

TÍTULO DA TESE

Antonioni Barros Campos

Exame de Qualificação de Mestrado
apresentado ao Programa de Pós-graduação em
Engenharia Elétrica, COPPE, da Universidade
Federal do Rio de Janeiro, como parte dos
requisitos necessários à obtenção do título de
Mestre em Engenharia Elétrica.

Orientadores: José Manoel de Seixas
Natanael Nunes de Moura
Junior

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2011

TÍTULO DA TESE

Antonioni Barros Campos

EXAME DE QUALIFICAÇÃO SUBMETIDO AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA ELÉTRICA.

Orientadores: José Manoel de Seixas

Natanael Nunes de Moura Junior

Aprovada por: Prof. Nome do Primeiro Examinador Sobrenome

Prof. Nome do Segundo Examinador Sobrenome

Prof. Nome do Terceiro Examinador Sobrenome

Prof. Nome do Quarto Examinador Sobrenome

Prof. Nome do Quinto Examinador Sobrenome

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

FEVEREIRO DE 2011

*A alguém cujo valor é digno
desta dedicatória.*

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todos.

Resumo do Exame de Qualificação apresentado à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

TÍTULO DA TESE

Antonioni Barros Campos

Fevereiro/2011

Orientadores: José Manoel de Seixas

Natanael Nunes de Moura Junior

Programa: Engenharia Elétrica

Apresenta-se, nesta tese, ...

Abstract of Qualifying Exam presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

THESIS TITLE

Antonioni Barros Campos

February/2011

Advisors: José Manoel de Seixas

Natanael Nunes de Moura Junior

Department: Electrical Engineering

In this work, we present ...

Sumário

Lista de Figuras	viii
Lista de Abreviaturas	ix
1 Introdução	1
1.1 Contexto	1
1.2 Engenharia de Reservatórios	2
1.3 Objetivo	3
2 Equilíbrio de Fase no Contexto da Inteligência Computacional	5
2.1 Simulação Composicional de Reservatórios	5
2.2 Equilíbrio de Fases Vapor-Líquido	5
2.2.1 Razões de Equilíbrio	6
2.2.2 Cálculos de <i>Flash</i>	7
3 Trabalhos Relacionados	8
3.1 Cálculo de Flash NPT	8
3.2 Cálculo de Flash NVT	9
3.3 Cálculo de Flash para compostos limpos	10
4 Cronograma esperado da pesquisa	12
Referências Bibliográficas	13

Lista de Figuras

1.1	Fluxograma de inferência de propriedades de fluidos	4
3.1	Arquitetura proposta para as Redes Neurais informadas pela Termo- dinâmica	11

Lista de Abreviaturas

K_i	Razão de Equilíbrio para o componente i , p. 6
x_i	Fração molar da fase líquida para o componente i , p. 6
y_i	Fração molar da fase gasosa para o componente i , p. 6
z_i	Fração molar total para o componente i , p. 6
BP	British Petroleum, empresa multinacional de petróleo e gás, p. 2
ML	<i>Machine Learning</i> , ou Aprendizado de Máquina, p. 5
M	Número de componentes em uma mistura, p. 10
NVT	Composição (N), Pressão (P) e Temperatura (T), p. 8
NVT	Composição (N), Volume (V) e Temperatura (T), p. 9
N	Número de amostras utilizadas para treinamento de modelos, p. 10
PR	Equação de Estado Peng-Robinson, p. 3
SRK	Equação de Estado Soave-Redlich-Kwong, p. 3
W	Pesos de uma Rede Neural, p. 10

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contexto

A indústria de petróleo e gás desempenha um papel fundamental no contexto mundial, impulsionando o crescimento econômico e atendendo à demanda global por energia. Essa indústria abrange todas as atividades relacionadas à exploração, produção, refino, distribuição e comercialização de petróleo e gás natural.

No cenário global, a indústria de petróleo e gás tem enfrentado diversos desafios ao longo dos anos. Um desses desafios é a **volatilidade dos preços do petróleo** [1, 2], que é influenciada por fatores geopolíticos, econômicos e ambientais. Essa volatilidade pode afetar os investimentos e as decisões estratégicas das empresas do setor.

Outro desafio importante é a **transição para uma matriz energética mais sustentável** [1, 2]. Com o aumento das preocupações ambientais e a necessidade de reduzir as emissões de gases de efeito estufa, a indústria de petróleo e gás tem buscado investir em fontes de energia renovável e tecnologias de baixo carbono. Essa transição é fundamental para garantir a sustentabilidade do setor no longo prazo.

Além disso, a indústria de petróleo e gás tem uma importância estratégica para muitos países, especialmente aqueles que possuem grandes reservas de petróleo e gás natural. Essas reservas podem ser uma fonte de receita significativa e podem contribuir para o desenvolvimento econômico desses países.

No contexto mundial, alguns países se destacam na indústria de petróleo e gás. Os Estados Unidos, por exemplo, é o maior produtor de petróleo do mundo com uma produção crescente de petróleo de xisto. A Arábia Saudita também é um importante *player* no setor e desempenha um papel crucial na estabilidade do mercado global [3].

Outros países, como Rússia, Irã e Iraque, também possuem grandes reservas de petróleo e gás natural e desempenham um papel significativo na produção e

exportação desses recursos [3]. Além disso, empresas multinacionais do setor, como a ExxonMobil, Shell e BP, têm uma presença global e desempenham um papel importante na indústria.

No Brasil, a indústria de petróleo e gás desempenha um papel estratégico, sendo uma das principais fontes de receita e desenvolvimento econômico do país. O Brasil possui vastas reservas de petróleo e gás natural, localizadas principalmente na camada pré-sal, o que coloca o país como um dos principais produtores e exportadores desses recursos [4].

Entre 2007 e 2017, a arrecadação do setor de Petróleo e Gás totalizou R\$ 1,4 trilhão e espera-se que, nos próximos dez anos, esse valor alcance mais R\$ 1 trilhão. Essa arrecadação é proveniente de tributos, participação especial, bônus e royalties. Além disso, o setor tem um impacto significativo na economia do país, gerando empregos, renda e estimulando a pesquisa e desenvolvimento local. Também contribui para o superavit na balança comercial e para a formação de um fundo social importante. Para manter essa contribuição e atrair grandes investimentos nos próximos anos, é essencial que o Brasil adote uma agenda positiva, promovendo um ambiente favorável e garantindo segurança jurídica para os investidores [5].

No entanto, a indústria de petróleo e gás no Brasil também enfrenta desafios significativos. A volatilidade dos preços do petróleo, as questões ambientais e as demandas por fontes de energia mais limpas são alguns dos desafios enfrentados pelo setor. A transição para uma matriz energética mais sustentável é uma preocupação crescente e tem impulsionado investimentos em energias renováveis e tecnologias de baixo carbono [5].

A Petrobras, principal empresa de óleo e gás brasileira e uma das principais do mundo, reconhece a importância de intensificar a descarbonização de suas operações, ao mesmo tempo em que garante a segurança energética do Brasil e do mundo. Para isso, a empresa busca repor suas reservas e produzir petróleo, enquanto reduz suas emissões de gases de efeito estufa e desenvolve produtos mais sustentáveis [6].

1.2 Engenharia de Reservatórios

A exploração e produção de petróleo necessita de uma compreensão e gerenciamento de reservatórios de petróleo. A simulação de reservatórios é uma área da engenharia de reservatórios em que modelos de computador são usados para prever o fluxo de fluidos através de meios porosos. Os modelos são usados por empresas de petróleo e gás para o desenvolvimento de campos novos ou desenvolvidos onde as previsões de produção são necessárias para ajudar a tomar decisões de investimento [7]. Uma maneira similar de definir o que é uma simulação de reservatórios é a habilidade de utilizar formulas matemáticas para prever a performance de um reservatório de

petróleo ou gás [8].

Dentro da simulação de reservatórios, a **simulação composicional de reservatórios** é utilizada para avaliar o comportamento do fluxo composicional, levando em consideração todas as fases presentes, como função de pressão, tempo e posição. Também é capaz de estimar a recuperação de óleo para um determinado esquema de produção existente e avaliar o impacto nas condições operacionais alteradas na recuperação [9].

1.3 Objetivo

O presente trabalho pretende explorar os cálculos de Equilíbrio de Fase no contexto da Simulação Composicional de Reservatórios com um olhar da Inteligência Computacional. Uma equação de estado, como a PR [10] e a SRK [11, 12], é comumente usada para descrever o comportamento de fases fluidas em uma composição. Esses modelos são amplamente utilizados na indústria para prever propriedades termodinâmicas de misturas de fluidos. No entanto, os cálculos de equilíbrio de fases baseados em equações de estado geralmente envolvem a resolução de sistemas de equações não lineares, o que pode tornar os cálculos mais complexos e demorados em comparação com outros modelos de fluidos [13].

Dentro da inteligência computacional, aplicações vem demonstrando melhora na performance na predição, estimação e otimização de diferentes funções objetivo em problemas na indústria de óleo e gás (como exemplo, pressões mínimas de miscibilidade, taxa de produção de petróleo, precipitação de asfaleno ao redor do poço, colocação de poço e caracterização de reservatório) [14].

Com o ganho de poder computacional, principalmente na última década, algoritmos de Aprendizado de Máquina e Aprendizado Profundo ganharam força em várias aplicações práticas. O aprendizado de máquina pode realizar previsões a um custo computacional muito menor em comparação com o tempo inicial necessário para realizar o cálculo, sem comprometer a precisão [15]. Além disso, em comparação com simulações numéricas baseadas em física, o aprendizado de máquina pode ser mais eficiente computacionalmente [15].

Num primeiro momento, utilizando a figura 1.1 como referência, o presente trabalho dispõe, para formar os dados de entrada, de dados de uma base de dados (oriundos de análises de amostras de petróleo) e de simulação, e pretende retornar as composições para as fases existente em equilíbrio.

O texto divide-se em uma descrição mais detalhada do problema a ser atacado com algumas definições e estruturação do problema (Capítulo 2), uma revisão dos principais trabalhos relacionados ao tema (Capítulo 3) e um cronograma esperado da pesquisa (Capítulo 4).

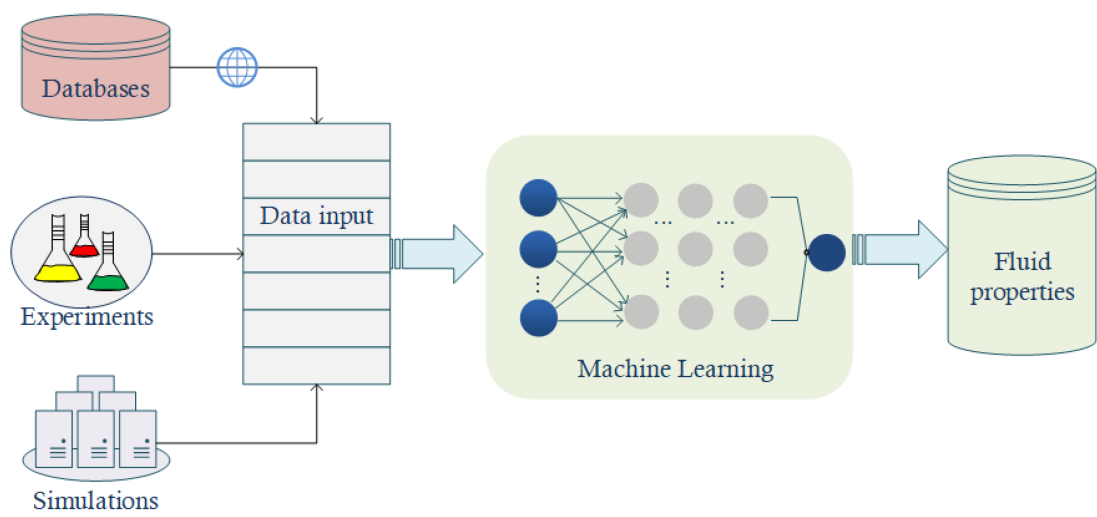


Figura 1.1: Fluxograma de inferência de propriedades de fluidos [15]

Capítulo 2

Equilíbrio de Fase no Contexto da Inteligência Computacional

O Aprendizado de Máquina está em alta na pesquisa de propriedades termo-físicas, principalmente devido pelo progresso dos algoritmos de ML e a disponibilidade [16].

Os dados são geralmente utilizados no desenvolvimento de modelos matemáticos permeando entre dois extremos: Num extremo, modelos que não possuem nenhuma informação física e são obtidos puramente com dados. No outro extremo, modelos baseados em teorias físicas mas que ainda contém parâmetros que precisam ser ajustados utilizando alguns dados. Permeando nesse espectro, a mais importante característica do modelo é sua capacidade preditiva [16].

2.1 Simulação Composicional de Reservatórios

Durante a simulação de um reservatório, o reservatório é dividido em blocos e cada bloco possui propriedades como permeabilidade, porosidade, pressão, temperatura e composição do fluido. Essas propriedades podem variar de bloco para bloco e ao longo do tempo durante a simulação. O processo de deslocamento do fluido é descrito por equilíbrios termodinâmicos aplicados a cada bloco, permitindo uma análise detalhada do comportamento do reservatório e do seu desempenho sob diferentes condições operacionais [9].

2.2 Equilíbrio de Fases Vapor-Líquido

Uma fase é uma parte do sistema que apresenta propriedades físicas e químicas uniformes, composição homogênea e está separada de outras fases por superfícies definidas. Na produção de petróleo, as fases mais relevantes são a fase líquida de

hidrocarboneto e a fase gasosa. Essas fases podem coexistir em equilíbrio quando as variáveis que descrevem as mudanças no sistema permanecem constantes ao longo do tempo e da posição. As principais variáveis que determinam o estado de equilíbrio são **temperatura**, **pressão** e **composição** do sistema [8].

2.2.1 Razões de Equilíbrio

Em sistemas com vários componentes, a razão de equilíbrio K_i de um componente é a relação entre sua fração molar na fase gasosa (y_i) e sua fração molar na fase líquida (x_i). Essa relação é expressa matematicamente como:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (2.1)$$

Onde o K_i representa a Razão de Equilíbrio, y_i a fração molar da fase gasosa e x_i a fração molar da fase líquida para o componente i .

Além das Razões de Equilíbrio, outras relações básicas são definidas. De maneira conveniente, todos os cálculos de equilíbrio de fases são baseados em 1 mol de mistura de hidrocarbonetos, resultando nas seguintes relações.

$$z_i = x_i n_L + y_i n_V \quad (2.2)$$

$$\sum_i z_i = 1 \quad (2.3)$$

$$\sum_i x_i = 1 \quad (2.4)$$

$$\sum_i y_i = 1 \quad (2.5)$$

Combinando equações 2.1 e 2.2 para eliminar y_i , temos:

$$z_i = x_i n_L + (x_i K_i) n_V \quad (2.6)$$

E resolvendo para x_i :

$$x_i = \frac{z_i}{n_L + n_V K_i} \quad (2.7)$$

A equação 2.2 pode também ser resolvida para y_i , combinando com a equação 2.1 para eliminar x_i , obtendo:

$$y_i = \frac{z_i K_i}{n_L + K_i n_V} \quad (2.8)$$

Combinando as equações 2.4 e 2.7 e equações 2.5 e 2.8 chegamos ao seguinte resultado:

$$\sum_i x_i = \sum_i \frac{z_i}{n_L + n_V K_i} \quad (2.9)$$

$$\sum_i y_i = \sum_i \frac{z_i K_i}{n_L + K_i n_V} \quad (2.10)$$

Como $\sum_i y_i - \sum_i x_i = 0$:

$$\sum_i \frac{z_i K_i}{n_L + K_i n_V} - \sum_i \frac{z_i}{n_L + n_V K_i} = 0 \quad (2.11)$$

$$\sum_i \frac{z_i (K_i - 1)}{n_L + K_i n_V} = 0 \quad (2.12)$$

$$f(n_V) = \sum_i \frac{z_i (K_i - 1)}{n_V (K_i - 1) + 1} = 0 \quad (2.13)$$

O conjunto de equações acima são suficientes para representar as relações de fase para realizar os cálculos de composição de um sistema de hidrocarbonetos. Esses cálculos são conhecidos como cálculos de *Flash* [8].

2.2.2 Cálculos de *Flash*

(...)

Para uma variedade de problemas na engenharia de petróleo, as Redes Neurais têm sido a escolha usual para treinamento e inferência [15]

Capítulo 3

Trabalhos Relacionados

Os trabalhos revisados a seguir foram retirados do site de busca de artigos científicos **ScienceDirect** nos períodos entre o ano de 2020 até publicações no ano de 2024 utilizando as palavras-chave "deep", "learning", "flash", "calculations".

3.1 Cálculo de Flash NPT

Na área de cálculos de Flash utilizando Composição, Pressão e Temperatura, o trabalho de QU *et al.* [17] visa acelerar o cálculo de Flash utilizando redes neurais para resolver duas tarefas distintas:

- Classificar se um conjunto P , T e \mathbf{z} é estável ou não, ou seja, possui mais de uma fase ou não. Esse problema é de classificação binária e esse modelo substitui o teste de estabilidade normalmente empregado antes da divisão de fases para acelerar o processo.
- Inicializar as razões de equilíbrio K_i para o problema de divisão das fases convencional. Uma rede neural inicializa os K_i de maneira mais precisa reduzindo o número de iterações na etapa de divisão das fases.

Na geração dos dados, foram usadas como referência quatro tipos de petróleo (*Wet Gas*, *Gas Condensate*, *Volatile Oil* e *Black Oil*), ajustados distribuições de Dirichlet baseados nas composições características desses petróleos e gerados um conjunto de amostras utilizando a técnica de amostragem do Hipercubo Latino. Os dados foram divididos em três estudos de caso: um primeiro com apenas dois componentes (CH_4 e C_6H_{14} , um segundo caso envolvendo quatro componentes (CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 e C_4H_{10}). O terceiro estudo de caso considera nove componentes.

3.2 Cálculo de Flash NVT

O trabalho de LI *et al.* [18] utilizou redes neurais profundas densas para modelar reservatórios abordando o problema de Flash utilizando a Composição, Volume e Temperatura (NVT Flash) como parâmetros de entrada. A ideia é acelerar os cálculos de equilíbrio de fase substituindo os algoritmos convencionais, que são iterativos. O modelo proposto recebe, como entrada, propriedades composicionais (pressão crítica p_c , temperatura crítica T_c e fator acêntrico ω), a fração molar total $\mathbf{z} = [z_1, \dots, z_M]^T$, a concentração molar total C e temperatura T . As saídas são as frações molares do vapor X_i , frações molares do líquido Y_i e o número de fases N . Essa abordagem difere-se das pesquisas mais recentes na aceleração dos cálculos de Flash utilizando modelos de aprendizado de máquina porque geralmente o teste de estabilidade para avaliar se existe mais de uma fase é preservado. Para o treinamento do modelo, foi utilizado o erro médio quadrático com regularização pela norma L^2 como função custo e uma arquitetura com 5 camadas ocultas com 100 neurônios cada e função de ativação do tipo ReLU. Nesse trabalho, três fluidos de reservatórios reais foram investigados, incluindo petróleos com 5 componentes, 8 componentes e 14 componentes. Para esses fluidos, foram discretizados uniformemente a densidade molar e temperatura. Para investigar o efeito do tamanho do conjunto de dados, essas discretizações foram feitas num grid de 51 x 51, 71 x 71, 101 x 101, 151 x 151, 201 x 201 e 301 x 301 para um dos três fluidos. Para os outros dois fluidos, foram utilizados grids de 301 x 301. Através do trabalho, a abordagem mostra bons resultados tanto na performance geral do modelo quanto as previsões das composições nas fases.

O trabalho de ZHANG *et al.* [19] propõe-se a resolver o mesmo problema de Flash NVT utilizando-se de duas redes neurais. Todo o experimento descrito nesse artigo está bem alinhado com o trabalho de LI *et al.* [18], diferindo-se na arquitetura da(s) rede(s) neural(is). Nesse trabalho, a primeira rede neural tem o propósito de extrair características dos valores de entrada e a saída dessa rede sofre um *padding* de zeros ou um *cropping* dependendo da quantidade de componentes do petróleo em relação a quantidade de componentes predefinida na entrada da segunda rede. Então os dados de treinamento e teste são uniformizados para uma certa dimensão, beneficiando a segunda rede. Foram avaliados vários hiper parâmetros da rede neural visando diminuição dos erros no conjunto de teste.

Baseado nos trabalhos acima, ZHANG *et al.* [20] seguiu uma abordagem diferente alterando os valores preditos pela modelagem. Ao contrário dos trabalhos anteriores, a saída do modelo retornava, além da quantidade de fases, a fração molar de vapor ϕ e a fração de cada componente na fase vapor somente, diminuindo a dimensão da saída em quase pela metade, impactando fortemente, segundo os autores, na eficiência do treinamento. Nesse trabalho, também foi avaliado os efeitos de capilaridade que

ocorrem em reservatórios não convencionais. A ideia é de avaliar a alta aplicabilidade da configuração de rede neural obtida anteriormente no artigo.

Nesses trabalhos, os conjuntos de dados para treinamento e avaliação dos modelos foram gerados através do método iterativo por substituições sucessivas que foi introduzido anteriormente para resolver problemas de Flash NVT.

3.3 Cálculo de Flash para compostos limpos

Com a transição para energias renováveis, a aplicação da análise de equilíbrio de fases para misturas de hidrogênio natural surgiu como um tópico relevante e foi explorada pelo trabalho de ZHANG *et al.* [21] posteriormente aos trabalhos mostrados acima. Nesse trabalho, foram utilizadas duas composições de mistura de hidrogênio, o gás Robel e o gás Ramsay1, ambos sendo uma mistura de H_2 em maior fração com O_2 , CO_2 , CH_4 e N_2 .

Também foram analisados modelos híbridos baseados em rede neurais com a inserção de regras termodinâmicas nos quais foram denominados Redes Neurais informadas pela Termodinâmica (*Thermodynamic-Informed Neural Networks*, TINN).

Foram utilizados as regras de conservação para as composições ($\sum_i X_i = 1$ e $\sum_i Y_i = 1$) para atingir uma consistência termodinâmica, na função custo utilizada no treinamento dos modelos. A função custo L final é a seguinte.

$$L = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \|\mathbf{o} - \hat{\mathbf{o}}\|^2 + \lambda \|\mathbf{W}\|_2^2 + \sum_{i=1}^M X_i + \sum_{i=1}^M Y_i - 2 \quad (3.1)$$

As variáveis de entrada e saídas são similares aos trabalhos anteriores com a diferença da adição nas *features* do raio do poro para incorporar efeitos de capilaridade dos reservatórios.

As abordagens no treinamento dos modelos utilizadas nos trabalhos anteriores também foram usadas. Aplicação da regularização pela norma L_2 dos pesos da rede, utilização de *dropout* e *batch normalization*. Foram realizadas análises comparativas de tempo computacional entre os métodos iterativos convencionais com os modelos de aprendizado profundo e de resultados dos cálculos de Flash entre as abordagens com resultados satisfatórios no ponto de vista dos autores.

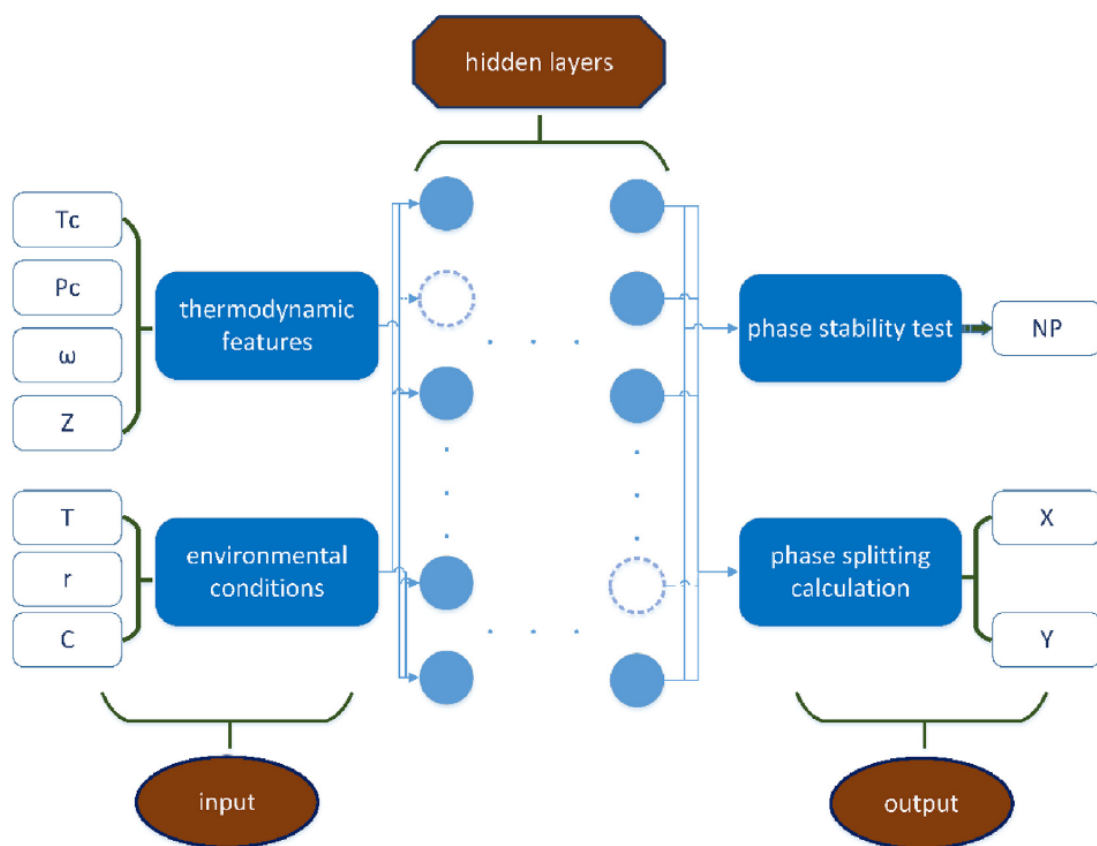


Figura 3.1: Arquitetura proposta para as Redes Neurais informadas pela Termodinâmica [21]

Capítulo 4

Cronograma esperado da pesquisa

Referências Bibliográficas

- [1] *OPEC Annual Report*. In: Report, Organization of the Petroleum Exporting Countries (OPEC), Vienna, Austria, 2022.
- [2] *World Energy Outlook*. In: Report, International Energy Agency (IEA), Paris, France, 2023.
- [3] *World Energy Review*. In: Report, Eni SpA, Rome, Italy, 2023.
- [4] BARBOSA, G. *Petróleo e Estado*. Rio de Janeiro, RJ, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis - ANP, 2015.
- [5] *A Relevância do Petróleo & Gás para o Brasil*. Rio de Janeiro, RJ, Instituto Brasileiro de Petróleo, Gás e Biocombustível - IBP, 2019.
- [6] “Energia em Transformação”. https://petrobras.com.br/energia-em-transformacao?gad_source=1&gclid=CjwKCAiA0PuuBhBsEiwAS7fsNTRxzBFw_qPJbRy_TGYNdRZOHdPDANYp_vKej4T_AiGS1IGrTVc1yRoCi-kQAvD_BwE#introducao. Accessed: 2024-02-28.
- [7] BEGUM, N., DADASHPOUR, M., KLEPPE, J. “Subchapter 1.6 - A case study of reservoir parameter estimation in Norne oil field, Norway by using Ensemble Kalman Filter (EnKF)”. In: Moitra, A., Kayal, J., Mukerji, B., et al. (Eds.), *Innovative Exploration Methods for Minerals, Oil, Gas, and Groundwater for Sustainable Development*, Elsevier, pp. 61–78, 2022. ISBN: 978-0-12-823998-8. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823998-8.00007-7>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128239988000077>>.
- [8] AHMED, T. *Reservoir Engineering Handbook*. Houston, Texas, Elsevier Science, 2010. ISBN: 9780080966670. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=LXJcG_jwTHAC>.
- [9] WANG, P., STENBY, E. H. “Phase equilibrium calculation in compositional reservoir simulation”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 16,

- pp. S449–S456, 1992. ISSN: 0098-1354. doi: [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(09\)80053-7](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(09)80053-7). Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135409800537>>. European Symposium on Computer Aided Process Engineering—1.
- [10] PENG, D.-Y., ROBINSON, D. B. “A New Two-Constant Equation of State”, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 15, n. 1, pp. 59–64, 1976. doi: 10.1021/i160057a011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/i160057a011>>.
- [11] REDLICH, O., KWONG, J. N. S. “On the Thermodynamics of Solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions.” *Chemical Reviews*, v. 44, n. 1, pp. 233–244, 1949. doi: 10.1021/cr60137a013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/cr60137a013>>. PMID: 18125401.
- [12] SOAVE, G. “Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state”, *Chemical Engineering Science*, v. 27, n. 6, pp. 1197–1203, 1972. ISSN: 0009-2509. doi: [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(72\)80096-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(72)80096-4). Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250972800964>>.
- [13] WANG, K., LUO, J., WEI, Y., et al. “Practical application of machine learning on fast phase equilibrium calculations in compositional reservoir simulations”, *Journal of Computational Physics*, v. 401, pp. 109013, 2020. ISSN: 0021-9991. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.109013>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999119307193>>.
- [14] RAHMANIFARD, H., PLAKSINA, T. “Application of artificial intelligence techniques in the petroleum industry: a review”, *Artificial Intelligence Review*, v. 52, n. 4, pp. 2295–2318, Dec 2019. ISSN: 1573-7462. doi: 10.1007/s10462-018-9612-8. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10462-018-9612-8>>.
- [15] SOFOS, F., STAVROGIANNIS, C., EXARCHOU-KOUVELI, K. K., et al. “Current Trends in Fluid Research in the Era of Artificial Intelligence: A Review”, *Fluids*, v. 7, n. 3, 2022. ISSN: 2311-5521. doi: 10.3390/fluids7030116. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2311-5521/7/3/116>>.
- [16] JIRASEK, F., HASSE, H. “Perspective: Machine Learning of Thermophysical Properties”, *Fluid Phase Equilibria*, v. 549, pp. 113206, 2021. ISSN:

0378-3812. doi: <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2021.113206>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381221002697>>.

- [17] QU, J., FANEY, T., DE HEMPTINNE, J.-C., et al. “PTFlash : A vectorized and parallel deep learning framework for two-phase flash calculation”, *Fuel*, v. 331, pp. 125603, 2023. ISSN: 0016-2361. doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125603>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236122024334>>.
- [18] LI, Y., ZHANG, T., SUN, S. “Acceleration of the NVT Flash Calculation for Multicomponent Mixtures Using Deep Neural Network Models”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 58, n. 27, pp. 12312–12322, 2019. doi: [10.1021/acs.iecr.9b00527](https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b00527). Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b00527>>.
- [19] ZHANG, T., LI, Y., LI, Y., et al. “A self-adaptive deep learning algorithm for accelerating multi-component flash calculation”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 369, pp. 113207, 2020. ISSN: 0045-7825. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113207>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782520303923>>.
- [20] ZHANG, T., LI, Y., SUN, S., et al. “Accelerating flash calculations in unconventional reservoirs considering capillary pressure using an optimized deep learning algorithm”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 195, pp. 107886, 2020. ISSN: 0920-4105. doi: <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2020.107886>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920410520309438>>.
- [21] ZHANG, T., ZHANG, Y., KATTERBAUER, K., et al. “Deep learning-assisted phase equilibrium analysis for producing natural hydrogen”, *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 50, pp. 473–486, 2024. ISSN: 0360-3199. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.09.097>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319923046633>>.