Figura 4.3: Fluxograma do *Main Loop*: execução do *Schedule* (variações de Pressão/Vazão de contorno em função do tempo), chamada do cálculo implícito de pressão e composição e seleção do próximo passo de tempo dt

4.3.1 Seleção automática do próximo Time Step

A implementação de uma rotina que determine *a priori* o passo de tempo, dt , a ser utilizado no próximo cálculo implícito de Pressões/Composições, é necessária para garantir estabilidade do método sem onerar o tempo de simulação.

O método das variações relativas proposto por Jensen *et al.* (1980) foi empregado nesse estudo para as pressões, P_i , e para o número de moles de cada componente N_i^k de cada nó i , como segue:

$$\begin{aligned}
 dt^{t+1} &= dt^t \min_{i=1, k=1}^{N_{No}, n_c} \left(\frac{dN_{max}^k}{dN_i^k}, \frac{dP_{max}}{dP_i} \right) \\
 dN_i^k &= \left| 1 - \frac{(N_i^k)^t}{(N_i^k)^{t+1}} \right| \\
 dP_i &= \left| 1 - \frac{(P_i)^t}{(P_i)^{t+1}} \right|
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

A equação 4.2 permite escolher o passo de tempo do cálculo implícito seguinte $(dt)^{t+1}$, a partir dos resultados do passo de tempo corrente $(dt)^t$ e dos seguintes parâmetros de entrada:

- dN_{max}^k : máxima variação molar desejada, por componente k , entre t e $t+1$
- dP_{max} : máxima variação de pressão desejada entre t e $t+1$

Os resultado de equação 4.2 deve estar limitado a:

$$dt_{min} \leq dt \leq dt_{max} \quad (4.3)$$

onde dt_{min} e dt_{max} também são parâmetros de entrada, e sua escolha dependem do relação entre o volume do modelo e as vazões empregadas, heterogeneidade da rede, etc.

4.4

Implementação do método de Newton Raphson

O objetivo dessa rotina é encontrar, através do método de Newton Raphson, um vetor $\tilde{\mathbf{u}}$ tal que $\mathbf{R}(\tilde{\mathbf{u}}) = 0$, onde:

$$\mathbf{u}_{[1, N_{No}(n_c+2)]} = [N_i^k \ P_i \ s_i]^T$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{u})_{[1, N_{No}(n_c+2)]} = [(R_N)_i^k \ (R_V)_i \ (R_C)_i]^T$$

$$(R_N)_i^k = (N_i^k)^{t+1} - (N_i^k)^t + dt \left[\sum_{j=1}^{N_{aresta}} c_{ij} [(y_j^k \xi_j^{gas} g_j^{gas} + x_j^k \xi_j^{liq} g_j^{liq})^\tau \sum_{m=1}^{N_{no}} c_{mj} P_m^{t+1}] - (z_{si}^k s_i)^{t+1} \right]$$

$$(R_V)_i = (N_i)^{t+1} - \frac{\bar{V}_i [1 + \bar{v}_i ((P_i)^{t+1} - \bar{P})]}{\mathcal{L}_i^\tau \left(\frac{(Z_i^{liq})^\tau R_{flu} T}{P_i^{t+1}} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k x_k \right) + (1 - \mathcal{L}_i^\tau) \left(\frac{(Z_i^{gas})^\tau R_{flu} T}{P_i^{t+1}} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k y_k \right)}$$

$$(R_C)_i = \begin{cases} dt \frac{(s_i - s_i^{imp})}{R_{flu} T}, & \text{para vazão molar total imposta no nó } i \\ \frac{(P_i - P_i^{imp}) \bar{V}_i}{R_{flu} T}, & \text{para pressão imposta no nó } i \end{cases}$$

$$i = 1, \dots, N_{no} \text{ e } k = 1, \dots, n_c$$

$$(4.4)$$

Em outras palavras, busca-se encontrar, para todo nó i , a pressão P_i e o número de moles de cada componente N_i^k que satisfaçam ao mesmo tempo a discretização temporal da Equação do Balanço Molar 3.5 e a Equação da Consistência dos Volumes 3.15. O termo fonte da equação s_i^k da equação 3.5 foi substituído por $z_{s_i}^k s_i$, podendo $z_{s_i}^k$ ser a composição global do nó i ou uma composição imposta. $(R_C)_i$ são as equações de imposição de vazão molar ou pressão nos nós que possuem termo fonte e estão escritas de modo a possuir dimensão de número de moles.

A fim de aliviar a complexidade associada ao cálculo simultâneo de todas as equações que governam o problema composicional e facilitar a paralelização do código, a formulação implementada nesse estudo desacoplou o cálculo de equilíbrio de fases das equações 4.4 dentro de cada iteração do método de Newton. Assim, conforme mostra a Figura 4.4, o cálculo composicional é realizado com as Pressões $(P_i)^\tau$ e composições globais $(z_i^k)^\tau = (N_i^k)^\tau / (\sum_{k=1}^{n_c} (N_i^k)^\tau)$ da iteração newtoniana anterior τ e então, com as frações molares $(x_i^k)^\tau$, $(y_i^k)^\tau$ e $(\mathcal{L}_i)^\tau$, são calculados os resíduos da equação 4.4.

Enquanto o vetor dos resíduos não estiver suficientemente próximo de zero, o vetor \mathbf{u} é atualizado da segundo a equação 4.5 a cada iteração τ , onde \mathbf{J} é a matriz jacobiana do vetor \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} (\mathbf{u})^{\tau+1} &= (\mathbf{u})^\tau - (\mathbf{J}^{-1}\mathbf{R})^\tau \\ \mathbf{J} &= (j_{pq}) \\ (j_{pq}) &= \frac{\partial R_q}{\partial u_p} \end{aligned} \quad (4.5)$$

As derivadas parciais do vetor de resíduos $\mathbf{R}(\mathbf{u})$ com relação a N_i^k , P_i e s_i são, majoritariamente, imediatas e obtidas analiticamente. As exceções são as derivadas das variáveis composicionais x_j^k , y_j^k e \mathcal{L}_i e, conseqüentemente, de suas variáveis dependentes ξ^{gas} , g^{gas} , ξ^{liq} e g^{liq} (que serão descritas mais adiante), com relação às variáveis primárias P_i e N_i^k , que serão obtidas conforme o procedimento encontrado em Wong *et al.* (1987). Como mencionado anteriormente, ao final da rotina do *flash* bifásico são obtidos, para cada nó i , as frações molares x_i^k , y_i^k e \mathcal{L}_i sendo que, para cada componente, o número de moles está dividido entre a fase líquida e gasosa:

$$N^k = N_{liq}^k + N_{gas}^k \quad (4.6)$$

As derivadas parciais da equação 4.6 com relação as essas a P e N^m , por

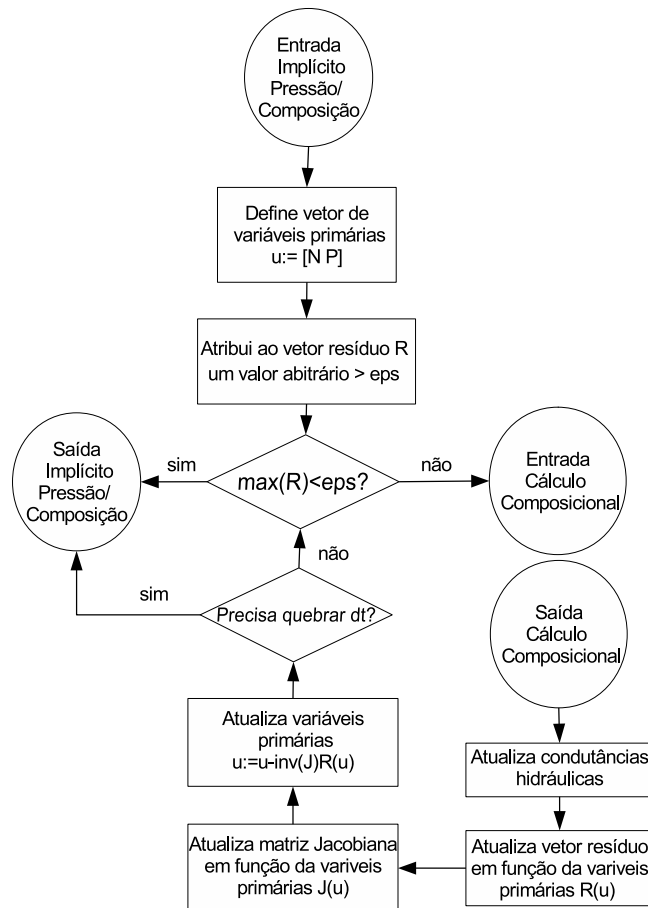


Figura 4.4: Fluxograma da implementação do método de *Newton Raphson*: definição das variáveis primárias, cálculo do vetor de Resíduos e da matriz Jacobiana, atualização das variáveis primárias e verificação da convergência ou da necessidade de quebra de passo de tempo

serem variáveis primárias, fornecem as seguintes relações:

$$\frac{\partial N_{liq}^k}{\partial P} = -\frac{\partial N_{gas}^k}{\partial P} \tag{4.7}$$

$$\frac{\partial N_{liq}^k}{\partial N^m} = \delta_{km} - \frac{\partial N_{gas}^k}{\partial N^m}$$

No sistema bifásico a igualdade de fugacidades para cada componente l , nas duas fases, é atingida ao final do *flash* (procedimento definido na seção 3.5) e a derivada parcial dessa relação com respeito às variáveis independentes P e N^m é dada pela equação:

$$\begin{aligned}
 f_{liq}^l - f_{gas}^l &= 0 \\
 \sum_{k=1}^{n_c} \left(\frac{\partial N_{liq}^k}{\partial P} \frac{\partial f_{liq}^l}{\partial N_{liq}^k} - \frac{\partial N_{gas}^k}{\partial P} \frac{\partial f_{gas}^l}{\partial N_{gas}^k} \right) &= \frac{\partial f_{gas}^l}{\partial P} - \frac{\partial f_{liq}^l}{\partial P} \\
 \sum_{k=1}^{n_c} \left(\frac{\partial N_{liq}^k}{\partial N^m} \frac{\partial f_{liq}^l}{\partial N_{liq}^k} - \frac{\partial N_{gas}^k}{\partial N^m} \frac{\partial f_{gas}^l}{\partial N_{gas}^k} \right) &= 0
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Substituindo as relações 4.7 em 4.8 chega-se ao sistema de n_c equações 4.9 e aos n_c sistemas de n_c equações 4.10:

$$\sum_{k=1}^{n_c} \frac{\partial N_{liq}^k}{\partial P} \left(\frac{\partial f_{liq}^l}{\partial N_{liq}^k} + \frac{\partial f_{gas}^l}{\partial N_{gas}^k} \right) = \frac{\partial f_{gas}^l}{\partial P} - \frac{\partial f_{liq}^l}{\partial P} \tag{4.9}$$

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

$$\sum_{k=1}^{n_c} \frac{\partial N_{liq}^k}{\partial N^m} \left(\frac{\partial f_{liq}^l}{\partial N_{liq}^k} + \frac{\partial f_{gas}^l}{\partial N_{gas}^k} \right) = \frac{\partial f_{gas}^l}{\partial N_{gas}^m} \tag{4.10}$$

$$k, l, m = 1, \dots, n_c$$

As formas analíticas das derivadas parciais de f_{liq}^l e f_{gas}^l com relação a N_{liq}^k , N_{gas}^k e P encontram-se em Chang (1990).

Uma vez obtidas $\frac{\partial N_{liq}^k}{\partial N^m}$, $\frac{\partial N_{gas}^k}{\partial N^m}$, $\frac{\partial N_{liq}^k}{\partial P}$ e $\frac{\partial N_{gas}^k}{\partial P}$, as derivadas parciais de x_i^k , y_i^k são imediatamente obtidas através das relações (Santos, 2013):

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial x^k}{\partial P} &= \sum_{s=1}^{n_c} \frac{\partial x^k}{\partial N_{liq}^s} \frac{\partial N_{liq}^s}{\partial P} \quad \text{e} \quad \frac{\partial x^k}{\partial N^m} = \sum_{s=1}^{n_c} \frac{\partial x^k}{\partial N_{liq}^s} \frac{\partial N_{liq}^s}{\partial N^m} \\
 \frac{\partial y^k}{\partial P} &= \sum_{s=1}^{n_c} \frac{\partial y^k}{\partial N_{gas}^s} \frac{\partial N_{gas}^s}{\partial P} \quad \text{e} \quad \frac{\partial y^k}{\partial N^m} = \sum_{s=1}^{n_c} \frac{\partial y^k}{\partial N_{gas}^s} \frac{\partial N_{gas}^s}{\partial N^m}
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Onde

$$\begin{aligned}
 x^k &= \frac{N_{liq}^k}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{liq}^k} \Rightarrow \frac{\partial x^k}{\partial N_{liq}^s} = \frac{(\delta_{ks} - x^k)}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{liq}^k} \\
 y^k &= \frac{N_{gas}^k}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{gas}^k} \Rightarrow \frac{\partial y^k}{\partial N_{gas}^s} = \frac{(\delta_{ks} - y^k)}{\sum_{k=1}^{n_c} N_{gas}^k}
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Enquanto as derivadas parciais de \mathcal{L} , Z_{liq} e Z_{gas} são obtidas da forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = \frac{\sum_{k=1}^{n_c} N_{liq}^k}{\sum_{k=1}^{n_c} N^k} &\Rightarrow \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P} = \frac{\sum_{k=1}^{n_c} \frac{\partial N_{liq}^k}{\partial P}}{\sum_{k=1}^{n_c} N^k} \\ &\Rightarrow \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial N^m} = \frac{\sum_{k=1}^{n_c} \frac{\partial N_{liq}^k}{\partial N^m} - \mathcal{L}}{\sum_{k=1}^{n_c} N^k} \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_{liq}}{\partial P} &= \sum_{s=1}^{n_c} \frac{\partial Z_{liq}}{\partial N_{liq}^s} \frac{\partial N_{liq}^s}{\partial P} + \frac{\partial Z_{liq}}{\partial P} \Big|_{N_{liq}^s} & \text{e} & \frac{\partial Z_{liq}}{\partial N^m} = \sum_{s=1}^{n_c} \frac{\partial Z_{liq}}{\partial N_{liq}^s} \frac{\partial N_{liq}^s}{\partial N^m} \\ \frac{\partial Z_{gas}}{\partial P} &= \sum_{s=1}^{n_c} \frac{\partial Z_{gas}}{\partial N_{gas}^s} \frac{\partial N_{gas}^s}{\partial P} + \frac{\partial Z_{gas}}{\partial P} \Big|_{N_{gas}^s} & \text{e} & \frac{\partial Z_{gas}}{\partial N^m} = \sum_{s=1}^{n_c} \frac{\partial Z_{gas}}{\partial N_{gas}^s} \frac{\partial N_{gas}^s}{\partial N^m} \end{aligned} \quad (4.14)$$

As formas analíticas das derivadas parciais de Z_{liq} e Z_{gas} com relação a N_{liq}^k , N_{gas}^k e P encontram-se em Chang (1990).

Embora omitido o índice i , para não sobrecarregar a notação, o procedimento descrito deve ser realizado para cada nó i imediatamente após o *flash*, para as misturas bifásicas. Para o caso de misturas monofásicas, as derivadas parciais $\frac{\partial Z_{liq}}{\partial P}$, $\frac{\partial Z_{liq}}{\partial N^m}$ e $\frac{\partial x}{\partial N} = \frac{\partial z}{\partial N}$ (ou $\frac{\partial Z_{gas}}{\partial P}$, $\frac{\partial Z_{gas}}{\partial N^m}$ e $\frac{\partial y}{\partial N} = \frac{\partial z}{\partial N}$) são imediatas e devem ser calculadas após o teste de estabilidade.

A partir das derivadas parciais obtidas anteriormente é possível derivar todos os termos de $\mathbf{R}(\tilde{\mathbf{u}})$ com relação as variáveis primárias P e N , caracterizando uma formulação totalmente implícita.

4.4.1

Upwind

Da maneira como estão definidas as equações 4.4, as frações molares de cada fase x_j^k e y_j^k são propriedades da aresta j , enquanto a fração molar global $z_i^k = N_i^k / (\sum_{k=1}^{n_c} N_i^k)$ é propriedade do nó i . Para resolver esse problema foi utilizada a regra do ponto simples a montante, ou *upwind*, que consiste em, para o exemplo Figura 3.2:

$$z_j^k = \begin{cases} z_i^k, & \text{se } P_i \geq P_{i+1} \\ z_{i+1}^k, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.15)$$

Uma vez conhecida qual composição z_j^k deve ser empregada no cálculo composicional, para se obter x_j^k , y_j^k , \mathcal{L}_j , Z_j^{liq} e Z_j^{gas} , resta qual pressão (P_j) e deve ser imposta à aresta j . Duas soluções são possíveis:

1. Upwind da pressão

$$P_j = \begin{cases} P_i, & \text{se } P_i \geq P_{i+1} \\ P_{i+1}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.16)$$

2. Ponto médio de pressão

$$P_j = \frac{P_i + P_{i+1}}{2} \quad (4.17)$$

Na primeira solução 4.16, que foi a utilizada nesse trabalho por razões de simplicidade, as pressões impostas para o cálculo composicional são as mesmas pressões dos nós a serem utilizadas no vetor resíduo R_V das equações 4.4. O mesmo não ocorre na segunda solução, sendo necessária a seguinte modificação na definição de R_V :

$$R_V = (N_i)^{t+1} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n_{aresta_i}} |c_{ij}| \frac{(P_j)^{t+1} \bar{V}_j [1 + \bar{v}_j ((P_j)^{t+1} - \bar{P})]}{\mathcal{L}_j^\tau \left(\frac{(Z_j^{liq})^\tau R_{flu} T}{P_j^{t+1}} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k x_k \right) + (1 - \mathcal{L}_j^\tau) \left(\frac{(Z_j^{gas})^\tau R_{flu} T}{P_j^{t+1}} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k y_k \right)} \quad (4.18)$$

A equação 4.18 obriga que o número de moles total de cada nó i seja igual à metade da soma do número de moles total das arestas de volume V_j e pressão P_j que conectam esse nó.

Por motivos de simplicidade para implementação, os resultados das simulações que serão apresentados nesse trabalho utilizaram o *upwind* de pressão em sua formulação.

4.4.2

Atualização das Saturações, Condutâncias Hidráulicas e Densidades Molares

Obtidos \mathcal{L}_j , Z_j^{liq} e Z_j^{gas} , do cálculo composicional para aresta j , é possível atualizar o valor de suas saturações:

$$\begin{aligned}
S_j^{gas} &= \frac{V_j^{gas}}{V_j^{gas} + V_j^{liq}} \\
&= \frac{1}{1 + \frac{V_j^{liq}}{V_j^{gas}}} \\
&= \frac{1}{1 + \frac{\mathcal{L}_j \left(\frac{Z_j^{liq} R_{flu} T}{P_j} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k x_k \right)}{(1-\mathcal{L}_j) \left(\frac{Z_j^{gas} R_{flu} T}{P_j} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k y_k \right)}} \\
S_j^{liq} &= 1 - S_j^{gas}
\end{aligned} \tag{4.19}$$

A saturação S_j^{gas} permite atualizar o raio interno da Figura 3.3 através da equação 3.50 e, conseqüentemente, as condutâncias hidráulicas da equação 3.49.

O cálculo das densidades molares ξ_j^{liq} e ξ_j^{gas} é consequência direta da equação de estado, conforme indica a equação 4.20

$$\begin{aligned}
\xi_j^{liq} &= \frac{N_j^{liq}}{V_j^{liq}} = \frac{1}{\frac{Z_j^{liq} R_{flu} T}{P_j} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k x_k} \\
\xi_j^{gas} &= \frac{N_j^{gas}}{V_j^{gas}} = \frac{1}{\frac{Z_j^{gas} R_{flu} T}{P_j} - \sum_{k=1}^{n_c} v_k y_k}
\end{aligned} \tag{4.20}$$

4.4.3 Critério de Convergência

A forma como estão escritos os resíduos R_N , R_V e R_C , nas equações 4.4, com a mesma dimensão (número de moles), facilita a definição do critério de parada do algoritmo. Sendo assim, a convergência é assumida quando o maior valor absoluto do vetor de resíduos for M vezes inferior (ex: $M=1000$) ao menor número não nulo de moles por componente de toda a rede no instante t anterior, conforme a expresso em 4.21

$$\max(|\mathbf{R}^t|) \leq \varepsilon = \frac{\min_{i=1, k=1}^{N_{No}, n_c} (N_i^k \neq 0)^t}{M} \tag{4.21}$$

4.4.4

Quebra do Passo de Tempo

Nessa implementação, haverá interrupção dos ciclos newtonianos da Figura 4.4 e sinalização para quebra do passo de tempo toda vez que:

- após a atualização do vetor \mathbf{u} pela equação 4.5, algum nó tenha algum componente com quantidade de moles negativa ($N_i^k < 0$), ou
- o método não convirja após um número máximo de interações pré-determinado ($\tau > ITER_{max}$) e a redução do máximo resíduo absoluto entre uma iteração e a anterior seja maior que a desejada ($\max(|\mathbf{R}^{\tau+1}|) / \max(|\mathbf{R}^\tau|) > CONV_{min}$)

Uma vez convergido o método de Newton, ainda é possível que a solução encontrada ainda possua um erro de balanço de materiais, fornecido pela equação 4.1, maior do que o desejado. Nesse caso também haverá sinalização para quebra do passo de tempo.

5

Validação do Modelo

Nesse capítulo serão abordados casos de validação do modelo desenvolvido tanto para o comportamento do fluido e suas propriedades quanto para o modelo de fluxo.

5.1

Verificação do Modelo de Fluido

A fim de testar a implementação do cálculo de equilíbrio de fases e das propriedades de transporte do fluido, a solução desse trabalho foi comparada com os resultados do WINPROP(Winprop, 2010), simulador termodinâmico comercial desenvolvido pela CMG, para um dos fluidos contidos no trabalho de Coats *et al.* (1986), não levando em conta os componentes acima de C6.

k	z	Pc[atm]	Tc[K]	Vc[l/mol]	M[g/mol]	vol shift	ω
CO ₂	0.007792	72.80	304.2	0.0940	44.010	-0.094346	0.225
H ₂ S	0.000452	88.20	373.2	0.0985	34.080	-0.115477	0.100
C1	0.658611	45.40	190.6	0.0990	16.043	-0.153860	0.008
C2	0.153021	48.20	305.4	0.1480	30.070	-0.102103	0.098
C3	0.085940	41.90	369.8	0.2030	44.097	-0.073300	0.152
C4	0.045511	36.00	408.1	0.2630	58.124	-0.057068	0.176
C5	0.027216	33.40	460.4	0.3060	72.151	-0.034462	0.227
C6	0.021457	32.46	507.5	0.3440	86.000	-0.004992	0.275

Tabela 5.1: Composição do Fluido e propriedades dos componentes do fluido no.2 utilizado em Coats *et al.* (1986). A composição foi renormalizada pois os componentes C7+ não foram levados em conta

No experimento da Figura 5.1 uma amostra do fluido em questão foi submetida à temperatura de 40°C e teve a pressão variada de 420kgf/cm² até 40kgf/cm². Para cada par pressão e temperatura foi chamada a rotina de cálculo composicional descrita na seção 4.2 e os resultados, obtidos para fator de compressibilidade, massa específica e viscosidade das fases gasosa e líquida (quando aplicável), foram comparados com os resultados do WINPROP(Winprop, 2010) para as mesmas condições. Os resultados obtidos se aproximam dos apresentados pelo WINPROP(Winprop, 2010), como mostra a Figura 5.1.

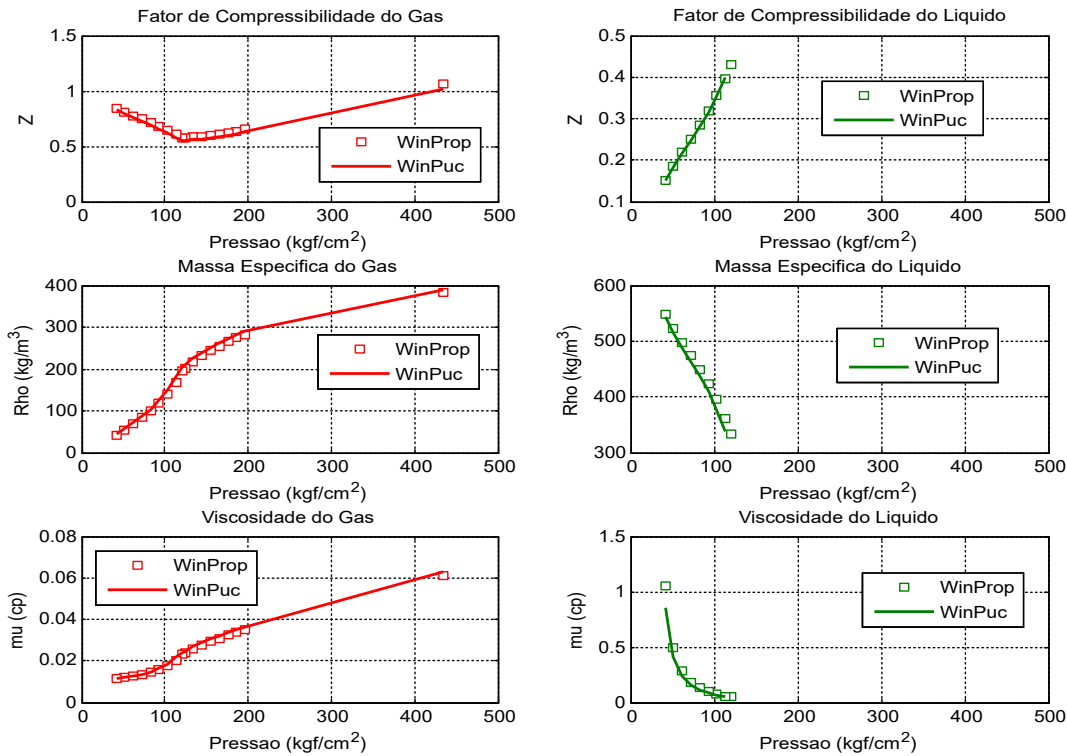


Figura 5.1: Fator de compressibilidade, Massa Específica e Viscosidade do fluido de Coats *et al.* (1986), submetido à temperatura de 40°C

5.2 Validação do Modelo de Escoamento

Nessa seção, alguns casos de teste serão abordados para verificar a formulação descrita no capítulo 3 e implementada no capítulo 4. A solução numérica será comparada com soluções analíticas exatas, incluindo o caso de produção por depleção em reservatório de gás seco e de gás retrógrado, escoamento 1-D monofásico de fluido pouco compressível e deslocamento 1-D por fluido totalmente miscível.

5.2.1 Produção por Depleção em Reservatório de Gás Seco

A equação de balanço de materiais, em um reservatório de gás seco, produzindo por depleção pode ser escrita como (Dake, 1983):

$$\frac{P}{Z} = \left(\frac{P}{Z}\right)_{inicial} \left(1 - \frac{G_p}{G_{inicial}}\right) \quad (5.1)$$

onde P é a pressão média do reservatório, Z é o fator de compressibilidade, G_p é o volume de gás produzido acumulado e $G_{inicial}$ é o volume original de *gas in place*.

Segundo essa equação há uma relação linear entre a razão P/Z e o volume produzido acumulado. Além disso, o zero da função P/Z corresponde ao volume de *gas in place*, ou seja, o volume inicial de gás do reservatório reportado na pressão atmosférica.

A fim de verificar se o modelo de simulação respeita a relação 5.1, um meio poroso contínuo e retilíneo foi representado por rede de 10+2 nós (10 nós do meio poroso + 1 nó de entrada + 1 nó de saída) e 11 gargantas com raio e comprimento de $23\mu m$ e $6000\mu m$, respectivamente, conforme ilustra a Figura 5.2. A rede é então inicializada, com metano a pressão inicial $P_i = 121kgf/cm^2$ e temperatura de $20^\circ C$, e operada a vazão constante $Q_{in} = 0$ no nó de entrada (reservatório selado nessa extremidade) e a pressão constante $P_e = 118.4kgf/cm^2$ no nó de saída, de modo que seja produzido gás durante $100\mu s$ como mostra a Figura 5.3. As vazões volumétricas produzidas são convertidas para vazão na pressão atmosférica e integradas no tempo obtendo G_p . Ao mesmo tempo, para cada *time-step* a pressão global da rede, P , é calculada através de uma média da pressão dos nós, Figura 5.4, ponderada pelo volume de cada nó, resultando no perfil de pressão da Figura 5.6. A partir da composição do gás produzido, são calculados os fatores de compressibilidade Z para a pressão global média rede, P , e os valores de P/Z são apresentados em um gráfico cartesiano em função de G_p , como exposto na Figura 5.5.

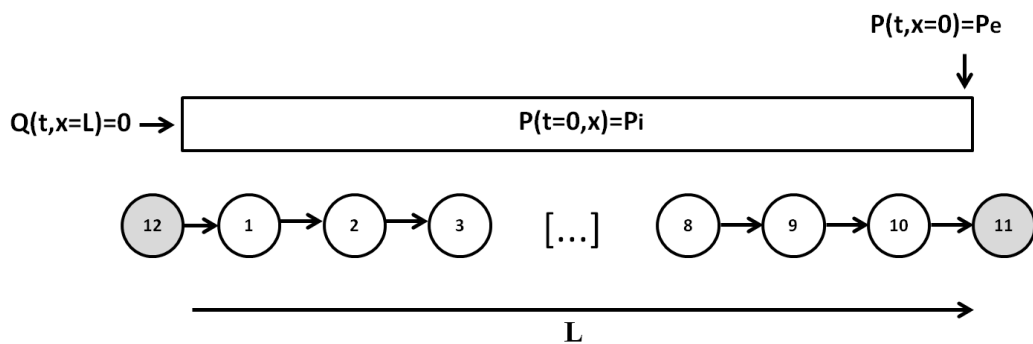


Figura 5.2: Meio contínuo (acima) e esquema da rede de capilares equivalente (abaixo), com 10+2 nós.

O gráfico $\frac{P}{Z}$ versus G_p da Figura 5.5 sugere comportamento linear entre as variáveis e a extrapolação da reta da regressão (excluindo-se os primeiros pontos) intercepta o eixo das abscissas em $G_p = 1.587 \times 10^{-8} m^3$ (a pressão de 1 atm), o que corresponde a um erro de estimativa de volume inicial de 0.88% (volume inicial da rede - a pressão de 1 atm - igual a $G_{inicial} = 1.6011 \times 10^{-8} m^3$).

Como forma de aferição de validade também foi calculado o erro de balanço de materiais por componente da equação 4.1 e esse resultado é apresentado na Figura 5.6.

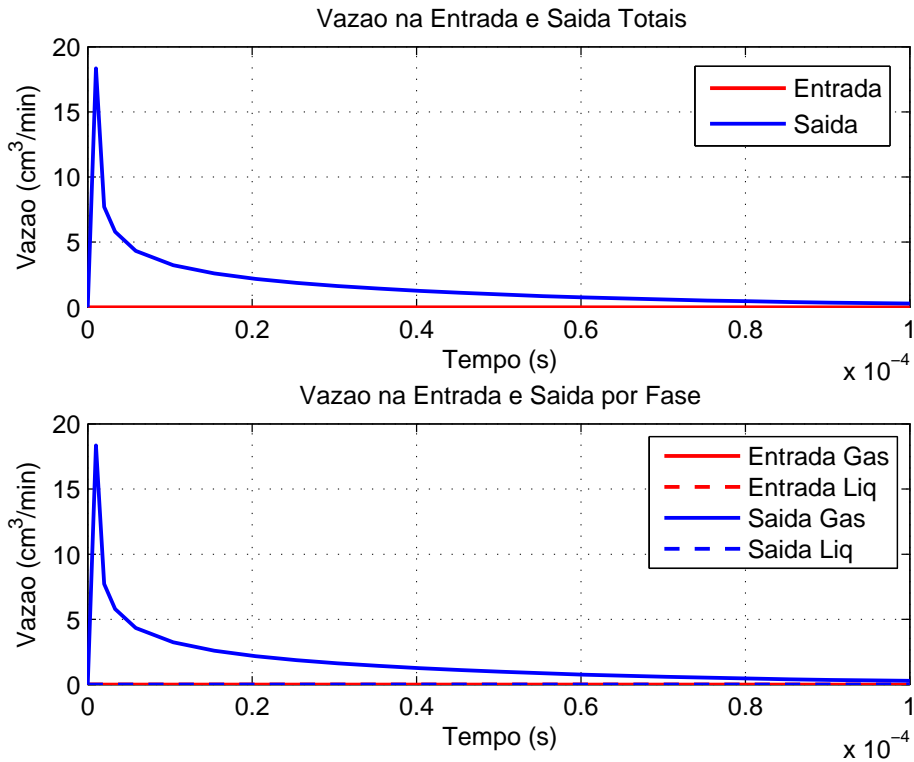


Figura 5.3: Vazões volumétricas, totais e por fase, na entrada e na saída da rede reportadas respectivamente às pressões da entrada e da saída.

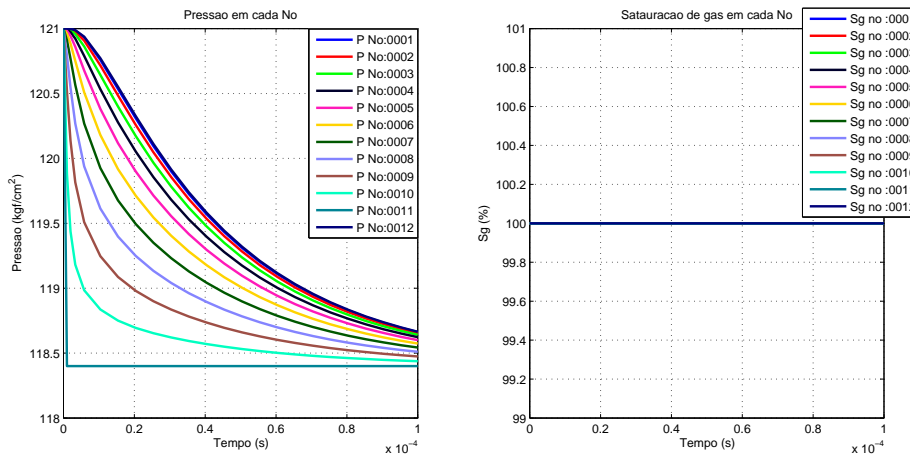


Figura 5.4: Pressão e Saturação dos nós da rede, nós 11 e 12 correspondem aos nós da saída e entrada respectivamente. A saturação de gás constante e igual a 100% em todos os nós confirma a premissa de que não houve condensação dentro do meio poroso

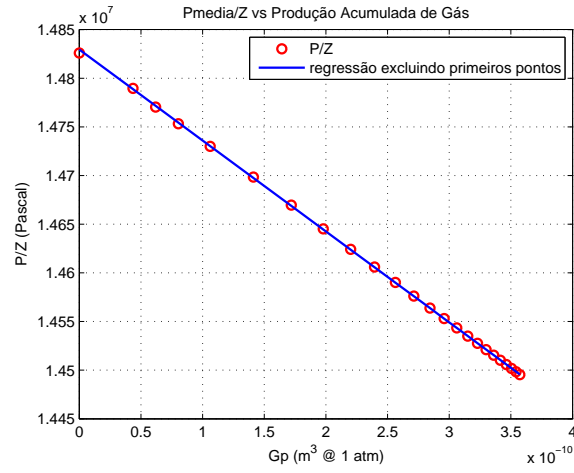


Figura 5.5: $\frac{P}{Z}$ versus Gp sugerindo comportamento linear e regressão dos pontos(excluindo-se os primeiros)

PUC-Rio - Certificação Digital N° 1512292/CA

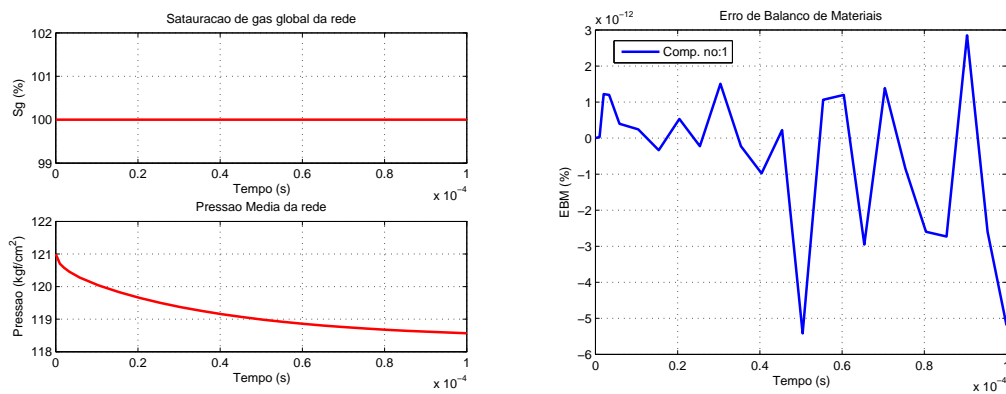


Figura 5.6: Saturação de gás e pressão globais da rede (à esquerda) e Erro de balanço de materiais (à direita) da solução numérica para a rede de 10+2 nós

5.2.2

Produção por Depleção em Reservatório de Gás Condensado Retrógrado

O mesmo exemplo da seção 5.2.1 foi estudado para o fluido apresentado na seção 5.1. Segundo Rayes *et al.* (1992), a equação 5.1 também pode ser usada para se estimar o volume de *gas in place* contanto que se use o fator de compressibilidade equivalente para 2 fases, dado por:

$$Z_{2p} = \mathcal{L}Z^{liq} + (1 - \mathcal{L})Z^{gas} \quad (5.2)$$

Através do mesmo método descrito na seção 5.2.1, porém utilizando Z_{2p} da equação 5.2, chega-se a um volume de *gas in place* estimado de $2.6682 \times 10^{-8}m^3$ para um volume na inicialização de $2.7162 \times 10^{-8}m^3$, correspondendo a um erro de estimativa de volume inicial de 1.7671%. O gráfico G_p versus P/Z_{2p} e o erro de balanço de materiais para cada componente encontram-se nas Figuras 5.9 e 5.10. Também na Figura 5.10 é mostrada a evolução temporal das saturações e pressões globais médias da rede.

Além da verificação do balanço de materiais por componente da Figura 5.10 é importante notar a produção de condensado na Figura 5.7 e a formação de condensado nos nós na Figura 5.8 (queda na saturação de gás nos nós mais próximos da saída). A saturação de gás inicial de todos os nós é 100%. Uma pressão abaixo ($P_e = 118.4kgf/cm^2$) do ponto de orvalho imposta ao nó de saída que tem sua saturação de gás instantaneamente reduzida devido a formação da fase líquida. Os nós a montante da saída vão sofrendo condensação a medida que a depleção destes traga sua pressão para abaixo do ponto de orvalho. Outra informação relevante da Figura 5.8 é a mudança do envelope de fases do nó de saída (nó 11) após o início da condensação do nó a montante (nó 10): uma vez que o nó de saída opera a pressão constante, a única forma de mudar a saturação de gás desse nó é mudando sua composição e isso só ocorre a após a condensação do nó a montante.

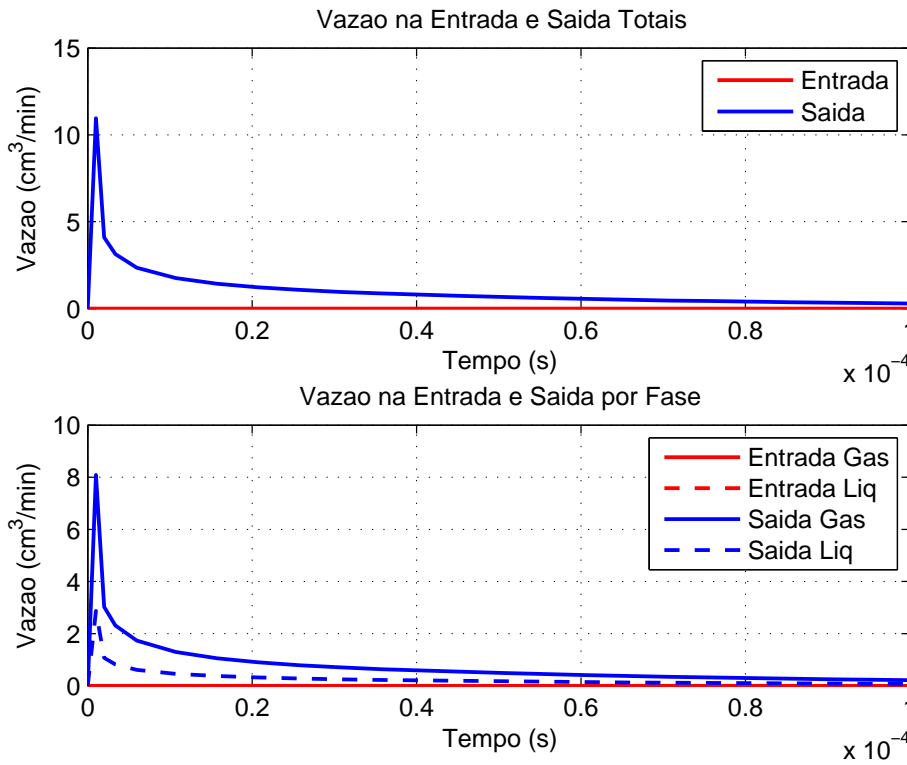


Figura 5.7: Vazões volumétricas, totais e por fase, na entrada e na saída da rede reportadas respectivamente às pressões da entrada e da saída.

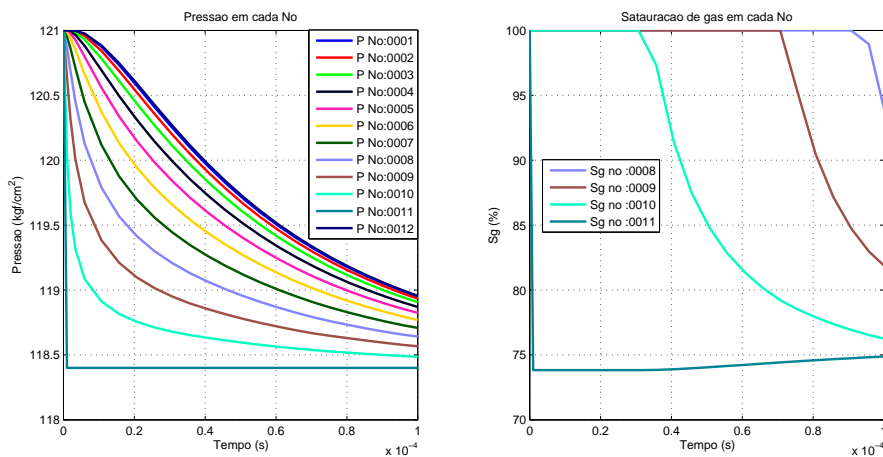


Figura 5.8: Pressão e Saturação dos nós da rede, nós 11 e 12 correspondem aos nós da saída e entrada respectivamente.

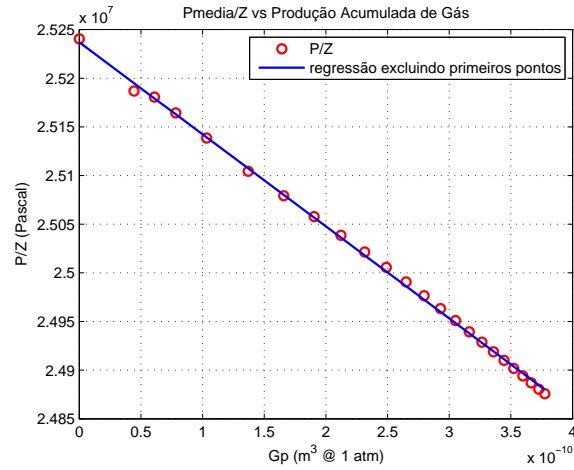


Figura 5.9: G_p versus $\frac{P}{Z}$ sugerindo comportamento linear e regressão dos pontos(excluindo-se os primeiros)

PUC-Rio - Certificação Digital N° 1512292/CA

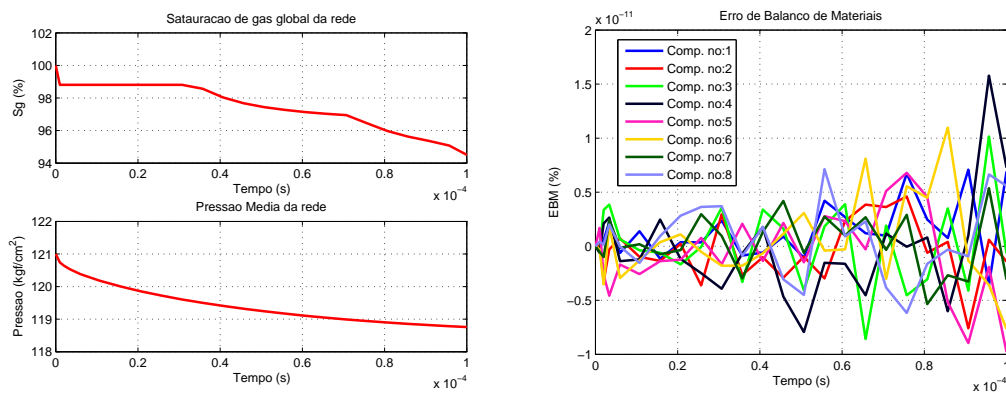


Figura 5.10: Saturação de gás e pressão globais da rede (à esquerda) e Erro de balanço de materiais (à direita) da solução numérica para a rede de 10+2 nós

5.2.3

Escoamento Unidimensional Monofásico de Fluido Pouco Compressível

Assumindo que a Lei de Darcy é válida, a equação de conservação da massa para um fluxo monofásico, compressível em um meio homogêneo e isotrópico pode ser escrita como (Ahmed *et al.*, 2006):

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = \frac{\phi \eta c_t}{\kappa} \frac{\partial P}{\partial t} \quad (5.3)$$

onde $P(x, t)$ é a pressão do reservatório ao longo da distância e em função do tempo, c_t é a soma da compressibilidade do fluido e do material que o contém, ϕ é a porosidade do meio, η é a viscosidade do fluido e κ é a permeabilidade absoluta da Lei de Darcy.

Resolvendo analiticamente a equação 5.3 para um corpo retilíneo de comprimento L compressibilidade, porosidade e permeabilidade constantes, pressão inicial P_i , pressão imposta P_e em uma extremidade e vazão imposta $Q_{in} = 0$ na outra, para o mesmo meio poroso da Figura 5.2, tem-se:

$$P_D(x_D, t_D) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\gamma_n} \exp(-\gamma_n^2 t_D) \sin(\gamma_n x_D) \quad (5.4)$$

$$P_D = \frac{P(x, t) - P_e}{P_i - P_e}, \quad x_D = \frac{x}{L}, \quad t_D = \frac{\kappa t}{\phi \eta c_t L^2}$$

Visto que a formulação deste trabalho não utiliza a Lei de Darcy, há duas formas de estabelecer uma relação de correspondência entre os resultados dos modelos analítico e numérico:

- $k_{teorico}$: por ser uma rede homogênea, assumir o k equivalente de Darcy de uma garganta $k = R^2/8$ para toda a rede
 - k_{medido} : calcular a permeabilidade global da rede após se atingir o regime permanente, conforme o procedimento a seguir
1. realizar uma outra simulação impondo pressão (P_{in} e P_{out}) nas 2 extremidades da rede durante por um tempo longo o suficiente para se atingir o regime permanente (quando o gráfico (x_D vs P_D) se torna uma reta)
 2. com vazão do regime permanente Q calcular a razão $\frac{Q}{\Delta P} = \frac{Q}{P_{in} - P_{out}}$
 3. a partir da definição da Lei de Darcy para um prisma de secção transversal de área A e comprimento L ($Q = A \frac{\kappa}{\eta} \frac{\Delta P}{L}$) - e a de volume poroso ($V_p = \phi AL$), modificar a definição de t_D da equação 5.4 para:

$$t_D = \left(\frac{Q}{\Delta P} \right) \frac{t}{c_t V_p} \quad (5.5)$$

onde V_p é o volume da rede por onde escoo o fluido, ou seja, o volume interno da rede.

Foi simulada a mesma rede dos problemas anteriores com as mesmas condições de contorno, sendo apenas trocado o fluido para decano a $5^\circ C$ e incorporada ao modelo a compressibilidade da rede de $5 \times 10^{-7} Pa^{-1}$. Para a solução analítica, a compressibilidade da rede deve ser somada a compressibilidade do fluido, calculada a partir da relação $c_{fluido} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial P}$. Para a solução numérica, a compressibilidade do fluido e da rede são *inputs* da equação da consistência dos volumes 3.15 (a compressibilidade da rede está explícita em \bar{v} e a do fluido é consequência da Equação de Estado). A comparação da solução numérica para a rede de 10+2 nós com a solução analítica está na Figura 5.11 para a abordagem de k_{medido} e $k_{teorico}$.

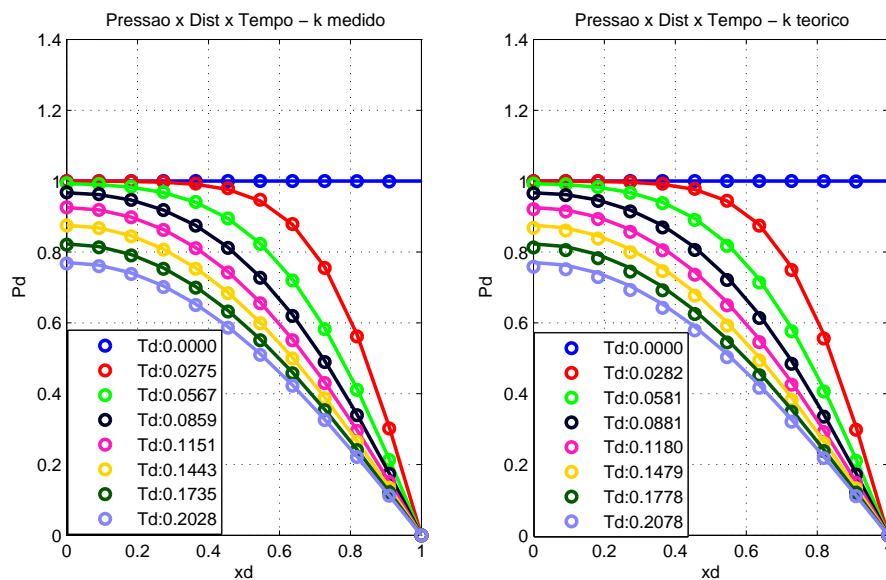


Figura 5.11: Comparação da solução analítica normalizada (em círculos) com a solução normalizada da rede de 10+2 nós (em contínuo) para k_{medido} e $k_{teorico}$

Para fins de verificação, o erro de balanço de materiais é apresentado na Figura 5.12. Na mesma Figura também são mostradas as vazões produzidas total e por fase durante a despressurização da rede ao longo do tempo. A evolução temporal da pressão de todos os nós da rede é apresentada na Figura 5.13.

5.2.4 Deslocamento Unidimensional por Fluido Totalmente Miscível

A fim de verificar a formulação das equações de conservação, o resultado da simulação para um deslocamento miscível, em uma rede 1D, foi comparado

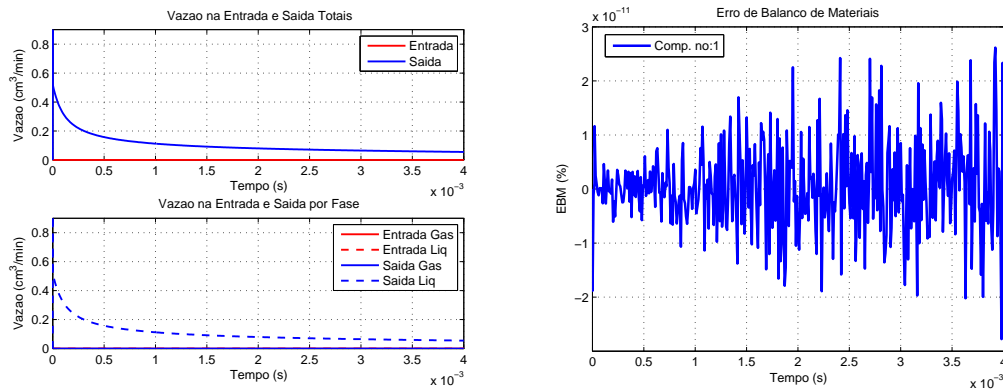


Figura 5.12: Vazões na entrada e saída da rede de 10+2 nós, à esquerda, e erro de balanço de materiais da solução numérica, à direita

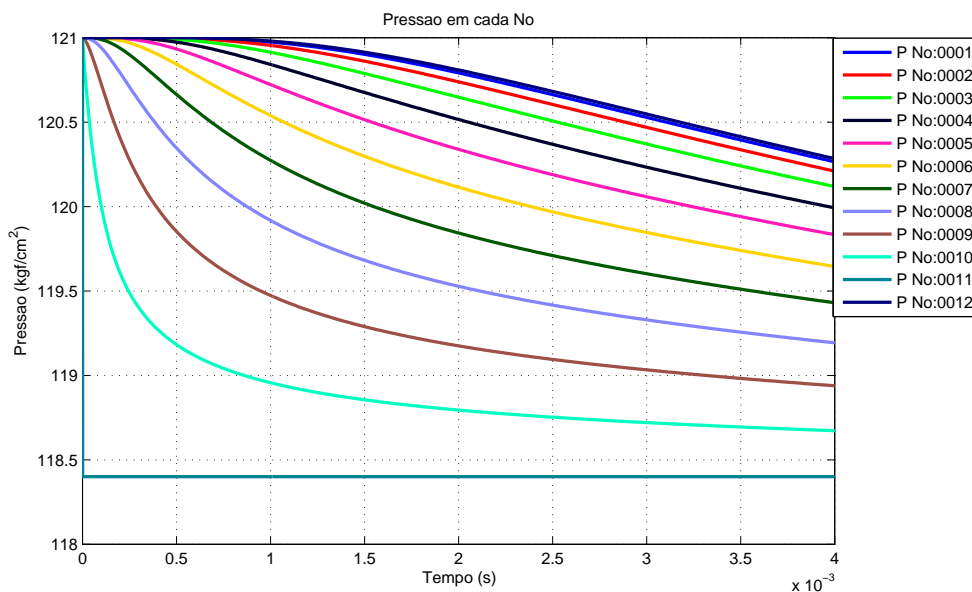


Figura 5.13: Pressão em cada nó da solução da rede de 10+2 nós

com a solução analítica da convecção-difusão. Embora a difusão física não tenha sido modelada nesse trabalho, os resultados da simulação apresentam efeitos da difusão numérica, que foi relacionada com a difusão física da solução analítica.

Foi simulada uma rede 1D com N+2 nós, inicializada com a fração molar $z = [80\%C10; 20\%C10]$ à pressão de $300\text{kgf}/\text{cm}^2$ e à temperatura de 5°C . A razão de se ter 2 componentes exatamente iguais (ambos os componente são decano) é impedir que mudanças na composição alterem a fase e as propriedades do fluido. Os capilares desta rede possuem as mesmas dimensões daqueles da rede dos problemas anteriores, o nó de saída foi operado à pressão constante e ao nó de entrada foram aplicadas as seguintes condições de contorno:

1. vazão molar constante de 10^{-4} mol/s , com a mesma fração molar inicial da rede $z = [80\%C10; 20\%C10]$, na entrada e pressão constante igual a inicial da rede na saída
2. após ser atingido o regime permanente, vazão molar constante de 10^{-4} mol/s com fração molar $z = [20\%C10; 80\%C10]$ na entrada e pressão constante igual à inicial da rede na saída

A cada time-step foram gravadas as frações molares de cada nó i e normalizadas da seguinte forma:

$$C_d = \frac{z_i - z_{inicial}}{z_{injetado} - z_{inicial}} \quad (5.6)$$

A equação da convecção-difusão 5.7 descreve a conservação de um componente deslocado com concentração C_d (Lake *et al.*, 1986). Ela assume fluido e rocha incompressíveis (fato contornado ao se aguardar o sistema entrar em regime permanente antes da injeção de um fluido diferente do contido inicialmente na rede), mistura ideal e fase única (motivo de se escolher 2 componentes iguais).

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_d}{\partial t_d} + \frac{\partial C_d}{\partial x_d} - \frac{1}{N_{Pe}} \frac{\partial^2 C_d}{\partial x_d^2} &= 0 \\ t_d = \frac{vt}{L} \quad x_d = \frac{x}{L} \quad N_{Pe} &= \frac{vL}{K_L} \end{aligned} \quad (5.7)$$

O adimensional N_{Pe} , número de Péclet, representa a razão entre as taxas do transporte convectivo e do difusivo (K_L é o coeficiente de difusão). Para deslocamentos 1D e com velocidade superior a 3 cm/dia, N_{Pe} pode ser aproximado pela equação 5.8, onde α_L é a dispersividade longitudinal. (Lake *et al.*, 1986).

$$N_{Pe} \approx \frac{L}{\alpha_L} \quad (5.8)$$

Entende-se por difusão numérica um efeito que pode causar a deformação da frente de avanço da concentração de um componente, pelo fato de se estar usando um esquema *Upwind* em uma discretização de primeira ordem. A difusão numérica para métodos de baixa ordem é aproximadamente $\alpha_{num} = L/\Delta x/2$ (Δx é o comprimento do nó na direção do fluxo) (Kazemi Nia Korrani, 2014). Logo, para o caso de uma rede 1D, com $N + 2$ nós conectados por $N + 1$

capilares de comprimento $\Delta x = L/(N + 1)$, uma boa estimativa do Número de Péclet para difusão numérica é $N_{Pe} \approx 2(N + 1)$.

A solução exata da equação 5.7 é da forma:

$$C_d = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N_{Pe}}{t_d}} \frac{x_d - t_d}{2} \right) + \frac{e^{x_d N_{Pe}}}{2} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N_{Pe}}{t_d}} \frac{x_d + t_d}{2} \right) \right] \quad (5.9)$$

Foram simuladas redes com 20+2, 40+2 e 80+2 nós e a solução numérica foi comparada com a solução analítica da equação 5.9 para N_{Pe} iguais a 42, 82 e 162, conforme indica a Figura 5.2.4. Além da aderência da simulação à solução analítica percebe-se a redução da difusão numérica com o aumento do Número de Péclet para ambas as soluções.

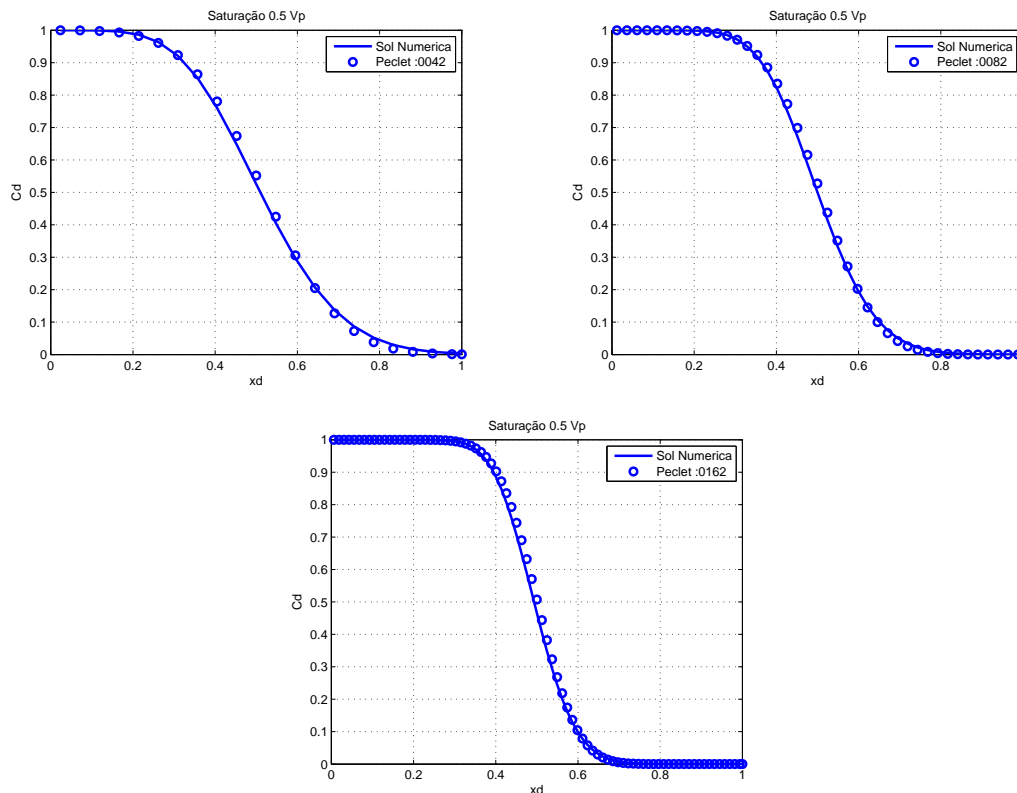


Figura 5.14: Comparação da frente de avanço da solução analítica e numérica, para meio volume poroso injetado após o regime permanente, para redes N_{Pe} iguais a 42, 82 e 162

6

Curvas de permeabilidade relativa Gás-Líquido

Nesse capítulo serão abordados ensaios de despressurização de uma rede de capilares de forma que se alcance o escoamento bifásico nas gargantas dos poros. Uma vez atingido o regime permanente são calculadas a saturação global média da rede e as vazões de cada fase. Esses valores são então convertidos em um ponto da curva de permeabilidade relativa gás-líquido.

6.1

Ensaio em redes 2D

Foram realizados duas séries de ensaios isotérmicos às temperaturas de 5°C e 30°C (linhas tracejadas da Figura 6.1), escolhidas de modo a se ter um ensaio abaixo e outro acima da temperatura crítica, segundo o envelope de fases da Figura 6.1.

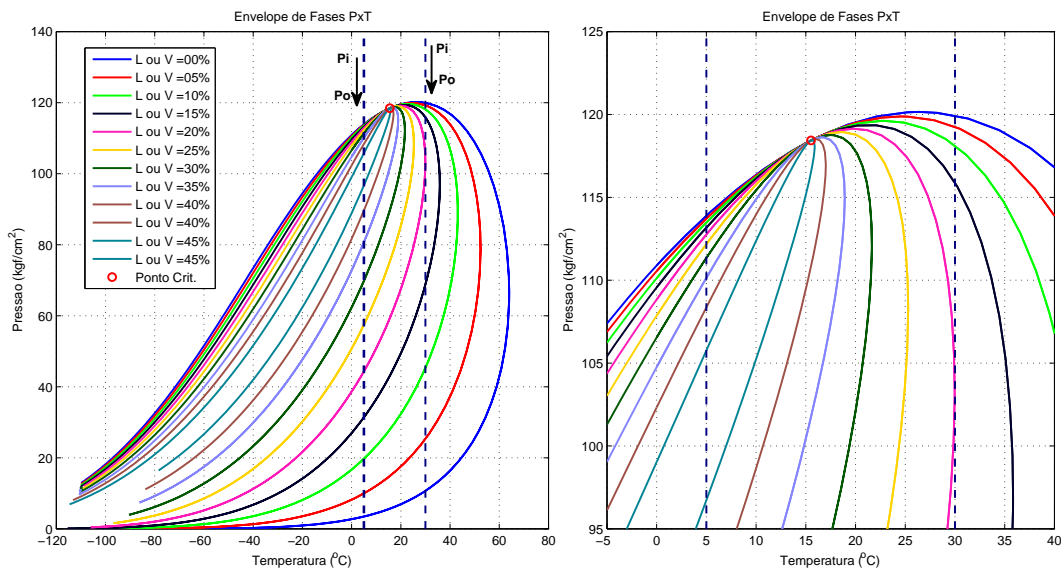


Figura 6.1: Envelope de Fases com Linhas de Qualidade do Fluido apresentado na seção 5.1 obtido através do simulador termodinâmico comercial WIN-PROP(Winprop, 2010).

A Figura 6.2 mostra a evolução da fração molar de líquido \mathcal{L} , da compressibilidade total ($\nu_{liq}S_{liq} + \nu_{gas}S_{gas}$) e das viscosidades da fase líquida

e gasosa em função da pressão, para uma amostra do fluido apresentado na seção 5.1 com composição global constante. O comportamento da fração molar de líquido \mathcal{L} confirma que a despressurização desse fluido leva a mistura de um estado monofásico líquido a um bifásico para a temperatura de $5^{\circ}C$, abaixo da temperatura crítica, e de um estado monofásico gasoso a um bifásico para a temperatura de $30^{\circ}C$, acima da temperatura crítica. Também é observado na Figura 6.2 que, ao contrário da compressibilidade, as viscosidades das fases são as propriedades de transporte mais sensíveis às variações da temperatura.

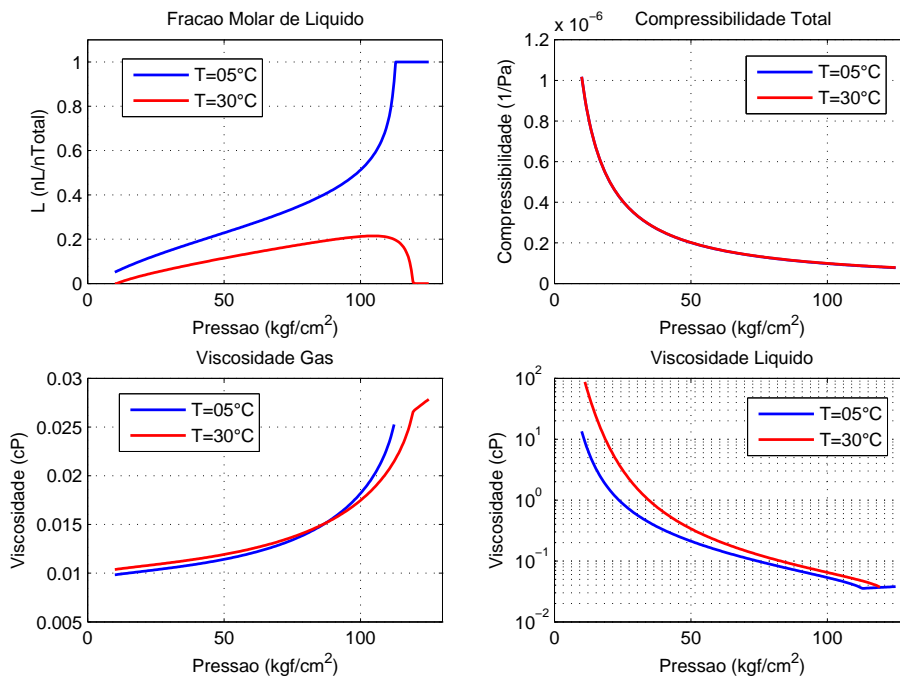


Figura 6.2: Fração molar de líquido (\mathcal{L}), compressibilidade total ($\nu_{liq}S_{liq} + \nu_{gas}S_{gas}$) e viscosidades do gás e do líquido de uma amostra do fluido apresentado em 5.1 submetida a diferentes condições de pressão para às temperaturas constantes de $5^{\circ}C$ e $30^{\circ}C$.

Para a realização de cada ensaio de despressurização foi utilizada uma rede 2D de $N_x N_y + 2$ nós ($N_x N_y$ nós de meio poroso + 1 nó de entrada + 1 nó de saída), inicializada com pressão P_i e operada por pressão constante P_i na entrada e P_o na saída ($P_o = P_i - 0.1 \text{kgf/cm}^2$), tal como indica a Figura 6.3. A rede escolhida tem $50 \times 20 + 2 = 1002$ nós e $50 \times (20 - 1) + 20 \times (50 - 1) + 2 \times 20 = 1970$ gargantas de comprimento constante $L = 6000 \mu\text{m}$ e seção circular com raio seguindo a distribuição 6.1. A escolha de L e R_m foi baseada em Fang *et al.* (1996).

$$\begin{aligned}
 R &= R_m + \sigma R_m [\mathcal{U}(0,1) - 0.5] \\
 R_m &= 23\mu m \\
 \sigma &= 0.2 \\
 \mathcal{U}(0,1) &: \text{distribuição uniforme com valores entre 0 e 1}
 \end{aligned}
 \tag{6.1}$$

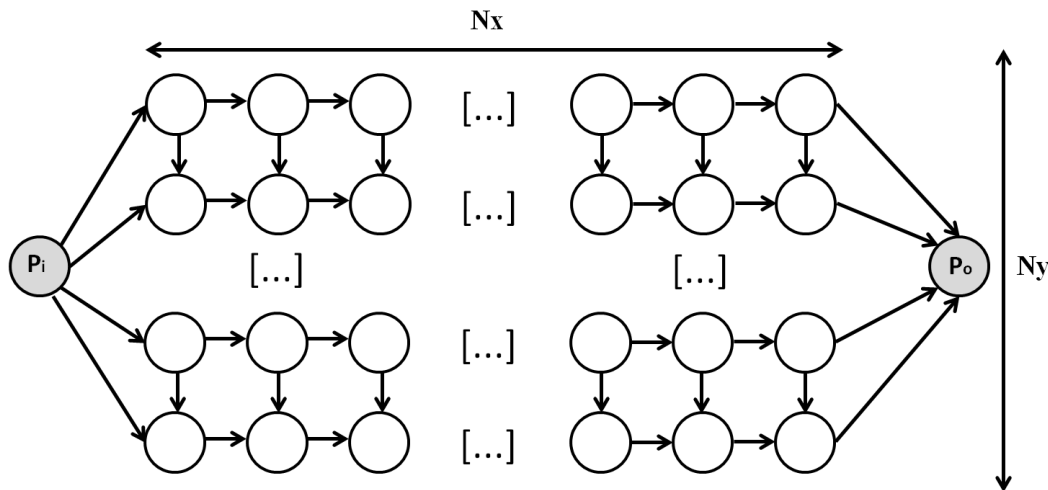


Figura 6.3: Rede 2D com $N_x N_y$ nós de meio poroso + 1 nó de entrada + 1 nó de saída, operada por pressão constante P_i na entrada e P_o na saída ($P_o < P_i$)

As despressurizações forem feitas com o fluido apresentado na seção 5.1, às temperaturas constantes de $5^\circ C$ e $30^\circ C$, havendo escoamento através da rede até serem atingidos 3 critérios de parada:

- as vazões volumétricas na entrada e saída reportadas à pressão média da rede forem iguais (gráfico acima e à esquerda das Figuras 6.4, 6.5 e 6.6)
- as pressões e saturações médias globais da rede tornarem-se constantes (gráfico acima e à direita das Figuras 6.4 e 6.5 e 6.6)
- composição global, z^k da vazão de saída for igual a da entrada, que é imposta e igual a composição global inicial da rede (gráfico abaixo e à esquerda das Figuras 6.4, 6.5 e 6.6)

Atingidos esses 3 critérios só é possível observar mudanças na pressão, saturação e composição dos nós se forem alteras as condições de contorno da rede, podendo-se admitir que foi atingido o regime permanente.

É observado na saturação global de gás das Figuras 6.4 e 6.5 o aparecimento de gás (para $T = 5^\circ C$) e de líquido (para $T = 30^\circ C$) logo após o início da despressurização. Esse comportamento é observado quando P_i está fora e P_o está dentro do envelope de fases da Figura 6.1. As Figuras 6.4 e 6.5 apresentam o erro de balanço de materiais para cada componente.

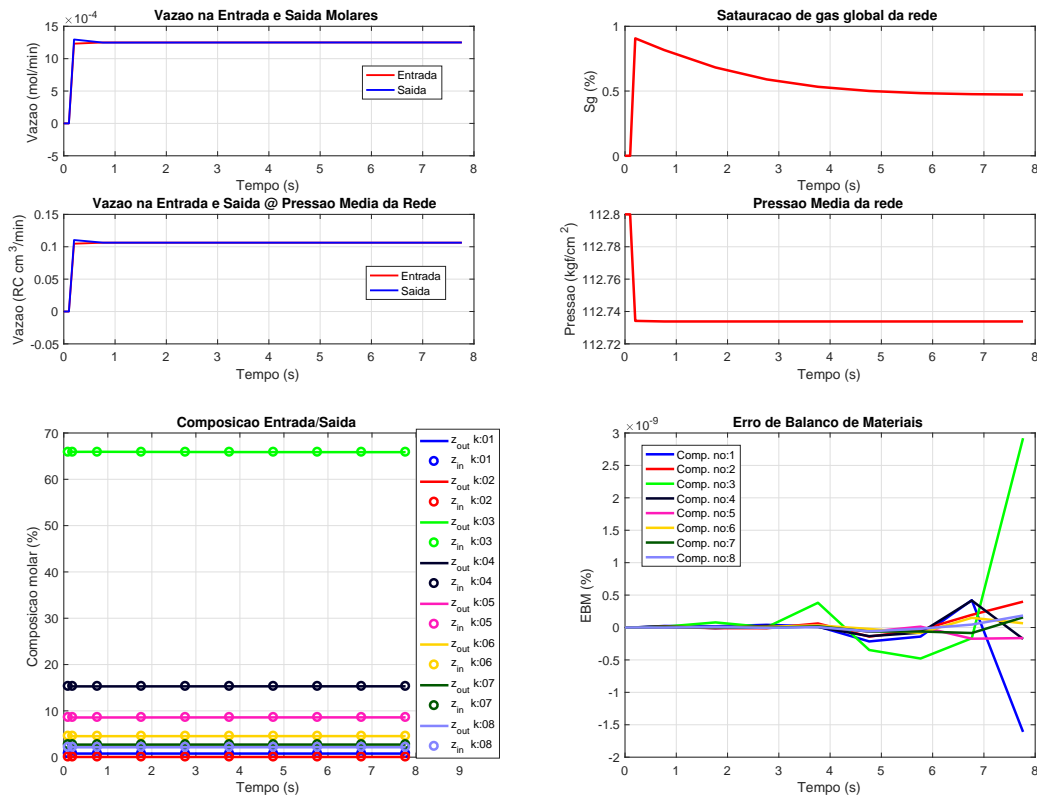


Figura 6.4: Ensaio de despressurização a 5°C , $P_i = 112.8\text{kgf}/\text{cm}^2$ e $P_o = 112.7\text{kgf}/\text{cm}^2$: vazões molares totais e vazões volumétricas reportadas à pressão média da rede na entrada e saída, acima à esquerda; pressões e saturações médias globais da rede, acima à direita; composição global na entrada (em círculo) e na saída (em contínuo); erro de balanço de materiais para cada componente, abaixo à direita.

No regime bifásico da Figura 6.6, pelo fato da condutâncias hidráulicas do gás e do líquido não serem necessariamente iguais, a quantidade de moles transferida de um nó i para o nó $i + 1$ pode ter fração molar diferente da fração molar global z_i^k . Essa é a razão pela qual a composição da vazão injetada (composição imposta) é diferente da produzida (igual a composição global do nó de saída) nos primeiros passos de tempo. Logo, ao atingir o regime permanente, para que a composição da entrada seja igual a da saída, é possível que a composição de todos dos nós do rede (com exceção do nó de saída que tem a mesma composição da vazão de saída) seja diferente da composição injetada e, conseqüentemente, da original. Em outras palavras, é possível ser atingido um regime permanente onde as vazões molares cedida e recebida de cada nó possuam composições globais iguais entre si e diferentes da composição da global do nó. Essa diferença entre a composição injetada (que é igual à produzida e à inicial) e a composição dos nós implica em um novo envelope de fases para cada nó, diferente do inicial da Figura 6.1, o que explica a não correspondência das pressões e saturações médias da Figura 6.6 com as Linhas

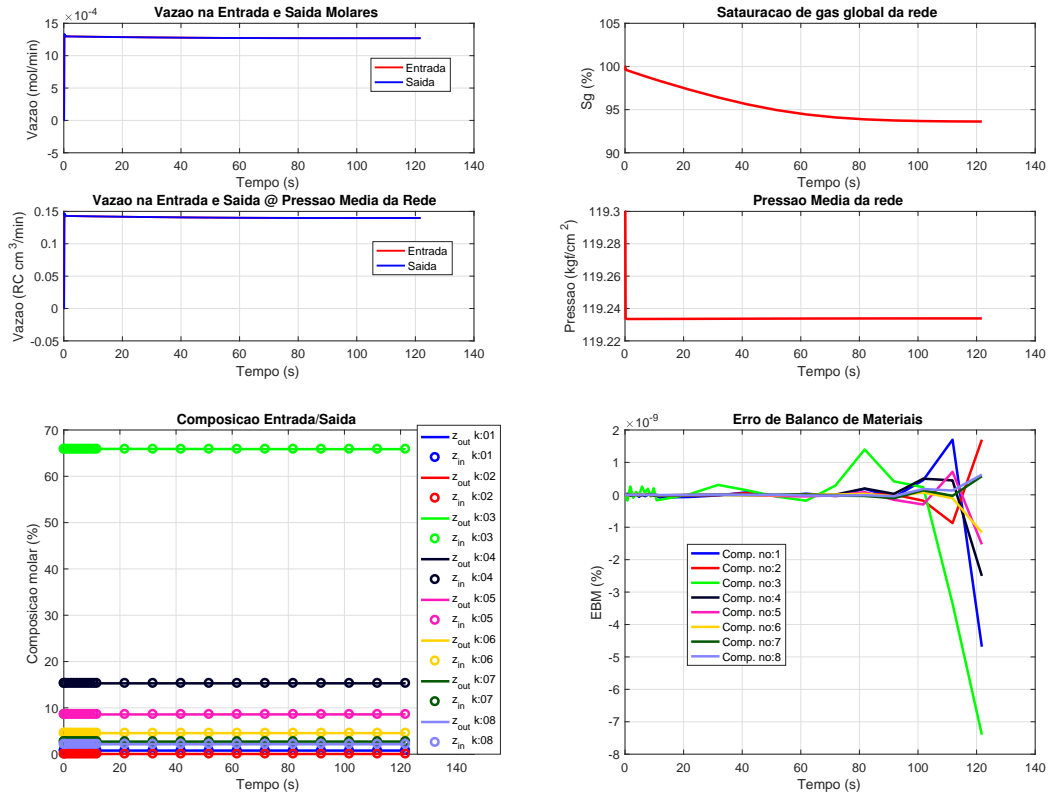


Figura 6.5: Ensaio de depressurização a $30^{\circ}C$, $P_i = 119.3kgf/cm^2$ e $P_o = 119.2kgf/cm^2$: vazões molares totais e vazões volumétricas reportadas à pressão média da rede na entrada e saída, acima à esquerda; pressões e saturações médias globais da rede, acima à direita; composição global na entrada (em círculo) e na saída (em contínuo); erro de balanço de materiais para cada componente, abaixo à direita.

de Qualidade da Figura 6.1. No regime monofásico, a transferência molar entre nós possui necessariamente, desde o início da simulação, a mesma fração molar do nó cedente, não ocorrendo mudanças no envelope de fases do meio poroso. Isso faz com que se torne imperceptível a diferença entre composições injetadas e produzidas nos ensaios das Figuras 6.4 e 6.5), visto que nesses ensaios a rede é inicializada nos regimes monofásico líquido e gás, respectivamente.

Atingidos os critérios de parada, é obtido um ponto da curva de permeabilidade relativa do gás e um ponto para o líquido, com S_g correspondendo à saturação de gás global da rede ao ser atingido o critério de parada e permeabilidade relativa da fase dada pela equação 6.2.

$$k_{fase}^r = \eta_{fase} \frac{Q_{fase}^{RC}}{C_{monofasico}(P_i - P_o)} \quad (6.2)$$

Q_{fase}^{RC} é a vazão volumétrica por fase na saída, ou na entrada, da rede reportada à pressão global média (dado que no regime permanente as vazões na entrada e na saída possuem a mesma composição global, Q_{fase}^{RC} é a vazão média

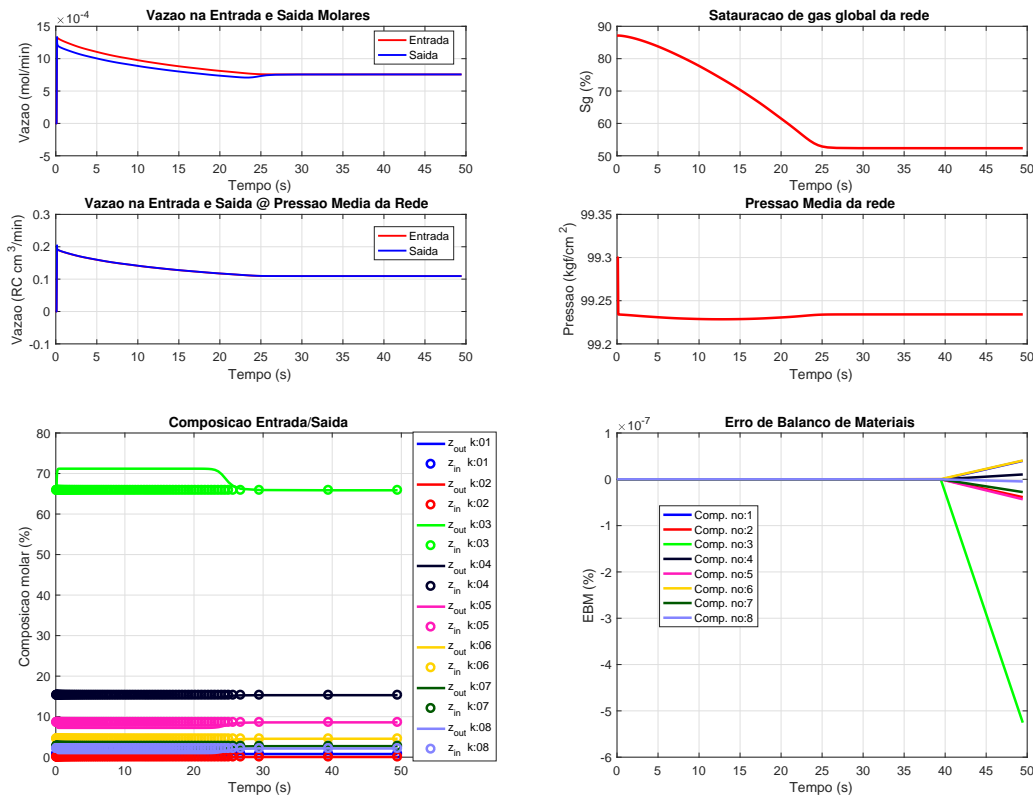


Figura 6.6: Ensaio de despressurização a $30^{\circ}C$, $P_i = 99.3kgf/cm^2$ e $P_o = 99.2kgf/cm^2$: vazões molares totais e vazões volumétricas reportadas à pressão média da rede na entrada e saída, acima à esquerda; pressões e saturações médias globais da rede, acima à direita; composição global na entrada (em círculo) e na saída (em contínuo); erro de balanço de materiais para cada componente, abaixo à direita.

equivalente que atravessa a rede) e η_{fase} é a viscosidade da fase na saída da rede, ou na entrada, também calculada à pressão global média. $C_{monofasico}$ é uma constante que engloba a permeabilidade absoluta, a área da seção transversal e o comprimento da rede, calculada pela equação 6.2 para $k_{fase}^r = 1$ quando a rede encontra-se em regime monofásico.

Depois de calculado o ponto de permeabilidade relativa, P_i e P_o são decrescidos de $0.1kgf/cm^2$ e uma nova simulação é realizada. O conjunto de pontos gerados por sucessivos experimentos geraram as curvas de permeabilidade relativa abaixo da temperatura crítica (gráfico superior à direita da Figura 6.7) e acima da temperatura crítica (gráfico inferior à direita da Figura 6.7). Os gráficos da esquerda da Figura 6.7 mostram o comportamento da saturação média da rede em função de sua pressão média global ao final de cada um dos ensaios realizados em ambas as temperaturas.

Uma vez que o modelo não considera forças capilares, não foram observados saturação de gás crítica e de líquido residual nos ensaios da Figura 6.7

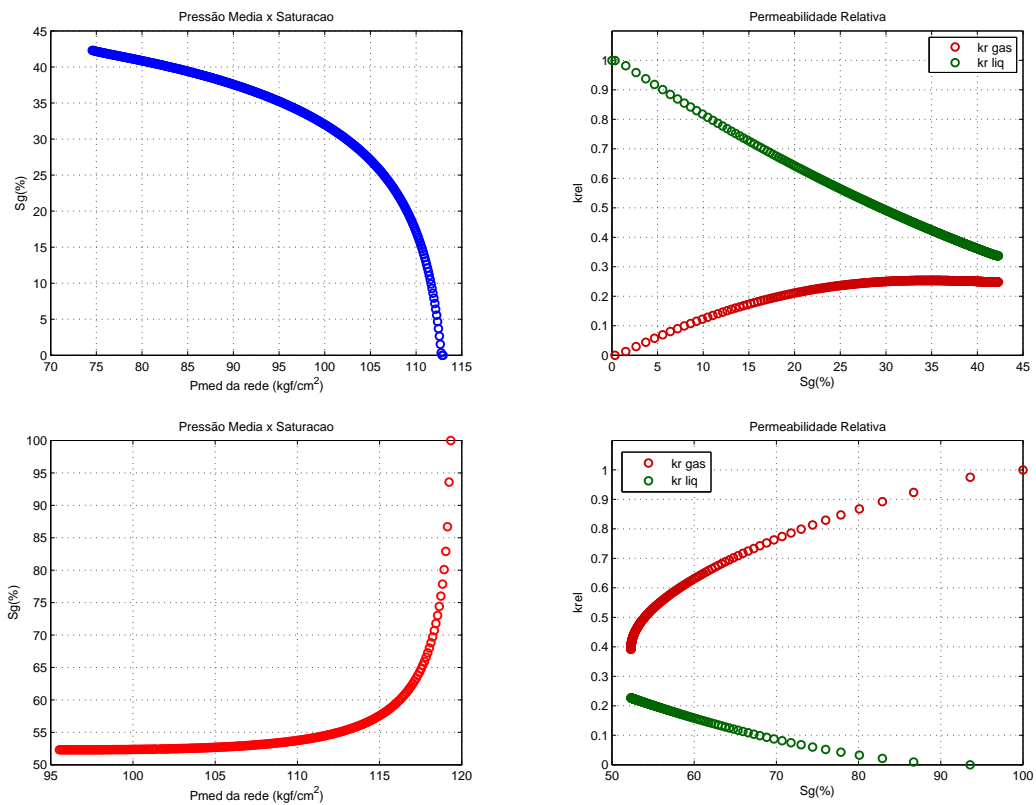


Figura 6.7: Curvas de permeabilidade relativa gás-líquido obtidas a 5°C (abaixo da T_c), gráfico superior à direita; e a 30°C (acima da T_c), gráfico inferior à direita. Saturação e pressão globais médias, atingidas ao final de cada ensaio, obtidas a 5°C gráfico superior à esquerda; e a 30°C, gráfico inferior à esquerda

6.2

Detalhamento de ensaio em rede 1D e fluido binário

O objetivo dessa seção é apresentar a evolução temporal da composição global z^k dos nós de uma rede, desde o início da despressurização até ser atingido o regime permanente. Para facilitar sua visualização e compreensão, o problema foi reduzido a uma rede unidimensional de 10+2 nós, tal como a rede da Figura 5.2, cujas gargantas possuem comprimento constante $L = 6000\mu m$ e seção circular com raio seguindo a distribuição 6.1. Foi empregado um fluido binário, de composição [77%C1 ; 23%C4], cujas propriedades a $20^\circ C$ podem ser observadas na Figura 6.8.

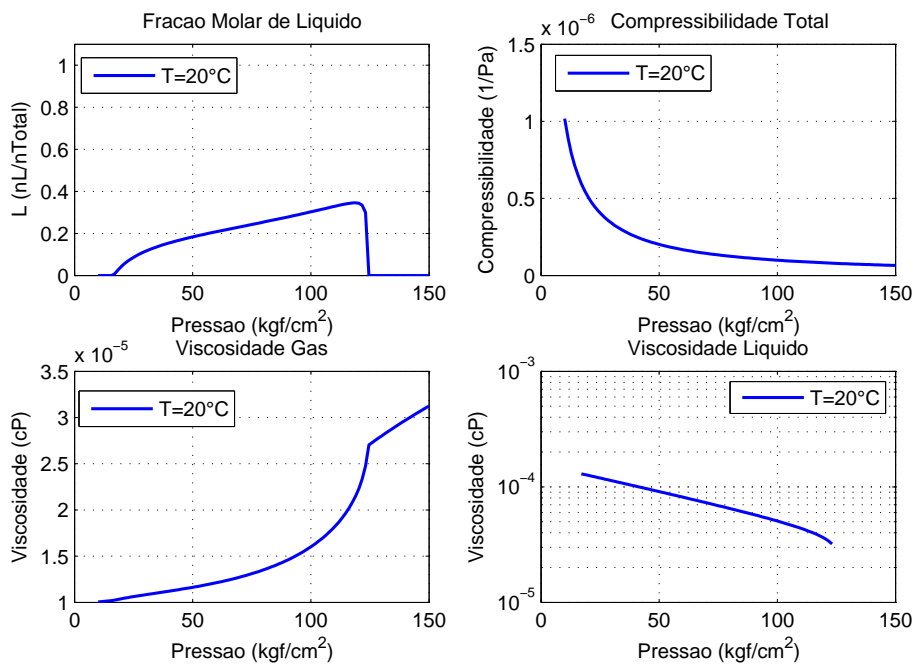


Figura 6.8: Fração molar de líquido (\mathcal{L}), Compressibilidade Total ($\nu_{liq}S_{liq} + \nu_{gas}S_{gas}$) e Viscosidades do Gás e do Líquido de uma amostra do fluido binário [77%C1 23%C4] submetida a diferentes condições de pressão para à temperatura constante de $20^\circ C$.

O ensaio de despressurização, realizado a $20^\circ C$, com $P_i = 90.6 kgf/cm^2$ e $P_o = 90.5 kgf/cm^2$, foi interrompido assim que os critérios de parada mencionados na seção 6.1 foram atingidos, como indica a Figura 6.9. Como a rede permanece em regime bifásico durante o ensaio, o componente C1, por ser mais abundante na fase mais móvel, é produzido preferencialmente em relação ao C4 nos primeiros passos de tempo, o que explica a diferença entre composição da vazão produzida e a injetada até $t \approx 1s$. Essa diferença tende a zero ao passo que o sistema se aproxima do regime permanente.

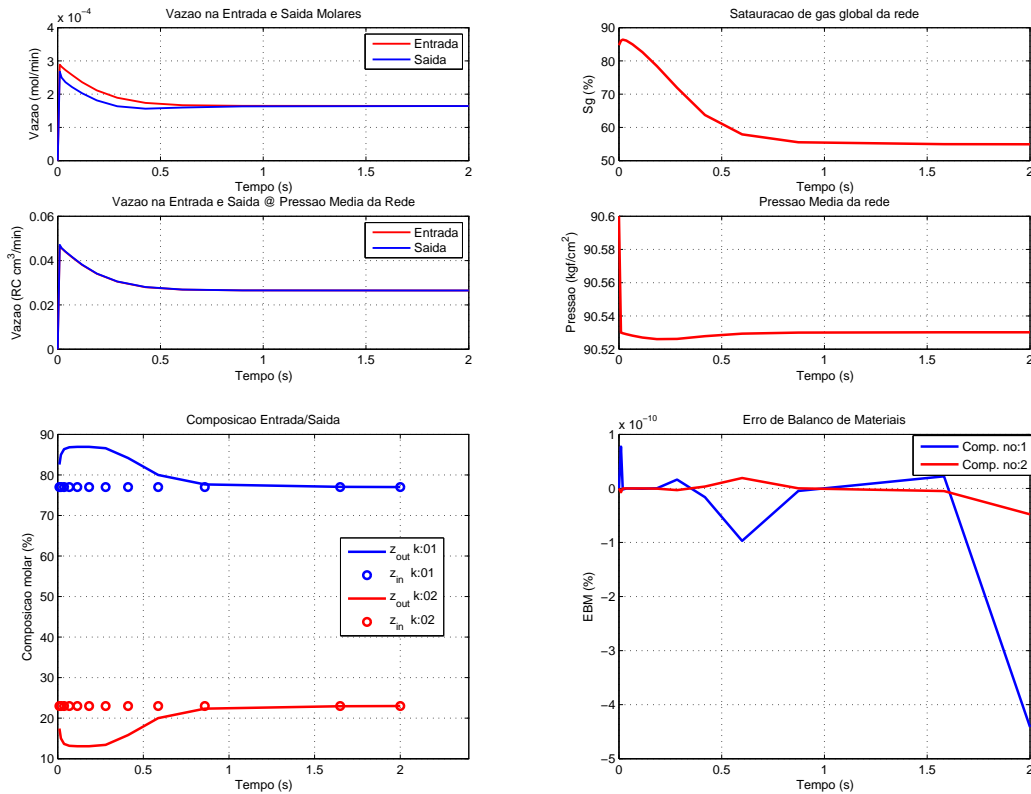


Figura 6.9: Ensaio de depressurização a 20°C , $P_i = 90.6\text{kgf}/\text{cm}^2$ e $P_o = 90.5\text{kgf}/\text{cm}^2$: vazões molares totais e vazões volumétricas reportadas à pressão média da rede na entrada e saída, acima à esquerda; pressões e saturações médias globais da rede, acima à direita; composição global na entrada (em círculo) e na saída (em contínuo); erro de balanço de materiais para cada componente, abaixo à direita.

Embora um dos critérios de parada se refira a pressão e vazão globais médias da rede, pode ser observado na Figura 6.10 que as pressões e saturações de todos os nós tornam-se constantes ao final da simulação.

Também é observado 6.10 que as saturações finais dos nós do meio são bastante incoerentes com a fração molar de líquido (\mathcal{L}) do fluido inicial da rede ([77%C1 ; 23%C4]). Uma vez atingido o regime permanente, a composição da vazão de entrada na rede é a mesma da vazão de saída, que é a mesma do fluxo que atravessa todos os nós da rede. Como foi imposta a composição de fluido inicial ([77%C1 ; 23%C4]) na vazão de entrada, esta será a composição do fluxo que entra e do que sai de cada nó ao ser atingido o regime permanente. Entretanto, conforme Chopra *et al.* (1986) provaram rigorosamente para a escala contínua, no regime bifásico permanente a composição global do fluxo é diferente da composição do fluido *in place*, implicando em composições dos nós diferentes da composição do fluido inicial e, conseqüentemente, em envelopes de fase também diferentes do envelope de [77%C1 ; 23%C4].

A Figura 6.11 mostra a evolução temporal da composição z^k e do número

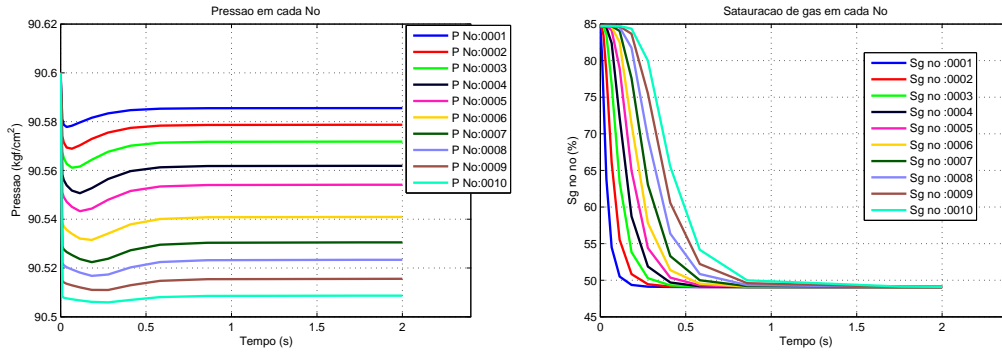


Figura 6.10: Evolução temporal das pressões e saturações dos nós do meio poroso do ensaio de depressurização a $20^{\circ}C$.

de moles N^k de cada nó da rede, onde $x_d = 0$ corresponde ao primeiro nó do meio poroso (nó 1 da Figura 5.2) e $x_d = 1$ corresponde ao último nó do meio poroso (nó 10 da Figura 5.2), z_1 e N_1 são as frações molares globais e o número de moles do componente $C1$, z_2 e N_2 são as frações molares globais e o número de moles do componente $C4$. No instante $t = 0s$ a fração molar de $C1$ é 77% para todos os nós da rede. Por ser o componente preferencialmente produzido, a fração molar de $C1$ vai aos poucos diminuindo no primeiro nó do meio poroso. Ao longo da simulação, a redução de z_1 vai se propagando para os nós a jusante até chegar último nó. Nesse instante, cada nó da rede tem sua composição estabilizada, sendo esta diferente da composição do fluxo que o atravessa. Raciocínio semelhante, se aplica para o componente $C4$ mas, pelo fato de estar mais presente na fase menos móvel, há acumulação no nó de entrada e redução no de saída. A forma da distribuição espacial do número de moles da Figura 6.11 deve-se à aleatoriedade dos volumes de cada nó. O aumento do número de moles, tanto de $C1$ como de $C4$, é justificado pela nova composição global z_k da rede ao ser atingido o regime permanente: todos os nós do meio poroso possuem uma fração molar de $C4$ superior à inicial, exigindo de uma quantidade total de moles maior para manter a mesma pressão.

Considerando a sub-rede unidimensional a Figura 6.12, ao ser atingido o regime permanente, a vazão molar de cada componente k que entra no nó i pela aresta $j - 1$ passa ser a igual a que sai pela aresta j , dada pela equação 6.3.

$$\dot{n}_j^k = (y_j^k \zeta_j^{gas} g_j^{gas} + x_j^k \zeta_j^{liq} g_j^{liq}) \Delta P_j \quad (6.3)$$

Posto que é utilizado *upwind* de pressão e composição no desenvolvimento desse trabalho, chega-se às consequências 6.4.

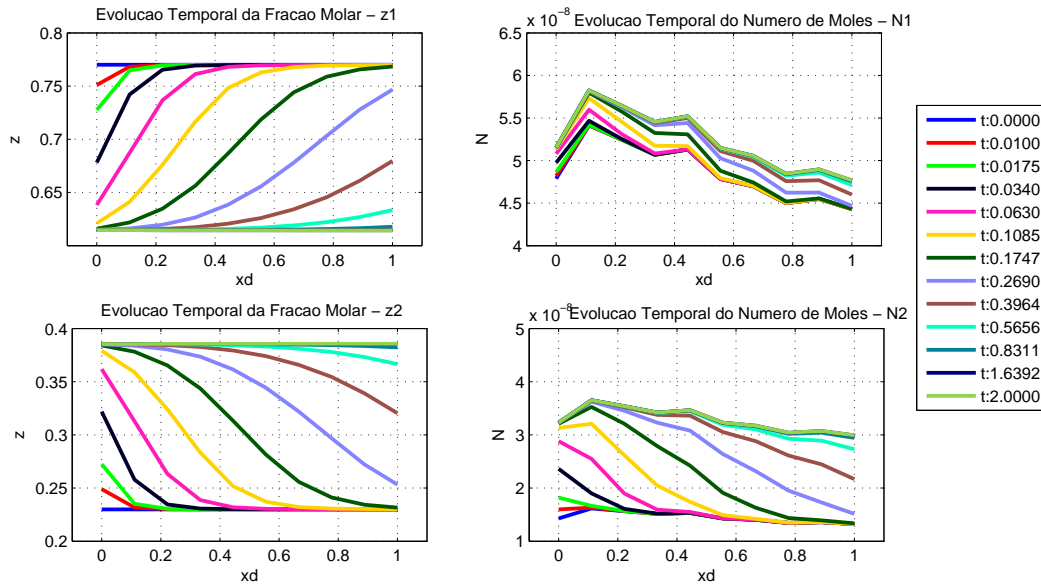


Figura 6.11: Evolução temporal das frações molares globais e do número de moles dos nós da rede 1D apresentada na Figura 5.2: $x_d = 0$ corresponde ao primeiro nó do meio poroso (nó 1 da Figura 5.2), $x_d = 1$ corresponde ao último nó do meio poroso (nó 10 da Figura 5.2), z_1 e N_1 são as frações molares globais e o número de moles do componente C1, z_2 e N_2 são as frações molares globais e o número de moles do componente C4

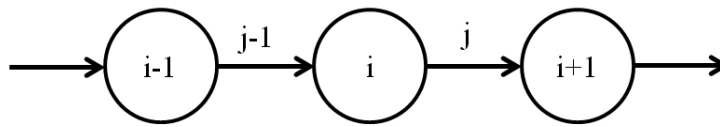


Figura 6.12: Sub-rede genérica de rede 1D

$$\begin{aligned}
 P_i > P_{i+1} &\Rightarrow \xi_j^{gas} = \xi_i^{gas} \\
 &\Rightarrow \xi_j^{liq} = \xi_i^{liq} \\
 &\Rightarrow y_j^k = y_i^k \\
 &\Rightarrow x_j^k = x_i^k
 \end{aligned}
 \tag{6.4}$$

Substituindo as consequências 6.4 na equação 6.3, a composição global z_j^k do escoamento que atravessa aresta j pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
z_j^k &= \frac{\dot{n}_j^k}{\sum_{k=1}^{n_c} \dot{n}_j^k} \\
&= \frac{(y_i^k \xi_i^{gas} g_j^{gas} + x_i^k \xi_i^{liq} g_j^{liq}) \Delta P_j}{\sum_{k=1}^{n_c} [(y_i^k \xi_i^{gas} g_j^{gas} + x_i^k \xi_i^{liq} g_j^{liq}) \Delta P_j]} \\
&= \frac{y_i^k \xi_i^{gas} g_j^{gas} + x_i^k \xi_i^{liq} g_j^{liq}}{\xi_i^{gas} g_j^{gas} \sum_{k=1}^{n_c} y_i^k + \xi_i^{liq} g_j^{liq} \sum_{k=1}^{n_c} x_i^k} \\
&= \frac{y_i^k \xi_i^{gas} g_j^{gas} + x_i^k \xi_i^{liq} g_j^{liq}}{\xi_i^{gas} g_j^{gas} + \xi_i^{liq} g_j^{liq}}
\end{aligned} \tag{6.5}$$

Entretanto o número de moles de cada componente N_i^k e a composição global z_i^k do fluido contido no nó i é dada por:

$$\begin{aligned}
N_i^k &= V_i^{gas} \xi_i^{gas} y_i^k + V_i^{liq} \xi_i^{liq} x_i^k \\
z_i^k &= \frac{N_i^k}{\sum_{k=1}^{n_c} N_i^k} \\
&= \frac{V_i^{gas} \xi_i^{gas} y_i^k + V_i^{liq} \xi_i^{liq} x_i^k}{\sum_{k=1}^{n_c} (V_i^{gas} \xi_i^{gas} y_i^k + V_i^{liq} \xi_i^{liq} x_i^k)} \\
&= \frac{V_i^{gas} \xi_i^{gas} y_i^k + V_i^{liq} \xi_i^{liq} x_i^k}{V_i^{gas} \xi_i^{gas} \sum_{k=1}^{n_c} y_i^k + V_i^{liq} \xi_i^{liq} \sum_{k=1}^{n_c} x_i^k} \\
&= \frac{V_i^{gas} \xi_i^{gas} y_i^k + V_i^{liq} \xi_i^{liq} x_i^k}{V_i^{gas} \xi_i^{gas} + V_i^{liq} \xi_i^{liq}} \\
&= \frac{S_i^{gas} \xi_i^{gas} y_i^k + S_i^{liq} \xi_i^{liq} x_i^k}{S_i^{gas} \xi_i^{gas} + S_i^{liq} \xi_i^{liq}}
\end{aligned} \tag{6.6}$$

Pelo mesmo argumento do *upwind*, foi realizado *flash* na aresta j à pressão e à composição do nó i , implicando em:

$$\begin{aligned}
S_i^{gas} &= S_j^{gas} \quad e \quad S_i^{liq} = S_j^{liq} \Rightarrow \\
z_i^k &= \frac{S_j^{gas} \xi_i^{gas} y_i^k + S_j^{liq} \xi_i^{liq} x_i^k}{S_j^{gas} \xi_i^{gas} + S_j^{liq} \xi_i^{liq}}
\end{aligned} \tag{6.7}$$

A partir das equações 6.5 e 6.7 conclui-se que, atingido o regime permanente bifásico, a composição global do escoamento z_j^k e a composição global do nó z_i^k só serão iguais se as condutâncias das fases g_j^{gas} e g_j^{liq} forem coincidirem numericamente com as saturações S_j^{gas} e S_j^{liq} , o que não necessariamente é verdadeiro.

7

Considerações Finais

Nesse trabalho foi desenvolvido um simulador de redes capilares em formulação totalmente implícita, cujas variáveis primárias são a pressão e o número de moles de cada componente. O simulador permite a movimentação dos componentes através do meio poroso bem como a transição desses entre as fases líquida e gasosa, quando aplicável.

O comportamento do equilíbrio de fases e das propriedades do fluido em função da pressão foi aferido contra os resultados de um simulador termodinâmico comercial, mostrando aderência do modelo à ferramenta para a fração molar de líquido, fatores de compressibilidade e viscosidades do gás e do líquido. O comportamento do modelo de fluxo foi comparado com a solução de problemas que permitem solução analítica: produção por depleção em reservatório de gás seco e de gás retrógrado, escoamento 1-D monofásico de fluido pouco compressível e deslocamento 1-D por fluido totalmente miscível. As soluções simuladas foram satisfatoriamente próximas às das analíticas exatas.

Uma vez validado, o modelo foi empregado para obter curvas de permeabilidade relativa gás-líquido, de sistemas gás-condensado e óleo-gás. Notou-se a ausência de saturação de gás e líquido críticas, o que foi atribuído ao fato do modelo não contemplar forças capilares.

O padrão de escoamento nos capilares foi assumido anular para todos os casos, o que exige a hipótese do fluido molhante possuir pequenos ângulos de contato.

Além do escoamento de gás retrógrado, o modelo construído permite estudar o deslocamento miscível, a produção de óleo volátil e outros fenômenos que exijam modelagem composicional em escala de poros.

7.1

Sugestões para Trabalhos Futuros

A primeira melhoria sugerida para aumentar a generalidade do modelo seria admitir outros padrões de escoamento, tal como o deslocamento pistão, além de estabelecer critérios para a mudança de padrão. Esta melhoria, associada à inclusão da pressão capilar ao modelo de fluxo, permitiria estudar a influência

da molhabilidade no escoamento e no aparecimento de saturações de líquido residual e de gás crítica.

Também aumentaria a gama de aplicabilidade do modelo a inclusão da fase água, sendo esta somente líquida e com um componente apenas, tal como é feito na maioria dos simuladores comerciais isotérmicos, e da força gravitacional, substituindo a pressão das equações de fluxo pelo potencial hidráulico.

Outro ganho de generalidade do modelo seria o de permitir gargantas de seção transversal poligonal que variem ao longo do comprimento do capilar, de forma a melhor representar meios porosos reais.

Do ponto de vista numérico, pode-se buscar paralelizar a construção da matriz jacobiana (das equações do balanço molar e da consistência dos volumes) e a resolução do sistema linear associado, o que permitiria simular redes com elevados números de nós em tempos menores.

8

Referências bibliográficas

- ABHVANI, AS, BEAUMONT, DN, *et al.* 1987. Development of an Efficient Algorithm for the Calculation of Two-Phase Flash Equilibria. **SPE Reservoir Engineering**, 2(04), 695–702.
- AHMED, TAREK, *et al.* 2006. **Reservoir engineering handbook**. Gulf Professional Publishing.
- BARNUM, RS, BRINKMAN, FP, RICHARDSON, TW, SPILLETTE, AG, *et al.* 1995. Gas condensate reservoir behaviour: productivity and recovery reduction due to condensation. *In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.
- BRANCO, CELSO M, RODRIGUEZ, FERNANDO, *et al.* 1996. A semi-implicit formulation for compositional reservoir simulation. **SPE Advanced Technology Series**, 4(01), 171–177.
- BRYANT, STEVEN, & BLUNT, MARTIN. 1992. Prediction of relative permeability in simple porous media. **Physical Review A**, 46(4), 2004.
- BUSTOS, CECILIA I, & TOLEDO, PEDRO G. 2003. Pore-level modeling of gas and condensate flow in two-and three-dimensional pore networks: Pore size distribution effects on the relative permeability of gas and condensate. **Transport in Porous Media**, 53(3), 281–315.
- CHANG, KOUKUNG ALEX, & LINDQUIST, W BRENT. 2013. A network flow model for the genesis and migration of gas phase. **Computational Geosciences**, 1–15.
- CHANG, YIH-BOR. 1990. **Development and application of an equation of state compositional simulator**. Ph.D. thesis, University of Texas at Austin.
- CHOPRA, ANIL K, CARTER, ROBERT D, *et al.* 1986. Proof of the two-phase steady-state theory for flow through porous media. **SPE Formation Evaluation**, 1(06), 603–608.

- COATS, KEITH H, *et al.* 1980. An equation of state compositional model. **Society of Petroleum Engineers Journal**, **20**(05), 363–376.
- COATS, KH, SMART, GT, *et al.* 1986. Application of a regression-based EOS PVT program to laboratory data. **SPE Reservoir Engineering**, **1**(03), 277–299.
- COLLINS, DA, NGHIEM, LX, LI, YK, GRABONSTOTTER, JE, *et al.* 1992. An efficient approach to adaptive-implicit compositional simulation with an equation of state. **SPE reservoir engineering**, **7**(02), 259–264.
- DAKE, LP. 1983. **Fundamentals of Reservoir Engineering.**, 1978.
- ERTEKIN, TURGAY, ABOU-KASSEM, JH, & KING, GR. Basic applied reservoir simulation. 2001. **SPE Monograph Series**, **7**.
- FAN, LI, HARRIS, BILLY W, JAMALUDDIN, A, KAMATH, JAIRAM, MOTT, ROBERT, POPE, GARY A, SHANDRYGIN, ALEXANDER, & WHITSON, CURTIS HAYS. 2005. Understanding gas-condensate reservoirs. **Oilfield Review**, **17**(4), 14–27.
- FANG, FANG, FIROOZABADI, ABBAS, ABBASZADEH, MAGHSOOD, RADKE, CLAY, *et al.* 1996. A Phenomenological modeling of critical condensate saturation. *In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.
- FUSSELL, DD, YANOSIK, JOHN L, *et al.* 1978. An iterative sequence for phase-equilibria calculations incorporating the Redlich-Kwong equation of state. **Society of Petroleum Engineers Journal**, **18**(03), 173–182.
- HENDERSON, GD, DANESH, ALI, TEHRANI, DH, AL-SHAIDI, SALMAN, PEDEN, JM, *et al.* 1998. Measurement and correlation of gas condensate relative permeability by the steady-state method. **SPE Reservoir Evaluation & Engineering**, **1**(02), 134–140.
- JAMIOLAHMADY, M, DANESH, A, TEHRANI, DH, & DUNCAN, DB. 2000. A mechanistic model of gas-condensate flow in pores. **Transport in porous media**, **41**(1), 17–46.
- JENSEN, OLE K, *et al.* 1980. An automatic timestep selection scheme for reservoir simulation. *In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.

- JOEKAR-NIASAR, V, & HASSANIZADEH, SM. 2012. Analysis of fundamentals of two-phase flow in porous media using dynamic pore-network models: a review. **Critical reviews in environmental science and technology**, **42**(18), 1895–1976.
- JOSSI, JOHN A, STIEL, LEONARD I, & THODOS, GEORGE. 1962. The viscosity of pure substances in the dense gaseous and liquid phases. **AIChE Journal**, **8**(1), 59–63.
- KAZEMI NIA KORRANI, ABOULGHASEM. 2014. **Mechanistic modeling of low salinity water injection**. Ph.D. thesis, University of Texas at Austin.
- LAKE, LARRY W, JOHNS, RT, ROSSEN, WR, & POPE, GARY. 1986. **Fundamentals of enhanced oil recovery**. Society of Petroleum Engineers.
- LI, KEWEN, FIROOZABADI, ABBAS, *et al.* 2000. Phenomenological modeling of critical condensate saturation and relative permeabilities in gas/condensate systems. **SPE Journal**, **5**(02), 138–147.
- LOHRENZ, JOHN, BRAY, BRUCE G, CLARK, CHARLES R, *et al.* 1964. Calculating viscosities of reservoir fluids from their compositions. **Journal of Petroleum Technology**, **16**(10), 1–171.
- MATLAB. 2016. **R2016a**. Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc.
- MICHELSEN, MICHAEL L. 1982a. The isothermal flash problem. Part I. Stability. **Fluid phase equilibria**, **9**(1), 1–19.
- MICHELSEN, MICHAEL L. 1982b. The isothermal flash problem. Part II. Phase-split calculation. **Fluid phase equilibria**, **9**(1), 21–40.
- NGHIEM, LONG X, AZIZ, K, LI, YK, *et al.* 1983. A robust iterative method for flash calculations using the Soave-Redlich-Kwong or the Peng-Robinson equation of state. **Society of Petroleum Engineers Journal**, **23**(03), 521–530.
- ØREN, PÅL-ERIC, & BAKKE, STIG. 2003. Reconstruction of Berea sandstone and pore-scale modelling of wettability effects. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, **39**(3), 177–199.
- PEDERSEN, KAREN SCHOU, CHRISTENSEN, PETER L, & SHAIKH, JAWAD AZEEM. 2014. **Phase behavior of petroleum reservoir fluids**. CRC Press.

- PENG, DING-YU, & ROBINSON, DONALD B. 1976. A new two-constant equation of state. **Ind. Eng. Chem. Fundam**, **15**(1), 59–64.
- PRINCEN, HM. 1992. Capillary pressure behavior in pores with curved triangular cross-section: effect of wettability and pore size distribution. **Colloids and surfaces**, **65**(2-3), 221–230.
- RACHFORD JR, HH, RICE, JD, *et al.* 1952. Procedure for use of electronic digital computers in calculating flash vaporization hydrocarbon equilibrium. **Journal of Petroleum Technology**, **4**(10), 19–3.
- RAYES, DANIEL GEORGE, PIPER, LD, MCCAIN JR, WD, POSTON, SW, *et al.* 1992. Two-phase compressibility factors for retrograde gases. **SPE formation evaluation**, **7**(01), 87–92.
- SANTOS, LUIZ OTAVIO SCHMALL DOS. 2013. **Development of a multi-formulation compositional simulator**. Ph.D. thesis, University of Texas at Austin.
- STIEL, LEONARD I, & THODOS, GEORGE. 1961. The viscosity of nonpolar gases at normal pressures. **AIChE Journal**, **7**(4), 611–615.
- VALVATNE, PER H, & BLUNT, MARTIN J. 2004. Predictive pore-scale modeling of two-phase flow in mixed wet media. **Water Resources Research**, **40**(7).
- WANG, XIULI, MOHANTY, KK, *et al.* 2000. Pore-network model of flow in gas/condensate reservoirs. **SPE Journal**, **5**(04), 426–434.
- WILSON, GRANT M. 1969. A modified Redlich-Kwong equation of state, application to general physical data calculations. *In: 65th National AIChE Meeting, Cleveland, OH.*
- WINPROP. 2010. **CMG PROP Windows version**. 200, 1824 Crowchild Trail N.W. Calgary, Canada: Computer Modelling Group Ltd.
- WONG, T.W., & AZIZ, K. 1988. Considerations in the Development of Multipurpose Reservoir Simulation Models. **First and Second International Forum on Reservoir Simulation, Alpbach, Austria**, 12–16.
- WONG, TW, FIROOZABADI, A, NUTAKKI, R, AZIZ, KHALID, *et al.* 1987. A comparison of two approaches to compositional and black oil simulation. *In: SPE Symposium on Reservoir Simulation*. Society of Petroleum Engineers.

YANG, TAO, FEVANG, OIVIND, CHRISTOFFERSEN, KR, IVARRUD, ENDRE, *et al.* 2007. LBC viscosity modeling of gas condensate to heavy oil. *In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.

ZÉBERG-MIKKELSEN, CLAUS K. 2001. **Viscosity Study of Hydrocarbon Fluids at Reservoir Conditions: Modeling and Measurements**. Ph.D. thesis, Technical University of Denmark.

ZUDKEVITCH, DAVID, & JOFFE, JOSEPH. 1970. Correlation and prediction of vapor-liquid equilibria with the Redlich-Kwong equation of state. **AICHE Journal**, 16(1), 112–119.