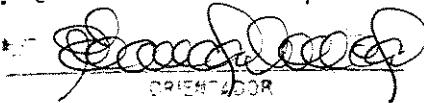


Este exemplar corresponde à reca  
da tese defendida por Romulo  
de Athayde Caminha, e os cravos  
pela comissão julgadora em 09/03/99.

  
ORIENTADOR

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

**Simulação Numérica Composicional com  
Formulação Implícita e Efeitos Gravitacional  
e Capilar**

Autor: Romulo de Athayde Caminha  
Orientador: Antônio Cláudio de França Corrêa

08/99

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

**Simulação Numérica Composicional com  
Formulação Implícita e Efeitos Gravitacional  
e Capilar**

Autor: Romulo de Athayde Caminha

Orientador: Antônio Cláudio de França Corrêa

Curso: Engenharia de Petróleo

Dissertação de mestrado apresentada à comissão de Pós Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Engenharia de Petróleo.

Campinas, 1999  
S.P . - Brasil

98138558



BC

UNICAMP	
M. CATEGORIA:	
V.	E.
TOMBO: 80/38307	
PROG: 229199	
C. 111 0 X	
PREÇO: R\$ 11,00	
DATA: 20/07/99	
N.º CFO	

CM-00125395-4

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

C146s

Caminha, Romulo de Athayde

Simulação numérica composicional com formulação implícita e efeitos gravitacional e capilar. / Romulo de Athayde Caminha.--Campinas, SP: [s.n.], 1999.

Orientador: Antônio Cláudio de França Corrêa.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.

1. Métodos de simulação.
2. Modelos matemáticos.
3. Escoamento bifásico. I. Corrêa, Antônio Cláudio de França. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

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

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

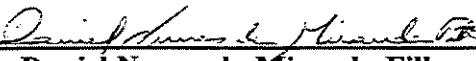
**Simulação Numérica Composicional com  
Formulação Implícita e Efeitos Gravitacional  
e Capilar**

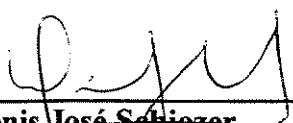
Autor: Romulo de Athayde Caminha

Orientador: Antônio Cláudio de França Corrêa

Banca Examinadora:

  
**Prof. Dr. Antônio Cláudio de França Corrêa, Presidente**  
Universidade Estadual de Campinas

  
**Prof. Dr. Daniel Nunes de Miranda Filho**  
Petróleo Brasileiro S.A.

  
**Prof. Dr. Denis José Schiozer**  
Universidade Estadual de Campinas

Campinas, 09 de março de 1999

## **Dedicatória**

Este trabalho é dedicado à minha esposa Noêmi e ao meu filho Danilo.

## **Agradecimentos**

Agradeço:

A Deus, pela força.

À minha família, pelo apoio e compreensão.

À Petróleo Brasileiro S.A., pela oportunidade oferecida.

Ao Dr. Antônio Cláudio de França Corrêa, pelo interesse e colaboração.

Ao Dr. Daniel Nunes de Miranda Filho e ao Dr. Denis José Schiozer, pelas contribuições prestadas e por prestigiarem meu trabalho com suas participações.

Aos professores, funcionários e colegas do curso de mestrado em engenharia de petróleo, pela ajuda e incentivo.

*Não se sabe quanto longe está um objetivo até que se esteja bem próximo dele.*

## **Resumo**

CAMINHA, Romulo de Athayde. *Simulação Numérica Composicional com Formulação Implícita e Efeitos Gravitacional e Capilar*. Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1999. 143 p. Dissertação (Mestrado)

Este trabalho tem como objetivo apresentar um simulador numérico composicional, unidimensional e isotérmico, no qual um escoamento bifásico (óleo e gás) e multicomponente é tratado implicitamente para pressão, saturação e composição dos fluidos. Considera-se também a ação gravitacional nos termos de fluxo, o que permite a análise de escoamento com inclinação. As equações envolvidas apresentam fortes não linearidades, requisitando uma solução numérica do sistema pelo método de Newton-Raphson. O tratamento unidimensional dado ao problema resulta na obtenção de uma matriz Jacobiana tridiagonal em blocos. É considerado um fluxo bifásico por convecção, no qual os efeitos de dispersão são desprezíveis. Não se considera a existência de água móvel no meio poroso e a curva de pressão capilar gás-óleo original, obtida em laboratório, é atualizada em função das variações de tensão interfacial dos fluidos. Supõe-se um equilíbrio termodinâmico instantâneo, cujo cálculo é feito com o auxílio da equação de estado de Peng e Robinson. O cálculo das densidades e pesos específicos das fases é feito usando-se a própria equação de estado. As viscosidades do óleo e do gás são obtidas pela correlação de Lohrenz. Considera-se ainda o meio poroso incompressível, homogêneo e isotrópico, mecânica e quimicamente inerte aos fluidos.

### *Palavras Chave*

- Métodos de Simulação, Escoamento Bifásico, Modelos Matemáticos

## **Abstract**

CAMINHA, Romulo de Athayde. *Compositional Numerical Simulation with Implicit Formulation and Gravitational and capillary Effects*. Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1999. 143 p. Dissertação (Mestrado)

This work aims to present an isothermal, one-dimensional, compositional numerical simulator. A two-phase (oil and gas) multicomponent flow is treated implicitly in pressure, saturation and compositions. Flow terms consider gravitational effect, which allows the study of flow in inclined reservoir. The highly non-linear equations, which are necessary to equate the problem, require a numerical solution, which is obtained by the Newton-Raphson method. The one-dimensional treatment given to the problem yields a tridiagonal block Jacobian matrix. It is assumed that the two-phase flow is dominated by convection and that the dispersive effects are neglected. No mobile water is considered in the porous media, and the original gas-oil capillary pressure curve, obtained from the laboratory, is modified to include the variations of interfacial tensions. Instantaneous thermodynamic equilibrium is admitted and it is computed by means of the Peng and Robinson equation of state. The fluids densities are calculated with the equation of state. Gas and oil viscosities are computed using the Lohrenz method. The medium is considered incompressible, homogeneous and isotropic, chemically and physically inert to the fluids.

### *Key Words*

- Simulation Methods, Two-phase Flow, Mathematics Models

# Índice

Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xii
Nomenclatura	xiii
Glossário	xvii
1. Introdução	1
2. Revisão da Literatura	5
3. Modelo Matemático	7
3.1 Equações do Escoamento	7
3.2 Equações do Equilíbrio Termodinâmico	10
3.3 Equação da Pressão Capilar e a Tensão Interfacial	12
3.4 Equações Restritivas	15
3.5 Totalização das Equações e Incógnitas do Sistema	16
3.6 Termos Fonte	17
4. Modelo Numérico	23
4.1 Discretização das Equações de Fluxo	23
4.2 O Sistema Matricial	26
5. Propriedades de Rocha e Fluidos	31
5.1 Pressão Capilar e Permeabilidade Relativa	31
5.2 A Equação de Estado	33
5.3 O Cálculo <i>Flash</i>	37
5.4 Cálculo da Pressão de Bolha e de Orvalho	43
5.5 Cálculo da Densidade e Peso Específico das Fases	46
5.6 Cálculo da Viscosidade das Fases	47
6. O Modelo Computacional	51

B.2 Derivadas das Transmissibilidades em Relação à Saturação de Gás	117
B.3 Derivadas das Transmissibilidades em Relação à Composição	117
C. Derivadas das Densidades e Pesos Específicos	119
C.1 Derivadas das Densidades em Relação à Pressão	119
C.2 Derivadas das Densidades em Relação à Composição	119
C.3 Derivadas das Densidades em Relação à Saturação de Gás	120
C.4 Derivadas dos Pesos Específicos	120
D. Derivadas das Frações Molares dos Componentes	123
E. Derivadas do Fator de Compressibilidade ( $Z$ )	124
E.1 Derivada do Fator de Compressibilidade em Relação à Pressão	124
E.2 Derivada do Fator de Compressibilidade em Relação à Composição	125
F. Derivadas das Viscosidades	128
F.1 Derivada da Viscosidade em Relação à Pressão	128
F.2 Derivada da Viscosidade em Relação à Composição	129
F.3 Derivada da Viscosidade em Relação à Saturação de Gás	132
G. Derivadas da Pressão Capilar	134
H. Derivadas das Equações de Equilíbrio Termodinâmico	136
H.1 Derivada da Fugacidade em Relação à Pressão	139
H.2 Derivada da Fugacidade em Relação à Composição	140

## **Lista de Figuras**

3.1 Representação do volume de controle (bloco $i$ ) e blocos adjacentes	7
4.1 Esquema da matriz Jacobiana para uma divisão em $n_b$ blocos	29
5.1 Curvas de permeabilidade relativa ao gás e ao óleo	32
5.2 Uso da derivação da equação cúbica na obtenção de outras duas raízes reais	36
5.3 Fluxograma do algoritmo para o cálculo <i>Flash</i>	42
5.4 Fluxograma para cálculo da pressão de saturação	50
6.1 Fluxograma simplificado do algoritmo do modelo computacional	56
7.1 Representação esquemática do reservatório analisado	57
7.2 Vazão de gás na superfície e pressão de fluxo	61
7.3 Vazão de líquido na superfície	62
7.4 Fechamento do poço injetor nas hipóteses B e C	62
7.5 Balanço molar para o componente leve (PC1)	63
7.6 Balanço molar para o componente intermediário (PC2)	64
7.7 Balanço molar para o componente pesado (PC3)	64
7.8 Composição do fluido produzido e tempo de irrupção do gás injetado (BT)	65
7.9 Alteração na composição do fluido remanescente no reservatório com a injeção	65
7.10 Comportamento da pressão estática média do reservatório	66
7.11 Comportamento da saturação de gás no bloco inferior	66
7.12 Comportamento da fração molar da fase gasosa	67
7.13 Densidade molar das fases no bloco inferior	67
7.14 Densidade molar das fases no bloco superior	68
7.15 Densidade do gás produzido em superfície	68
7.16 Fatores de recuperação molar de cada componente nas hipóteses A,B e C	69

## **Lista de Tabelas**

4.1 Dimensões dos vetores do sistema	28
5.1 Valores iniciais de pressão capilar gás-óleo em função da saturação de gás	32
7.1 Parâmetros do reservatório	58
7.2 Definição dos pseudo componentes	58
7.3 Condições iniciais do reservatório nos blocos 1 e 20	60
7.4 Parâmetros de produção	60
7.5 Composição do fluido injetado	60

## Nomenclatura

### *Letras Latinas*

$A$	- área da seção transversal	$\text{m}^2$
$D$	- profundidade vertical da célula	$\text{m}$
$f$	- fugacidade	$\text{Pa}$
$g$	- aceleração da gravidade	$\text{m/s}^2$
$G$	- fração molar da fase gasosa	
$G$	- energia livre de Gibbs	$\text{J}$
$h$	- altura da célula (perpendicular à direção do fluxo)	$\text{m}$
$IP$	- índice de produtividade do poço	$\text{m}^3$
$k$	- permeabilidade absoluta	$\text{m}^2$
$k_{rp}$	- permeabilidade relativa à fase $p$	
$k_i$	- constante de equilíbrio do componente $i$	
$L$	- fração molar da fase líquida	
$M$	- peso molecular	
$M_{c,p}$	- número de moles do componente $c$ na fase $p$	$\text{kg mol}$
$M_c^i$	- número de moles de $c$ no bloco $i$ no início do intervalo de tempo	$\text{kg mol}$
$M_c^{i+1}$	- número de moles de $c$ no bloco $i$ no final do intervalo de tempo	$\text{kg mol}$
$n_b$	- número de blocos	
$n_c$	- número de componentes	
$n$	- número de moles	$\text{kg mol}$
$n_L$	- número de moles na fase líquida	$\text{kg mol}$

$n_G$	- número de moles na fase gasosa	kg mol
$n_T$	- número de moles total	kg mol
$n_H$	- número de componentes hidrocarbonetos	
$n_p$	- número de fases	
$P_b$	- pressão de bolha	Pa
$P_C$	- pressão capilar	Pa
$P_c$	- pressão crítica	Pa
$P_{ch_i}$	- <i>parachor</i> do componente $i$	
$P_d$	- pressão de orvalho	Pa
$P_p$	- pressão na fase $p$	Pa
$P_w$	- pressão de fluxo no fundo do poço	Pa
$\tilde{q}_c$	- fluxo de moles do componente $c$	kg mol/s
$\tilde{q}_{c,p}$	- fluxo de moles do componente $c$ na fase $p$	kg mol/s
$\tilde{q}_c''$	- vazão molar no poço (negativo para injeção e positivo para produção)	kg mol/s
$\tilde{q}_p$	- vazão molar da fase $p$	kg mol/s
$q_p$	- vazão volumétrica da fase $p$	$m^3/s$
$R$	- constante universal dos gases	$\frac{Pa\ m^3}{kg\ mol\ ^\circ k}$
$r_w$	- raio do poço	m
S	- entropia	$J/^{\circ}k$
$S_p$	- saturação da fase $p$	
$T_p$	- transmissibilidade à fase $p$	$kg\ mol/Pa\ s$
$T$	- temperatura	$^\circ k$
$T_c$	- temperatura crítica	$^\circ k$
$T_r$	- temperatura reduzida	
$u_p$	- velocidade de Darcy da fase $p$	m/s
v	- volume molar	$m^3/kg\ mol$
$V_i$	- volume do bloco $i$	$m^3$
$x_c$	- fração molar do componente $c$ na fase líquida	

$y_{c,p}$	- fração molar do componente $c$ na fase $p$
$y_c$	- fração molar do componente $c$ na fase gás
$z_i$	- fração molar global do componente $i$
$z$	- fator de compressibilidade

### *Letras Gregas*

$\gamma_p$	- peso específico da fase	N/m <sup>3</sup>
$\delta_{ij}$	- coeficiente de iteração binária entre os componentes $i$ e $j$	
$\Delta t$	- intervalo de tempo	s
$\Delta x$	- dimensão da célula na direção $x$	m
$\Delta y$	- dimensão da célula na direção $y$	m
$\mu_{i,p}$	- potencial químico do componente $i$ na fase $p$	J/kg mol
$\mu_p$	- viscosidade da fase $p$	Pa s
$\mu_i^*$	- viscosidade do componente puro $i$ à baixa pressão	(cp)
$\rho_p$	- densidade molar da fase $p$	kg mol/ m <sup>3</sup>
$\sigma$	- tensão interfacial	N/m (d/cm)
$\phi$	- porosidade	
$\varphi$	- coeficiente de fugacidade	
$\varphi_{i,p}$	- coeficiente de fugacidade do componente $i$ na fase $p$	
$\Phi_p$	- função potencial da fase $p$	Pa
$\omega_i$	- fator acêntrico do componente $i$	

### *Superescritos*

$\tau$	- indicador de vetor transposto
$w$	- propriedade avaliada no poço
$v$	- índice de iteração

## ***Subscritos***

- $c$  - relativo à componente ou propriedade crítica
- $g$  - fase gasosa
- $G$  - fase gasosa
- $H$  - hidrocarboneto
- $i$  - índice do bloco em análise ou de um componente
- $i \pm \frac{1}{2}$  - índice das fronteiras à jusante e à montante do bloco em análise
- $L$  - fase líquida
- $n$  - índice do timestep
- $o$  - fase óleo
- $p$  - índice de fase
- $s$  - condições de superfície

## Glossário

*timestep* - passo de tempo.

*single point upstream* - diz-se quando uma propriedade de fronteira é avaliada na célula adjacente com maior potencial.

*breakthrough* - irrupção do fluido injetado no poço produtor.

*IMPES* - formulação de cálculo em que se considera a pressão implicitamente e a saturação e composições determinadas explicitamente.

# **Capítulo 1**

## **Introdução**

A otimização na recuperação de hidrocarbonetos requer uma adequada definição das premissas de desenvolvimento de um campo de petróleo. O número de poços perfurados e suas localizações, a definição dos intervalos a serem completados, os métodos de recuperação secundária a serem implementados e a demanda do mercado são os principais fatores externos determinantes da eficiência da exploração da jazida.

Na análise da viabilidade técnica-econômica de desenvolvimento de um reservatório petrolífero, quanto melhor a estimativa da produção associada a cada projeto de investimento, menores serão os riscos do investidor, permitindo a determinação da política de exploração de maior retorno econômico. É indiscutível, portanto, a importância da existência de ferramentas capazes de prever o comportamento dos reservatórios com precisão.

Os estudos de comportamento de produção dos reservatórios são realizados através de modelos que procuram reproduzir o sistema rocha-fluidos original e as modificações nele ocorridas com o tempo. Inicialmente estes modelos limitavam-se à análise das curvas de declínio (Arps, 1945), procurando estimar o desempenho futuro do reservatório com base em seu histórico de produção, desconsiderando-se as propriedades dos fluidos e da rocha. Num estágio seguinte, passou-se a utilizar o balanço de materiais, citando-se como exemplo o conhecido método de Muskat (1945), desta vez considerando-se as propriedades de rocha e fluido obtidas em laboratório e a lei de conservação de massa de um sistema.

Os simuladores numéricos de reservatório surgiram com a evolução dos computadores. Nestes modelos, as leis de conservação da massa, da energia e da quantidade de movimento são representadas por equações discretizadas em cada um dos blocos em que o meio poroso é subdividido (Coats, 1982). Torna-se possível agora a representação das heterogeneidades da rocha e as variações das propriedades dos fluidos ao longo do reservatório.

Os simuladores do tipo *black-oil* foram os primeiros a serem desenvolvidos. Nestes modelos é realizado um balanço de massa para cada fase e é considerada a solubilidade do gás no óleo. As composições do óleo e do gás são tratadas como constantes, ou seja, não se considera a troca de componentes entre as fases, a qual realmente ocorre com a variação da pressão, temperatura e injeção de hidrocarbonetos ou outros produtos químicos. Com esta limitação, estes simuladores devem ser utilizados apenas nos estudos convencionais de recuperação. Posteriormente surgiram os modelos *black-oil* modificados ou pseudo-composicionais, os quais consideram a mútua solubilidade entre as fases.

Com o surgimento dos métodos especiais de recuperação, a necessidade de uma análise técnica-econômica criteriosa destes projetos, uma vez que requerem altos custos de investimento, propiciou o surgimento de modelos que representassem a complexidade dos processos físico-químicos inerentes a estes novos métodos de recuperação. Surgem então os modelos compostionais.

Os modelos compostionais são utilizados sempre que a composição dos fluidos no reservatório é consideravelmente afetada pela variação de pressão, volume e temperatura. As fases passam a ser tratadas como misturas cujas composições variam ao longo do reservatório e do tempo. Esta abordagem permite reproduzir processos como o deslocamento miscível por injeção de gás pobre, solventes, injeção de dióxido de carbono e nitrogênio, produção de reservatórios de óleo volátil e gás condensado, ciclagem de gás e outros.

A construção de um simulador de fluxo envolve um grande número de equações diferenciais com fortes não linearidades, sendo comum o uso do método das diferenças finitas na discretização destas equações, gerando-se um sistema de equações não lineares que é resolvido numericamente por um método iterativo.

Em relação ao grau de implicitude utilizado na solução do sistema, o número de variáveis primárias poderá variar de uma única (abordagem explícita) ao caso em que todas as variáveis são consideradas como primárias (abordagem totalmente implícita). O tratamento explícito gera uma solução condicionalmente estável, podendo reduzir o esforço computacional, enquanto o tratamento totalmente implícito gera uma solução incondicionalmente estável.

Os primeiros simuladores composicionais utilizavam, no cálculo do equilíbrio entre as fases, valores tabelados de constantes de equilíbrio e tratavam separadamente as equações de fluxo e de equilíbrio termodinâmico. Posteriormente incorporou-se o uso de uma equação de estado na obtenção das densidades das fases e fugacidades dos componentes.

Este trabalho tem como objetivo apresentar um simulador composicional isotérmico, unidimensional, com escoamento bifásico (óleo e gás), multicomponente e formulação implícita para pressão, saturação e composição dos fluidos. Considera-se a pressão capilar e a ação gravitacional nos termos de fluxo, a qual permite a análise de modelos com qualquer inclinação.

Dadas as não linearidades do problema, torna-se necessária uma solução numérica, tendo sido adotado o método de Newton-Raphson para linearização do sistema resultante. O tratamento unidimensional dado ao problema resulta na obtenção de uma matriz Jacobiana tridiagonal blocada.

Este trabalho analisa um fluxo bifásico (óleo e gás) por convecção, no qual os efeitos de dispersão são desprezíveis. Não se considera a existência de água móvel no meio poroso. A curva de pressão capilar gás-óleo original, obtida em laboratório, é atualizada em função das variações de tensão interfacial resultantes das mudanças de composição dos fluidos no reservatório. A correção segue o método de Macleod-Sugden (1923,1924).

Supõe-se um equilíbrio termodinâmico instantâneo, cujo cálculo é feito com o auxílio da equação de estado de Peng & Robinson (1976). O cálculo das densidades e pesos específicos das fases é feito usando-se a própria equação de estado. As viscosidades do óleo e do gás são obtidas pela correlação de Lohrenz (1964).

Considera-se ainda um meio poroso incompressível, homogêneo e isotrópico, mecânica e quimicamente inerte aos fluidos.

Para o poço produtor, o modelo permite optar entre a especificação da vazão de produção na superfície ou da pressão de fluxo no fundo do poço. Para a primeira opção, a composição do fluido produzido na superfície é tratada explicitamente, atualizando-se à cada iteração. Para o caso de pressão de fluxo especificada, o tratamento é totalmente implícito.

O simulador unidimensional que se apresenta pode ser utilizado na obtenção de uma solução aproximada para o fluxo bidimensional ao aplicar-se a teoria dos canais de fluxo, a qual trata cada canal como um sistema independente. A solução numérica da equação de difusão-convecção seria substituída pela solução fornecida pelo simulador composicional, sendo as soluções em cada canal obtidas por simulação em paralelo.

## **Capítulo 2**

### **Revisão da Literatura**

O primeiro trabalho sobre simulação composicional incorporando uma equação de estado foi elaborado por Fussel & Fussel (1979). Foi considerado um tratamento implícito para a pressão e explícito para as demais variáveis, ou seja, as equações de fluxo são derivadas apenas em relação à pressão, usando-se os valores de saturações e composições obtidos do *timestep* anterior, valores estes atualizados ao final de cada iteração. Os autores propuseram um algoritmo de solução do sistema conhecido como MVNR (*Minimum Variable Newton-Raphson*).

A abordagem totalmente implícita foi utilizada pela primeira vez por Coats (1980), o que, conforme comentado anteriormente, garante a estabilidade da solução, possibilitando maiores valores para os *timesteps*, mas aumenta o esforço computacional, que na época era um sério limitador. Em seu modelo foi utilizada uma modificação da equação de estado de Redlich & Kwong (1949) no cálculo do equilíbrio e propriedades das fases. As variáveis primárias passam a ser a pressão, saturação e composições, sendo atualizadas simultaneamente ao final de cada iteração. Coats considerou ainda a correção dos dados de pressão capilar com a variação da tensão interfacial gás-óleo decorrente das variações de composição das fases.

Nghiem, Fong & Aziz (1981) desenvolveram um método implícito apenas para a pressão, fazendo uso de uma equação de estado, e também implementaram a correção da pressão capilar com a variação da tensão interfacial gás-óleo. Propuseram ainda o uso da ponderação *two-point upstream* para determinação dos termos da equação de fluxo avaliados nas fronteiras dos blocos. Trabalho semelhante desenvolveu Schiozer (1989).

Watts (1983) apresentou o método chamado seqüencialmente implícito, no qual considera inicialmente apenas a pressão como variável primária e numa segunda etapa calcula implicitamente as saturações.

Visando reduzir o número de componentes necessários à representação do fluido, e consequentemente o número de equações a serem resolvidas, Coats (1985) propôs o agrupamento dos componentes de um fluido em pseudocomponentes, cujas propriedades permitem representar satisfatoriamente a mistura.

Quandalle & Savary (1989) apresentaram uma formulação implícita em pressão e saturações, garantindo-se maior estabilidade na solução que o método IMPES. No caso do fluido apresentar duas fases, as variáveis primárias são pressão e saturações; havendo uma fase, considera-se pressão e uma variável composicional.

Gomes (1990) desenvolveu um modelo composicional implícito para a pressão, saturação e composições no reservatório. Para o caso da condição de contorno no poço ser vazão na superfície constante, a composição do fluido produzido é tratada explicitamente e atualizada à cada iteração. Adotou a equação de estado de Peng & Robinson e corrigiu os valores de pressão capilar com as alterações na tensão interfacial gás-óleo.

Branco (1991) desenvolveu uma formulação semelhante à de Quandalle & Savary, considerando um tratamento implícito para pressão e saturações e semi implícito para as variáveis compostionais, tendo os termos de fluxo das equações tratados explicitamente apenas nas variáveis dependentes das composições. Nos blocos com uma única fase, a variável primária saturação de gás é substituída por uma variável composicional.

As referências aos demais trabalhos pesquisados serão feitas ao longo do texto.

# Capítulo 3

## Modelo Matemático

### 3.1 Equações do Escoamento

O escoamento bifásico, numa abordagem composicional, será aqui descrito com base no princípio de conservação da massa e na equação de Darcy.

Considerando-se um sistema com  $n_c$  componentes e  $n_p$  fases em fluxo linear unidirecional, desprezando-se o efeito da dispersão e qualquer iteração rocha-fluido, podemos realizar o seguinte balanço molar por componente para o volume de controle representado pelo bloco  $i$ :

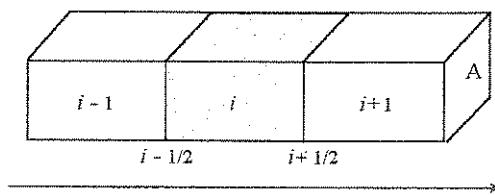


Figura 3.1: Representação do volume de controle (bloco  $i$ ) e blocos adjacentes.

$$\Delta t (\tilde{q}_{c_{i-1/2}} - \tilde{q}_{c_{i+1/2}} - \tilde{q}_{c_i}^w) = M_{c_i}^{n+1} - M_{c_i}^n; \quad c = 1, 2, \dots, n_c. \quad (3.1.1)$$

Uma vez que um componente  $c$  pode existir em qualquer das fases  $p$ , o número de moles deste componente que atravessa a fronteira do volume de controle por unidade de tempo será:

$$\tilde{q}_c = \sum_p \tilde{q}_{c,p} ; \quad (3.1.2)$$

onde,

$$\tilde{q}_{c,p} = A \rho_p y_{c,p} u_p . \quad (3.1.3)$$

A Equação 3.1.3 assume que o fluxo através das fronteiras se dá somente por convecção. O número de moles de um determinado componente existente no volume de controle num dado instante, será a soma no número de moles deste componente em cada uma das fases no volume de controle, então:

$$M_{c_i} = \sum_p M_{c,p_i} ; \quad (3.1.4)$$

onde,

$$M_{c,p} = V_i \phi S_p \rho_p y_{c,p} . \quad (3.1.5)$$

No intervalo de tempo entre os instantes  $n$  e  $n+1$ , a variação do número de moles será:

$$M_{c_i}^{n+1} - M_{c_i}^n = \Delta \left[ \sum_p (V_i \phi S_p \rho_p y_{c,p}) \right]. \quad (3.1.6)$$

A partir da Equação de Darcy, pode-se relacionar a velocidade da fase ao gradiente da função potencial:

$$u_p = \frac{-k k_{rp}}{\mu_p} \left( \frac{\partial P_p}{\partial x} - \gamma_p \frac{\partial D}{\partial x} \right); \quad (3.1.7)$$

onde,  $\gamma_p = \rho_p M g$ .

Substituindo as Equações 3.1.2 a 3.1.7 na Equação 3.1.1, obtém-se:

$$\begin{aligned} & \sum_p \left[ \left\{ A \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \left( \frac{\partial P_p}{\partial x} - \gamma_p \frac{\partial D}{\partial x} \right) \right\}_{i+1/2} - \left\{ A \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \left( \frac{\partial P_p}{\partial x} - \gamma_p \frac{\partial D}{\partial x} \right) \right\}_{i-1/2} - \tilde{q}_{c,p,i}^w \right] = \\ & = \frac{\Delta \left[ \sum_p (V_i \phi S_p \rho_p y_{c,p}) \right]}{\Delta t}, \end{aligned}$$

para  $c = 1, 2, \dots, n_c$  e  $p = o, g$ . (3.1.8)

Pela definição da função potencial, pode-se escrever:

$$\frac{\partial \Phi_p}{\partial x} = \frac{\partial P_p}{\partial x} - \gamma_p \frac{\partial D}{\partial x},$$
(3.1.9)

que substituída na Equação 3.1.8 resulta em:

$$\begin{aligned} & \sum_p \left[ \left\{ A \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \left( \frac{\partial \Phi_p}{\partial x} \right) \right\}_{i+1/2} - \left\{ A \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \left( \frac{\partial \Phi_p}{\partial x} \right) \right\}_{i-1/2} - \tilde{q}_{c,p,i}^w \right] = \\ & = \frac{\Delta \left[ \sum_p (V_i \phi S_p \rho_p y_{c,p}) \right]}{\Delta t}. \end{aligned}$$
(3.1.10)

Dividindo-se ambos os membros da Equação 3.1.10 pelo volume do bloco  $i$ , obtém-se:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x_i} \sum_p \left[ \left\{ \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \left( \frac{\partial \Phi_p}{\partial x} \right) \right\}_{i+1/2} - \left\{ \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \left( \frac{\partial \Phi_p}{\partial x} \right) \right\}_{i-1/2} \right] - \sum_p \frac{\tilde{q}_{c,p,i}^w}{V_i} = \\ & = \frac{\Delta \left[ \sum_p (\phi S_p \rho_p y_{c,p}) \right]}{\Delta t}, \end{aligned}$$
(3.1.11)

que pode ser rescrita na forma:

$$\frac{\Delta_i \left[ \sum_p \left\{ \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \left( \frac{\partial \Phi_p}{\partial x} \right) \right\} \right]}{\Delta x_i} - \sum_p \frac{\tilde{q}_{c,p,i}^w}{V_i} = \frac{\Delta \left[ \sum_p (\phi S_p \rho_p y_{c,p}) \right]}{\Delta t}. \quad (3.1.12)$$

Tomando-se o limite com  $\Delta t$  e  $\Delta x$  tendendo a zero, obtém-se:

$$\frac{\partial \left[ \sum_p \left\{ \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \left( \frac{\partial \Phi_p}{\partial x} \right) \right\} \right]}{\partial x_i} - \sum_p \frac{\tilde{q}_{c,p,i}^w}{V_i} = \frac{\partial \left[ \sum_p (\phi S_p \rho_p y_{c,p}) \right]}{\partial t},$$

para  $c = 1, 2, \dots, n_c$  e  $p = o, g$ . (3.1.13)

### 3.2 Equações do Equilíbrio Termodinâmico

Em um sistema fechado onde existem várias fases, cada fase consiste num sistema aberto, que pode variar em composição e massa, mas o sistema total tem composição e massa constantes. Mantidas as condições de temperatura e pressão, para que o equilíbrio entre fases exista é necessário que não haja variação na energia livre de Gibbs no sistema. A variação da energia livre no sistema é dada por (Daubert, 1985):

$$dG = \sum_p \left( -S_p dT + V_p dP + \sum_{i=1}^{n_p} \mu_{i,p} dn_{i,p} \right), \quad (3.2.1)$$

onde,  $G$  é energia livre de Gibbs,  $S_p$  é a entropia na fase  $p$ ,  $n_{i,p}$  é o número de moles do componente  $i$  na fase  $p$  e  $\mu_{i,p}$  é o potencial químico do componente  $i$  na fase  $p$ . À pressão e temperatura constantes, no equilíbrio, a Equação 3.2.1 pode ser escrita na forma:

$$dG = \sum_p \left( \sum_{i=1}^{n_c} \mu_{i,p} dn_{i,p} \right) = 0 \quad . \quad (3.2.2)$$

Considerando que não há troca de componentes do meio poroso com as fases óleo e gás, para cada componente  $i$  o número total de moles nas fases óleo e gás será constante:

$$dn_{i,o} = -dn_{i,g} \quad . \quad (3.2.3)$$

Se a Equação 3.2.3 for substituída na Equação 3.2.2, pode-se concluir que o equilíbrio é atingido quando o potencial químico de cada componente  $i$  é igual em ambas as fases:

$$\mu_{i,o} = \mu_{i,g} \quad . \quad (3.2.4)$$

A relação entre a fugacidade de um componente e seu potencial químico pode ser expressa pela equação:

$$d\mu_i = R T d(\ln f_i) \quad . \quad (3.2.5)$$

Integrando-se a Equação 3.2.5 e substituindo na Equação 3.2.4, pode-se mostrar que a condição básica do equilíbrio termodinâmico resume-se à igualdade das fugacidades de cada componente  $i$  nas fases óleo e gás:

$$f_{i,o} = f_{i,g} \quad . \quad (3.2.6)$$

A relação de equilíbrio pode ser expressa em termos do coeficiente de fugacidade  $\varphi$ , o qual é definido para cada componente da mistura como a razão entre a fugacidade e a pressão parcial do componente:

$$\varphi_{i,o} = \frac{f_{i,o}}{x_i P} \quad . \quad (3.2.7)$$

$$\varphi_{i,g} = \frac{f_{i,g}}{y_i P} \quad (3.2.8)$$

O coeficiente de fugacidade pode ser ainda calculado pela expressão abaixo (McCain, 1990), a qual será utilizada posteriormente:

$$\ln \varphi_i = \frac{1}{RT} \int_a^V \left[ \frac{RT}{V} - \left( \frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,V,n} \right] dV - \ln Z \quad (3.2.9)$$

Genericamente a constante de equilíbrio óleo-gás de um componente  $i$  é definida como a relação entre os coeficientes de fugacidade nas fases líquido e vapor. Pode ser também expressa como uma relação entre as fugacidades e frações molares do componente nas fases óleo e gás:

$$k_i = \frac{\varphi_{i,o}}{\varphi_{i,g}} = \frac{\frac{f_{i,o}}{x_i P}}{\frac{f_{i,g}}{y_i P}} = \frac{f_{i,o}}{f_{i,g}} \frac{y_i}{x_i} \quad (3.2.10)$$

Estando o sistema em equilíbrio, a relação entre as fugacidades será unitária e a Equação 3.2.10 pode ser simplificada:

$$k_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (3.2.11)$$

### 3.3 Equação da Pressão Capilar e a Tensão Interfacial

A pressão capilar entre dois fluidos imiscíveis em um meio poroso é função da tensão interfacial entre os fluidos, da molhabilidade da rocha aos fluidos, da geometria dos poros (diâmetro dos poros e gargantas) e do histórico de saturação do meio poroso, isto é, se ocorreu por embebição ou drenagem.

Um meio poroso contendo gás e óleo normalmente terá o óleo como fluido preferencialmente molhante. A pressão capilar gás-óleo, portanto, será expressa por:

$$P_{C_{go}} = P_g - P_o . \quad (3.3.1)$$

Em um modelo composicional ocorrem variações na composição das fases que podem alterar consideravelmente a tensão interfacial e em consequência a pressão capilar. Numa injeção de gás no reservatório, por exemplo, a mudança na composição pelo acréscimo de componentes mais leves aos fluidos do reservatório implicaria numa necessária correção dos dados de pressão capilar obtidos em laboratório.

À temperatura constante, a tensão interfacial de uma mistura diminui com o aumento da pressão à medida que mais metano é dissolvido na fase líquida. Assim, na repressurização de um reservatório com injeção de gás “pobre”, os valores de pressão capilar diminuem à medida que a tensão interfacial decresce.

Alguns métodos, desenvolvidos empiricamente, visam corrigir os dados de pressão capilar face às modificações na composição das fases, relacionando a tensão interfacial à composição das fases. Neste trabalho foi utilizada a correlação de Macleod-Sugden aplicada às misturas (Reid et alli, 1977 ; Coats, 1980):

$$\sigma^{\frac{1}{4}} = \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} (\rho_o x_i - \rho_g y_i) , \quad (3.3.2)$$

onde:  $\sigma$  é a tensão interfacial da mistura em dinas/cm,  $P_{ch_i}$  é o “parachor” do componente  $i$ ,  $x_i$  e  $y_i$  são as frações molares do componente  $i$  nas fases líquido e gás,  $\rho_o$  e  $\rho_g$  são as densidades molares das fases em gmol/cm<sup>3</sup>.

O “parachor” é um parâmetro independente da temperatura. Originalmente é estimado com base na estrutura molecular do componente, apresentando-se em tabelas. Seu valor para cada componente pode ser também obtido por regressão.

Existindo uma capa de gás inicial no reservatório, a tensão interfacial inicial ( $\sigma_o$ ) é calculada usando as densidades e composições das fases no equilíbrio. Se o reservatório é subsaturado, a tensão interfacial inicial é calculada com as densidades e composições à pressão de saturação (Coats, 1980).

Assume-se que a curva de pressão capilar informada ( $Pc_{g,o}^i$ ) corresponde à tensão interfacial inicial ( $\sigma_o$ ). Para qualquer outra tensão interfacial  $\sigma$ , o valor da pressão capilar gás-óleo deverá ser corrigido da seguinte forma :

$$Pc_{g,o} = Pc_{g,o}^i \frac{\sigma}{\sigma_o} . \quad (3.3.3)$$

A derivação de uma propriedade do gás, como por exemplo sua densidade, em relação à pressão na fase óleo deve ser desenvolvida da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial P_o} = \frac{\partial \rho_g}{\partial P_g} \frac{\partial P_g}{\partial P_o} . \quad (3.3.4)$$

Da definição de pressão capilar gás-óleo e da Equação 3.3.3, será determinada a derivada da pressão no gás em relação à pressão no óleo:

$$\frac{\partial P_g}{\partial P_o} = 1 + \frac{Pc_{g,o}^i}{\sigma_o} \frac{\partial \sigma}{\partial P_o} . \quad (3.3.5)$$

A partir da Equação 3.3.2, obtém-se :

$$\frac{\partial \sigma}{\partial P_o} = \alpha \sum_{i=1}^{n_c} P_{chi} \left( \frac{\partial \rho_o}{\partial P_o} x_i - \frac{\partial \rho_g}{\partial P_g} \frac{\partial P_g}{\partial P_o} y_i \right), \quad (3.3.6)$$

onde,  $\alpha = 4 \left[ \sum_{i=1}^{n_c} P_{chi} (\rho_o x_i - \rho_g y_i) \right]^3$ .

Substituindo-se a Equação 3.3.5 na Equação 3.3.6 e explicitando-se  $\frac{\partial \sigma}{\partial P_o}$ , resulta:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial P_o} = \frac{\alpha \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} \left( \frac{\partial \rho_o}{\partial P_o} x_i - \frac{\partial \rho_g}{\partial P_g} y_i \right)}{1 + \alpha \frac{P c_g^i}{\sigma_o} \frac{\partial \rho_g}{\partial P_g} \left( \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} y_i \right)} \quad (3.3.7)$$

Para as composições e níveis de pressão normalmente observados em um reservatório, a expressão acima representa valores da ordem de  $-10^{-7}$  cm (Reid, 1977). A tensão interfacial inicial, que pode assumir valores entre 2 e 10 dinas/cm, e os máximos valores de pressão capilar obtidos em laboratório, que normalmente correspondem à zona de transição, permitem negligenciar-se o segundo termo do segundo membro da Equação 3.3.5. Simplificação semelhante adotaram Coats (1980) e Gomes (1990) em seus modelos composicionais.

Nos ensaios realizados em laboratório para obtenção da curva de pressão capilar, pode não se atingir o máximo valor que este parâmetro assume no reservatório. Neste caso, o valor de saturação de óleo residual utilizado nos estudos de reservatório seria superior ao realmente existente.

### 3.4 Equações Restritivas

Considerando as equações de fluxo, de equilíbrio termodinâmico e de pressão capilar, ainda temos um número de incógnitas superior ao número de equações. As definições de fração molar de um componente nas fases e de saturação dos fluidos fornecerão as três equações restantes:

$$\sum_{i=1}^{n_c} x_i = 1 , \quad (3.4.1)$$

$$\sum_{i=1}^{n_c} y_i = 1 \quad ; \quad (3.4.2)$$

$$S_o + S_g = 1 \quad ; \quad (3.4.3)$$

### 3.5 Totalização das Equações e Incógnitas do Sistema

Para o problema em análise, totalizam-se  $2 n_c + 4$  incógnitas: pressões na fase óleo e na fase gás ( $P_o$  e  $P_g$ ), saturações da fase óleo e da fase gás ( $S_o$  e  $S_g$ ), frações molares dos componentes nas fases óleo e gás ( $x_i$  e  $y_i$ , para  $i=1, 2, \dots, n_c$ ).

Para que o sistema tenha solução única são necessárias  $2 n_c + 4$  equações:  $n_c$  equações de balanço de massa para os hidrocarbonetos (Equação 3.1.13),  $n_c$  equações de equilíbrio termodinâmico (Equação 3.2.6), uma equação de capilaridade (Equação 3.3.1) e três equações restritivas (Equações 3.4.1 a 3.4.3).

Algumas variáveis que aparecem nas equações do modelo podem ser explicitadas em função de outras, permitindo obter-se um sistema com  $2 n_c$  incógnitas e  $2 n_c$  equações com as seguintes substituições:

$$S_o = 1 - S_g \quad ; \quad (3.5.1)$$

$$x_1 = 1 - \sum_{i=2}^{n_c} x_i \quad ; \quad (3.5.2)$$

$$y_1 = 1 - \sum_{i=2}^{n_c} y_i \quad ; \quad (3.5.3)$$

$$P_g = P_o + P_{c_{go}} \quad . \quad (3.5.4)$$

### 3.6 Termos Fonte

A comunicação do reservatório com a superfície é feita através dos poços, que no modelo desenvolvido são representados pelos termos fonte das equações de fluxo e localizados na primeira célula (poço injetor) e na última célula (poço produtor). As equações tratadas nesta seção referem-se à compreensão de cada um dos poços em um único bloco.

Definindo  $q_p$  como a vazão volumétrica da fase  $p$  através do poço, pode-se escrevê-la como uma relação entre a vazão molar do componente  $c$  na fase  $p$ , a fração molar do componente  $c$  na fase  $p$  e a densidade molar da fase  $p$ :

$$q_p = \frac{\tilde{q}_{c,p}^w}{y_{c,p} \rho_p} \left[ \frac{\frac{\text{moles de } c}{\text{tempo}}}{\frac{\text{moles de } c}{\text{moles de } p} \frac{\text{moles de } p}{\text{volume de } p}} \right]. \quad (3.6.1)$$

A vazão molar total de um componente através do poço será a soma de suas vazões molares em ambas as fases:

$$\tilde{q}_c^w = x_c \rho_o q_o + y_c \rho_g q_g . \quad (3.6.2)$$

Para o poço injetor, a vazão molar de cada componente deve ser informada como dado de entrada, com sinal negativo. Mantendo-se constantes a vazão volumétrica do gás injetado na superfície e sua composição, as vazões molares injetadas de cada componente permanecerão constantes.

Desprezando-se a estocagem nos poços, a vazão molar de um componente em condições de reservatório é igual à sua vazão molar em condições de superfície ( $\tilde{q}_{c,s}^w$ ). A vazão molar total dos componentes, consequentemente, também será a mesma em ambos os casos:

$$\tilde{q}_H^w = \sum_{c=1}^{n_c} \tilde{q}_c^w = \rho_o q_o + \rho_g q_g \quad (3.6.3)$$

$$\tilde{q}_H^* = \tilde{q}_{H_s}^* \Rightarrow \rho_o q_o + \rho_g q_g = \rho_{o_s} q_{o_s} + \rho_{g_s} q_{g_s} . \quad (3.6.4)$$

As definições de fração molar da fase líquida ( $L$ ) e da fase gasosa ( $G$ ) permitem escrever-se, para as condições de superfície:

$$L_s = \frac{n_L}{n_L + n_G} = \frac{\rho_{o_s} q_{o_s}}{\rho_{o_s} q_{o_s} + \rho_{g_s} q_{g_s}} , \quad (3.6.5)$$

$$G_s = \frac{n_G}{n_L + n_G} = \frac{\rho_{g_s} q_{g_s}}{\rho_{o_s} q_{o_s} + \rho_{g_s} q_{g_s}} . \quad (3.6.6)$$

Combinando a Equação 3.6.4 com as Equações 3.6.5 e 3.6.6 obtém-se, respectivamente:

$$q_{o_s} = \frac{L_s}{\rho_{o_s}} (\rho_o q_o + \rho_g q_g) , \quad (3.6.7)$$

$$q_{g_s} = \frac{G_s}{\rho_{g_s}} (\rho_o q_o + \rho_g q_g) ; \quad (3.6.8)$$

restando determinar as vazões volumétricas de óleo e gás no reservatório.

Assumindo fluxo radial em regime permanente para uma única fase, obtém-se a expressão:

$$P(r) = P_{w_f} + \frac{q_p \mu_p}{2\pi k_p h} \ln\left(\frac{r}{r_w}\right) . \quad (3.6.9)$$

Sendo  $r_0$  a posição radial na qual a pressão calculada para a célula é igual à pressão dada pela Equação 3.6.9, então, explicitando-se a vazão, obtém-se:

$$q_p = \frac{2\pi k h}{\ln\left(\frac{r_0}{r_w}\right)} \frac{k_{r,p}}{\mu_p} (P - P_{wf}) , \quad (3.6.10)$$

onde  $r_w$  é o raio do poço,  $h$  é a altura da célula,  $k$  é a permeabilidade absoluta e  $r_0$  é dado pela relação obtida por Peaceman (1983):

$$r_0 = 0,140365\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2} , \quad (3.6.11)$$

onde  $\Delta x$  e  $\Delta y$  são respectivamente as dimensões da célula nas direções x e y.

Definindo-se o índice de produtividade como:

$$IP = \frac{2\pi k h}{\ln\left(\frac{r_0}{r_w}\right)} , \quad (3.6.12)$$

pode-se escrever que a vazão volumétrica de uma fase, em condições de reservatório, é dada pela expressão:

$$q_p = IP \frac{k_{r,p}}{\mu_p} (P - P_{wf}) . \quad (3.6.13)$$

A Equação 3.6.13 é função da pressão de fluxo e as Equações 3.6.7 e 3.6.8, que relacionam as vazões de superfície com as vazões de reservatório, dependem das frações molares das fases e suas densidades molares em condições de superfície. A determinação das vazões vai depender da condição de contorno escolhida para o poço. Há duas opções: pressão de fluxo no poço constante e vazão na superfície constante:

Caso 1 - Pressão de fluxo no fundo do poço constante.

Para o caso da produção à pressão de fundo constante, o cálculo da vazão volumétrica da fase em condições de reservatório é imediato, através da Equação 3.6.13.

As vazões no separador são obtidas pelas Equações 3.6.7 e 3.6.8 ao final de cada passo de tempo, usando-se as frações molares e densidades molares das fases, em condições de superfície, calculadas por uma liberação “*flash*”. Neste cálculo são usadas a pressão e temperatura de separação e a composição global no poço ( $z_c^w$ ), obtida por:

$$z_c^w = \frac{n_c}{n_T} = \frac{\frac{n_c}{t}}{\frac{n_L + n_G}{t}} = \frac{x_c \rho_o q_o + y_c \rho_g q_g}{\rho_o q_o + \rho_g q_g} . \quad (3.6.14)$$

#### Caso 2 - Vazão na superfície constante.

Neste caso, a vazão de óleo ou gás, conforme o caso, permanece constante e a pressão de fluxo é obtida através da Equação 3.6.7, para vazão de óleo na superfície constante, ou através da Equação 3.6.8, caso uma vazão de gás constante na superfície seja exigida. Exemplificando para o segundo caso, por substituição da Equação 3.6.13 na Equação 3.6.8, resulta:

$$\frac{q_g \rho_{g_s}}{G_s} = IP \left[ \rho_o \frac{k_{r_o}}{\mu_o} (P_o - P_{wf}) + \rho_g \frac{k_{r_g}}{\mu_g} (P_g - P_{wf}) \right]; \quad (3.6.15)$$

desconsiderando-se a pressão capilar no poço:

$$P_o = P_g = P \quad (3.6.16)$$

e explicitando-se a diferença de pressões, obtém-se:

$$(P - P_{wf}) = \frac{q_{gs}\rho_{gs}}{G_s} \cdot \frac{1}{IP \left[ \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \right]} . \quad (3.6.17)$$

Observa-se que a expressão anterior, necessária à determinação das vazões volumétricas de óleo e gás, depende da densidade molar e fração molar, em condições de superfície, da fase para qual a vazão foi fixada. As propriedades em condições de superfície, entretanto, dependem da composição das fases no reservatório, que será obtida apenas no final do *timestep*. A solução poderia ser obtida por um tratamento implícito também para as variáveis de superfície, o que aumentaria a complexidade do sistema.

Optou-se por determinar as frações molares e densidades molares das fases na superfície usando-se no cálculo *flash* a composição global no poço ( $z_c^*$ ) obtida com as propriedades da iteração anterior. A composição no poço, expressa pela Equação 3.6.14, pode ser ainda obtida a partir das definições de vazão molar e fração molar.

Sejam as definições de vazão molar da fase ( $p = o, g$ ) e vazão molar total:

$$\tilde{q}_p = IP \frac{Kr_p}{\mu_p} \rho_p \Delta P , \quad (3.6.18)$$

$$\tilde{q}_T = \tilde{q}_o + \tilde{q}_g . \quad (3.6.19)$$

A fração molar de um componente  $c$  no poço pode ser expressa por:

$$z_c^* = \frac{\tilde{q}_o}{\tilde{q}_T} x(c, n_b) + \frac{\tilde{q}_g}{\tilde{q}_T} y(c, n_b) . \quad (3.6.20)$$

Substituindo-se as Equações 3.6.18 e 3.6.19 na Equação 3.6.20, obtém-se a seguinte expressão para fração molar do componente  $c$  no poço:

$$z_c^w = \frac{\frac{K r_o \rho_o}{\mu_o}}{\frac{K r_o \rho_o}{\mu_o} + \frac{K r_g \rho_g}{\mu_g}} x(c, n_b) + \frac{\frac{K r_g \rho_g}{\mu_g}}{\frac{K r_o \rho_o}{\mu_o} + \frac{K r_g \rho_g}{\mu_g}} y(c, n_b) , \quad (3.6.21)$$

onde  $n_b$  representa o bloco onde está completado o poço produtor.

Ao final de cada passo de tempo, a vazão volumétrica de superfície fixada ( $q_{o,s}$  ou  $q_{g,s}$ ) deve ser recalculada, pois pode haver algum desvio do valor inicial estabelecido.

## Capítulo 4

### Modelo Numérico

#### 4.1. Discretização das Equações de Fluxo

No modelo matemático apresentado anteriormente, as equações de fluxo estão na forma diferencial, com fortes não linearidades. Torna-se necessário, então, a representação discretizada das equações, que gerará um sistema de equações não lineares, o qual será resolvido numericamente.

Aplicando-se diferenças finitas centradas, a Equação 3.1.13 pode ser facilmente discretizada:

$$\frac{1}{\Delta x_i} \sum_p \left[ \left( \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \right)_{i+\frac{1}{2}} \frac{(\Phi_{p,i+1} - \Phi_{p,i})}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} - \left( \rho_p y_{c,p} \frac{k k_{rp}}{\mu_p} \right)_{i-\frac{1}{2}} \frac{(\Phi_{p,i} - \Phi_{p,i-1})}{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}} \right] - \sum_p \frac{\tilde{q}_{c,p,i}^w}{V_i} = \\ \frac{\Delta \left[ \sum_p (\phi S_p \rho_p y_{c,p})_i \right]}{\Delta t} . \quad (4.1.1)$$

A transmissibilidade à fase  $p$  nas fronteiras à montante e à jusante do bloco  $i$  (volume de controle) será expressa pela relação:

$$T_{p,i \pm \frac{1}{2}} = \left( \frac{A \rho_p k k_{rp}}{\mu_p \Delta x} \right)_{i \pm \frac{1}{2}}. \quad (4.1.2)$$

Aplicando o conceito de transmissibilidade acima definido, a Equação 4.1.1 pode ser simplificada:

$$\frac{1}{V_i} \sum_p \left[ (T_p y_{c,p})_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{p,i+1} - \Phi_{p,i}) - (T_p y_{c,p})_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{p,i} - \Phi_{p,i-1}) \right] - \sum_p \frac{\tilde{q}_{c,p,i}^w}{V_i} = \frac{\Delta \left[ \sum_p (\phi S_p \rho_p y_{c,p})_i \right]}{\Delta t} \quad (4.1.3)$$

$$\sum_p \left[ (T_p y_{c,p})_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{p,i+1} - \Phi_{p,i}) - (T_p y_{c,p})_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{p,i} - \Phi_{p,i-1}) \right] - \sum_p \tilde{q}_{c,p,i}^w = \frac{V_i \phi \Delta \left[ \sum_p (S_p \rho_p y_{c,p})_i \right]}{\Delta t} \quad (4.1.4)$$

Cada componente hidrocarboneto poderá ocorrer nas fases óleo e gás, desta forma, a Equação 4.1.4 torna-se:

$$(T_o x_c)_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{o,i+1} - \Phi_{o,i}) - (T_o x_c)_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{o,i} - \Phi_{o,i-1}) + (T_g y_c)_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{g,i+1} - \Phi_{g,i}) - (T_g y_c)_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{g,i} - \Phi_{g,i-1}) = \tilde{q}_{c,o,i}^w + \tilde{q}_{c,g,i}^w + \frac{V_i \phi \left[ (S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c)_{i+1} - (S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c)_i \right]}{\Delta t}. \quad (4.1.5)$$

Como visto anteriormente, a Equação 3.6.1 relaciona a vazão molar de um componente *c* na fase *p* com a vazão volumétrica da fase ( $q_p$ ), a fração molar do componente *c* na fase *p* e a densidade molar da fase *p*:

$$q_p = \frac{\tilde{q}_{c,p}^w}{y_{c,p} \rho_p} \left[ \frac{\frac{\text{moles de } c}{\text{tempo}}}{\frac{\text{moles de } c}{\text{moles de } p} \frac{\text{moles de } p}{\text{volume de } p}} \right]. \quad (3.6.1)$$

Escrevendo-se os termos fonte da Equação 4.1.5 em função das vazões volumétricas das fases, obtém-se:

$$\begin{aligned} & (T_o x_c)_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{o,i+1} - \Phi_{o,i}) - (T_o x_c)_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{o,i} - \Phi_{o,i-1}) + (T_g y_c)_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{g,i+1} - \Phi_{g,i}) - (T_g y_c)_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{g,i} - \Phi_{g,i-1}) = \\ & \frac{V_i \phi \left[ (S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c)_{n+1} - (S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c)_n \right]_i}{\Delta t} + (q_o x_c \rho_o)_i + (q_g y_c \rho_g)_i . \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

Expressando a função potencial em termos de pressão e profundidade vertical e realizando algumas simplificações:

$$\begin{aligned} & \left[ (T_o x_c)_{i+\frac{1}{2}} (P_{o,i+1} - P_{o,i}) - (T_o x_c)_{i-\frac{1}{2}} (P_{o,i} - P_{o,i-1}) \right] - \left[ (T_o x_c \gamma_o)_{i+\frac{1}{2}} (D_{i+1} - D_i) - (T_o x_c \gamma_o)_{i-\frac{1}{2}} (D_i - D_{i-1}) \right] + \\ & \left[ (T_g y_c)_{i+\frac{1}{2}} (P_{g,i+1} - P_{g,i}) - (T_g y_c)_{i-\frac{1}{2}} (P_{g,i} - P_{g,i-1}) \right] - \left[ (T_g y_c \gamma_g)_{i+\frac{1}{2}} (D_{i+1} - D_i) - (T_g y_c \gamma_g)_{i-\frac{1}{2}} (D_i - D_{i-1}) \right] = \\ & \frac{V_i \phi \left[ (S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c)_{n+1} - (S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c)_n \right]_i}{\Delta t} + (q_o x_c \rho_o)_i + (q_g y_c \rho_g)_i . \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

Substituindo as Equações 3.5.1 e 3.5.4 na Equação 4.1.7, obtém-se as equações finais de escoamento em suas formas residuais:

$$\begin{aligned} F_c = & \left[ (T_o x_c)_{i+\frac{1}{2}} (P_{o,i+1} - P_{o,i}) - (T_o x_c)_{i-\frac{1}{2}} (P_{o,i} - P_{o,i-1}) \right] - \left[ (T_o x_c \gamma_o)_{i+\frac{1}{2}} (D_{i+1} - D_i) - (T_o x_c \gamma_o)_{i-\frac{1}{2}} (D_i - D_{i-1}) \right] \\ & + \left\{ (T_g y_c)_{i+\frac{1}{2}} [(P_{C,i+1} - P_{C,i}) + (P_{o,i+1} - P_{o,i})] - (T_g y_c)_{i-\frac{1}{2}} [(P_{C,i} - P_{C,i-1}) + (P_{o,i} - P_{o,i-1})] \right\} \\ & - \left[ (T_g y_c \gamma_g)_{i+\frac{1}{2}} (D_{i+1} - D_i) - (T_g y_c \gamma_g)_{i-\frac{1}{2}} (D_i - D_{i-1}) \right] - (q_o x_c \rho_o)_i - (q_g y_c \rho_g)_i \\ & - \frac{V_i \phi \left\{ \left[ (1 - S_g) \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right]_{n+1} - \left[ (1 - S_g) \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right]_n \right\}_i}{\Delta t} = 0 , \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

para  $c = 1, 2, 3, \dots, n_c$

Para um reservatório horizontal, a equação anterior pode ser simplificada:

$$\begin{aligned}
 F_c = & \left[ (T_o x_c)_{i+\frac{1}{2}} (P_{o,i+1} - P_{o,i}) - (T_o x_c)_{i-\frac{1}{2}} (P_{o,i} - P_{o,i-1}) \right] - (q_o x_c \rho_o)_i - (q_g y_c \rho_g)_i \\
 & + \left\{ (T_g y_c)_{i+\frac{1}{2}} [(P_{C,i+1} - P_{C,i}) + (P_{o,i+1} - P_{o,i})] - (T_g y_c)_{i-\frac{1}{2}} [(P_{C,i} - P_{C,i-1}) + (P_{o,i} - P_{o,i-1})] \right\} \\
 & - \frac{V_i \phi \left\{ [(1-S_g) \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c]_{n+1} - [(1-S_g) \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c]_n \right\}_i}{\Delta t} = 0, \\
 \text{para } c = 1, 2, \dots, n_c. \tag{4.1.9}
 \end{aligned}$$

As transmissibilidades ao óleo e ao gás nas fronteiras são calculadas pela Equação 4.1.2.

As transmissibilidades nas fronteiras têm os termos dependentes de pressão e saturação calculados com as propriedades avaliadas no bloco de maior potencial (*single-point upstream*).

## 4.2 O Sistema Matricial

Na formulação totalmente implícita é feito o cálculo simultâneo da pressão, saturação e composição dos fluidos no instante de tempo  $n+1$ , através de um sistema de equações único. Como se trata de um sistema não linear, é necessário o uso de um método iterativo para a linearização, sendo escolhido o método de Newton-Raphson (Cunha, 1993).

Na Seção 4.1 foi obtida a equação de fluxo em sua forma residual:

$$\begin{aligned}
 F_c = & \left[ (T_o x_c)_{i+\frac{1}{2}} (P_{o,i+1} - P_{o,i}) - (T_o x_c)_{i-\frac{1}{2}} (P_{o,i} - P_{o,i-1}) \right] - \left[ (T_o x_c \gamma_o)_{i+\frac{1}{2}} (D_{i+1} - D_i) - (T_o x_c \gamma_o)_{i-\frac{1}{2}} (D_i - D_{i-1}) \right] \\
 & + \left\{ (T_g y_c)_{i+\frac{1}{2}} [(P_{C,i+1} - P_{C,i}) + (P_{o,i+1} - P_{o,i})] - (T_g y_c)_{i-\frac{1}{2}} [(P_{C,i} - P_{C,i-1}) + (P_{o,i} - P_{o,i-1})] \right\} \\
 & - \left[ (T_g y_c \gamma_g)_{i+\frac{1}{2}} (D_{i+1} - D_i) - (T_g y_c \gamma_g)_{i-\frac{1}{2}} (D_i - D_{i-1}) \right] - (q_o x_c \rho_o)_i - (q_g y_c \rho_g)_i \\
 & - \frac{V_i \phi \left\{ [(1-S_g) \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c]_{n+1} - [(1-S_g) \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c]_n \right\}_i}{\Delta t} = 0, \\
 \text{para } c = 1, 2, 3, \dots, n_c. \tag{4.1.8}
 \end{aligned}$$

Escrevendo-se as equações de equilíbrio termodinâmico, obtidas na Seção 3.2, na forma residual, obtém-se:

$$\bar{f}_{c_i} = f_{c,o} - f_{c,g} = 0 \quad , \quad (4.2.2)$$

para  $c = 1, 2, 3, \dots, n_c$ ;  $i = 1, 2, 3, \dots, n_b$ .

De forma simplificada, as equações de escoamento e equilíbrio termodinâmico serão doravante representadas respectivamente por:

$$Fc_i(u_{d,i}) = 0 \quad , \quad (4.2.3)$$

$$\bar{f}_{c_i}(u_{d,i}) = 0 \quad , \quad (4.2.4)$$

para  $c = 1, 2, 3, \dots, n_c$ ;  $d = 1, 2, 3, \dots, 2n_c$ ;  $i = 1, 2, 3, \dots, n_b$ , onde  $u$  é o vetor de incógnitas,  $n_c$  é o número de componentes e  $n_b$  é o número de blocos.

A solução será obtida pela seguinte equação matricial, onde o índice  $v$  se refere ao número da iteração de Newton:

$$F'(u^v) \cdot (u^{v+1} - u^v) = -F_R(u^v) \quad . \quad (4.2.5)$$

No sistema acima,  $F'$  é a matriz Jacobiana, formada pelas derivadas das equações nas suas formas residuais em relação às variáveis independentes (ver Apêndices A e H);  $F_R$  é o vetor função resíduo, obtido pela substituição em  $Fc_i$  e  $\bar{f}_{c_i}$  das variáveis obtidas no nível de iteração anterior; a solução será obtida quando este vetor estiver bem próximo do vetor nulo. As dimensões da matriz Jacobiana e dos vetores solução e resíduo constam na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Dimensões dos vetores do sistema

Matrizes e Vetores do Sistema	Dimensões	
	Linhas	Colunas
Matriz Jacobiana ( $F'$ )	$(2 n_c) n_b$	$(2 n_c) n_b$
Vetor Solução ( $u$ )	$(2 n_c) n_b$	1
Vetor Resíduo ( $F_R$ )	$(2 n_c) n_b$	1

O vetor solução  $u$  compõe-se de  $n_b$  subvetores, cada um correspondente a um bloco do reservatório:

$$u = \left( u_1, u_2, \dots, u_i, \dots, u_{n_b} \right)^T; \quad (4.2.6)$$

para um bloco genérico  $i$  o subvetor solução  $u_i$  será:

$$u_i = \left( P_i, S_{g_i}, y_{2i}, x_{2i}, \dots, y_{n_{c_i}}, x_{n_{c_i}} \right)^T. \quad (4.2.7)$$

Da mesma forma, o vetor função resíduo pode ser representado por:

$$F_R = \left( F_{R1}, F_{R2}, \dots, F_{R_i}, \dots, F_{R_{n_b}} \right)^T; \quad (4.2.8)$$

onde, para um bloco genérico  $i$  o subvetor resíduo  $F_{R_i}$  será:

$$F_{R_i} = \left( F_{R1_i}, F_{R2_i}, \dots, F_{R_{n_{c_i}}}, \bar{F}_{R1_i}, \bar{F}_{R2_i}, \dots, \bar{F}_{R_{n_{c_i}}} \right)^T. \quad (4.2.9)$$

Na Equação 4.2.9, os  $n_c$  primeiros componentes do vetor referem-se aos resíduos das equações de fluxo e os  $n_c$  componentes restantes referem-se aos resíduos das equações de equilíbrio termodinâmico.

A matriz Jacobiana, constituída pelas derivadas das equações de fluxo e equilíbrio termodinâmico (em cada bloco e para cada componente) em relação às variáveis primárias do sistema, será uma matriz tridiagonal em blocos, uma vez que trata-se de um modelo unidimensional.

A Figura 4.1 apresenta um esquema da matriz Jacobiana gerada. As áreas sombreadas indicam as posições das matrizes não nulas, cujos termos encontram-se determinados no Apêndice A (derivadas das equações de fluxo) e no Apêndice H (derivadas das equações de equilíbrio termodinâmico).

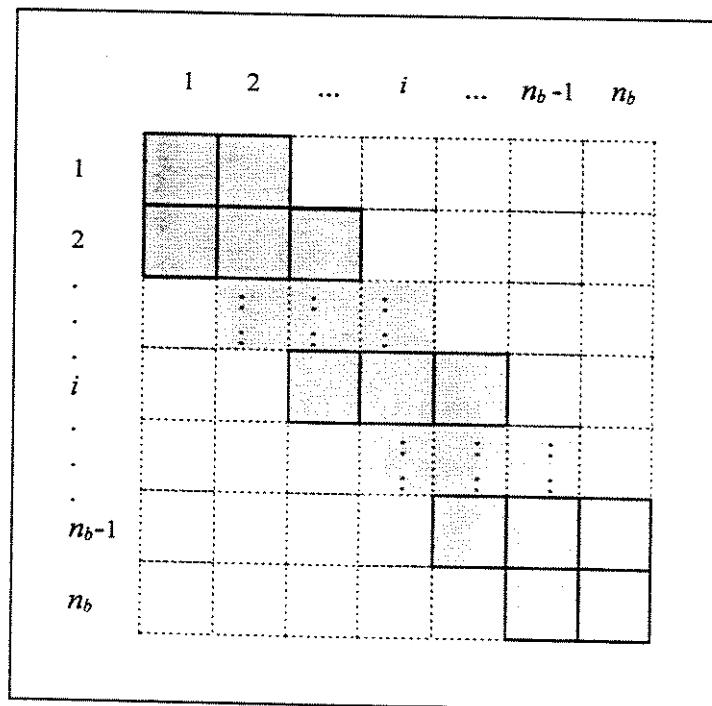


Figura 4.1: Esquema da matriz Jacobiana para uma divisão em  $n_b$  blocos

As matrizes que constituem as diagonais inferior, principal e superior na linha correspondente ao bloco genérico  $i$  são respectivamente ( $F$  representa as equações de fluxo e  $f$ , as equações de equilíbrio termodinâmico):



## **Capítulo 5**

### **Propriedades de Rocha e Fluidos**

#### **5.1 Pressão Capilar e Permeabilidade Relativa**

As curvas de pressão capilar informadas aos simuladores numéricos normalmente são obtidas das análises de laboratório, onde são utilizadas amostras dos fluidos e rocha do reservatório.

Nos modelos composicionais torna-se muito importante a correção dos dados de pressão capilar com a variação da tensão interfacial entre as fases, decorrente das mudanças em suas composições. Conforme detalhado na Seção 3.3, para correção dos valores de pressão capilar foi implementado o método de Macleod-Sugden aplicado às misturas (Reid et alli, 1977 ; Coats, 1980). A curva de pressão capilar inicial informada ao modelo é apresentada na Tabela 5.1, a qual será corrigida à medida que novos valores de frações molares dos componentes e densidades molares das fases são calculadas para os blocos.

As curvas de permeabilidades relativas são obtidas em laboratório através de experimentos onde se considera o fluxo bifásico na amostra de rocha. Normalmente realizam-se dois experimentos independentes: em um é analisado o fluxo de água e óleo no meio poroso e no outro é analisado o fluxo de gás e óleo à saturação de água irredutível, obtendo-se curvas de permeabilidade relativa água-óleo e gás-óleo independentes. Como no reservatório ocorre um fluxo trifásico, tornam-se necessárias correções aos dados obtidos de laboratório, sendo comumente empregado o método de Stone (1953). No modelo aqui desenvolvido, entretanto, considera-se apenas a existência de óleo e gás no reservatório, sendo os valores de

permeabilidade relativa gás-óleo obtidos diretamente a partir dos dados de laboratório. A Figura 5.1 apresenta os valores informados como dados de entrada do programa.

Tabela 5.1: Valores iniciais de pressão capilar gás-óleo em função da saturação de gás

Sg	Pc <sub>g-o</sub> (KPa)
0,00	0,00
0,01	0,01
0,10	0,13
0,20	0,27
0,30	0,45
0,40	0,71
0,50	1,02
0,60	1,50
0,75	2,15

Da mesma forma que ocorrem variações na pressão capilar com mudanças na composição dos fluidos, aquelas também ocorrerão nos valores de permeabilidade relativa (Coats, 1980 e Nghiem, 1981). Os valores de permeabilidade relativa ao gás e ao óleo, entretanto, apresentam pequena variação com a tensão interfacial, salvo próximo ao ponto crítico. Somente para tensões interfaciais muito pequenas haverá redução significativa da saturação residual de óleo. A correção dos valores de permeabilidades relativas com a variação na composição dos fluidos não foi implementada neste modelo.

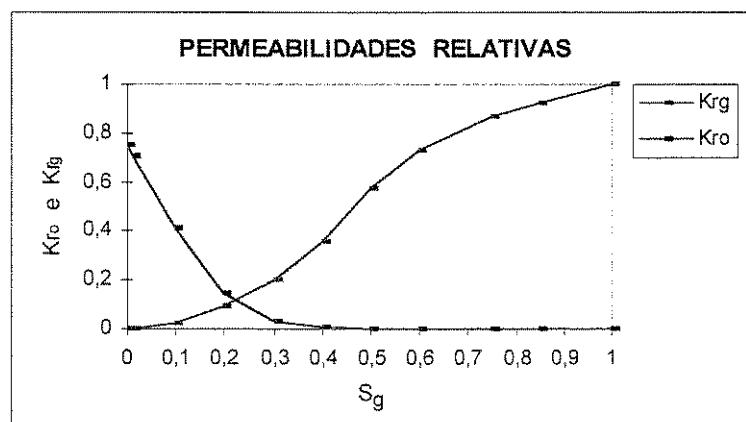


Figura 5.1: Curvas de permeabilidade relativa ao gás e ao óleo

## 5.2 A Equação de Estado

As equações de estado permitem a previsão das relações entre pressão, volume e temperatura para uma substância pura ou mistura, em qualquer fase. Pode-se também utilizá-las para determinação das densidades e fugacidades.

As equações de estado do tipo cúbicas são as que apresentam melhor desempenho nas aplicações de estudos de reservatórios, sendo a de Peng & Robinson (1976) a mais freqüentemente utilizada na simulação de reservatórios. Segue-se seu desenvolvimento:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a_T}{v(v + b) + b(v - b)} , \quad (5.2.1)$$

onde,

$$b = \sum_{i=1}^{n_c} y_i b_i , \quad (5.2.2)$$

sendo  $y_i$  a fração molar do componente  $i$  na fase líquido ou gás ( $x_i$  ou  $y_i$ ) e  $b_i$  dado por:

$$b_i = \Omega_b \frac{R T_{C,i}}{P_{C,i}} . \quad (5.2.3)$$

Define-se:

$$\alpha_T = \sum_{i=1}^{n_c} \sum_{j=1}^{n_c} y_i y_j \left( a_{T_i} a_{T_j} \right)^{0.5} \left( 1 - \delta_{ij} \right) , \quad (5.2.4)$$

onde,

$$a_{T_i} = a_{C_i} \alpha_i , \quad (5.2.5)$$

$$a_{C_i} = \Omega_a \frac{R^2 T_{c_u}^2}{P_{C_i}} , \quad (5.2.6)$$

$$\alpha_i^{0.5} = 1 + (0.37464 + 1.54226 \omega_i - 0.26992 \omega_i^2) (1 - T_{r_i}^{0.5}) . \quad (5.2.7)$$

Os parâmetros  $\Omega_a$  e  $\Omega_b$  da equação de Peng & Robinson originalmente são 0,45724 e 0,07780, mas podem ter seus valores alterados quando usados como variáveis no processo de ajuste da equação de estado aos dados de PVT. Os coeficientes de iteração binária são importantes quando  $i$  corresponde à um componente leve e  $j$  à um componente pesado, ou vice-versa. Tal como outros parâmetros, também podem ser usados como variáveis no processo de ajuste da equação de estado aos dados de PVT.

É importante ressaltar que os valores de  $a_T$  e  $b$  são determinados para as fases líquida e gasosa conforme usarmos  $x_i$  ou  $y_i$  nas Equações 5.2.4 e 5.2.2. Conseqüentemente, os parâmetros que adiante serão obtidos a partir de  $a_T$  e  $b$  também serão referenciados à fase líquido ou gás.

Rescrevendo-se a Equação 5.2.1 numa forma cúbica em termos do volume e substituindo-se o fator de compressibilidade  $Z = {}^P\gamma_{RT}$ , resultará na Equação de Peng & Robinson na sua forma cúbica:

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 2B - 3B^2)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0 , \quad (5.2.8)$$

onde,

$$A = \frac{a_T P}{R^2 T^2} , \quad (5.2.9)$$

$$B = \frac{bP}{RT} . \quad (5.2.10)$$

As três raízes da Equação 5.2.8 são reais quando a temperatura e pressão são tais que a mistura apresenta-se em duas fases. Haverá uma raiz real e duas raízes complexas quando a mistura encontrar-se em uma só fase.

Na utilização das frações molares dos componentes na fase líquida nas Equações 5.2.2 e 5.2.4, quando obtiverem-se três raízes reais, a raiz de menor valor será a compressibilidade do líquido ( $Z_L$ ). Na utilização das frações molares dos componentes na fase gasosa, a compressibilidade do gás ( $Z_G$ ) será a raiz de maior valor dentre as três obtidas. A raiz intermediária não tem significado físico.

Entretanto, nas primeiras iterações do cálculo do equilíbrio líquido-gás, não é raro encontrar-se uma única raiz mesmo quando há duas fases, principalmente devido a composições iniciais imprecisas. Assim, torna-se necessário, quando se obtém uma única raiz real, considerar-se também os valores de  $Z$  para os quais a derivada da Equação 5.2.8 se anula, pois são pontos mais próximos das raízes procuradas, caso tenhamos duas fases.

Suponhamos uma certa pressão e temperatura para as quais haja duas fases. Na Figura 5.2, a curva 1 corresponde à composição no equilíbrio e apresenta três raízes reais, a compressibilidade do gás seria a raiz de maior valor. A curva 2 fornece apenas uma raiz , próxima à  $Z_G$  e para o qual certamente convergiria. A situação representada pela curva 3, entretanto, apresenta uma única raiz que dificilmente convergiria para  $Z_G$ . A resolução da equação quadrática obtida pela derivação da equação cúbica (curva 3) forneceria dois valores reais dos quais o maior será uma melhor aproximação para  $Z_G$ .

Para o caso do líquido o problema se inverte. Das três raízes reais, a compressibilidade do líquido seria a raiz de menor valor. A curva 3 fornece apenas uma raiz , próxima à  $Z_L$  e para o qual certamente convergiria. A situação representada pela curva 2, entretanto, apresenta uma única raiz que dificilmente convergiria para  $Z_L$ . A resolução da equação quadrática obtida pela derivação da equação cúbica (curva 2) forneceria dois valores reais dos quais o menor será uma melhor aproximação para  $Z_L$ .

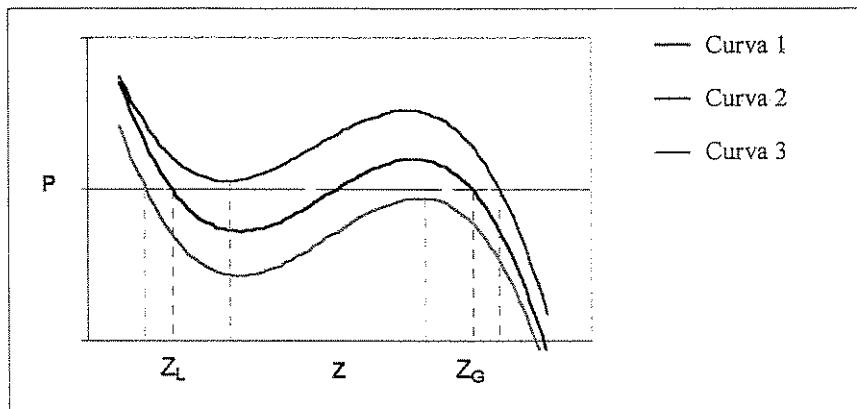


Figura 5.2: Uso da derivação da equação cúbica na obtenção de outras duas raízes reais

A obtenção das fugacidades não é feita de forma imediata. Combinando-se a Equação 5.2.1 com a Equação 3.2.9 e realizando-se a integração, será obtida a equação para o coeficiente de fugacidade do componente  $j$  na fase em que se está trabalhando:

$$\ln \varphi_j = -\ln(z - B) + (z - 1) B'_j - \frac{A}{2^{1.5} B} (A'_j - B'_j) \ln \left[ \frac{z + 2,414 B}{z - 0,414 B} \right], \quad (5.2.11)$$

onde,

$$B'_j = \frac{b_j}{b}, \quad (5.2.12)$$

$$A'_j = \frac{1}{a_T} \left[ 2 a_{Tj}^{0.5} \sum_i y_i a_{Ti}^{0.5} (1 - \delta_{ij}) \right]. \quad (5.2.13)$$

Determinado o coeficiente de fugacidade do componente  $j$ , decorre de sua definição o valor da fugacidade deste componente na fase  $p$  (óleo ou gás):

$$f_{j,p} = y_j P \varphi_{j,p}, \quad (5.2.14)$$

### 5.3 O Cálculo Flash

O procedimento descrito neste item visa a determinação das frações molares das fases e dos componentes de uma mistura dadas sua composição e as condições de pressão e temperatura às quais está submetida.

O método aqui implementado é iterativo e requer a estimativa prévia das frações molares da fase líquido ( $L$ ) e gás ( $G$ ) e das frações molares de cada componente nas fases líquida ( $x_i$ ) e gasosa ( $y_i$ ). É necessário ainda o conhecimento da composição global da mistura, ou seja, a fração molar global de cada componente na mistura ( $z_i$ ). Por definição:

$$x_i = \frac{n_{iL}}{n_L} , \quad (5.3.1)$$

$$y_i = \frac{n_{ig}}{n_g} , \quad (5.3.2)$$

$$z_i = \frac{n_i}{n_T} , \quad (5.3.3)$$

$$L = \frac{n_L}{n_T} , \quad (5.3.4)$$

$$G = \frac{n_g}{n_T} . \quad (5.3.5)$$

A partir das relações estabelecidas nas Equações 5.3.1 a 5.3.5, pode-se demonstrar:

$$z_i = L x_i + G y_i , \quad (5.3.6)$$

$$L + G = 1 , \quad (5.3.7)$$

$$\sum_{i=1}^{n_c} x_i = \sum_{i=1}^{n_c} y_i = \sum_{i=1}^{n_c} z_i = 1 . \quad (5.3.8)$$

Para uma solução não ideal, a relação entre as frações molares de um componente  $i$  no líquido e no gás se dá através de uma constante determinada experimentalmente, conhecida como constante de equilíbrio ( $k_i$ ). Normalmente os valores das constantes de equilíbrio são obtidos através de métodos matemáticos, dadas as dificuldades de obtenção e manipulação de dados experimentais.

A constante de equilíbrio de um componente  $i$  pode ser expressa por:

$$k_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{n_{ig}}{n_{il}} \frac{n_L}{n_g} . \quad (5.3.9)$$

Partindo-se da Equação 3.2.11, pode-se representar o número de moles de um componente  $i$  na fase gasosa como uma relação entre a constante de equilíbrio, as frações molares das fases, e o número total de moles deste componente:

$$n_{ig} = \frac{n_i}{1 + \frac{n_L}{n_{ig}}} = \frac{n_i}{1 + \frac{\gamma_G}{k_i}} = \frac{G}{L} \left[ \frac{n_i k_i}{1 + \frac{\gamma_L}{k_i}} \right] . \quad (5.3.10)$$

Analogamente, pode-se obter o número de moles do componente  $i$  na fase líquida pela seguinte relação:

$$n_{il} = \frac{n_i}{1 + \frac{\gamma_L}{k_i}} . \quad (5.3.11)$$

A equação de Rachford-Rice (Edmister, 1984) pode ser obtida a partir das Equações 5.3.10 e 5.3.11, resultando:

$$1 + \frac{G}{L} k_i = \frac{1}{L} [1 + G(k_i - 1)] . \quad (5.3.12)$$

Combinando-se as Equações 5.3.10 e 5.3.12, obtém-se a fração molar de um componente na fase gasosa como uma relação entre sua fração molar global, a constante de equilíbrio e a fração molar da fase gasosa:

$$y_i = \frac{z_i k_i}{1 + G(k_i - 1)} . \quad (5.3.13)$$

A própria definição de constante de equilíbrio aplicada à Equação 5.3.13 gera:

$$x_i = \frac{z_i}{1 + G(k_i - 1)} . \quad (5.3.14)$$

A partir da Equação 5.3.8, defini-se uma função  $E$ , a qual deverá ser nula no equilíbrio termodinâmico:

$$E = \sum_{i=1}^{n_c} y_i - \sum_{i=1}^{n_c} x_i = 0 . \quad (5.3.15)$$

Combinada às Equações 5.3.13 e 5.3.14, a Equação 5.3.15 apresenta-se como uma função da fração molar da fase gasosa:

$$E(G) = \sum_{i=1}^{n_c} \frac{z_i (1 - k_i)}{1 + G(k_i - 1)} = 0 . \quad (5.3.16)$$

Derivando-se a função  $E$  em relação à  $G$ , obtém-se:

$$\frac{\partial E(G)}{\partial G} = \sum_{i=1}^{n_c} z_i \left[ \frac{(1 - k_i)}{1 + G(k_i - 1)} \right]^2 . \quad (5.3.17)$$

Constata-se que a derivada acima é sempre positiva, garantindo-se desta forma a convergência de uma solução numérica da Equação 5.3.16 pelo método de Newton-Raphson (Cunha, 1993).

Ao se utilizar a Equação 5.3.16 deve considerar-se a Equação Restritiva 5.3.8, pois a solução que satisfaz a Equação 5.3.15 não necessariamente satisfaz a Equação 5.3.8.

O método de substituição sucessiva utilizado na implementação do cálculo *Flash* foi elaborado com base no procedimento descrito por Nghiem (1983) e também adotado por Branco (1991). Constitui-se das seguintes etapas:

1- Dados de entrada : pressão ( $P$ ), temperatura ( $T$ ), composição molar global da mistura ( $z_i$ ), temperatura crítica ( $T_c$ ) e pressão crítica ( $P_c$ ) dos componentes, fatores acênicos dos componentes ( $\omega_i$ ) e um valor inicial estimado para fração molar da fase gasosa ( $G$ ).

2- É feita uma estimativa inicial das constantes de equilíbrio dos componentes através da relação de Wilson (Edmister, 1984):

$$k_i = \frac{P_{ci}}{P} \exp \left[ 5,3727 \left( 1 + \omega_i \right) \left( 1 - \frac{T_{ci}}{T} \right) \right]. \quad (5.3.18)$$

3- Cálculo dos valores iniciais das frações molares dos componentes ( $x_i$  e  $y_i$ ) pelas Equações 5.3.14 e 5.3.13, utilizando-se os valores de  $k_i$  obtidos na etapa anterior.

4- Cálculo das fugacidades de cada componente nas fases líquida e gasosa através da Equação de Estado de Peng & Robinson.

5- Cálculo das constantes de equilíbrio dos componentes através da Equação 3.2.10 a partir dos valores recém calculados de fugacidades e frações molares dos componentes:

$$k_i = \frac{f_{i,\rho}}{f_{i,g}} \frac{y_i}{x_i} . \quad (3.2.10)$$

6- Com os valores de  $k_i$  obtidos na etapa 5, realizar o cálculo da função  $E(G)$  e de sua derivada  $E'(G)$  através das Equações 5.3.16 e 5.3.17. Determinar um novo valor para  $G$  usando uma iteração de Newton-Raphson:

$$G^{n+1} = G^n - \frac{E(G)}{E'(G)} . \quad (5.3.19)$$

Quando  $G^{n+1} > 1$ , adota-se  $G^{n+1} = \frac{G^n + 1}{2}$ ; se  $G^{n+1} < 0$ , adota-se  $G^{n+1} = \frac{G^n}{2}$ .

7- Repete-se o cálculo das frações molares dos componentes  $(x_i^{n+1}, y_i^{n+1})$  utilizando-se as Equações 5.3.14 e 5.3.13 com os valores de  $k_i$  obtidos na etapa 5 e com o valor de  $G$  obtido na etapa anterior.

8- Novamente através da Equação de Estado de Peng & Robinson, calcular as fugacidades de cada componente nas fases líquido e gás, utilizando as frações molares resultantes do procedimento da etapa 7.

9- Realizar as seguintes verificações de convergência (a tolerância utilizada é  $10^{-5}$ ):

9.1-  $E(G) <$  tolerância

$$9.2- \left| 1 - \sum_{i=1}^{n_c} x_i \right| < \text{tolerância}$$

$$9.3- \left| 1 - \sum_{i=1}^{n_c} y_i \right| < \text{tolerância}$$

$$9.4- \left[ \sum_{i=1}^{n_c} (f_{i,o} - f_{i,g})^2 \right]^{0,5} < \text{tolerância}$$

$$9.5- \frac{f_{i,o}}{f_{i,g}} = cte, \text{ para } i = 1, 2, \dots, n_c \quad (\text{para uma única fase o valor da constante pode ser diferente da unidade}).$$

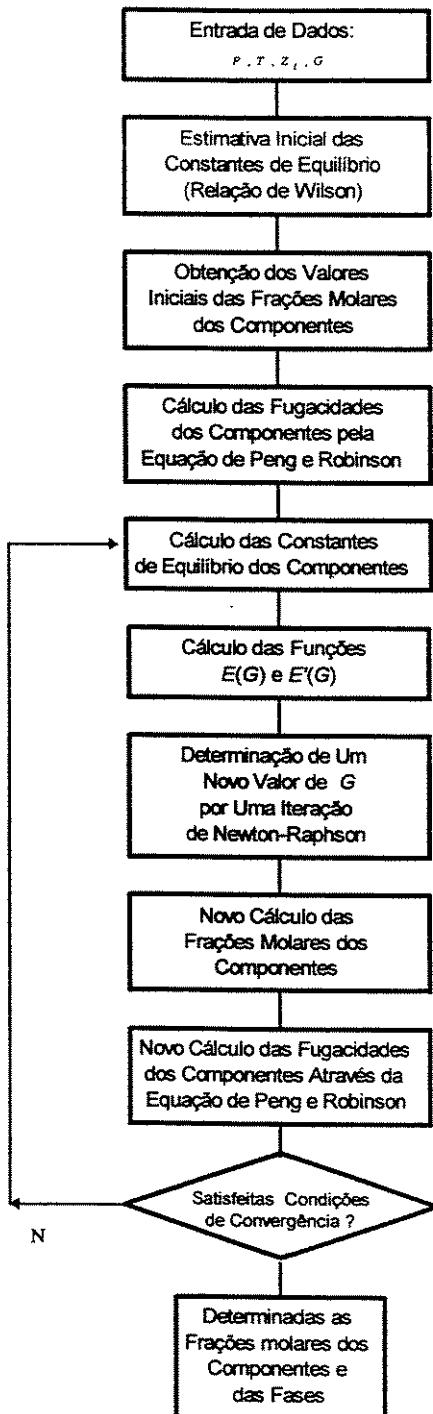


Figura 5.3: Fluxograma do algoritmo para o cálculo *Flash*, onde  $i = 1, 2, \dots, n_c$

Satisfitas as condições do item 9, teremos obtido as frações molares dos componentes  $(x_i^{n+1}, y_i^{n+1})$  e as frações molares das fases líquido e gás  $(1 - G^{n+1}, G^{n+1})$ . Caso não se obtenha convergência, retornar à etapa 5 e repetir o processo. A Figura 5.3 apresenta o fluxograma do algoritmo para o cálculo *Flash*.

O procedimento descrito gera uma raiz de  $E(G)$  para um sistema de duas fases. Para um sistema de uma fase, a razão das fugacidades dos componentes  $\frac{f_{i,s}}{f_{i,u}}$  converge para um valor constante que pode ser diferente da unidade. Desta forma pode-se também determinar pelo método acima a região de fase única sem a necessidade de se obter a pressão de saturação.

#### 5.4 Cálculo da Pressão de Bolha e de Orvalho

Pode-se definir a pressão de bolha de um líquido como aquela na qual a primeira bolha de gás é liberada do líquido, mantendo-se o mesmo valor para a fração molar da fase líquida ( $L=1$ ). A composição da fase líquida será dada pelas frações molares globais dos  $n_c$  componentes ( $x_i = z_i$ ). Como incógnitas haverá as frações molares dos  $n_c$  componentes na fase gasosa ( $y_i$ ) e a pressão de bolha ( $P_b$ ).

A pressão de orvalho do gás é aquela na qual a primeira gota de líquido se forma, mantendo-se inalterada a fração molar da fase gasosa ( $G=1$ ). A composição da fase gasosa será dada pelas frações molares globais dos componentes ( $y_i=z_i$ ). As incógnitas neste caso serão as frações molares dos componentes na fase líquida ( $x_i$ ) e a pressão de orvalho ( $P_d$ ).

A determinação da pressão de saturação (pressão de bolha ou de orvalho) se faz no equilíbrio entre as fases líquido e gás. O problema pode ser representado matematicamente pelo sistema:

$$\begin{cases} f_{i,o} = f_{i,g} & i = 1, \dots, n_c \\ \sum_{i=1}^{n_c} x_i = 1 \text{ ou } \sum_{i=1}^{n_c} y_i = 1 \end{cases} \quad (5.4.1)$$

A solução do sistema acima complica-se pelo fato das equações de fugacidade do sistema acima serem não lineares. Normalmente são utilizados dois métodos iterativos de solução, um por substituição sucessiva e outro que segue o procedimento de Newton-Raphson.

O método de substituição sucessiva é de simples implementação e não necessita de uma boa estimativa inicial dos valores das incógnitas, mas perde em velocidade de convergência.

O método de Newton-Raphson apresenta rápida convergência mas requer uma boa estimativa inicial da solução. Quando a pressão de saturação do fluido está próxima da pressão crítica, não há convergência por este método ou obtém-se uma solução trivial para o sistema, ou seja :  $x_i = y_i$ .

A aplicação irrestrita do método da substituição sucessiva, o torna mais adequado para implementação neste trabalho. O procedimento elaborado por Gomes (1990) em seu modelo composicional utiliza como estimativa inicial os próprios valores de pressão e composições calculados para uma célula em um determinado *timestep*. Tal procedimento, ilustrado na Figura 5.4, foi implementado neste trabalho pela sua simplicidade e eficácia, e consiste das seguintes etapas:

- 1- Dados de entrada : valores de pressão ( $P^n$ ), fração molar das fases líquida e gasosa ( $L^n, G^n$ ) e frações molares dos componentes nas fases líquida e gasosa ( $x_i^n, y_i^n$ ) calculados para a célula.
- 2- Determinação da pressão para a iteração seguinte:

$$P^{n+1} = \alpha P^n \quad (5.4.2)$$

onde,

$$\alpha = \frac{1}{L} , \text{ para } L > 0,5 ; \quad (5.4.3)$$

$$\alpha = \frac{1}{G} , \text{ para } G > 0,5 ; \quad (5.4.4)$$

se  $\alpha \geq 1,1$  adota-se  $\alpha = 1,1$ .

3- Cálculo *Flash* na pressão  $P^{n+1}$  considerando as composições  $x_i^n, y_i^n$ . Obtém-se novos valores de frações molares das fases líquida e gasosa ( $L^{n+1}, G^{n+1}$ ) e novas composições das fases  $(x_i^{n+1}, y_i^{n+1})$ .

4- Caso  $L^{n+1} \geq 1,01$  ou  $G^{n+1} \geq 1,0$ , retorna-se ao ítem 3, fazendo-se:

$$P^{n+1} = 0,8 P^n + 0,2 P^{n+1} \quad (5.4.5)$$

5- Retorna-se ao ítem 2, atualizando-se a pressão e as composições:

$$P^n = P^{n+1} \quad (5.4.6)$$

$$x_i^n = x_i^{n+1} \quad (5.4.7)$$

$$y_i^n = y_i^{n+1} \quad (5.4.8)$$

6- O processo é repetido até que seja atendida **uma** das seguintes condições :

a)  $P^{n+1} \leq 1,01 P^n$

b)  $0,99 \leq L^{n+1} \leq 1,01$

c)  $0,99 \leq G^{n+1} \leq 1,01$

7- Atendida uma das condições acima, podemos definir as pressões de bolha e de orvalho e respectivas composições do fluido:

para  $L^{n+1} > 0,5$ :

$$P_b = P^{n+1} \quad (5.4.9)$$

$$x_{b_i} = x_i^{n+1} = z_i \quad (5.4.10)$$

$$y_{b_i} = y_i^{n+1} \quad (5.4.11)$$

para  $G^{n+1} > 0,5$ :

$$P_d = P^{n+1} \quad (5.4.12)$$

$$x_{d_i} = x_i^{n+1} \quad (5.4.13)$$

$$y_{d_i} = y_i^{n+1} = z_i \quad (5.4.14)$$

## 5.5 Cálculo da Densidade e Peso Específico das Fases

Partindo-se da equação de estado  $P v = z R T$ , pode-se explicitar a densidade molar das fases:

$$\rho = \frac{1}{v} = \frac{P}{z R T} \quad (5.5.1)$$

Uma vez determinados os fatores de compressibilidade para as fases líquido e gás através da Equação de Estado de Peng & Robinson, facilmente se obtém as densidades molares de cada fase. Conhecidos os pesos moleculares e frações molares de cada componente, os pesos específicos são calculados por:

$$\gamma_o = \rho_o M_o g \quad , \text{ onde } M_o = \sum_{i=1}^{n_c} x_i M_i \quad ; \quad (5.5.2)$$

$$\gamma_g = \rho_g M_g g \quad , \text{ onde } M_g = \sum_{i=1}^{n_c} y_i M_i \quad . \quad (5.5.3)$$

Sabe-se que o valor da densidade da fase líquida calculada pelas equações de estado cúbicas apresenta um certo desvio em relação ao valor real. Jhavery et. al. (1984) acrescentaram um parâmetro na equação de Peng & Robinson de modo a corrigir o volume específico molar obtido da equação de estado. Tal correção é de fácil implementação, no entanto, é função de constantes específicas para cada componente, cuja determinação por vezes depende de dados de laboratório. Há ainda a correlação de Alani-Kennedy (1960), desenvolvida para o cálculo do peso específico da fase líquida a partir da equação de estado de Van der Waals (Edmister, 1984).

Dadas as dificuldades para obtenção do parâmetro de correção de Jhavery e incerteza da obtenção de melhores resultados ao utilizar-se a correlação de Alani-Kennedy, optou-se por calcular as densidades de ambas as fases com a equação de Peng & Robinson.

## 5.6 Cálculo da Viscosidade das Fases

Dentre os métodos mais difundidos para cálculo de viscosidade, optou-se neste trabalho pela correlação de Lohrenz (1964), aplicável a ambas as fases. A escolha se deve a simplicidade do método e a sua aplicação na maioria das abordagens compostionais da literatura. Foi cogitada a utilização da correlação de Lee-Gonzalez (1966) para cálculo da viscosidade do gás, porém Branco (1991), ao utilizar os dois métodos, concluiu que os resultados obtidos por ambas as correlações foram semelhantes. Como a correlação de Lee-Gonzalez é aplicável somente aos gases, decidiu-se pela de Lohrenz.

Na concepção original do método havia procedimentos diferentes para determinação da viscosidade de gás e de líquido, o que Lohrenz atribuiu à má qualidade dos dados de densidade da fase gasosa na época disponíveis. A densidade do gás aqui utilizada é obtida pela Equação de Estado de Peng e Robinson, o que nos permite a utilização de um mesmo procedimento para o cálculo da viscosidade de ambas as fases, à exemplo dos trabalhos de Coats (1980), Nghiem (1981) e Branco (1991).

O método considera a viscosidade como função da pressão, temperatura e composição das fases. O procedimento consta das seguintes etapas:

1- Cálculo da viscosidade dos componentes puros à baixa pressão ( $\mu_i^*$ ) e na temperatura do reservatório:

$$\mu_i^* \xi_i = 34,0 \cdot 10^{-5} T_{r_i}^{0,94} , \text{ para } T_{r_i} \leq 1,5 ; \quad (5.6.1)$$

$$\mu_i^* \xi_i = 17,78 \cdot 10^{-5} (4,58 T_{r_i} - 1,67)^{\frac{5}{8}} , \text{ para } T_{r_i} > 1,5 ; \quad (5.6.2)$$

onde a temperatura reduzida do componente  $i$  e o parâmetro  $\xi_i$ , são dados por:

$$T_{r_i} = \frac{T}{T_{c_i}} , \quad (5.6.3)$$

$$\xi_i = \frac{T_{c_i}^{\frac{1}{6}}}{M_i^{\frac{1}{2}} P_{c_i}^{\frac{2}{3}}} , \quad (5.6.4)$$

para valores de temperatura absoluta em graus Kelvin e pressão absoluta em atmosfera.

2- Cálculo da viscosidade da fase à baixa pressão ( $\mu_p^*$ ) e na temperatura do reservatório:

$$\mu_p^* = \frac{\sum_{i=1}^{n_c} (y_i \mu_i^* \sqrt{M_i})}{\sum_{i=1}^{n_c} (y_i \sqrt{M_i})} , \quad (5.6.5)$$

onde  $y_i$  são as frações molares de cada componente na fase.

3- Cálculo da densidade molar da fase ( $\rho$  [ $\text{lb mol}/\text{pe}^3$ ]) pela Equação de Estado de Peng e Robinson.

4- Cálculo da densidade reduzida da fase:

$$\rho_r = \frac{\rho}{\rho'_c} = \rho v'_c , \quad (5.6.6)$$

onde  $\rho'_c$  é a densidade pseudocrítica e  $v'_c$  é dado por:

$$v'_c = \sum_{i=1}^{n_c} y_i v_{c_i} , \quad (5.6.7)$$

sendo  $v_{c_i}$  [ $\text{pe}^3/\text{lb mol}$ ] o volume crítico do componente  $i$ .

3- Cálculo da viscosidade da fase na pressão e temperatura desejadas:

$$\mu_p[\text{cp}] = \mu_p^* + \frac{(0,1023 + 0,023364 \rho_r + 0,058533 \rho_r^2 - 0,040758 \rho_r^3 + 0,0093324 \rho_r^4)^4 - 0,0001}{\xi} , \quad (5.6.8)$$

onde,

$$\xi = \frac{\left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i T_{c_i} \right)^{\frac{1}{6}}}{\left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i M_i \right)^{\frac{1}{2}} \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i P_{c_i} \right)^{\frac{2}{3}}} . \quad (5.6.9)$$

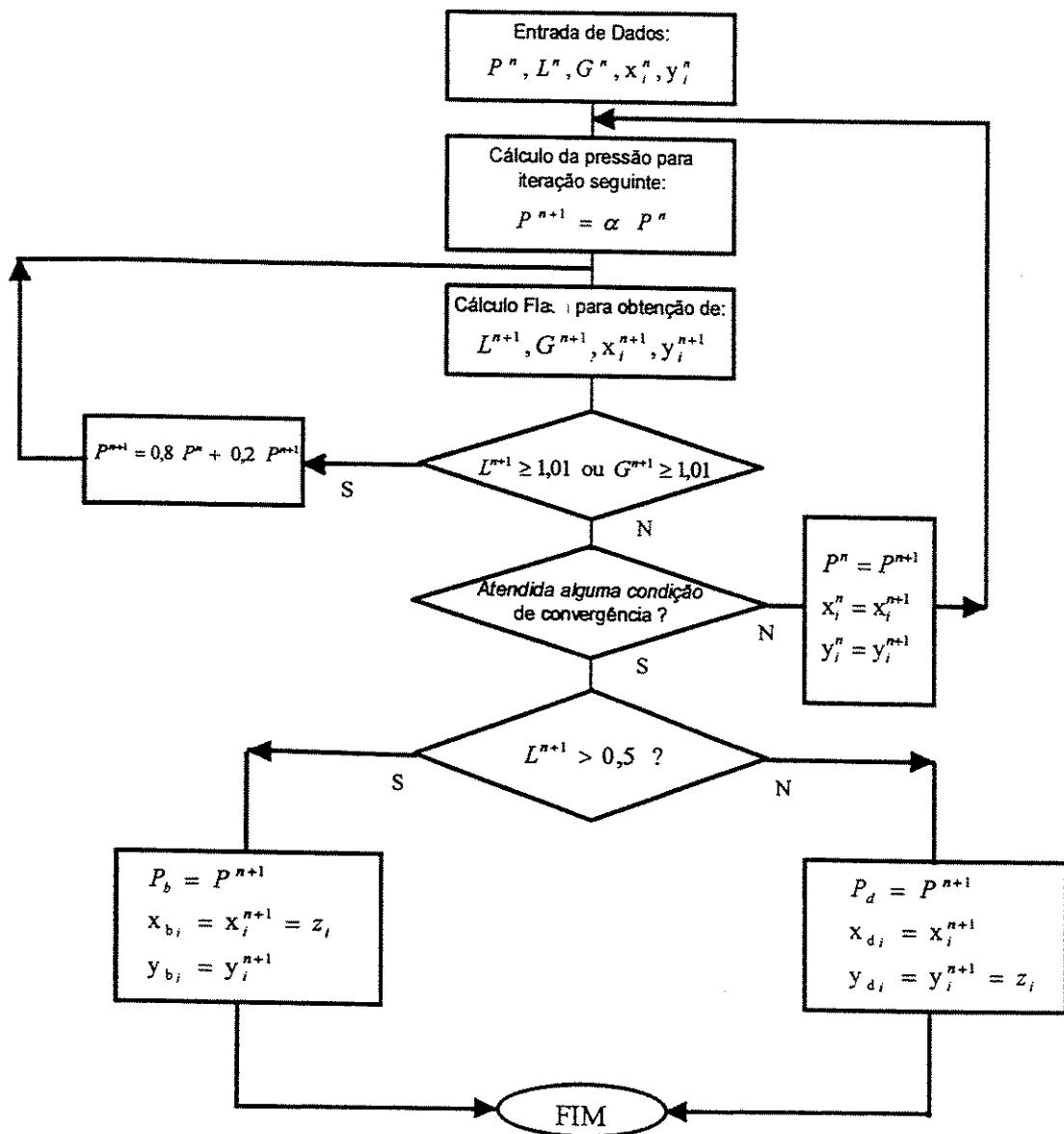


Figura 5.4: Fluxograma para cálculo da pressão de saturação (Gomes, 1990).

## **Capítulo 6**

### **O Modelo Computacional**

Na implementação do programa computacional foi utilizada a linguagem FORTRAN 77. As etapas descritas a seguir seguem a seqüência lógica adotada:

1- Dados de entrada: comprimento do reservatório, seção transversal ao fluxo, permeabilidade absoluta, porosidade, número de blocos, profundidade do topo e inclinação do reservatório, número de componentes e suas propriedades, saturação de gás, pressão estática e fração molar global de cada componente em cada bloco nas condições iniciais, temperatura do reservatório, pressão e temperatura de separação, vazão volumétrica de injeção em condições de superfície, frações molares globais de cada componente no fluido injetado, condição de contorno no poço produtor (vazão constante ou pressão de fluxo constante), curvas de permeabilidade relativa gás-óleo e pressão capilar, *timestep* inicial, tempo de simulação e freqüência de impressão dos resultados.

2- Com a pressão, temperatura e composição é realizado um cálculo *Flash* em cada bloco, obtendo-se as frações molares e as fugacidades de cada componente em ambas as fases, as densidades, pesos específicos e frações molares das fases.

3- Cálculo das viscosidades das fases.

4- Cálculo da pressão de saturação.

5- Cálculo da tensão interfacial e correção da pressão capilar pela relação entre as tensões interfaciais calculada e inicial.

6- Cálculo das derivadas da densidade molar, peso específico e viscosidade das fases em relação às variáveis primárias do sistema.

7- Cálculo das derivadas das fugacidades dos componentes em relação às variáveis primárias.

8- Cálculo das derivadas da pressão capilar (função da tensão interfacial) em relação às variáveis primárias.

9- Determinação das transmissibilidades das fases e suas derivadas em relação às variáveis do sistema.

Os passos 2 à 9 são repetidos para cada bloco antes de se prosseguir ao item 10.

10- Com a composição do fluido injetado obtém-se, através de um cálculo *Flash*, suas propriedades em condição de superfície ( $\rho_{os}$ ,  $\rho_{gs}$ ,  $G_s$  e  $L_s$ ) com as quais, uma vez fixada a vazão de injeção na superfície, determina-se a vazão molar total injetada. A vazão molar injetada do componente, obtida pelo produto da vazão molar total injetada e a fração molar global do componente, irá constituir o termo fonte da equação de fluxo para o primeiro bloco, no qual o poço injetor está completado.

11- Cálculo das derivadas das equações de fluxo e de equilíbrio termodinâmico no bloco 1 em relação às variáveis primárias nos blocos 1 e 2. Os resultados são endereçados às submatrizes que irão compor respectivamente as diagonais principal e superior da matriz Jacobiana.

12- Cálculo dos componentes do vetor resíduo relativos ao primeiro bloco.

13- Obtenção das frações molares globais dos componentes no poço produtor, calculadas em função da saturação, densidades molares, viscosidades das fases e frações molares dos componentes no último bloco, onde está completado o poço produtor.

- 14- Cálculo do índice de produtividade.
- 15- A determinação do termo fonte da equação de fluxo para o último bloco e das vazões na superfície dependerá da condição de contorno estabelecida para o poço produtor:
  - a) pressão de fluxo constante : determinação das vazões volumétricas de óleo e gás em condições de reservatório e obtenção, através de um cálculo *Flash*, das propriedades das fases em condições de superfície, com as quais se determinará a vazão molar total de produção e as vazões volumétricas em condições de superfície.
  - b) vazão na superfície constante : utilizando-se a composição no poço obtida no *timestep* anterior, realiza-se um cálculo *Flash* às condições de superfície, obtendo-se as densidades e frações molares das fases para cálculo da vazão molar total de produção e seqüencialmente a obtenção das vazões volumétricas de óleo e gás no reservatório e da pressão de fluxo.
- 16- Cálculo das derivadas das equações de fluxo e equilíbrio termodinâmico no último bloco em relação às variáveis primárias no último e penúltimo blocos. Os resultados são endereçados às submatrizes que irão compor respectivamente as diagonais principal e inferior da matriz Jacobiana.
- 17- Determinação dos componentes do vetor resíduo relativos ao último bloco.
- 18- Cálculo das derivadas das equações de fluxo e equilíbrio termodinâmico em cada bloco  $i$  em relação às variáveis primárias nos blocos  $i$ ,  $i+1$  e  $i-1$ . Os resultados são endereçados às submatrizes que irão compor respectivamente as diagonais principal, superior e inferior da matriz Jacobiana.
- 19- Obtenção dos componentes do vetor resíduo relativos aos blocos intermediários.
- 20- Construção da matriz Jacobiana com as saídas obtidas nos itens 11,16 e 18.

21- Resolução do sistema de equações composto pela matriz Jacobiana e o vetor resíduo (termo independente), obtendo-se as correções das variáveis para cada bloco do reservatório, ou seja, o vetor solução  $(\Delta P, \Delta S_g, \Delta x_2, \Delta y_2, \dots, \Delta x_{n_e}, \Delta y_{n_e})_i$ .

22- Atualização das variáveis primárias nos diversos blocos com o vetor solução obtido.

23- Normalização do vetor solução de modo a quantificar percentualmente as variações nos valores das variáveis em relação aos seus valores na iteração em andamento.

24- Normalização do vetor resíduo pela vazão molar de produção na iteração em andamento.

25- Verificação da convergência pela comparação dos valores de cada componente dos vetores solução e resíduo normalizados com a tolerância estabelecida.

26- Não atingida a convergência, retorna-se ao item 2, após a atualização das variáveis nos diversos blocos.

27- Satisfeitas as condições de convergência e dispondo-se dos valores atualizados de pressão, saturação de gás e frações molares dos componentes nas fases, calculam-se os novos valores de densidade molar das fases nos diversos blocos (através da equação de estado) e atualizam-se as frações molares das fases ( $G$  e  $L$ ) em cada bloco, através das relações:

$$G = \frac{1}{1 + \frac{\rho_o}{\rho_g} \left( \frac{1}{S_g} - 1 \right)} \quad (6.1)$$

$$L + G = 1 \quad (5.3.7)$$

28- Determinação dos novos valores das frações molares globais de cada componente  $c$  em cada bloco  $i$  pela equação:

$$z_{c,i} = L_i \mathbf{x}_{c,i} + G_i \mathbf{y}_{c,i} . \quad (5.3.6)$$

29- Atualização da fração molar global de cada componente no poço, conforme descrito no item 13.

30- Atualização das vazões no reservatório e na superfície conforme descrito no item 15.

31- Obtenção das vazões molares por componente multiplicando-se a vazão molar de produção e a fração molar global de cada componente no poço.

32- Cálculo do número de moles de cada componente  $c$  existente em cada bloco  $i$  no timestep em andamento:

$$nm(c,i) = z(c,i) V_i \phi \left( \rho_g S_g + \rho_o S_o \right)_i . \quad (6.2)$$

33- Cálculo do número de moles produzidos e injetados durante o timestep utilizando-se das vazões molares de produção e injeção de cada componente. A diferença entre o número de moles produzidos e injetados deve ser igual a variação do número de moles no reservatório para cada componente, variação esta calculada com uso da Equação 6.2.

34- Cálculo do fator de recuperação molar de cada componente.

35- Atualização do valor do próximo *timestep*. O novo valor pode aumentar ou diminuir na proporção da razão entre os limites prefixados para variação das variáveis de controle e as variações observadas nos valores destas variáveis durante o *timestep* recém concluído. As variáveis consideradas no controle do tamanho do *timestep* foram :  $P, S_g, \mathbf{x}_c, \mathbf{y}_c, z_c$ :

$$ts^{n+1} = 0,8 r ts^n \quad (6.3)$$

$$\text{onde, } r = \min \left( \frac{\Delta P_{MAX}}{\Delta P_{iOBS}}, \frac{\Delta S_{g,MAX}}{\Delta S_{g,OBS}}, \frac{\Delta \mathbf{x}_{c,i,MAX}}{\Delta \mathbf{x}_{c,i,OBS}}, \frac{\Delta \mathbf{y}_{c,i,MAX}}{\Delta \mathbf{y}_{c,i,OBS}}, \frac{\Delta z_{c,i,MAX}}{\Delta z_{c,i,OBS}} \right) \quad (6.4)$$

para  $c = 1, \dots, n_c$ ;  $i = 1, \dots, n_b$ .

36- Controle de impressão dos resultados.

37- Na inicialização do novo *timestep* as variáveis de cada bloco assumirão os valores recém determinados no *timestep* anterior ou os valores iniciais no caso do primeiro *timestep*. Na primeira iteração do *timestep*  $n+1$  cada variável assumirá o mesmo valor da iteração final do *timestep*  $n$ .

38- Atualização do tempo decorrido de simulação, a qual pode ser encerrada ou prosseguir com o novo *timestep*, retornando-se ao item 2.

A Figura 6.1 apresenta um fluxograma simplificado das etapas descritas acima.

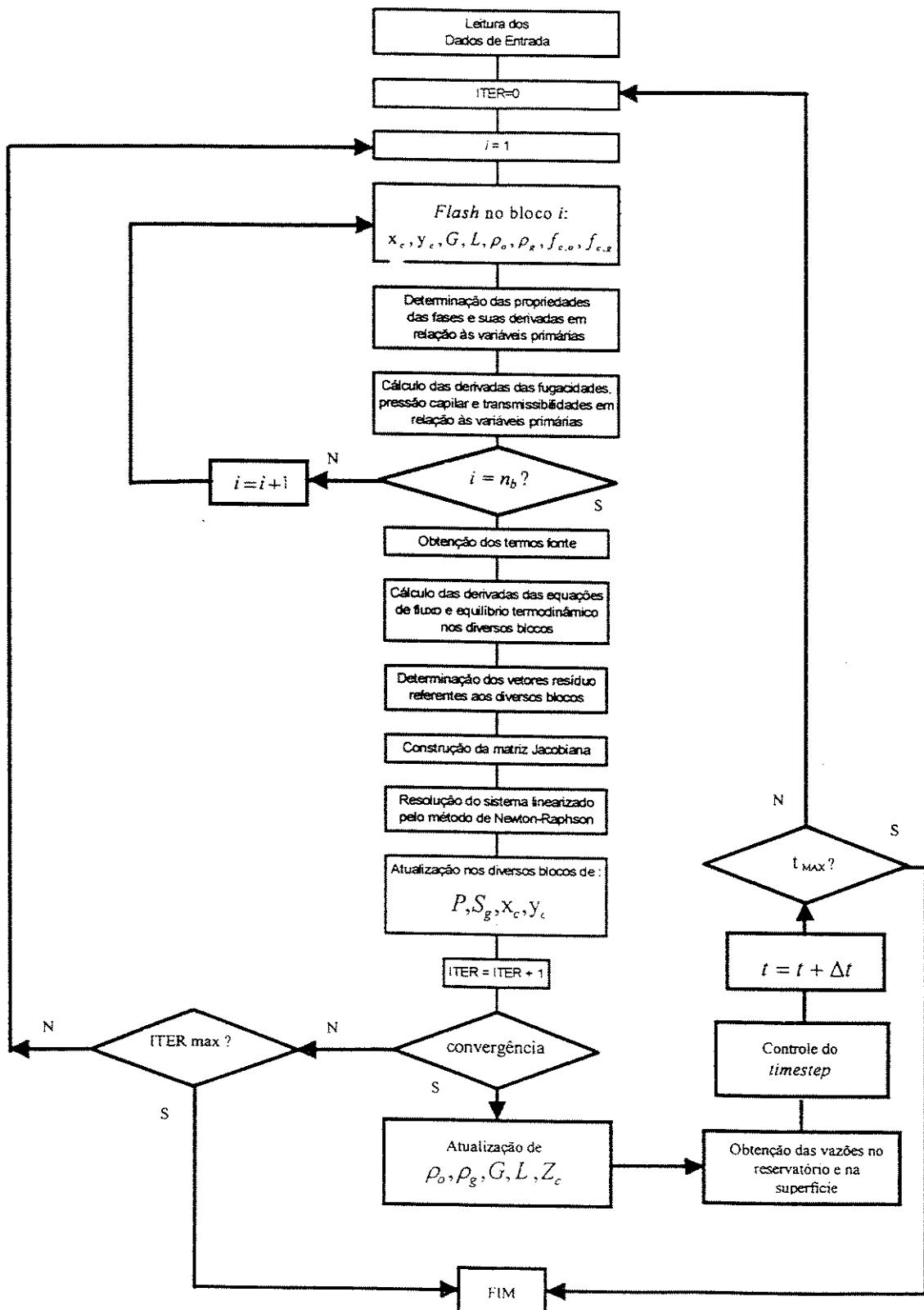


Figura 6.1: Fluxograma simplificado do algoritmo do modelo computacional.

## Capítulo 7

### Aplicação do Modelo e Resultados

Neste capítulo serão apresentadas aplicações simplificadas do modelo, compreendendo simulações da produção de um reservatório linear com ou sem ciclagem de gás. A composição dos fluidos é definida em termos das frações molares de três pseudo componentes.

Considera-se um espaçamento de 500 metros entre os poços injetor e produtor, os quais localizam-se respectivamente na primeira e última das vinte células em que é discretizado o reservatório. É suposto um modelo com uma inclinação de dez graus em relação a horizontal, o que resulta numa diferença de 87 metros entre as posições estruturais do topo e da base do reservatório. A Figura 7.1 ilustra o descrito acima.

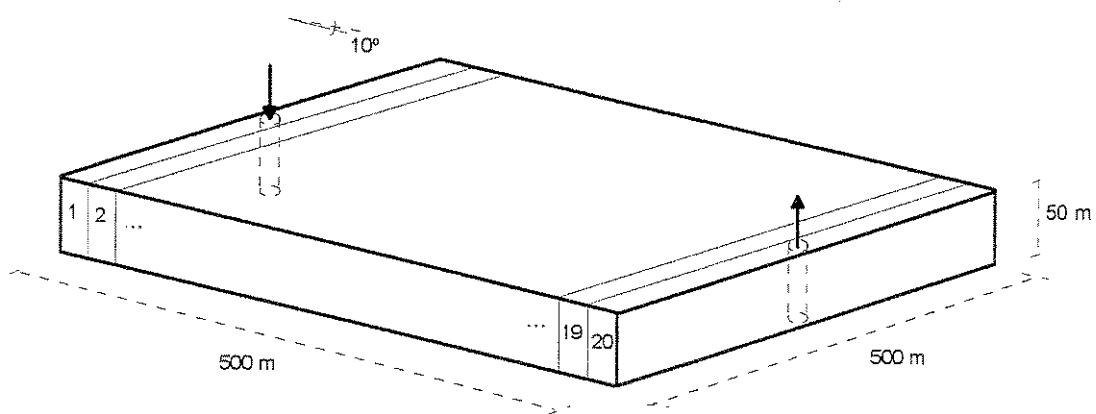


Figura 7.1: Representação esquemática do reservatório analisado.

Os dados petrofísicos e a temperatura, apresentados na Tabela 7.1, são constantes para todo o reservatório e ao longo de todo o período de simulação.

Tabela 7.1: Parâmetros do reservatório

PARÂMETRO	VALOR	UNIDADES
Comprimento	500	m
Espessura	50	m
Largura	500	m
Inclinação	10	graus
Permeabilidade	2,97 E-13	$m^2$
Porosidade	0,2	fração
Temperatura	344	$^{\circ}K$

Admitindo-se que os fluidos do reservatório tenham em suas composições hidrocarbonetos que variam do metano ao decano, estes serão aqui agrupados em três pseudo componentes, conforme a Tabela 7.2.

Tabela 7.2: Definição dos pseudo componentes

COMPONENTES	PSEUDO COMPONENTES
C1 N2	PC1
C2 C3 C4 C5	PC2
C6 C7 C8 C9 C10	PC3

Os valores iniciais de pressão, saturação de gás e frações molares dos componentes em cada um dos vinte blocos do reservatório foram obtidos seguindo-se as etapas:

- a) Foi estabelecida inicialmente uma mesma composição para todos os blocos. As frações molares globais de PC1, PC2 e PC3 foram estipuladas respectivamente em 0,5, 0,15 e 0,35.
- b) Para a composição fixada no item anterior, à temperatura do reservatório, foi calculada uma pressão de bolha de 15 MPa. Atribuindo-se a todos os blocos uma pressão de 6,9 MPa, garante-se a existência de duas fases. Dada a inclinação do reservatório, haverá segregação da fase gasosa no topo do reservatório após o equilíbrio.
- c) Com a composição e pressão estabelecidas nos itens a e b, realizou-se um cálculo *Flash*, à temperatura do reservatório, do qual obtiveram-se as densidades molares das fases e a fração molar da fase gasosa. Estes valores permitiram o cálculo, através da Equação 6.1, de uma saturação de gás de 0,64.
- d) Com os valores de pressão, saturação de gás e frações molares dos pseudo componentes, procedeu-se à rodada de equilíbrio, fechando-se os poços produtor e injetor.
- e) Devido à diferença de potencial entre os blocos, a princípio decorrente apenas da inclinação do reservatório, estabeleceram-se fluxos em sentidos contrários para a fase líquida, buscando ocupar preferencialmente a base do reservatório, e para a fase gasosa, migrando em direção ao topo. Considerou-se atingido o equilíbrio quando as variações de pressão, saturação e composição em cada célula tornaram-se insignificantes no período de um ano. No caso em análise, o tempo necessário para atingir-se o equilíbrio foi um pouco superior a 45 anos.
- f) As condições iniciais de pressão, saturação de gás e frações molares dos pseudo componentes em cada bloco correspondem aos valores obtidos pelo simulador ao final da rodada de equilíbrio. As condições iniciais calculadas para o primeiro e último blocos constam na Tabela 7.3. Em um bloco intermediário, o valor inicial calculado na rodada de equilíbrio para qualquer variável está sempre compreendido pelos valores calculados para esta variável no primeiro e no último bloco.

Tabela 7.3: Condições iniciais do reservatório nos blocos 1 e 20.

VARIÁVEL	BLOCO 1	BLOCO 20	UNIDADE
$P$	6,87	6,92	MPa
$S_g$	0,75	0,10	fração
$Z(1)$	0,59	0,28	fração
$Z(2)$	0,13	0,19	fração
$Z(3)$	0,28	0,53	fração

Alguns parâmetros de produção, os quais encontram-se resumidos na Tabela 7.4, serão mantidos constantes nos casos simulados, permitindo uma análise comparativa entre os resultados.

Tabela 7.4: Parâmetros de produção.

PARÂMETROS	VALORES	UNIDADES
Vazão Limite de Gás	80000	$\text{m}^3/\text{d}$
Pressão de Fluxo Mínima	1,01	MPa
Vazão Mínima Econômica de Gás	30000	$\text{m}^3/\text{d}$
Pressão de Separação	0,101	MPa
Temperatura de Separação	288,55	$^\circ\text{K}$

As aplicações que se seguem visam analisar comparativamente os resultados obtidos pelo simulador ao submeter-se o reservatório à produção por depleção natural e à produção assistida por injeção de gás pobre. A composição do gás injetado, apresentada na Tabela 7.5, foi estimada como a resultante de um processo hipotético de extração dos componentes mais pesados do gás produzido. A composição permanece constante por todo o período simulado.

Tabela 7.5: Composição do fluido injetado.

PSEUDO COMPONENTE	FRAÇÃO MOLAR
PC1	0,982
PC2	0,018
PC3	0,000

Foram simuladas três hipóteses de produção, que serão referenciadas ao longo do texto pelas designações A, B e C:

**Hipótese A:** O reservatório produz com a vazão limite de gás até que a pressão de fluxo atinja seu valor mínimo. Nesse momento, a condição de contorno no poço se altera e a produção decresce até que seja alcançada a vazão mínima econômica de gás. Não há injeção.

**Hipótese B:** Diferencia-se da hipótese A por considerar, desde o início da produção, uma injeção de gás de 15000 m<sup>3</sup>/d. A injeção prossegue até 1800 dias, quando a diferença entre as vazões de gás produzido e injetado atinge o valor limite econômico. A partir de então, segue-se conforme a hipótese A.

**Hipótese C:** Semelhante à hipótese B, porém com injeção ampliada para 30000 m<sup>3</sup>/d. A vazão disponível de gás atinge o valor limite econômico num tempo de produção de 2000 dias.

A Figura 7.2 mostra a vazão de gás na superfície e a pressão de fluxo no poço obtidas com a simulação das hipóteses A, B e C. Observa-se que nas hipóteses B e C seria possível manter-se uma vazão maior que 80000 m<sup>3</sup>/d durante os três primeiros anos, haja vista que, neste período, as pressões de fluxo permaneceram em níveis superiores aos da hipótese A. Tal opção permitiria uma antecipação de produção, caso houvesse aquiescência do mercado.

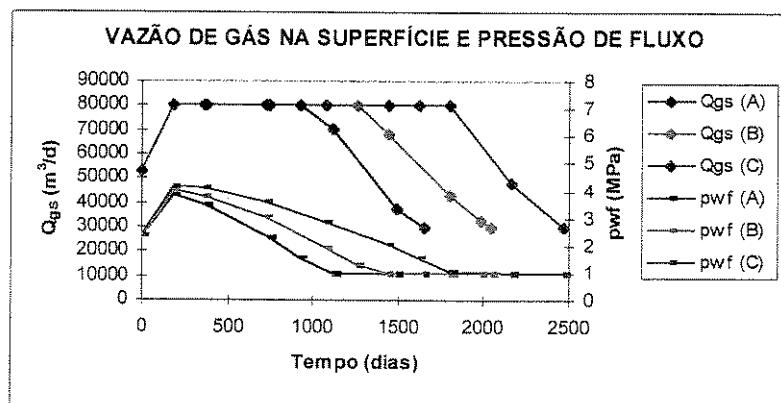


Figura 7.2: Vazão de gás na superfície e pressão de fluxo.

A Figura 7.3 apresenta o comportamento da vazão de líquido na superfície para a hipótese A, as hipóteses B e C apresentam o mesmo comportamento. Há um decréscimo exponencial na vazão em superfície, que assume valores muito pequenos para um tempo superior a 200 dias. Este comportamento pode ser explicado pelo acentuado crescimento inicial da saturação de gás na célula do poço produtor. As curvas de permeabilidade relativa mostram-se desfavoráveis ao fluxo de líquido mesmo a saturações de gás não tão elevadas.

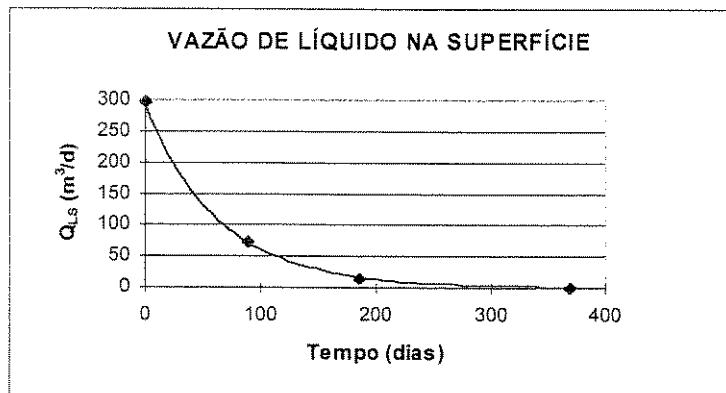


Figura 7.3: Vazão de líquido na superfície.

O critério utilizado para fechamento do poço injetor nas hipóteses B e C está ilustrado na Figura 7.4. Quando o volume de gás disponível para venda (produção menos injeção) torna-se inferior ao mínimo necessário à manutenção do processo (Vazão Mínima Econômica de Gás), a solução mais imediata é desviar-se o gás de injeção para atender a demanda do mercado.

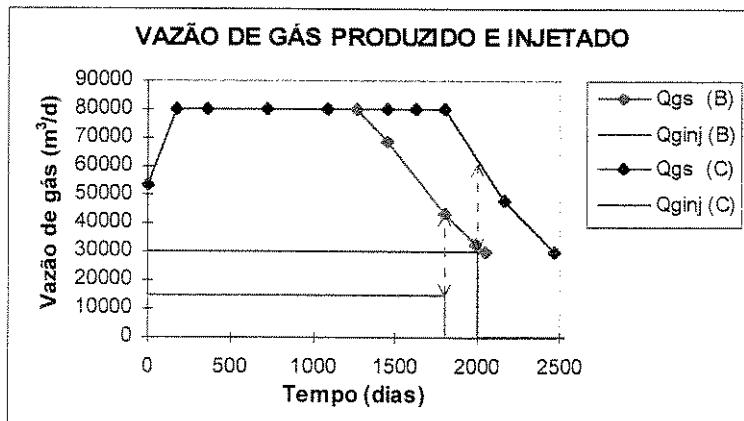


Figura 7.4: Fechamento do poço injetor nas hipóteses B e C.

Uma importante verificação a ser feita é o balanço do número de moles de cada componente no reservatório ao longo do período simulado. A diferença entre o número de moles produzidos e injetados de cada componente deve ser igual à variação do número de moles deste componente no reservatório, ambas as totalizações realizadas num mesmo intervalo de tempo.

O número de moles produzidos (ou injetados) de um componente é obtido pelo produto da vazão molar de produção (ou injeção) deste componente pelo intervalo de tempo considerado. Por outro lado, o número de moles de um componente no reservatório em um determinado instante é obtido a partir da Equação 6.2, onde  $nm(c,i)$  é o número de moles do componente  $c$  no bloco  $i$ :

$$nm(c,i) = z(c,i) V_i \phi (\rho_g S_g + \rho_o S_o)_i \quad (6.2)$$

As Figuras 7.5, 7.6 e 7.7 mostram uma perfeita correspondência entre o número de moles obtido a partir das vazões molares (curvas em vermelho) e a variação do número de moles no reservatório, obtida a partir da Equação 6.2 (curvas em azul):

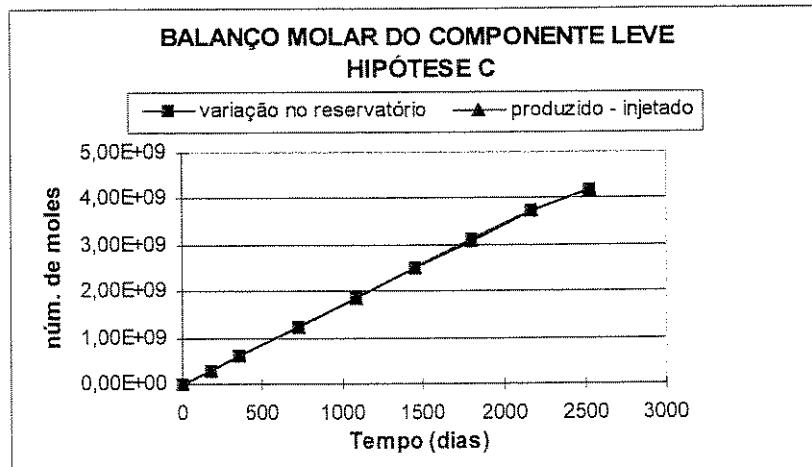


Figura 7.5: Balanço molar para o componente leve (PC1).

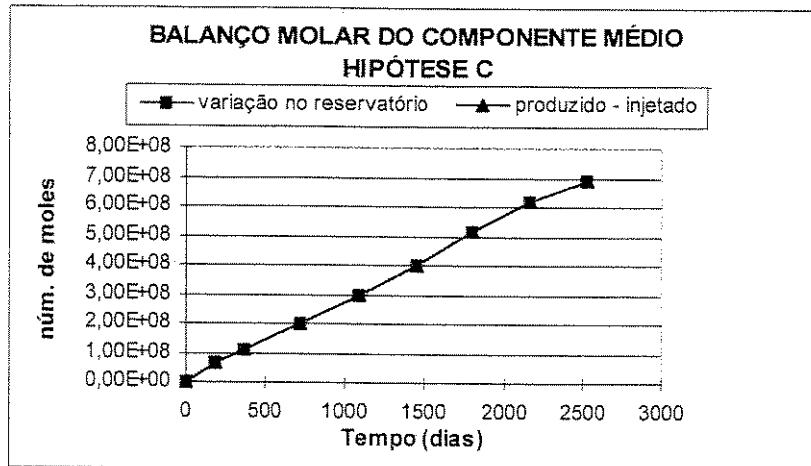


Figura 7.6: Balanço molar para o componente intermediário (PC2).

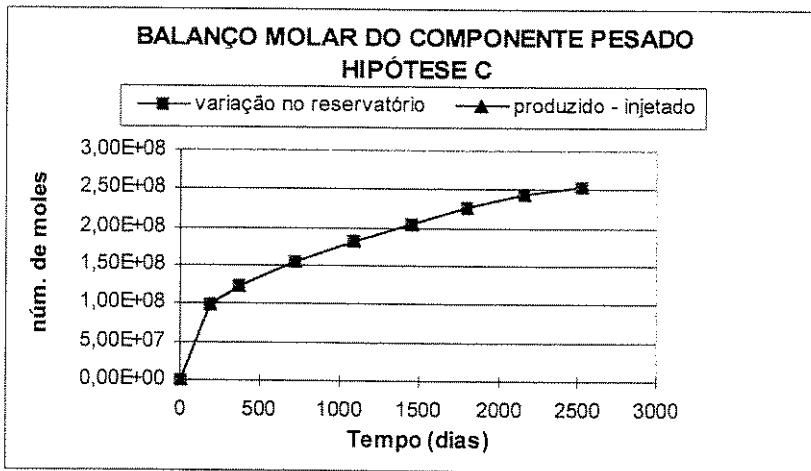


Figura 7.7: Balanço molar para o componente pesado (PC3).

A Figura 7.8 compara as hipóteses A e C quanto às variações na composição do fluido produzido ao longo do tempo. O primeiro aspecto importante a observar é o tempo de irrupção (*breakthrough*) do gás injetado no poço produtor. Para tempos inferiores à 350 dias a composição dos fluidos produzidos é rigorosamente a mesma em ambas as hipóteses. A partir de então, as curvas correspondentes à hipótese C mostram uma crescente “contaminação” do fluido do reservatório pela baixa qualidade do gás injetado, conforme se observa no comportamento das frações molares dos componentes no fluido produzido ( $Z_p$ ). Os resultados obtidos para a hipótese B apresentam-se qualitativamente semelhantes aos da hipótese C, com um pequeno retardo no tempo de irrupção do gás.

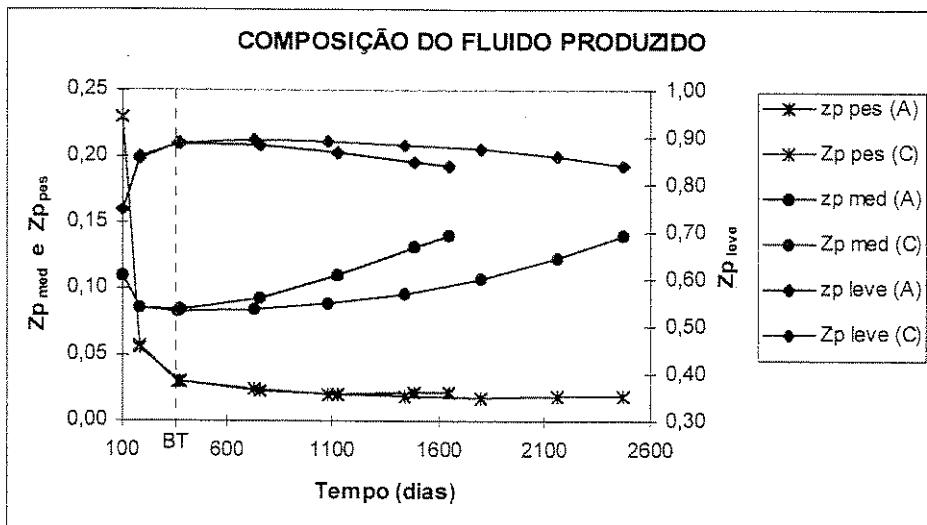


Figura 7.8: Composição do fluido produzido e tempo de irrigação do gás injetado (BT).

O principal objetivo de uma injeção é a substituição dos fluidos existentes no reservatório por fluidos de menor valor econômico, buscando-se a manutenção da energia do sistema ou atenuando-se sua diminuição.

Ao comparar as hipóteses A e C, a Figura 7.9 mostra os efeitos da injeção de gás na composição do fluido remanescente no reservatório. Constatata-se que a injeção de gás (hipótese C) é responsável pela redução das frações molares dos componentes pesados no fluido que permanece no reservatório.

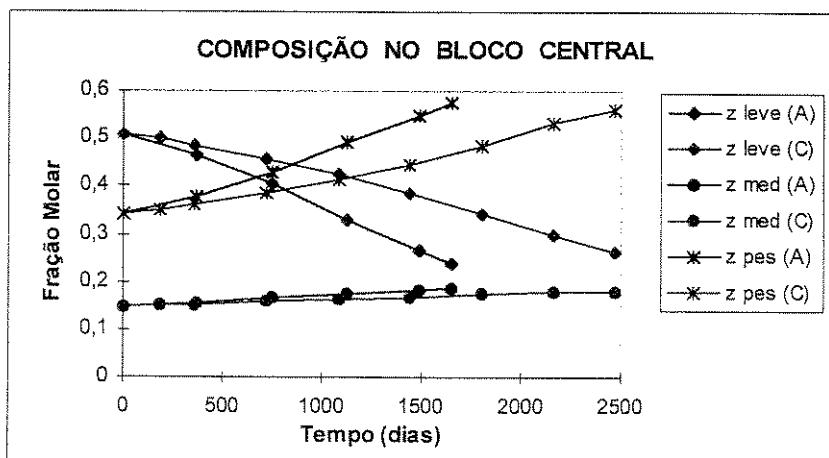


Figura 7.9: Alteração na composição do fluido remanescente no reservatório com a injeção.

Quanto à manutenção da energia do reservatório, o comportamento da pressão média (Figura 7.10) mostra o efeito da injeção, prorrogando o tempo de produção econômica do reservatório.

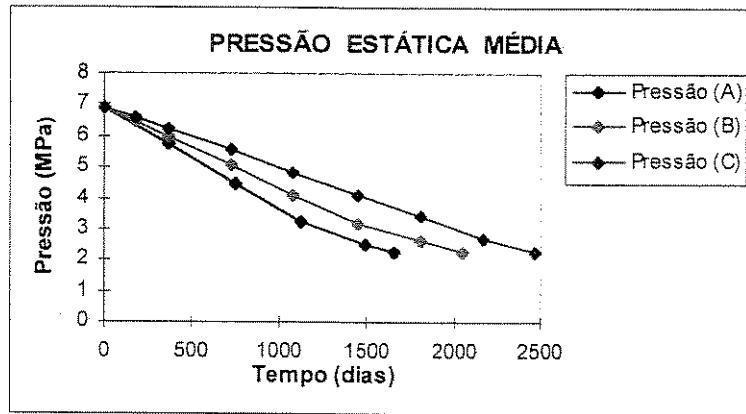


Figura 7.10: Comportamento da pressão estática média do reservatório.

O comportamento da saturação de gás no bloco inferior é ilustrado na Figura 7.11, na qual verifica-se o rápido crescimento inicial da saturação de gás, responsável pelo acentuado declínio na vazão de líquido. A Figura 7.12 apresenta o comportamento da fração molar da fase gasosa nos blocos superior e inferior.

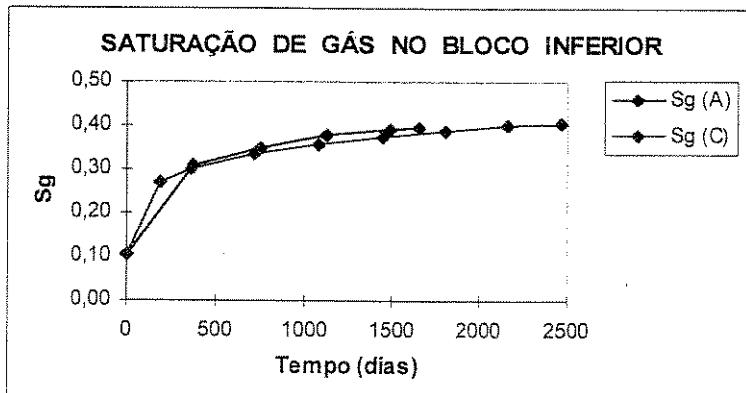


Figura 7.11: Comportamento da saturação de gás no bloco inferior.

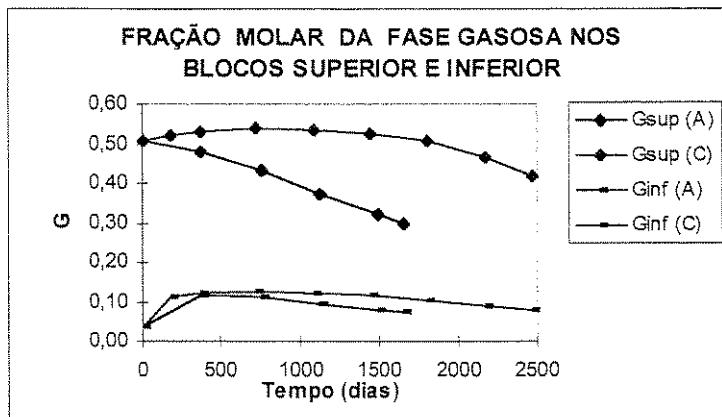


Figura 7.12: Comportamento da fração molar da fase gasosa.

As densidades molares das fases variam com a pressão e composição. As Figuras 7.13 e 7.14 mostram um decréscimo nos valores das densidades com a diminuição da pressão estática ao longo do tempo, sendo a densidade do gás mais sensível à esta redução.

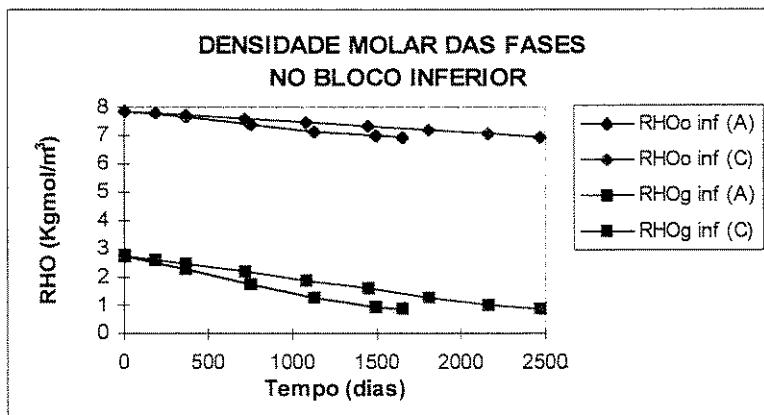


Figura 7.13: Densidade molar das fases no bloco inferior.

A baixa qualidade do gás injetado modifica a composição dos fluidos no reservatório, o que deveria resultar numa redução nas densidades das fases; entretanto, a injeção também é responsável pela manutenção da pressão em níveis superiores, o que implica em maiores valores de densidade. A resultante desses dois efeitos determina o comportamento das densidades das fases. No bloco inferior prevaleceu o efeito devido à pressão e as densidades do líquido e do gás mostraram-se ligeiramente maiores na hipótese C. Entretanto, no bloco superior houve uma ligeira preponderância do efeito devido ao aumento do percentual de

componentes leves com a injeção neste bloco, resultando em valores de densidade do líquido um pouco menores na hipótese C em relação à hipótese A, ao contrário do que ocorreu no bloco inferior.

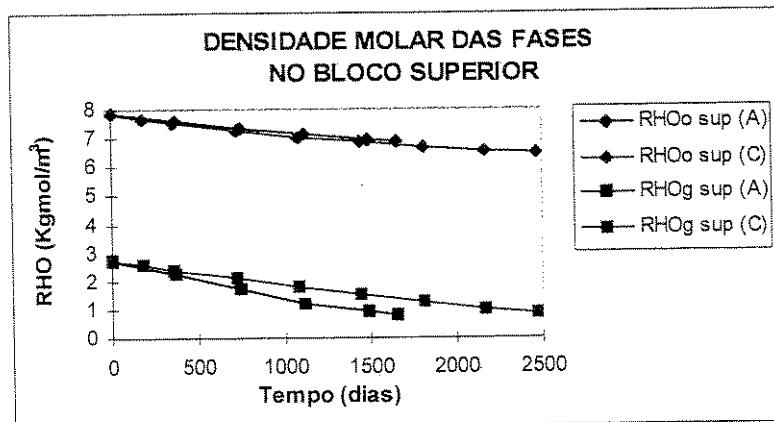


Figura 7.14: Densidade molar das fases no bloco superior.

A densidade do gás produzido na superfície nas hipótese B e C é mostrada na Figura 7.15. Observa-se que, a longo prazo, a densidade do gás produzido na hipótese C torna-se inferior à da hipótese B, uma decorrência dos maiores volumes injetados naquela hipótese. Inicialmente quase todo o gás produzido em superfície encontrava-se em solução no líquido em condições de reservatório, o que explica sua alta densidade nos primeiros dias de produção.

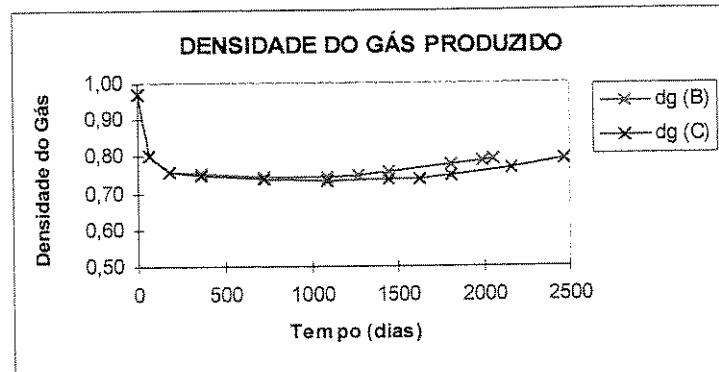


Figura 7.15: Densidade do gás produzido em superfície.

Normalmente se costuma definir o fator de recuperação de um reservatório pelo percentual dos volumes originais de óleo e gás produzido em condições de superfície. Para que se possa aferir a recuperação de cada componente, neste texto é definido o Fator de Recuperação Molar (FRm). Trata-se da razão entre o número de moles produzidos de um componente e seu número de moles inicialmente existentes no reservatório. Quando houver injeção, deverá ser descontado o número de moles injetados do componente. A Figura 7.16 apresenta os resultados obtidos nas hipóteses simuladas.

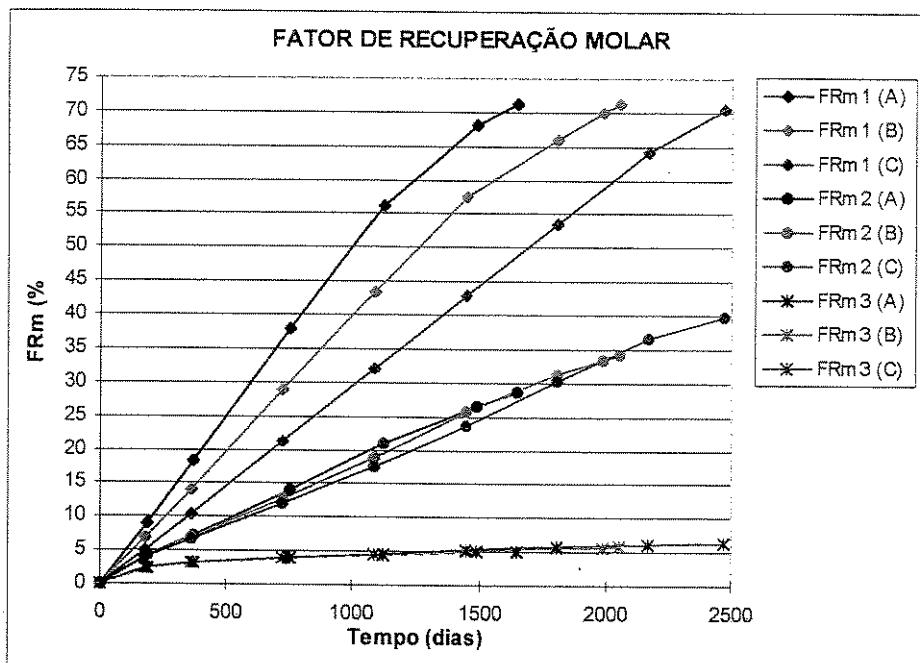


Figura 7.16: Fatores de Recuperação Molar de cada componente nas hipóteses A, B e C.

A recuperação molar final do componente leve praticamente não se alterou nas três hipóteses analisadas. Quanto à recuperação molar final dos componentes intermediários, houve um ganho de 5,5 % da hipótese B em relação à hipótese A e um ganho de 11,2 % da hipótese C em relação à hipótese A. Para os componentes pesados, o ganho na recuperação molar final foi de apenas 1,2 % quando comparadas as hipóteses C e A, mostrando que a injeção de gás obteve pouco resultado na recuperação destes componentes. Os componentes pesados encontram-se predominantemente na fase líquida, que praticamente não teve alterada sua condição de fluxo devido ao moderado nível de pressurização atingido com a injeção e à curva de permeabilidade desfavorável ao fluxo de óleo, mesmo a saturações de gás moderadas.

## **Capítulo 8**

### **Conclusões e Recomendações**

O modelo desenvolvido trata o fluxo e o equilíbrio termodinâmico das fases de forma composicional, numa abordagem totalmente implícita. O cálculo explícito da composição dos fluidos na superfície, quando a condição de contorno no poço é a vazão na superfície constante, não compromete a estabilidade da solução para as aplicações aqui testadas.

O cálculo do equilíbrio termodinâmico, elaborado com base no procedimento proposto por Nghiem (1983), utiliza a equação de estado de Peng & Robinson (1976). Sua concepção, no entanto, permite o uso de outras equações de estado.

A solução do sistema não linear gerado pelas equações de fluxo e equilíbrio termodinâmico é obtida com linearização pelo método de Newton-Raphson. Por tratar-se de um modelo unidimensional, a matriz Jacobiana resultante é tridiagonal em blocos. Na resolução do sistema é utilizado o método de eliminação de Gauss para matriz de banda. Uma condição para que um sistema tridiagonal tenha solução única é que ele seja diagonalmente dominante; neste caso o método de eliminação pode ser aplicado sem pivoteamento.

Neste modelo é considerada a correção dos dados de pressão capilar gás-óleo de acordo com as variações nas tensões interfaciais, resultantes das mudanças de composição das fases. No entanto, a correção das permeabilidades relativas pela variação da tensão interfacial não é aqui implementada, sendo recomendável em aplicações nas quais trabalhe-se próximo ao ponto crítico; nestes casos a correção implica em redução significativa na saturação residual de óleo.

Os efeitos capilares e gravitacionais são tratados na construção do simulador, porém foram desprezados os efeitos de dispersão. Outra simplificação importante é a do equilíbrio termodinâmico instantâneo. Desconsidera-se ainda a existência de água móvel no meio poroso, o que permite trabalhar com uma curva de permeabilidade relativa gás-óleo obtida diretamente do laboratório, sem as correções necessárias ao fluxo trifásico.

Nas aplicações apresentadas, são analisados os resultados obtidos pelo modelo ao submeter o reservatório à produção por depleção natural e à produção assistida por injeção de gás pobre. Verifica-se um significativo aumento na recuperação molar dos componentes intermediários devido à injeção de gás, acompanhado por um empobrecimento progressivo do fluido remanescente no reservatório. O incremento na recuperação só se concretiza à médio e longo prazo. A previsão da recuperação volumétrica de óleo e gás de um reservatório pode, algumas vezes, não permitir uma análise econômica precisa de um projeto. A determinação da recuperação molar dos componentes permite uma valoração dos fluidos produzidos e das reservas segundo a riqueza de seus componentes, o que se torna importante quando as composições dos fluidos produzidos e injetados são decisivas no cômputo das despesas e receitas de um projeto, como por exemplo uma injeção de gás ou um deslocamento miscível.

A utilização do modelo desenvolvido neste trabalho na obtenção de uma solução aproximada para o fluxo bidimensional, através da aplicação da teoria dos canais de fluxo, requer a representação da seção transversal ao fluxo de forma vetorial, permitindo sua variação ao longo do reservatório. Numa aplicação desta natureza, tem-se a solução numérica da equação de difusão-convecção substituída pela solução fornecida pelo simulador em cada canal, numa simulação em paralelo. O modelo assim obtido pode ser utilizado, em alguns casos, com certa vantagem em relação ao simulador composicional bidimensional.

## **Referências Bibliográficas**

- ALANI, G. H., KENNEDY, H. T. Volume of Liquid Hydrocarbons at High Temperatures and Pressures. *Trans., AIME*, n.219, p.288-292, 1960.
- AMIX, J. W., BASS, D. M., WHITING, R. L. *Petroleum Reservoir Engineering - Physical Properties*. New York, McGraw Hill Inc., 1960.
- ARPS, J. J. Analysis of Decline Curves. *Trans AIME*, v.160, p.228-47, 1945.
- AZIZ, K., SETTARI, A. *Petroleum Reservoir Simulation*. Applied Science Publishers Ltd., London, 1979.
- AZIZ, K. *Notes for Petroleum Reservoir Simulation*. Stanford University, Stanford, California, 1994.
- BRANCO, C. C. M. *Simulador Composicional de Reservatórios com Formulação Implícita em Pressão e Saturações e Semi Implícita em Composições*. Tese de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 1991.
- BURCIK, E. J. *Properties of Petroleum Reservoir Fluids*. International Human Resources Development Corporation, Boston, 1979.
- COATS, K. H. An Equation of State Compositional Model. *Society of Petroleum Engineers Journal*, p.363-376, outubro de 1980.

- COATS, K. H. Reservoir Simulation: State of the Art. *Society of Petroleum Engineers*, v.10020, 1982.
- COATS, K. H. Simulation: of Gas Condensate Reservoir Performance. *J. Petroleum Technology*, p.1870-1886, outubro de 1985.
- CUNHA, C. *Métodos Numéricos Para as Engenharias e Ciências Aplicadas*. Editora da Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 1993.
- DAM, J. V. Planning of Optimum Production From a Natural Gas Field. *Journal of The Institute of Petroleum*, v.54, n.531, p.55- 67, março de 1968.
- DAUBERT, T. E. *Chemical Engineering Thermodynamics*. McGraw-Hill Inc., 1985.
- EDMISTER, W. C. , LEE, B. I. *Applied Hydrocarbon Thermodynamics*. Segunda edição, Gulf Publishing Company , Houston, Texas, 1984.
- FANCHI, J. R. Calculations of Parachors for Compositional Simulation. *J. Petroleum Technology*, p.2049-2050, novembro de 1985.
- FUSSEL, L. T. & FUSSEL, D. D. An Iterative Technique for Compositional Reservoir Models. *Society of Petroleum Engineers Journal*, p.211-220, agosto de 1979.
- GOMES, H. P. *Modelo Composicional de Reservatórios com Formulação Totalmente Implícita*. Tese de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 1990.
- JHAVERI, B. S. , YOUNGREN, G. K. Three-Parameter Modification of the Peng-Robinson Equation of State to Improve Volumetric Predictions. *SPE Reservoir Engineering*, p.1033-1040, agosto de 1988.
- KONINKLIJKE, J. K. An Algorithm for Calculating Vapor-Liquid Equilibrium. *Society of Petroleum Engineers*, SPE 7605, outubro de 1978.

LEE, A. L. , GONZALEZ, M. H. The Viscosity of Natural Gases. *J. Petroleum Technology*, p.997-1000, agosto de 1966.

LEVERETT, M. C. Capillary Behaviour in Porous Solids. *Trans AIME*, p.142-152, 1941.

LOHRENZ, J. , BRAY, B. G. , CLARK, C. R. Calculating Viscosities of Reservoir Fluids From Their Compositions. *J. Petroleum Technology* , p.1171-1176, agosto de 1964.

MACLEOD, D. B. On a Relation Between Surface Tension and Density. *Trans Faraday Soc.*, v.19, p.38-42, 1923.

MANSOORI, J. Discussion of Compositional Modeling With an Equation of State. *Society of Petroleum Engineers Journal*, p.202-203, abril de 1982.

MCCAIN, W. D. JR. *The Properties of Petroleum Fluids*. Segunda Edição, PennWell Publishing Company, Tulsa, Oklahoma, 1990.

MUSKAT, M. The Production Histories of Oil Producing Gas-Drive Reservoirs. *Journal of Applied Physics*, p.16, 147, 1945.

NGHIEM, L. X. , AZIZ, K. , Li, Y. K. A Robust Iterative Method for Flash Calculations Using the Soave-Redlich-Kwong or the Peng-Robinson Equation of State. *Society of Petroleum Engineers Journal*, p.521-530, junho de 1983.

NGHIEM, L. X., FONG, D. K., AZIZ, K. Compositional Modeling With an Equation of State. *Society of Petroleum Engineers Journal*, p.687-698, dezembro de 1981.

NGHIEM, L. X. Author's Reply to Discussion of Compositional Modeling With an Equation of State. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 204, abril de 1982.

PEACEMAN, D. W. *Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*. Elsevier Scientific Publishing Co., New York, 1977.

- PEACEMAN, D. W. Interpretation of Well-Block Pressures in Numerical Reservoir Simulation With Nonsquare Grid Blocks and Anisotropic Permeability. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 531-43, *Trans. AIME*, 275, junho de 1983.
- PENG, D. Y. , ROBINSON, D. B. A New Two-Constant Equation of State. *Ind. Eng. Chemical Fundamentals*, v.15, n.1, p.59-64, 1976.
- QUANDALLE, P. & SAVARY, D. An Implicit in Pressure and Saturations Approach to Fully Compositional Simulation. *Society of Petroleum Engineers, SPE* 18423, 1989.
- REDLICH, O. & KWONG, J. N. S. On the Thermodinamics of Solutions V. an Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions. *Chemical Rev.*, v.233, p.44, 1949.
- REID, R. C., PRAUSNITZ, J.M., SHERWOOD, T.K. *The Properties of Gases and Liquids*. Terceira Edição, McGraw-Hill Inc., 1977.
- REYNOLDS, W. C. *Thermodynamics Properties in SI*. Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Stanford, California, 1979.
- SCHIOZER, D. J. *Estudo de um Modelo Composicional Para Simulação de Reservatórios*. Tese de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 1989.
- STONE, H. L. Estimation of Three-Phase Relative Permeability and Residual Oil Data. *J. Cdn. Pet. Tech.*, p.53-61, dezembro de 1953.
- SUGDEN, S. The Variation of Surface Tension With Temperature and some Related Functions. *J. Chem. Soc.*, v.125, p.32-41, 1924.
- WATTS, J. W. A Compositional Formulation of the Pressure and Saturation Equation. *Society of Petroleum Engineers, SPE* 12244, 1983.

## Apêndice A

### Derivadas das Equações de Fluxo

No capítulo 4 foram apresentadas as equações de fluxo na forma discretizada:

$$\begin{aligned} & \left( T_o x_c \right)_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{o,i+1} - \Phi_{o,i}) - \left( T_o x_c \right)_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{o,i} - \Phi_{o,i-1}) + \left( T_g y_c \right)_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{g,i+1} - \Phi_{g,i}) - \left( T_g y_c \right)_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{g,i} - \Phi_{g,i-1}) = \\ & V_i \phi \left[ \frac{\left( S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right)_{n+1} - \left( S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right)_n}{\Delta t} + \left( q_o x_c \rho_o \right)_i + \left( q_g y_c \rho_g \right)_i \right] . \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

Na construção da matriz jacobiana, será necessária a derivação da Equação 4.1.6 em relação às variáveis fundamentais  $(P, S_g, x_2, y_2, \dots, x_{n_c}, y_{n_c})$ . Haja vista a extensão das expressões a serem obtidas, torna-se recomendável desmembrar a Equação 4.1.6 e efetuar as derivações em parcelas. Rescrevendo a Equação 4.1.6 em função das variáveis auxiliares  $A, B, C, D, E, F$  e  $G$ :

$$A - B + C - D = E + F + G , \quad (A.1)$$

onde,

$$A = \left( T_o x_c \right)_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{o,i+1} - \Phi_{o,i}) , \quad (A.2)$$

$$B = \left( T_o \ x_c \right)_{i-\frac{1}{2}} \left( \Phi_{o,i} - \Phi_{o,i-1} \right) , \quad (\text{A.3})$$

$$C = \left( T_g \ y_c \right)_{i+\frac{1}{2}} \left( \Phi_{g,i+1} - \Phi_{g,i} \right) , \quad (\text{A.4})$$

$$D = \left( T_g \ y_c \right)_{i+\frac{1}{2}} \left( \Phi_{g,i} - \Phi_{g,i-1} \right) , \quad (\text{A.5})$$

$$E = \frac{V_i \phi \left[ \left( S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right)_{n+1} - \left( S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right)_n \right]_i}{\Delta t} , \quad (\text{A.6})$$

$$F = \left( q_o x_c \rho_o \right)_i , \quad (\text{A.7})$$

$$G = \left( q_g y_c \rho_g \right)_i . \quad (\text{A.8})$$

As composições dos fluidos e transmissibilidades ao óleo e ao gás nas fronteiras dos blocos são calculadas com as propriedades do bloco de maior potencial (*single-point upstream mobility*). Para o problema proposto, normalmente o bloco de maior potencial será o bloco à esquerda da fronteira, no entanto podem ocorrer situações em que ocasionalmente o sentido de fluxo se inverta para uma das fases ou mesmo para ambas em determinadas células. O modelo numérico precisa prever tais situações e para isto costuma-se implementar um artifício matemático bastante simples. Definindo-se uma propriedade genérica de fronteira por  $X$  e uma variável auxiliar  $W$ , tem-se:

$$X_{i+\frac{1}{2}} = W_i X_i + (1 - W_i) X_{i+1} , \quad (\text{A.9})$$

$$X_{i-\frac{1}{2}} = W_i X_{i-1} + (1 - W_i) X_i , \quad (\text{A.10})$$

satisfazendo às seguintes condições:

$$\Phi_i > \Phi_{i+1} \Rightarrow W = 1 , \quad (\text{A.11})$$

$$\Phi_i < \Phi_{i+1} \Rightarrow W = 0 , \quad (A.12)$$

sendo os potenciais avaliados em cada célula na iteração anterior.

Para cada termo da equação de fluxo (Equações A.2 a A.8) as propriedades que são avaliadas na fronteira devem ser escritas na forma da Equação A.9 ou da Equação A.10, antes de realizar-se a derivação.

Devido a grande extensão das expressões obtidas com o desenvolvimento das derivadas, serão apresentados apenas os resultados finais da derivação de cada termo da equação de fluxo em relação à cada uma das variáveis. Nas expressões obtidas neste apêndice aparecerão indicadas as derivadas das densidades molares, viscosidades, pesos específicos, frações molares, transmissibilidades, permeabilidades relativas e pressão capilar em relação às variáveis primárias do sistema. Estas derivadas serão determinadas nos apêndices seguintes.

### A.1 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Pressão no Bloco $i$ ( $P_i$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivações das equações de fluxo em relação à pressão no bloco  $i$ . Estas derivadas irão compor a primeira coluna de cada matriz constituinte da diagonal principal da matriz Jacobiana:

#### Termo $A$

$$A = \left( T_o \ x_c \right)_{i+\frac{1}{2}} \Phi_{o i+\frac{1}{2}} ,$$

$$\text{onde, } \Phi_{o i+\frac{1}{2}} = \Phi_{o i+1} - \Phi_{o i} ; \quad (A.1.1)$$

$$\frac{\partial A}{\partial P_i} = \Phi_{o,i+\frac{1}{2}} W X_c \frac{\partial T_{oi}}{\partial P_i} + \left[ (T_o X_c)_i W + (T_o X_c)_{i+1} (1-W) \right] \cdot \left[ -1 - W(D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{oi}}{\partial P_i} \right], \quad (\text{A.1.2})$$

onde,

$$\Phi_{o,i+\frac{1}{2}} = P_{i+1} - P_i - \gamma_{oi}(D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.1.3})$$


---

### Termo B

$$B = (T_o X_c)_{i-\frac{1}{2}} \Phi_{o,i-\frac{1}{2}},$$

$$\text{onde, } \Phi_{o,i-\frac{1}{2}} = \Phi_{oi} - \Phi_{o,i-1}; \quad (\text{A.1.4})$$

$$\frac{\partial B}{\partial P_i} = \Phi_{o,i-\frac{1}{2}} (1-W) \left( X_c \frac{\partial T_{oi}}{\partial P_i} \right) + \left[ (T_o X_c)_i (1-W) + (T_o X_c)_{i-1} W \right] \cdot \left[ 1 - (1-W)(D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{oi}}{\partial P_i} \right], \quad (\text{A.1.5})$$

onde,

$$\Phi_{o,i-\frac{1}{2}} = P_i - P_{i-1} - \gamma_{oi}(D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.1.6})$$


---

### Termo C

$$C = (T_g Y_c)_{i+\frac{1}{2}} \Phi_{g,i+\frac{1}{2}},$$

$$\text{onde, } \Phi_{g,i+\frac{1}{2}} = \Phi_{gi+1} - \Phi_{gi}; \quad (\text{A.1.7})$$

$$\frac{\partial C}{\partial P_i} = \Phi_{g,i+\frac{1}{2}} W \left( Y_c \frac{\partial T_{gi}}{\partial P_i} \right) + \left[ (T_g Y_c)_i W + (T_g Y_c)_{i+1} (1-W) \right] \cdot \left[ -1 - \frac{\partial P_{ci}}{\partial P_i} - W(D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{gi}}{\partial P_i} \right], \quad (\text{A.1.8})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i+\frac{1}{2}}} = (Pc_{i+1} - Pc_i) + (P_{i+1} - P_i) - \gamma_{gi}(D_{i+1} - D_i), \quad (\text{A.1.9})$$


---

### Termo D

$$D = (T_g y_c)_{i-\frac{1}{2}} \Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}},$$

$$\text{onde, } \Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}} = \Phi_{gi} - \Phi_{g_{i-1}};$$
(A.1.10)

$$\frac{\partial D}{\partial P_i} = \Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}} (1-W) \left( y_{ci} \frac{\partial T_{gi}}{\partial P_i} \right) + \left[ (T_g y_c)_i (1-W) + (T_g y_c)_{i-1} W \right] \cdot \left[ \frac{\partial P_{ci}}{\partial P_i} + 1 - (1-W)(D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{gi}}{\partial P_i} \right],$$
(A.1.11)

onde,

$$\Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}} = (Pc_i - Pc_{i-1}) + (P_i - P_{i-1}) - \gamma_{gi}(D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.1.12})$$


---

### Termo E

$$E = \frac{V_i \phi}{\Delta t} \left[ (S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c)_{n+1} - (S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c)_n \right]_i, \quad (\text{A.1.13})$$

onde as derivadas dos termos em  $n$  são nulas pois estes são constantes no passo de tempo  $n+1$ ; assim:

$$\frac{\partial E}{\partial P_i} = \frac{V_i \phi}{\Delta t} \left[ (1 - S_g) \left( x_{ci} \frac{\partial \rho_{oi}}{\partial P_i} \right) + S_g \left( y_{ci} \frac{\partial \rho_{gi}}{\partial P_i} \right) \right]. \quad (\text{A.1.14})$$


---

### Termo F

$$F = (q_o x_c \rho_o)_i, \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial F}{\partial P_i} = \rho_{oi} x_{ci} \frac{\partial q_{oi}}{\partial P_i} + q_{oi} x_{ci} \frac{\partial \rho_{oi}}{\partial P_i} . \quad (\text{A.1.15})$$

Aqui torna-se necessário considerar-se separadamente cada condição de contorno para o poço:

1º caso: considerando-se constante a pressão de fluxo no fundo do poço ( $P_{wf}$ ), a derivada de  $q_{oi}$  ( dado pela Equação 3.6.13) será:

$$\frac{\partial q_{oi}}{\partial P_i} = \frac{1}{\mu_{oi}} \left( IP k_{ro} - q_{oi} \frac{\partial \mu_{oi}}{\partial P_i} \right) \quad (\text{A.1.16})$$

e a derivada do termo  $F$  será:

$$\frac{\partial F}{\partial P_i} = \frac{x_{ci} \rho_{oi}}{\mu_{oi}} \left( IP k_{ro} - q_{oi} \frac{\partial \mu_{oi}}{\partial P_i} \right) + q_{oi} x_{ci} \frac{\partial \rho_{oi}}{\partial P_i} , \quad (\text{A.1.17})$$

onde,

$$q_{oi} = IP \frac{k_{ro}}{\mu_{oi}} \left( P_i - P_{wf} \right) . \quad (\text{A.1.18})$$

2º caso : considerando-se constante a vazão de gás na superfície ( $q_{gs}$ ), foi visto na Seção 3.6 que o diferencial de pressão no poço será dado por:

$$(P - P_{wf}) = \frac{q_{gs} \rho_{gs}}{G_s} \frac{1}{IP \left[ \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \right]} , \quad (3.6.17)$$

definindo-se as seguintes variáveis auxiliares:

$$S = \frac{q_{gs} \rho_{gs}}{G_s}, \quad (\text{A.1.19})$$

$$R = IP \left[ \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \right], \quad (\text{A.1.20})$$

a Equação 3.6.17 será assim rescrita:

$$P_i - P_{wfi} = \frac{S}{R}. \quad (\text{A.1.21})$$

Os termos que compõem a variável S, por serem determinados na iteração anterior, são constantes no passo de tempo  $n+1$ . A derivada da vazão de óleo em relação a pressão será portanto:

$$\frac{\partial q_{oi}}{\partial P_i} = IP k_{ro,i} S \frac{\partial}{\partial P_i} \left( \frac{1}{\mu_{oi} R} \right), \quad (\text{A.1.22})$$

$$\frac{\partial q_{oi}}{\partial P_i} = \frac{-IP k_{ro,i} S}{\mu_{oi} R} \left[ \frac{1}{\mu_{oi} R} \frac{\partial \mu_{oi}}{\partial P_i} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial R}{\partial P_i} \right], \quad (\text{A.1.23})$$

onde,

$$\frac{\partial R}{\partial P_i} = IP \left[ \frac{k_{ro,i}}{\mu_{oi}} \left( \frac{\partial \rho_{oi}}{\partial P_i} - \frac{\rho_{oi}}{\mu_{oi}} \frac{\partial \mu_{oi}}{\partial P_i} \right) + \frac{k_{rg}}{\mu_{gi}} \left( \frac{\partial \rho_{gi}}{\partial P_i} - \frac{\rho_{gi}}{\mu_{gi}} \frac{\partial \mu_{gi}}{\partial P_i} \right) \right]. \quad (\text{A.1.24})$$

Substituindo-se as Equações A.1.23 e A.1.24 na Equação A.1.15, obtém-se a derivada do termo F em relação à pressão para o caso em que se deseja fixar a vazão de gás na superfície. Se for necessário fixar-se a vazão de óleo na superfície, o desenvolvimento será análogo com uma única diferença para a variável S que será expressa pela vazão, densidade e fração molar do óleo na superfície.

---

### Termo *G*

$$G = (q_g y_c \rho_g)_i , \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial G}{\partial P_i} = \rho_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial q_{g_i}}{\partial P_i} + q_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial \rho_{g_i}}{\partial P_i} . \quad (\text{A.1.25})$$

Novamente torna-se necessário considerar-se separadamente cada condição de contorno para o poço:

1º caso : considerando constante a pressão de fluxo no fundo do poço ( $P_{wf}$ ), a derivada de  $q_{g_i}$  (dado pela Equação 3.6.13) será:

$$\frac{\partial q_{g_i}}{\partial P_i} = \frac{1}{\mu_{g_i}} \left( IP k_{rg_i} - q_{g_i} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial P_i} \right) , \quad (\text{A.1.26})$$

e a derivada do termo *G* ficará:

$$\frac{\partial G}{\partial P_i} = \frac{y_{c_i} \rho_{g_i}}{\mu_{g_i}} \left( IP k_{rg_i} - q_{g_i} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial P_i} \right) + q_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial \rho_{g_i}}{\partial P_i} , \quad (\text{A.1.27})$$

onde,

$$q_{g_i} = IP \frac{k_{rg_i}}{\mu_{g_i}} (P_i - P_{wf}) . \quad (\text{A.1.28})$$

2º caso : considerando constante a vazão de gás na superfície ( $q_{g_s}$ ), a expressão da derivada da vazão de gás em relação à pressão é obtida de forma similar à derivada da vazão de óleo, resultando em:

$$\frac{\partial q_{g_i}}{\partial P_i} = \frac{-IP k_{rg_i} S}{\mu_{g_i} R} \left[ \frac{1}{\mu_{g_i} R} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial P_i} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial R}{\partial P_i} \right], \quad (\text{A.1.29})$$

onde  $S$  e  $R$  foram definidos pelas Equações A.1.19 e A.1.20 e  $\frac{\partial R}{\partial P_i}$  pela Equação A.1.24.

Substituindo-se a Equação A.1.29 na Equação A.1.25, obtém-se a derivada do termo  $G$  em relação à pressão para o caso em que se deseja fixar a vazão de gás na superfície. Se for necessário fixar-se a vazão de óleo na superfície, o desenvolvimento será análogo com uma única diferença para a variável  $S$ , que será expressa pela vazão, densidade e fração molar do óleo na superfície.

## A.2 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Pressão no Bloco $i+1$ ( $P_{i+1}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivadas das equações de fluxo em relação à pressão no bloco  $i+1$ . Estas derivadas irão compor a primeira coluna de cada matriz constituinte da diagonal superior da matriz Jacobiana. Os termos  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$ ,  $F$  e  $G$  já foram definidos na seção anterior.

### Termo $A$

$$\frac{\partial A}{\partial P_{i+1}} = \Phi_{oi+1} (1-W) \left( x_{ci+1} \frac{\partial T_{oi+1}}{\partial P_{i+1}} \right) + \left[ (T_o x_c)_i W + (T_o x_c)_{i+1} (1-W) \right] \cdot \left[ 1 - (1-W)(D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{oi+1}}{\partial P_{i+1}} \right], \quad (\text{A.2.1})$$

onde,

$$\Phi_{oi+1} = P_{i+1} - P_i - \gamma_{oi+1} (D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.2.2})$$

---

### Termo *B*

O termo *B* representa o fluxo de óleo através da fronteira entre o bloco *i*-1 e o bloco *i*. As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à variável primária no bloco *i*+1 será nula:

$$\frac{\partial B}{\partial P_{i+1}} = 0 . \quad (\text{A.2.3})$$


---

### Termo *C*

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial P_{i+1}} &= \Phi_{g_{i+\frac{1}{2}}} (1-W) \left( y_{c_{i+1}} \frac{\partial T_{g_{i+1}}}{\partial P_{i+1}} \right) + \\ &+ \left[ (T_g y_c)_i W + (T_g y_c)_{i+1} (1-W) \right] \cdot \left[ 1 + \frac{\partial P_{c_{i+1}}}{\partial P_{i+1}} - (1-W)(D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{g_{i+1}}}{\partial P_{i+1}} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.4})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i+\frac{1}{2}}} = (P_{c_{i+1}} - P_{c_i}) + (P_{i+1} - P_i) - \gamma_{g_{i+1}} (D_{i+1} - D_i) . \quad (\text{A.2.5})$$


---

### Termo *D*

O termo *D* representa o fluxo de gás através da fronteira entre o bloco *i*-1 e o bloco *i*. As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à variável primária no bloco *i*+1 será nula:

$$\frac{\partial D}{\partial P_{i+1}} = 0 . \quad (\text{A.2.6})$$


---

### Termos $E$ , $F$ e $G$

Os termos  $E$ ,  $F$  e  $G$  são definidos no próprio bloco  $i$ , desta forma suas derivadas em relação à pressão no bloco  $i+1$  serão nulas:

$$\frac{\partial E}{\partial P_{i+1}} = \frac{\partial F}{\partial P_{i+1}} = \frac{\partial G}{\partial P_{i+1}} = 0 . \quad (\text{A.2.7})$$

### A.3 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Pressão no Bloco $i-1$ ( $P_{i-1}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivações das equações de fluxo em relação à pressão no bloco  $i-1$ . Estas derivadas irão compor a primeira coluna de cada matriz constituinte da diagonal inferior da matriz Jacobiana. Os termos  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$ ,  $F$  e  $G$  já foram definidos na primeira seção deste apêndice.

---

#### Termo $A$

O termo  $A$  representa o fluxo de óleo através da fronteira entre o bloco  $i+1$  e o bloco  $i$ . As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à variável primária no bloco  $i-1$  será nula:

$$\frac{\partial A}{\partial P_{i-1}} = 0 . \quad (\text{A.3.1})$$

---

### Termo **B**

$$\frac{\partial B}{\partial P_{i-1}} = \Phi_{o_{i-1}} W \left( x_{c_{i-1}} \frac{\partial T_{o_{i-1}}}{\partial P_{i-1}} \right) + \left[ (T_o x_c)_i (1-W) + (T_o x_c)_{i-1} W \right] \cdot \left[ -1 - W(D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{o_{i-1}}}{\partial P_{i-1}} \right], \quad (\text{A.3.2})$$

onde,

$$\Phi_{o_{i-1}} = P_i - P_{i-1} - \gamma_{o_{i-1}} (D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.3.3})$$


---

### Termo **C**

O termo *C* representa o fluxo de gás através da fronteira entre o bloco *i+1* e o bloco *i*. As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à variável primária no bloco *i-1* será nula:

$$\frac{\partial C}{\partial P_{i-1}} = 0. \quad (\text{A.3.4})$$


---

### Termo **D**

$$\frac{\partial D}{\partial P_{i-1}} = \Phi_{g_{i-1}} W \left( y_{c_{i-1}} \frac{\partial T_{g_{i-1}}}{\partial P_{i-1}} \right) + \left[ (T_g y_c)_i (1-W) + (T_g y_c)_{i-1} W \right] \cdot \left[ -\frac{\partial P_{c_{i-1}}}{\partial P_{i-1}} - 1 - W(D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{g_{i-1}}}{\partial P_{i-1}} \right], \quad (\text{A.3.5})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i-1}} = (P_{c_i} - P_{c_{i-1}}) + (P_i - P_{i-1}) - \gamma_{g_{i-1}} (D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.3.6})$$

---

### Termos $E$ , $F$ e $G$

Os termos  $E$ ,  $F$  e  $G$  são definidos no próprio bloco  $i$ , desta forma suas derivadas em relação à pressão no bloco  $i-1$  serão nulas:

$$\frac{\partial E}{\partial P_{i-1}} = \frac{\partial F}{\partial P_{i-1}} = \frac{\partial G}{\partial P_{i-1}} = 0 . \quad (\text{A.3.7})$$

### A.4 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Saturação de Gás no Bloco $i$ ( $S_{gi}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivações das equações de fluxo em relação à saturação de gás, a segunda variável primária, no bloco  $i$ . Estas derivadas irão compor a segunda coluna de cada matriz constituinte da diagonal principal da matriz Jacobiana. Os termos  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$ ,  $F$  e  $G$  são os mesmos definidos anteriormente.

---

#### Termo $A$

$$\frac{\partial A}{\partial S_{gi}} = \Phi_{oi+\frac{1}{2}} W x_{ci} \frac{\partial T_{oi}}{\partial S_{gi}} , \quad (\text{A.4.1})$$

onde,

$$\Phi_{oi+\frac{1}{2}} = P_{i+1} - P_i - \gamma_{oi} (D_{i+1} - D_i) . \quad (\text{A.4.2})$$

---

#### Termo $B$

$$\frac{\partial B}{\partial S_{g_i}} = (1 - W) x_{c_i} \Phi_{o_{i-\frac{1}{2}}} \frac{\partial T_{o_i}}{\partial S_{g_i}} , \quad (\text{A.4.3})$$

onde,

$$\Phi_{o_{i-\frac{1}{2}}} = P_i - P_{i-1} - \gamma_{o_i} (D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.4.4})$$


---

### Termo C

$$\frac{\partial C}{\partial S_{g_i}} = W \Phi_{g_{i+\frac{1}{2}}} y_{c_i} \frac{\partial T_{g_i}}{\partial S_{g_i}} + \left[ (T_g y_c)_i W + (T_g y_c)_{i+1} (1 - W) \right] \cdot \left[ -\frac{\partial P c_i}{\partial S_{g_i}} - W (D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{g_i}}{\partial S_{g_i}} \right], \quad (\text{A.4.5})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i+\frac{1}{2}}} = (P c_{i+1} - P c_i) + (P_{i+1} - P_i) - \gamma_{g_i} (D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.4.6})$$


---

### Termo D

$$\frac{\partial D}{\partial S_{g_i}} = (1 - W) \Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}} y_{c_i} \frac{\partial T_{g_i}}{\partial S_{g_i}} + \left[ (T_g y_c)_{i-1} W + (T_g y_c)_i (1 - W) \right] \cdot \left[ \frac{\partial P c_i}{\partial S_{g_i}} - (1 - W) (D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{g_i}}{\partial S_{g_i}} \right], \quad (\text{A.4.7})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}} = (P c_i - P c_{i-1}) + (P_i - P_{i-1}) - \gamma_{g_i} (D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.4.8})$$


---

### Termo E

Como visto anteriormente, o termo de acumulação é definido pela seguinte expressão:

$$E = \frac{V_i \phi}{\Delta t} \left[ \left( S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right)_{n+1} - \left( S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right)_n \right]_i . \quad (\text{A.6})$$

As derivadas dos termos em  $n$  são nulas, pois estes são constantes no passo de tempo  $n+1$ , assim:

$$\frac{\partial E}{\partial S_{g_i}} = \frac{V_i \phi}{\Delta t} \left[ y_{c_i} \rho_{g_i} - x_{c_i} \rho_{o_i} + y_{c_i} S_{g_i} \frac{\partial \rho_{g_i}}{\partial S_{g_i}} \right] . \quad (\text{A.4.9})$$


---

### Termo $F$

$$F = (q_o x_c \rho_o)_i , \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial F}{\partial S_{g_i}} = \rho_{o_i} x_{c_i} \frac{\partial q_{o_i}}{\partial S_{g_i}} . \quad (\text{A.4.10})$$

Na determinação da derivada da Equação A.4.10 torna-se necessário considerar-se separadamente cada condição de contorno para o poço:

1º caso : considerando a pressão de fluxo no fundo do poço ( $P_{w_f}$ ) uma constante, a derivada de  $q_{o_i}$  (dado pela Equação 3.6.13) será:

$$\frac{\partial q_{o_i}}{\partial S_{g_i}} = \frac{IP(P_i - P_{w_f})}{\mu_{o_i}} \frac{\partial k_{r_o}}{\partial S_{g_i}} . \quad (\text{A.4.11})$$

2º caso : considerando a vazão de gás na superfície ( $q_{g_s}$ ) uma constante, a expressão da derivada da vazão de óleo em relação à saturação é obtida de forma similar à derivada em relação à pressão, resultando em:

$$\frac{\partial q_{o_i}}{\partial S_{g_i}} = \frac{IP}{\mu_{o_i}} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial k_{ro_i}}{\partial S_{g_i}} - \frac{k_{ro_i}}{R^2} \frac{\partial R}{\partial S_{g_i}} \right), \quad (A.4.12)$$

onde S e R foram definidos pelas Equações A.1.19 e A.1.20 e

$$\frac{\partial R}{\partial S_{g_i}} = IP \left[ \frac{\rho_o}{\mu_o} \frac{\partial k_{ro_i}}{\partial S_{g_i}} + \frac{\rho_g}{\mu_g} \frac{\partial k_{rg_i}}{\partial S_{g_i}} + \frac{k_{rg_i} \rho_{g_i}}{\mu_{g_i}} \left( \frac{1}{\rho_{g_i}} \frac{\partial \rho_{g_i}}{\partial S_{g_i}} - \frac{1}{\mu_{g_i}} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial S_{g_i}} \right) \right]. \quad (A.4.13)$$

Substituindo-se as Equações A.4.12 e A.4.13 na Equação A.4.10, obtém-se a derivada do termo F em relação à saturação para o caso em que se deseja fixar a vazão de gás na superfície. Se for necessário fixar-se a vazão de óleo na superfície, o desenvolvimento será análogo com uma única diferença para a variável S, que será expressa pela vazão, densidade e fração molar do óleo na superfície.

### Termo G

$$G = (q_g y_c \rho_g)_i, \quad (A.8)$$

$$\frac{\partial G}{\partial S_{g_i}} = \rho_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial q_{g_i}}{\partial S_{g_i}} + q_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial \rho_{g_i}}{\partial S_{g_i}}. \quad (A.4.14)$$

Na determinação da derivada da vazão de gás em relação à saturação de gás, torna-se necessário considerar-se separadamente cada condição de contorno para o poço:

1º caso : considerando constante a pressão de fluxo no fundo do poço ( $P_{wf}$ ), a derivada de  $q_{g_i}$  será:

$$\frac{\partial q_{g_i}}{\partial S_{g_i}} = q_{g_i} \left( \frac{1}{k_{rg_i}} \frac{\partial k_{rg_i}}{\partial S_{g_i}} - \frac{1}{\mu_{g_i}} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial S_{g_i}} \right), \quad (\text{A.4.15})$$

onde,

$$q_{g_i} = IP \frac{k_{rg_i}}{\mu_{g_i}} (P_i - P_{wf_i}). \quad (\text{A.1.28})$$

Substituindo as Equações A.4.15 e A.1.28 na equação A.4.14 obtém-se a derivada do termo  $G$  em relação à saturação de gás para pressão de fluxo constante. As derivadas da densidade e da viscosidade do gás em relação à saturação serão determinadas nos apêndices seguintes.

2º caso : considerando a vazão de gás na superfície ( $q_{g_s}$ ) uma constante, a expressão da derivada da vazão de gás em relação à saturação é obtida de forma similar à derivada em relação à pressão, resultando em:

$$\frac{\partial q_{g_i}}{\partial S_{g_i}} = q_{g_i} \left[ \frac{1}{k_{rg_i}} \frac{\partial k_{rg_i}}{\partial S_{g_i}} - \frac{1}{\mu_{g_i}} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial S_{g_i}} - \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial S_{g_i}} \right], \quad (\text{A.4.16})$$

onde  $S$  e  $R$  foram definidos pelas Equações A.1.19 e A.1.20 e  $\frac{\partial R}{\partial S_{g_i}}$  pela Equação A.4.13.

Substituindo-se as Equações A.4.16 e A.1.28 na Equação A.4.14, obtém-se a derivada do termo  $G$  em relação à saturação para o caso em que se deseja fixar a vazão de gás na superfície. Se for necessário fixar-se a vazão de óleo na superfície, o desenvolvimento será análogo com uma única diferença para a variável  $S$ , que será expressa pela vazão, densidade e fração molar do óleo na superfície.

## A.5 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Saturação de Gás no Bloco $i+1$ ( $S_{g,i+1}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivadas das equações de fluxo em relação à saturação de gás no bloco  $i+1$ . Estas derivadas irão compor a segunda coluna de cada matriz constituinte da diagonal superior da matriz Jacobiana. Os termos  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$ ,  $F$  e  $G$  são os mesmos definidos anteriormente.

---

### Termo $A$

$$\frac{\partial A}{\partial S_{g,i+1}} = \Phi_{o,i+\frac{1}{2}} (1 - W) x_{c,i+1} \frac{\partial T_{o,i+1}}{\partial S_{g,i+1}}, \quad (\text{A.5.1})$$

onde,

$$\Phi_{o,i+\frac{1}{2}} = P_{i+1} - P_i - \gamma_{o,i+1} (D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.5.2})$$


---

### Termo $B$

O termo  $B$  representa o fluxo de óleo através da fronteira entre o bloco  $i-1$  e o bloco  $i$ . As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à saturação de gás no bloco  $i+1$  será nula:

$$\frac{\partial B}{\partial S_{g,i+1}} = 0. \quad (\text{A.5.3})$$


---

### Termo $C$

$$\frac{\partial C}{\partial S_{g_{i+1}}} = (1-W) \Phi_{g_{i+1}} y_{c_{i+1}} \frac{\partial T_{g_{i+1}}}{\partial S_{g_{i+1}}} + \left[ (T_g y_c)_i W + (T_g y_c)_{i+1} (1-W) \right] \cdot \left[ \frac{\partial P c_{i+1}}{\partial S_{g_{i+1}}} - (1-W)(D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{g_{i+1}}}{\partial S_{g_{i+1}}} \right], \quad (\text{A.5.4})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i+1}} = (P c_{i+1} - P c_i) + (P_{i+1} - P_i) - \gamma_{g_{i+1}} (D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.5.5})$$


---

### Termo *D*

O termo *D* representa o fluxo de gás através da fronteira entre o bloco *i-1* e o bloco *i*. As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à saturação de gás no bloco *i+1* será nula:

$$\frac{\partial D}{\partial S_{g_{i+1}}} = 0. \quad (\text{A.5.6})$$


---

### Termos *E*, *F* e *G*

Os termos *E*, *F* e *G* são definidos no próprio bloco *i*, desta forma suas derivadas em relação à saturação no bloco *i+1* serão nulas:

$$\frac{\partial E}{\partial S_{g_{i+1}}} = \frac{\partial F}{\partial S_{g_{i+1}}} = \frac{\partial G}{\partial S_{g_{i+1}}} = 0. \quad (\text{A.5.7})$$

## A.6 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Saturação de Gás no Bloco *i-1* ( $S_{g_{i-1}}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivações das equações de fluxo em relação à saturação de gás no bloco  $i-1$ . Estas derivadas irão compor a segunda coluna de cada matriz constituinte da diagonal inferior da matriz Jacobiana. Os termos  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$ ,  $F$  e  $G$  são os mesmos definidos anteriormente.

---

### **Termo A**

O termo  $A$  representa o fluxo de óleo através da fronteira entre o bloco  $i+1$  e o bloco  $i$ . As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à saturação de gás no bloco  $i-1$  será nula:

$$\frac{\partial A}{\partial S_{g_{i-1}}} = 0 . \quad (\text{A.6.1})$$


---

### **Termo B**

$$\frac{\partial B}{\partial S_{g_{i-1}}} = W x_{c_{i-1}} \Phi_{o_{i-1}} \frac{\partial T_{o_{i-1}}}{\partial S_{g_{i-1}}} , \quad (\text{A.6.2})$$

onde,

$$\Phi_{o_{i-1}} = P_i - P_{i-1} - \gamma_{o_{i-1}} (D_i - D_{i-1}) . \quad (\text{A.6.3})$$


---

### **Termo C**

O termo  $C$  representa o fluxo de gás através da fronteira entre o bloco  $i+1$  e o bloco  $i$ . As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da

interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à saturação de gás no bloco  $i-1$  será nula:

$$\frac{\partial C}{\partial S_{g_{i-1}}} = 0 . \quad (\text{A.6.4})$$


---

### **Termo D**

$$\frac{\partial D}{\partial S_{g_{i-1}}} = W \Phi_{g_{i-1}} y_{c_{i-1}} \frac{\partial T_g}_{\partial S_{g_{i-1}}} + \left[ (T_g y_c)_{i-1} W + (T_g y_c)_i (1 - W) \right] \cdot \left[ -\frac{\partial P c_{i-1}}{\partial S_{g_{i-1}}} - W(D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{g_{i-1}}}{\partial S_{g_{i-1}}} \right], \quad (\text{A.6.5})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i-1}} = (P c_i - P c_{i-1}) + (P_i - P_{i-1}) - \gamma_{g_{i-1}} (D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.6.6})$$


---

### **Termos E, F e G**

Os termos  $E$ ,  $F$  e  $G$  são definidos no próprio bloco  $i$ , desta forma suas derivadas em relação à saturação no bloco  $i-1$  serão nulas:

$$\frac{\partial E}{\partial S_{g_{i-1}}} = \frac{\partial F}{\partial S_{g_{i-1}}} = \frac{\partial G}{\partial S_{g_{i-1}}} = 0 . \quad (\text{A.6.7})$$

## **A.7 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Fração Molar do Componente $n$ na Fase Líquida no Bloco $i$ ( $x_{n_i}$ )**

Nesta seção serão apresentadas as derivadas das equações de fluxo em relação à fração molar do  $n$ -ésimo componente na fase líquida, no bloco  $i$ . Estas derivadas irão compor as

colunas de ordem  $2n-1$  de cada matriz constituinte da diagonal principal da matriz Jacobiana. Os termos  $A, B, C, D, E, F$  e  $G$  são os mesmos definidos anteriormente.

---

### Termo A

$$\frac{\partial A}{\partial \mathbf{x}_{ni}} = \Phi_{oi+\frac{1}{2}} W \left( T_{oi} \frac{\partial \mathbf{x}_{ci}}{\partial \mathbf{x}_{ni}} + \mathbf{x}_{ci} \frac{\partial T_{oi}}{\partial \mathbf{x}_{ni}} \right) - (T_o \mathbf{x}_c)_i W (D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{oi}}{\partial \mathbf{x}_{ni}}, \quad (\text{A.7.1})$$

onde,

$$\Phi_{oi+\frac{1}{2}} = P_{i+1} - P_i - \gamma_{oi} (D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.7.2})$$


---

### Termo B

$$\frac{\partial B}{\partial \mathbf{x}_{ni}} = \Phi_{oi-\frac{1}{2}} (1 - W) \left( T_{oi} \frac{\partial \mathbf{x}_{ci}}{\partial \mathbf{x}_{ni}} + \mathbf{x}_{ci} \frac{\partial T_{oi}}{\partial \mathbf{x}_{ni}} \right) - (T_o \mathbf{x}_c)_i (1 - W) (D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{oi}}{\partial \mathbf{x}_{ni}}, \quad (\text{A.7.3})$$

onde,

$$\Phi_{oi-\frac{1}{2}} = P_i - P_{i-1} - \gamma_{oi} (D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.7.4})$$


---

### Termo C

$$\frac{\partial C}{\partial \mathbf{x}_{ni}} = \Phi_{gi+\frac{1}{2}} W \mathbf{y}_{ci} \frac{\partial T_{gi}}{\partial \mathbf{x}_{ni}} + \left[ (T_g \mathbf{y}_c)_i W + (T_g \mathbf{y}_c)_{i+1} (1 - W) \right] \left[ - \frac{\partial P_{ci}}{\partial \mathbf{x}_{ni}} - W (D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{gi}}{\partial \mathbf{x}_{ni}} \right], \quad (\text{A.7.5})$$

onde,

$$\Phi_{gi+\frac{1}{2}} = (P_{ci+1} - P_{ci}) + (P_{i+1} - P_i) - \gamma_{gi} (D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.7.6})$$

**Termo D**

$$\frac{\partial D}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} = \Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}} (1 - W) y_{c_i} \frac{\partial T_g}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} + \left[ \left( T_g y_c \right)_i (1 - W) + \left( T_g y_c \right)_{i-1} W \right] \left[ \frac{\partial P c_i}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} - (1 - W)(D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_g}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} \right], \quad (\text{A.7.7})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}} = (P c_i - P c_{i-1}) + (P_i - P_{i-1}) - \gamma_g (D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.7.8})$$

**Termo E**

Para o termo de acumulação, as derivadas das parcelas avaliadas no passo de tempo n são nulas pois estas são constantes no passo de tempo n+1:

$$E = \frac{V_i \phi}{\Delta t} \left[ \left( S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right)_{n+1} - \left( S_o \rho_o x_c + S_g \rho_g y_c \right)_n \right]_i, \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} = \frac{V_i \phi}{\Delta t} \left[ \left( 1 - S_g \right) \left( x_{c_i} \frac{\partial \rho_o}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} + \rho_o \frac{\partial x_{c_i}}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} \right) + S_g y_{c_i} \frac{\partial \rho_g}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} \right]. \quad (\text{A.7.9})$$

**Termo F**

$$F = (q_o x_c \rho_o)_i, \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} = \rho_o x_{c_i} \frac{\partial q_o}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} + q_o x_{c_i} \frac{\partial \rho_o}{\partial \mathbf{x}_{n_i}} + \rho_o q_o \frac{\partial x_{c_i}}{\partial \mathbf{x}_{n_i}}. \quad (\text{A.7.10})$$

Na determinação da derivada da vazão de óleo em relação à fração molar há dois casos a serem considerados, a depender da condição de contorno fixada para o poço:

1º caso : considerando a pressão de fluxo no fundo do poço ( $P_{wf}$ ) uma constante, a derivada de  $q_{oi}$  será :

$$\frac{\partial q_{oi}}{\partial x_{ni}} = \frac{-q_{oi}}{\mu_{oi}} \frac{\partial \mu_{oi}}{\partial x_{ni}}, \quad (\text{A.7.11})$$

onde,

$$q_{oi} = IP \frac{k_{ro_i}}{\mu_{oi}} (P_i - P_{wf_i}). \quad (\text{A.1.18})$$

2º caso : considerando a vazão de gás na superfície ( $q_{gs}$ ) uma constante, a derivada da vazão de óleo em condições de reservatório em relação à  $x_n$  será desenvolvida de forma semelhante à derivada em relação à pressão, resultando em:

$$\frac{\partial q_{oi}}{\partial x_{ni}} = \frac{-IP k_{ro_i} S}{\mu_{oi} R} \left[ \frac{1}{\mu_{oi} R} \frac{\partial \mu_{oi}}{\partial x_{ni}} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial R}{\partial x_{ni}} \right] = -q_{oi} \left( \frac{1}{\mu_{oi}} \frac{\partial \mu_{oi}}{\partial x_{ni}} + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial x_{ni}} \right), \quad (\text{A.7.12})$$

onde S e R foram definidos pelas Equações A.1.19 e A.1.20 e a derivada de R em relação a fração molar é dada por:

$$\frac{\partial R}{\partial x_{ni}} = IP k_{ro_i} \frac{\rho_{oi}}{\mu_{oi}} \left( \frac{1}{\rho_{oi}} \frac{\partial \rho_{oi}}{\partial x_{ni}} - \frac{1}{\mu_{oi}} \frac{\partial \mu_{oi}}{\partial x_{ni}} \right) + IP k_{rg_i} \frac{\rho_{gi}}{\mu_{gi}} \left( \frac{1}{\rho_{gi}} \frac{\partial \rho_{gi}}{\partial x_{ni}} - \frac{1}{\mu_{gi}} \frac{\partial \mu_{gi}}{\partial x_{ni}} \right). \quad (\text{A.7.13})$$

A expressão final da derivada do termo F em relação à fração molar do componente  $n$  na fase líquida, para a vazão de gás na superfície constante, será obtida ao substituírem-se as

Equações A.7.12 e A.7.13 na Equação A.7.10. Se for necessário fixar-se a vazão de óleo na superfície, a determinação será análoga com uma única diferença para a variável S, que será expressa pela vazão, densidade e fração molar do óleo na superfície.

---

### Termo *G*

$$G = (q_g y_c \rho_g)_i , \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial G}{\partial x_{n_i}} = \rho_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial q_{g_i}}{\partial x_{n_i}} + q_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial \rho_{g_i}}{\partial x_{n_i}} . \quad (\text{A.7.14})$$

Tal como na vazão de óleo, na determinação da derivada da vazão de gás em relação à fração molar deve se considerar separadamente cada condição de contorno fixada para o poço:

1º caso : considerando constante a pressão de fluxo no fundo do poço, a derivada de  $q_{g_i}$  será:

$$\frac{\partial q_{g_i}}{\partial x_{n_i}} = \frac{-q_{g_i}}{\mu_{g_i}} \left( \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial x_{n_i}} \right) , \quad (\text{A.7.15})$$

onde,

$$q_{g_i} = IP \frac{k_{rg_i}}{\mu_{g_i}} (P_i - P_{wf_i}) , \quad (\text{A.1.28})$$

obtendo-se:

$$\frac{\partial G}{\partial x_{n_i}} = -\rho_{g_i} y_{c_i} \frac{q_{g_i}}{\mu_{g_i}} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial x_{n_i}} + q_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial \rho_{g_i}}{\partial x_{n_i}} . \quad (\text{A.7.16})$$

2º caso : considerando a vazão de gás na superfície ( $q_{g_s}$ ) uma constante, a expressão da derivada da vazão de gás no reservatório em relação à  $x_{n_i}$  é obtida de forma similar à derivada da vazão de óleo, resultando em:

$$\frac{\partial q_{g_s}}{\partial x_{n_i}} = - \frac{IP Kr_g}{\mu_g} \frac{S}{R} \left( \frac{1}{\mu_{g_i}} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial x_{n_i}} + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial x_{n_i}} \right), \quad (\text{A.7.17})$$

onde S e R foram definidos pelas Equações A.1.19 e A.1.20 e a derivada de R em relação a fração molar é dada pela Equação A.7.13.

Substituindo-se a Equação A.7.17 na equação A.7.14, obtém-se a derivada do termo  $G$  em relação à  $x_{n_i}$  para o caso em que se deseja fixar a vazão de gás na superfície. Se for necessário fixar-se a vazão de óleo na superfície, o desenvolvimento será análogo com uma única diferença para a variável S, que será expressa pela vazão, densidade e fração molar do óleo na superfície.

## A.8 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Fração Molar do Componente $n$ na Fase Líquida no Bloco $i+1$ ( $x_{n_{i+1}}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivações das equações de fluxo em relação à fração molar do  $n$ -ésimo componente na fase líquida, no bloco  $i+1$ . Estas derivadas irão compor as colunas de ordem  $2n-1$  de cada matriz constituinte da diagonal superior da matriz Jacobiana. Os termos  $A, B, C, D, E, F$  e  $G$  são os mesmos definidos anteriormente.

### Termo $A$

$$\frac{\partial A}{\partial x_{n_{i+1}}} = \Phi_{o_{i+1}} (1-W) \left( T_{o_{i+1}} \frac{\partial x_{c_{i+1}}}{\partial x_{n_{i+1}}} + x_{c_{i+1}} \frac{\partial T_{o_{i+1}}}{\partial x_{n_{i+1}}} \right) - (T_o x_c)_{i+1} (1-W) (D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{o_{i+1}}}{\partial x_{n_{i+1}}}, \quad (\text{A.8.1})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i+1}} = P_{i+1} - P_i - \gamma_{g_{i+1}}(D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.8.2})$$


---

### Termo *B*

O termo *B* representa o fluxo de óleo através da fronteira entre o bloco *i*-1 e o bloco *i*. As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à fração molar no bloco *i*+1 será nula:

$$\frac{\partial B}{\partial x_{n_{i+1}}} = 0. \quad (\text{A.8.3})$$


---

### Termo *C*

$$\frac{\partial C}{\partial x_{n_{i+1}}} = \Phi_{g_{i+1}}(1-W)y_{c_{i+1}} \frac{\partial T_{g_{i+1}}}{\partial x_{n_{i+1}}} + \left[ (T_g y_c)_i W + (T_g y_c)_{i+1}(1-W) \right] \left[ \frac{\partial P c_{i+1}}{\partial x_{n_{i+1}}} - (1-W)(D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{g_{i+1}}}{\partial x_{n_{i+1}}} \right], \quad (\text{A.8.4})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i+1}} = (P c_{i+1} - P c_i) + (P_{i+1} - P_i) - \gamma_{g_{i+1}}(D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.8.5})$$


---

### Termo *D*

O termo *D* representa o fluxo de gás através da fronteira entre o bloco *i*-1 e o bloco *i*. As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à fração molar no bloco *i*+1 será nula:

$$\frac{\partial D}{\partial x_{n_{i+1}}} = 0 . \quad (\text{A.8.6})$$


---

### Termos $E$ , $F$ e $G$

Os termos  $E$ ,  $F$  e  $G$  são definidos no próprio bloco  $i$ ; logo, suas derivadas em relação à  $x_n$  no bloco  $i+1$  serão nulas :

$$\frac{\partial E}{\partial x_{n_{i+1}}} = \frac{\partial F}{\partial x_{n_{i+1}}} = \frac{\partial G}{\partial x_{n_{i+1}}} = 0 . \quad (\text{A.8.7})$$

### A.9 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Fração Molar do Componente $n$ na Fase Líquida no Bloco $i-1$ ( $x_{n_{i-1}}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivadas das equações de fluxo em relação à fração molar do  $n$ -ésimo componente na fase líquida, no bloco  $i-1$ . Estas derivadas irão compor as colunas de ordem  $2n-1$  de cada matriz constituinte da diagonal inferior da matriz Jacobiana. Os termos  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$ ,  $F$  e  $G$  são os mesmos definidos anteriormente.

---

#### Termo $A$

O termo  $A$  representa o fluxo de óleo através da fronteira entre o bloco  $i+1$  e o bloco  $i$ . As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à fração molar no bloco  $i-1$  será nula:

$$\frac{\partial A}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} = 0 . \quad (\text{A.9.1})$$


---

### Termo B

$$\frac{\partial B}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} = \Phi_{o_{i-\frac{1}{2}}} W \left( T_{o_{i-1}} \frac{\partial \mathbf{x}_{c_{i-1}}}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} + \mathbf{x}_{c_{i-1}} \frac{\partial T_{o_{i-1}}}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} \right) - (T_o \mathbf{x}_c)_{i-1} W (D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{o_{i-1}}}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} , \quad (\text{A.9.2})$$

onde,

$$\Phi_{o_{i-\frac{1}{2}}} = P_i - P_{i-1} - \gamma_{o_{i-1}} (D_i - D_{i-1}) . \quad (\text{A.9.3})$$


---

### Termo C

O termo *C* representa o fluxo de gás através da fronteira entre o bloco  $i+1$  e o bloco  $i$ . As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à fração molar no bloco  $i-1$  será nula:

$$\frac{\partial C}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} = 0 . \quad (\text{A.9.4})$$


---

### Termo D

$$\frac{\partial D}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} = \Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}} W \mathbf{y}_{c_{i-1}} \frac{\partial T_{g_{i-1}}}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} + \left[ (T_g \mathbf{y}_c)_i (1 - W) + (T_g \mathbf{y}_c)_{i-1} W \right] \left[ - \frac{\partial P c_{i-1}}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} - W (D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{g_{i-1}}}{\partial \mathbf{x}_{n_{i-1}}} \right] , \quad (\text{A.9.5})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i-\frac{1}{2}}} = (Pc_i - P_{c_{i-1}}) + (P_i - P_{i-1}) - \gamma_{g_{i-1}}(D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.9.6})$$


---

### Termos $E$ , $F$ e $G$

Os termos  $E$ ,  $F$  e  $G$  são definidos no próprio bloco  $i$ ; logo, suas derivadas em relação à  $x_n$  no bloco  $i-1$  serão nulas:

$$\frac{\partial E}{\partial x_{n_{i-1}}} = \frac{\partial F}{\partial x_{n_{i-1}}} = \frac{\partial G}{\partial x_{n_{i-1}}} = 0. \quad (\text{A.9.7})$$

### A.10 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Fração Molar do Componente $n$ na Fase Gasosa no Bloco $i$ ( $y_{n_i}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivações das equações de fluxo em relação à fração molar do  $n$ -ésimo componente na fase gasosa, no bloco  $i$ . Estas derivadas irão compor as colunas de ordem  $2n$  de cada matriz constituinte da diagonal principal da matriz Jacobiana. Os termos  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$ ,  $F$  e  $G$  são os mesmos definidos anteriormente.

---

#### Termo $A$

O termo  $A$  refere-se ao fluxo de óleo através de uma fronteira. Somente propriedades do óleo são avaliadas neste termo e a derivada de qualquer propriedade do óleo em relação à fração molar de um componente na fase gasosa será nula. Para facilitar o entendimento, imagina-se uma propriedade genérica do óleo  $X_o$ , cuja derivada em relação à  $y_n$  pode ser desenvolvida da seguinte forma:

$$\frac{\partial X_o}{\partial y_n} = \frac{\partial X_o}{\partial P_o} \frac{\partial P_o}{\partial y_n}; \quad (\text{A.10.1})$$

a derivada  $\frac{\partial P_o}{\partial y_n}$  na Equação A.10.1 será nula, uma vez que ambas as variáveis são primárias.

A derivada do termo de fluxo  $A$  seria representada pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial A}{\partial y_n} = \Phi_{o,i+\frac{1}{2}} W \left( T_{o,i} \frac{\partial x_{ci}}{\partial y_n} + x_{ci} \frac{\partial T_{oi}}{\partial y_n} \right) - (T_o x_c)_i W (D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{e_i}}{\partial y_n} . \quad (\text{A.10.2})$$

As derivadas referidas na Equação A.10.2, pelos motivos apresentados, são nulas. O resultado será, portanto:

$$\frac{\partial A}{\partial y_n} = 0 . \quad (\text{A.10.3})$$


---

### Termo *B*

A derivada do termo de fluxo  $B$  seria representada pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial B}{\partial y_n} = \Phi_{o,i-\frac{1}{2}} (1 - W) \left( T_{o,i} \frac{\partial x_{ci}}{\partial y_n} + x_{ci} \frac{\partial T_{oi}}{\partial y_n} \right) - (T_o x_c)_i (1 - W) (D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{oi}}{\partial y_n} . \quad (\text{A.10.4})$$

Pelos mesmos motivos apresentados para o termo  $A$ , tem-se:

$$\frac{\partial B}{\partial y_n} = 0 . \quad (\text{A.10.5})$$


---

### Termo *C*

$$\frac{\partial C}{\partial y_n} = \Phi_{g,i+\frac{1}{2}} W \left( T_g \frac{\partial y_{ci}}{\partial y_n} + y_{ci} \frac{\partial T_g}{\partial y_n} \right) + \left[ (T_g y_c)_i W + (T_g y_c)_{i+1} (1 - W) \right] \left[ - \frac{\partial P c_i}{\partial y_n} - W (D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{e_i}}{\partial y_n} \right], \quad (\text{A.10.6})$$

onde,

$$\Phi_{g,i+\frac{1}{2}} = (Pc_{i+1} - Pc_i) + (P_{i+1} - P_i) - \gamma_{gi}(D_{i+1} - D_i). \quad (\text{A.10.7})$$

### Termo **D**

$$\frac{\partial D}{\partial y_{ni}} = \Phi_{g,i-\frac{1}{2}}(1-W) \left( T_{gi} \frac{\partial y_{ci}}{\partial y_{ni}} + y_{ci} \frac{\partial T_{gi}}{\partial y_{ni}} \right) + \left[ (T_g y_c)_i (1-W) + (T_g y_c)_{i-1} W \right] \left[ \frac{\partial P_{ci}}{\partial y_{ni}} - (1-W)(D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{gi}}{\partial y_{ni}} \right], \quad (\text{A.10.8})$$

onde,

$$\Phi_{g,i-\frac{1}{2}} = (Pc_i - Pc_{i-1}) + (P_i - P_{i-1}) - \gamma_{gi}(D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.10.9})$$

### Termo **E**

$$\frac{\partial E}{\partial y_{ni}} = \frac{V_i \phi}{\Delta t} S_g \left( y_{ci} \frac{\partial \rho_{gi}}{\partial y_{ni}} + \rho_{gi} \frac{\partial y_{ci}}{\partial y_{ni}} \right). \quad (\text{A.10.10})$$

### Termo **F**

$$\frac{\partial F}{\partial y_{ni}} = \rho_{oi} x_{ci} \frac{\partial q_{oi}}{\partial y_{ni}}. \quad (\text{A.10.11})$$

O termo fonte para fase óleo deverá ter sua derivada em relação à fração molar do componente  $n$  na fase gasosa analisada para cada condição de contorno no poço:

1º caso : considerando constante a pressão de fluxo no fundo do poço, a derivada de  $q_{oi}$  será obtida da seguinte forma:

$$q_{o_i} = IP \frac{k_{ro_i}}{\mu_{o_i}} (P_i - P_{wf_i}) , \quad (A.1.18)$$

$$\frac{\partial q_{o_i}}{\partial y_{n_i}} = \frac{-q_{o_i}}{\mu_{o_i}} \left( \frac{\partial \mu_{o_i}}{\partial y_{n_i}} \right) , \quad (A.10.12)$$

porém, a derivada da viscosidade do óleo em relação à fração molar de um componente na fase gasosa é nula. Assim, para pressão de fluxo constante no poço:

$$\frac{\partial F}{\partial y_{n_i}} = 0 . \quad (A.10.13)$$

2º caso : considerando a vazão de gás na superfície ( $q_{g_s}$ ) uma constante, a expressão da derivada da vazão de óleo no reservatório em relação à  $y_{n_i}$  é obtida de forma similar à derivada da vazão de óleo em relação à pressão:

$$q_{o_i} = IP \frac{k_{ro_i}}{\mu_{o_i}} (P_i - P_{wf_i}) , \quad (A.1.18)$$

onde, conforme demonstrado na Seção 3.6, tem-se para vazão de gás na superfície constante:

$$(P - P_{wf}) = \frac{q_{g_s} \rho_{g_s}}{G_s} \frac{1}{IP \left[ \rho_o \frac{k_{ro}}{\mu_o} + \rho_g \frac{k_{rg}}{\mu_g} \right]} . \quad (3.6.17)$$

Substituindo-se as definições de S e R (Equações A.1.19 e A.1.20) na Equação 3.6.17 e esta na Equação A.1.18, obtém-se, após a derivação:

$$\frac{\partial q_{o_i}}{\partial y_{n_i}} = \frac{-IP k_{ro_i}}{\mu_{o_i}} \frac{S}{R^2} \frac{\partial R}{\partial y_{n_i}} , \quad (A.10.14)$$

onde,

$$\frac{\partial R}{\partial y_{n_i}} = IP \frac{k_{rg_i}}{\mu_{g_i}} \left( \frac{\partial \rho_{g_i}}{\partial y_{n_i}} - \frac{\rho_{g_i}}{\mu_{g_i}} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial y_{n_i}} \right). \quad (\text{A.10.15})$$

Substituindo-se as Equações A.10.14 e A.10.15 na Equação A.10.11, obtém-se a derivada do termo  $F$  em relação à  $y_{n_i}$ , para o caso em que se deseja fixar a vazão de gás na superfície. Se for necessário fixar-se a vazão de óleo na superfície, o desenvolvimento será análogo com uma única diferença para a variável  $S$ , que será expressa pela vazão, densidade e fração molar do óleo na superfície.

---

### Termo $G$

O termo fonte para fase gás tem a seguinte expressão para sua derivada em relação à fração molar de um componente  $n$  na fase gasosa:

$$\frac{\partial G}{\partial y_{n_i}} = \rho_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial q_{g_i}}{\partial y_{n_i}} + q_{g_i} y_{c_i} \frac{\partial \rho_{g_i}}{\partial y_{n_i}} + q_{g_i} \rho_{g_i} \frac{\partial y_{c_i}}{\partial y_{n_i}}. \quad (\text{A.10.16})$$

Novamente aqui torna-se necessário analisar separadamente as duas condições de contorno no poço para determinação da derivada da vazão de gás em relação à fração molar:

1º caso : considerando constante a pressão de fluxo no fundo do poço, a derivada de  $q_{g_i}$  será:

$$\frac{\partial q_{g_i}}{\partial y_{n_i}} = \frac{-q_{g_i}}{\mu_{g_i}} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial y_{n_i}}, \quad (\text{A.10.17})$$

onde,

$$q_{g_i} = IP \frac{k_{rg_i}}{\mu_{g_i}} (P_i - P_{w f_i}) . \quad (A.1.28)$$

2º caso : considerando a vazão de gás na superfície ( $q_{g_s}$ ) uma constante, a expressão da derivada da vazão de gás em relação à  $y_{n_i}$  é obtida de forma similar à derivada da vazão de óleo, resultando em:

$$\frac{\partial q_{g_i}}{\partial y_{n_i}} = \frac{-IP k_{rg_i}}{\mu_{g_i} R} S \left[ \frac{1}{\mu_{g_i}} \frac{\partial \mu_{g_i}}{\partial y_{n_i}} + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial y_{n_i}} \right], \quad (A.10.18)$$

onde S e R foram definidos pelas Equações A.1.19 e A.1.20 e  $\frac{\partial R}{\partial y_{n_i}}$  pela Equação A.10.15.

Substituindo-se a Equação A.10.18 na Equação A.10.16, obtém-se a derivada do termo  $G$  em relação à  $y_{n_i}$  para o caso em que se deseja fixar a vazão de gás na superfície. Se for necessário fixar-se a vazão de óleo na superfície, o desenvolvimento será análogo com uma única diferença para a variável S, que será expressa pela vazão, densidade e fração molar do óleo na superfície.

### A.11 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Fração Molar do Componente $n$ na Fase Gasosa no Bloco $i+1$ ( $y_{n_{i+1}}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivações das equações de fluxo em relação à fração molar do  $n$ -ésimo componente na fase gasosa, no bloco  $i+1$ . Estas derivadas irão compor as colunas de ordem  $2n$  de cada matriz constituinte da diagonal superior da matriz Jacobiana. Os termos  $A, B, C, D, E, F$  e  $G$  são os mesmos definidos anteriormente.

O termo *A* refere-se ao fluxo de óleo através de uma fronteira. Somente propriedades do óleo são avaliadas neste termo e, conforme discutido na Seção A.10, a derivada de qualquer propriedade do óleo em relação à fração molar de um componente na fase gasosa será nula.

$$\frac{\partial A}{\partial y_{n_{i+1}}} = 0 . \quad (\text{A.11.1})$$


---

### Termo *B*

A derivada do termo *B* em relação à fração molar do componente na fase gasosa, pelo mesmo motivo discutido no parágrafo anterior, também será nula. Além disso, as propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto, como o termo *B* é avaliado na fronteira entre os blocos *i* e *i*-1, sua derivada em relação à variável primária no bloco *i*+1 será nula:

$$\frac{\partial B}{\partial y_{n_{i+1}}} = 0 . \quad (\text{A.11.2})$$


---

### Termo *C*

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial y_{n_{i+1}}} &= \Phi_{g_{i+\frac{1}{2}}} (1-W) \left( T_{g_{i+1}} \frac{\partial y_{c_{i+1}}}{\partial y_{n_{i+1}}} + y_{c_{i+1}} \frac{\partial T_{g_{i+1}}}{\partial y_{n_{i+1}}} \right) + \\ &+ \left[ (T_g y_c)_i W + (T_g y_c)_{i+1} (1-W) \right] \left[ \frac{\partial P c_{i+1}}{\partial y_{n_{i+1}}} - (1-W)(D_{i+1} - D_i) \frac{\partial \gamma_{g_{i+1}}}{\partial y_{n_{i+1}}} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.11.3})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i+\frac{1}{2}}} = (P c_{i+1} - P c_i) + (P_{i+1} - P_i) - \gamma_{g_{i+1}} (D_{i+1} - D_i) . \quad (\text{A.11.4})$$


---

### Termo *D*

O termo  $D$  representa o fluxo de gás através da fronteira entre o bloco  $i-1$  e o bloco  $i$ . As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à fração molar no bloco  $i+1$  será nula:

$$\frac{\partial D}{\partial y_{n_{i+1}}} = 0 . \quad (\text{A.11.5})$$


---

### Termos $E$ , $F$ e $G$

Os termos  $E$ ,  $F$  e  $G$  são definidos no próprio bloco  $i$ ; desta forma, suas derivadas em relação à  $y_n$  no bloco  $i+1$  serão nulas :

$$\frac{\partial E}{\partial y_{n_{i+1}}} = \frac{\partial F}{\partial y_{n_{i+1}}} = \frac{\partial G}{\partial y_{n_{i+1}}} = 0 . \quad (\text{A.11.6})$$

## A.12 Derivadas dos Termos da Equação de Fluxo em Relação à Fração Molar do Componente $n$ na Fase Gasosa no Bloco $i-1$ ( $y_{n_{i-1}}$ )

Nesta seção serão apresentadas as derivações das equações de fluxo em relação à fração molar do  $n$ -ésimo componente na fase gasosa, no bloco  $i-1$ . Estas derivadas irão compor as colunas de ordem  $2n$  de cada matriz constituinte da diagonal inferior da matriz Jacobiana. Os termos  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$ ,  $F$  e  $G$  são os mesmos definidos anteriormente.

---

### Termo $A$

O termo  $A$  refere-se ao fluxo de óleo através de uma fronteira. Somente propriedades do óleo são avaliadas neste termo e, conforme discutido na Seção A.10, a derivada de qualquer propriedade do óleo em relação à fração molar de um componente na fase gasosa será nula.

Além disso, as propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto, como o termo  $A$  é avaliado na fronteira entre os blocos  $i$  e  $i+1$ , sua derivada em relação à variável primária no bloco  $i-1$  será nula:

$$\frac{\partial A}{\partial y_{n_{i-1}}} = 0 . \quad (\text{A.12.1})$$


---

### **Termo B**

O termo  $B$  refere-se ao fluxo de óleo através da fronteira entre os blocos  $i$  e  $i-1$ . Somente propriedades do óleo são avaliadas neste termo e, conforme discutido na Seção A.10, a derivada de qualquer propriedade do óleo em relação à fração molar de um componente na fase gasosa será nula, portanto:

$$\frac{\partial B}{\partial y_{n_{i-1}}} = 0 . \quad (\text{A.12.2})$$


---

### **Termo C**

O termo  $C$  representa o fluxo de gás através da fronteira entre o bloco  $i+1$  e o bloco  $i$ . As propriedades de fronteira só poderão ser definidas nos blocos à montante ou à jusante da interface considerada, portanto a derivada deste termo em relação à fração molar no bloco  $i-1$  será nula:

$$\frac{\partial C}{\partial y_{n_{i-1}}} = 0 . \quad (\text{A.12.3})$$


---

### **Termo D**

$$\frac{\partial D}{\partial y_{n_{i-1}}} = \Phi_{g_{i-1}} W \left( T_{g_{i-1}} \frac{\partial y_{c_{i-1}}}{\partial y_{n_{i-1}}} + y_{c_{i-1}} \frac{\partial T_{g_{i-1}}}{\partial y_{n_{i-1}}} \right) + \left[ (T_g y_c)_i (1-W) + (T_g y_c)_{i-1} W \right] \left[ - \frac{\partial P c_{i-1}}{\partial y_{n_{i-1}}} - W(D_i - D_{i-1}) \frac{\partial \gamma_{g_{i-1}}}{\partial y_{n_{i-1}}} \right], \quad (\text{A.12.4})$$

onde,

$$\Phi_{g_{i-1}} = (P c_i - P c_{i-1}) + (P_i - P_{i-1}) - \gamma_{g_{i-1}} (D_i - D_{i-1}). \quad (\text{A.12.5})$$


---

### Termos $E$ , $F$ e $G$

Os termos  $E$ ,  $F$  e  $G$  são definidos no próprio bloco  $i$ ; desta forma, suas derivadas em relação à  $y_n$  no bloco  $i-1$  serão nulas:

$$\frac{\partial E}{\partial y_{n_{i-1}}} = \frac{\partial F}{\partial y_{n_{i-1}}} = \frac{\partial G}{\partial y_{n_{i-1}}} = 0. \quad (\text{A.12.6})$$

## Apêndice B

### Derivadas das Transmissibilidades

Este apêndice trata das derivações das transmissibilidades ao óleo e ao gás nas fronteiras dos blocos em relação às variáveis primárias do sistema. As derivadas das densidades molares, viscosidades e permeabilidades relativas, as quais são referenciadas neste apêndice, estão determinadas nos apêndices seguintes.

#### B.1 Derivadas das Transmissibilidades em Relação à Pressão

A transmissibilidade à fase  $p$  nas fronteiras de uma célula é dada pela relação:

$$T_{p,i\pm\frac{1}{2}} = \left( \frac{A \rho_p k k_{rp}}{\mu_p \Delta x} \right)_{i\pm\frac{1}{2}} . \quad (4.1.2)$$

Sabendo-se que na Equação 4.1.2 apenas a densidade e a viscosidade são funções da pressão, a derivada em relação à esta variável será:

$$\frac{\partial T_p}{\partial P} = \frac{A k k_{rp}}{\Delta x} \frac{\partial}{\partial P} \left( \frac{\rho_p}{\mu_p} \right) = \frac{A k k_{rp}}{\Delta x} \left( \frac{1}{\mu_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial P} - \frac{\rho_p}{\mu_p^2} \frac{\partial \mu_p}{\partial P} \right), \quad (B.1.1)$$

$$\frac{\partial T_p}{\partial P} = T_p \left( \frac{1}{\rho_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial P} - \frac{1}{\mu_p} \frac{\partial \mu_p}{\partial P} \right). \quad (B.1.2)$$

A Equação B.1.2 é válida para ambas as fases. As derivadas da densidade e viscosidade em relação à pressão serão determinadas nos apêndices seguintes.

## B.2 Derivadas das Transmissibilidades em Relação à Saturação de Gás

Derivando-se a transmissibilidade ao óleo em relação à saturação de gás, obtém-se :

$$\frac{\partial T_o}{\partial S_g} = \frac{k A}{\Delta x} \frac{\rho_o}{\mu_o} \frac{\partial k_{ro}}{\partial S_g} . \quad (\text{B.2.1})$$

Para a transmissibilidade ao gás, a expressão se torna mais complexa, pois a densidade e viscosidade do gás podem ser derivadas em relação à saturação de gás utilizando-se a equação de pressão capilar e a regra da cadeia, conforme será mostrado adiante. As derivadas da permeabilidade relativa ao óleo e ao gás em relação à saturação são obtidas das tabelas de permeabilidade relativa disponíveis. A derivada da transmissibilidade ao gás em relação à saturação de gás será dada por:

$$\frac{\partial T_g}{\partial S_g} = \frac{k A}{\Delta x} \left( \frac{1}{\mu_g} \frac{\partial (\rho_g k_{rg})}{\partial S_g} - \frac{\rho_g k_{rg}}{\mu_g^2} \frac{\partial \mu_g}{\partial S_g} \right), \quad (\text{B.2.2})$$

realizando a derivada do produto, após algumas simplificações obtém-se:

$$\frac{\partial T_g}{\partial S_g} = \frac{k A}{\Delta x} \frac{\rho_g k_{rg}}{\mu_g} \left( \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial \rho_g}{\partial S_g} + \frac{1}{k_{rg}} \frac{\partial k_{rg}}{\partial S_g} - \frac{1}{\mu_g} \frac{\partial \mu_g}{\partial S_g} \right). \quad (\text{B.2.3})$$

## B.3 Derivadas das Transmissibilidades em Relação à Composição

Finalmente resta determinar as derivadas da transmissibilidade em relação às frações molares de um componente  $n$  nas fases óleo e gás:

$$\frac{\partial T_o}{\partial x_n} = \frac{A k k_{ro}}{\Delta x} \frac{\partial}{\partial x_n} \left( \frac{\rho_o}{\mu_o} \right) = \frac{A k k_{ro}}{\Delta x} \left( \frac{1}{\mu_o} \frac{\partial \rho_o}{\partial x_n} - \frac{\rho_o}{\mu_o^2} \frac{\partial \mu_o}{\partial x_n} \right), \quad (\text{B.3.1})$$

$$\frac{\partial T_o}{\partial x_n} = \frac{A k k_{ro}}{\Delta x} \frac{\rho_o}{\mu_o} \left( \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial \rho_o}{\partial x_n} - \frac{1}{\mu_o} \frac{\partial \mu_o}{\partial x_n} \right). \quad (\text{B.3.2})$$

Realizando desenvolvimento análogo para a transmissibilidade ao gás:

$$\frac{\partial T_g}{\partial y_n} = \frac{A k k_{rg}}{\Delta x} \frac{\rho_g}{\mu_g} \left( \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial \rho_g}{\partial y_n} - \frac{1}{\mu_g} \frac{\partial \mu_g}{\partial y_n} \right), \quad (\text{B.3.3})$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial x_n} = \frac{A k k_{rg}}{\Delta x} \frac{\rho_g}{\mu_g} \left( \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial \rho_g}{\partial x_n} - \frac{1}{\mu_g} \frac{\partial \mu_g}{\partial x_n} \right). \quad (\text{B.3.4})$$

As derivadas da densidade e viscosidade em relação à composição serão determinadas nos apêndices seguintes.

## Apêndice C

### Derivadas das Densidades e Pesos Específicos

#### C.1 Derivadas das Densidades em Relação à Pressão

Partindo-se da equação que define a densidade molar de uma fase, a qual já foi discutida no Capítulo 5:

$$\rho_p = \frac{1}{v} = \frac{P}{z_p R T} , \quad (5.5.1)$$

realizando sua derivação em relação à pressão, obteremos uma equação que será válida para ambas as fases:

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial P} = \frac{1}{z_p R T} - \frac{P}{z_p^2 R T} \frac{\partial z_p}{\partial P} , \quad (C.1.1)$$

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial P} = \frac{1}{z_p R T} \left( 1 - \frac{P}{z_p} \frac{\partial z_p}{\partial P} \right) . \quad (C.1.2)$$

A derivada da compressibilidade da fase em relação à pressão será determinada posteriormente.

#### C.2 Derivadas das Densidades em Relação à Composição

Procedendo a derivação da Equação 5.5.1 em relação à composição, obtém-se para as fases óleo e gás respectivamente:

$$\frac{\partial \rho_o}{\partial x_n} = - \frac{P}{z_o^2 R T} \frac{\partial z_o}{\partial x_n}, \quad (C.2.1)$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial y_n} = - \frac{P}{z_g^2 R T} \frac{\partial z_g}{\partial y_n}. \quad (C.2.2)$$

A derivada da densidade molar do gás em relação à fração molar do componente na fase líquida será obtida pela regra da cadeia (ver Seção 3.3):

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial x_n} = \frac{\partial \rho_g}{\partial P_g} \frac{\partial P_g}{\partial x_n} = \frac{\partial \rho_g}{\partial P} \frac{\partial P_c}{\partial x_n}. \quad (C.2.3)$$

As Equações C.2.1 a C.2.3 estão em função das derivadas da compressibilidade e pressão capilar em relação à composição, as quais serão determinadas nos apêndices seguintes.

### C.3 Derivadas das Densidades em Relação à Saturação de Gás

A derivada da densidade do gás em relação à variável primária saturação de gás é obtida pela regra da cadeia, expressando-se a pressão na fase gás em função da pressão capilar:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial S_g} = \frac{\partial \rho_g}{\partial P_g} \frac{\partial P_g}{\partial S_g} = \frac{\partial \rho_g}{\partial P_g} \frac{\partial P_c}{\partial S_g}. \quad (C.3.1)$$

A derivada da densidade do óleo em relação à saturação de gás será nula, pois pressão no óleo e saturação de gás são variáveis primárias.

### C.4 Derivadas dos Pesos Específicos

O cálculo das derivadas do peso específico é feito diretamente a partir das derivadas da densidade molar. A relação entre estas duas propriedades já foi vista no Capítulo 5:

$$\gamma_o = \rho_o M_o g , \text{ onde } M_o = \sum_{i=1}^n x_i M_i ; \quad (5.5.2)$$

$$\gamma_g = \rho_g M_g g , \text{ onde } M_g = \sum_{i=1}^n y_i M_i . \quad (5.5.3)$$

Derivando as equações acima em relação à pressão resulta em:

$$\frac{\partial \gamma_o}{\partial P} = M_o g \frac{\partial \rho_o}{\partial P} , \quad (C.4.1)$$

$$\frac{\partial \gamma_g}{\partial P} = M_g g \frac{\partial \rho_g}{\partial P} . \quad (C.4.2)$$

A derivada do peso específico da fase gás em relação à saturação de gás será:

$$\frac{\partial \gamma_g}{\partial S_g} = M_g g \frac{\partial \rho_g}{\partial S_g} . \quad (C.4.3)$$

Em relação às frações molares, as derivadas dos pesos específicos não surgem diretamente das derivadas das densidades molares, uma vez que o peso molecular da fase é função de sua composição. Assim, o desenvolvimento será:

$$\frac{\partial \gamma_o}{\partial x_n} = M_o g \frac{\partial \rho_o}{\partial x_n} + \rho_o g \frac{\partial M_o}{\partial x_n} , \quad (C.4.4)$$

o que resulta em:

$$\frac{\partial \gamma_o}{\partial x_n} = M_o g \frac{\partial \rho_o}{\partial x_n} + \rho_o g \sum_{c=1}^n M_c \frac{\partial x_c}{\partial x_n} . \quad (C.4.5)$$

Analogamente para fase gás:

$$\frac{\partial \gamma_g}{\partial y_n} = M_g g \frac{\partial \rho_g}{\partial y_n} + \rho_g g \sum_{c=1}^n M_c \frac{\partial y_c}{\partial y_n}, \quad (\text{C.4.6})$$

$$\frac{\partial \gamma_g}{\partial x_n} = M_g g \frac{\partial \rho_g}{\partial x_n}. \quad (\text{C.4.7})$$

As derivadas  $\frac{\partial x_c}{\partial x_n}$  e  $\frac{\partial y_c}{\partial y_n}$  serão determinadas no Apêndice D.

## Apêndice D

### Derivadas das Frações Molares dos Componentes ( $x_c, y_c$ )

As frações molares do primeiro componente foram expressas em função das frações molares dos demais componentes, as quais foram estabelecidas como variáveis fundamentais, juntamente com a pressão na fase óleo e a saturação da fase gás :

$$x_1 = 1 - \sum_{i=2}^{n_c} x_i , \quad (3.5.2)$$

$$y_1 = 1 - \sum_{i=2}^{n_c} y_i . \quad (3.5.3)$$

As frações molares  $x_c, y_c$  (para  $c = 2, 3, \dots, n_c$ ), definidas como variáveis primárias, obrigatoriamente terão derivadas nulas em relação à pressão e saturação, o mesmo podendo-se mostrar para  $x_1$  e  $y_1$ , haja vista as Equações 3.5.2 e 3.5.3 que as relacionam. Sendo  $x_i$  e  $y_i$  as frações molares de um componente  $i$  respectivamente nas fases líquida e gasosa, tem-se:

$$\frac{\partial y_c}{\partial y_n} = 1 \quad \text{e} \quad \frac{\partial x_c}{\partial x_n} = 1 \quad \text{quando } c = n \quad \text{e} \quad c \neq 1 \quad (D.1)$$

$$\frac{\partial y_c}{\partial y_n} = -1 \quad \text{e} \quad \frac{\partial x_c}{\partial x_n} = -1 \quad \text{quando } c = 1 \quad \text{e} \quad n = 2, 3, \dots, n_c \quad (D.2)$$

$$\frac{\partial y_c}{\partial y_n} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial x_c}{\partial x_n} = 0 \quad \text{quando } c \neq n \quad \text{e} \quad c \neq 1 \quad (D.3)$$

## **Apêndice E**

### **Derivadas do Fator de Compressibilidade ( $Z$ )**

Neste apêndice serão determinadas as derivadas dos fatores de compressibilidade das fases óleo e gás em relação às variáveis primárias do sistema.

#### **E.1 Derivada do Fator de Compressibilidade em Relação à Pressão**

A equação de Peng e Robinson em sua forma cúbica será utilizada na obtenção das derivadas do fator de compressibilidade para as fases óleo e gás em relação à pressão e composição:

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 2B - 3B^2)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0, \quad (5.2.8)$$

onde  $A$  e  $B$  são funções da pressão e composições, conforme visto no capítulo 5:

$$A = \frac{a_r P}{R^2 T^2}, \quad (5.2.9)$$

$$B = \frac{bP}{RT}. \quad (5.2.10)$$

Pela regra da cadeia, a derivada da compressibilidade em relação à pressão pode ser expressa por:

$$\frac{\partial z}{\partial P} = \frac{\partial z}{\partial A} \frac{\partial A}{\partial P} + \frac{\partial z}{\partial B} \frac{\partial B}{\partial P} . \quad (\text{E.1.1})$$

Derivando a Equação 5.2.8 em relação à  $A$  e explicitando  $\frac{\partial Z}{\partial A}$ , obtém-se:

$$\frac{\partial z}{\partial A} = \frac{B - z}{3z^2 + 2(B-1)z + A - 2B - 3B^2} , \quad (\text{E.1.2})$$

analogamente para  $B$ :

$$\frac{\partial z}{\partial B} = \frac{-z^2 + 2(3B+1)z + A - 2B - 3B^2}{3z^2 + 2(B-1)z + A - 2B - 3B^2} . \quad (\text{E.1.3})$$

Derivando-se as Equações 5.2.9 e 5.2.10 em relação a pressão, resulta:

$$\frac{\partial A}{\partial P} = \frac{a_T}{R^2 T^2} , \quad (\text{E.1.4})$$

$$\frac{\partial B}{\partial P} = \frac{b}{RT} . \quad (\text{E.1.5})$$

Substituindo-se as Equações E.1.2 a E.1.5 na Equação E.1.1 fica determinada a derivada da compressibilidade em relação à pressão. A solução obtida é aplicável tanto à compressibilidade do óleo quanto à do gás, fazendo-se as devidas substituições.

## E.2 Derivada do Fator de Compressibilidade em Relação à Composição

Representando-se a fração molar de um componente  $n$  na fase líquida ou gasosa por  $y_n$ , a derivada da compressibilidade em relação à composição, analogamente à pressão, pode ser expressa por:

$$\frac{\partial z}{\partial y_n} = \frac{\partial z}{\partial A} \frac{\partial A}{\partial y_n} + \frac{\partial z}{\partial B} \frac{\partial B}{\partial y_n} . \quad (\text{E.2.1})$$

Resta determinar a derivada de  $A$  e  $B$  em relação à fração molar do componente  $n$ :

$$\frac{\partial A}{\partial y_n} = \frac{P}{R^2 T^2} \frac{\partial a_T}{\partial y_n} , \quad (\text{E.2.2})$$

$$\frac{\partial A}{\partial y_n} = \frac{P}{R^2 T^2} \frac{\partial}{\partial y_n} \left[ \sum_{i=1}^{n_c} \sum_{j=1}^{n_c} y_i y_j (a_{T_i} a_{T_j})^{0.5} (1 - \delta_{ij}) \right] . \quad (\text{E.2.3})$$

Para realizar a derivação acima é importante lembrar que (apêndice D):

$$y_1 = 1 - \sum_{i=2}^{n_c} y_i ; \quad (\text{E.2.4})$$

$$\frac{\partial y_c}{\partial y_n} = 1 \quad \text{para } c = n \text{ e } c \neq 1 ; \quad (\text{E.2.5})$$

$$\frac{\partial y_c}{\partial y_n} = -1 \quad \text{para } c = 1 \text{ e } n = 2, 3, \dots, n_c ; \quad (\text{E.2.6})$$

$$\frac{\partial y_c}{\partial y_n} = 0 \quad \text{para } c \neq n \text{ e } c \neq 1 . \quad (\text{E.2.7})$$

Sabendo-se que  $(a_{T_i} a_{T_j})^{0.5} (1 - \delta_{ij})$  é constante para cada par de componentes e expandindo-se os somatórios da equação E.2.3, após extenso desenvolvimento a derivada resultará em:

$$\frac{\partial A}{\partial y_n} = \frac{2P}{R^2 T^2} \sum_{j=1}^{n_c} y_j \left[ (a_{T_n} a_{T_j})^{0.5} (1 - \delta_{nj}) - (a_{T_1} a_{T_j})^{0.5} (1 - \delta_{1j}) \right] . \quad (\text{E.2.8})$$

Procedendo de forma análoga para a derivada de  $B$ :

$$\frac{\partial B}{\partial y_n} = \frac{P}{R T} \frac{\partial b}{\partial y_n} = \frac{P}{R T} \frac{\partial}{\partial y_n} \left( \sum_{j=1}^{n_c} y_j b_j \right), \quad (\text{E.2.9})$$

$$\frac{\partial B}{\partial y_n} = \frac{P}{R T} (b_n - b_1). \quad (\text{E.2.10})$$

Substituindo-se as Equações E.1.2, E.1.3, E.2.8 e E.2.10 na Equação E.2.1 fica determinada a derivada da compressibilidade em relação à composição. A solução obtida é aplicável tanto à compressibilidade do óleo quanto à do gás, fazendo-se as devidas substituições.

## Apêndice F

### Derivadas das Viscosidades

#### F.1 Derivada da Viscosidade em Relação à Pressão

O cálculo das viscosidades pela correlação de Lohrenz, conforme visto no Capítulo 5, resulta na seguinte expressão:

$$\mu_p[\text{cp}] = \mu_p^* + \frac{(0,1023 + 0,023364 \rho_r + 0,058533 \rho_r^2 - 0,040758 \rho_r^3 + 0,0093324 \rho_r^4)^4 - 0,0001}{\xi}, \quad (5.6.8)$$

onde,

$$\mu_p^* = \frac{\sum_{i=1}^{n_c} (y_i \mu_i^* \sqrt{M_i})}{\sum_{i=1}^{n_c} (y_i \sqrt{M_i})}, \quad (5.6.5)$$

com  $\mu_i^* = f(T, T_{c_i}, P_{c_i}, M_i)$ ,

$$\xi = \frac{\left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i T_{c_i} \right)^{\frac{1}{6}}}{\left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i M_i \right)^{\frac{1}{2}} \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i P_{c_i} \right)^{\frac{2}{3}}} \quad (5.6.9)$$

As frações molares de cada componente, na fase óleo ou na fase gás, são aqui representadas pela fração molar genérica  $y_i$ .

Representando as constantes da Equação 5.6.8 respectivamente por  $a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5$  e derivando esta equação em relação à pressão:

$$\frac{\partial \mu_p}{\partial P} = \frac{4}{\xi} \left[ (a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4)^3 \cdot (a_1 + 2a_2 \rho_r + 3a_3 \rho_r^2 + 4a_4 \rho_r^3) \cdot \left( \frac{\partial \rho_r}{\partial P} \right) \right], \quad (\text{F.1.1})$$

onde,

$$\frac{\partial \rho_r}{\partial P} = \frac{\partial}{\partial P} \left( \frac{\rho}{\rho'_c} \right) = \frac{1}{\rho'_c} \frac{\partial \rho}{\partial P} = \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i v_{c_i} \right) \frac{\partial \rho}{\partial P}, \quad (\text{F.1.2})$$

$\rho_r$  e  $\rho'_c$ , definidos no capítulo 5, são respectivamente a densidade reduzida e a densidade pseudo crítica e  $v_{c_i} \left[ \text{pe}^3 / \text{lb mol} \right]$  é o volume crítico do componente  $i$ .

A expressão para cálculo da derivada da densidade em relação a pressão já foi determinada anteriormente. O método de Lohrenz exige que esta derivada seja calculada em  $\text{lbmol}/\text{pe}^3$ .

## F.2 Derivada da Viscosidade em Relação à Composição

Derivando a Equação 5.6.8 em relação à composição, obtém-se a seguinte expressão geral:

$$\frac{\partial \mu}{\partial y_n} = \frac{\partial \mu^*}{\partial y_n} + \frac{\xi \frac{\partial R}{\partial y_n} - R \frac{\partial \xi}{\partial y_n}}{(\xi)^2}, \quad (\text{F.2.1})$$

onde  $R$  foi aqui definido como:

$$R = (a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4)^4 - a_5. \quad (\text{F.2.2})$$

A partir da Equação 5.6.5, podemos determinar o primeiro termo da derivada da viscosidade em relação à composição:

$$\frac{\partial \mu_p^*}{\partial y_n} = \frac{\partial}{\partial y_n} \left( \frac{\sum_{i=1}^{n_e} (y_i \mu_i \sqrt{M_i})}{\sum_{i=1}^{n_e} (y_i \sqrt{M_i})} \right), \quad (\text{F.2.3})$$

$$\frac{\partial \mu_p^*}{\partial y_n} = \frac{(\mu_n \sqrt{M_n} - \mu_1 \sqrt{M_1}) \sum_{i=1}^{n_e} (y_i \sqrt{M_i}) - (\sqrt{M_n} - \sqrt{M_1}) \sum_{i=1}^{n_e} (y_i \mu_i \sqrt{M_i})}{\left[ \sum_{i=1}^{n_e} (y_i \sqrt{M_i}) \right]^2}. \quad (\text{F.2.4})$$

Para determinação do segundo termo da derivada representada em F.2.1, procede-se à determinação da derivada de  $R$  em relação à fração molar:

$$\frac{\partial R}{\partial y_n} = 4 (a_0 + a_1 \rho_r + a_2 \rho_r^2 + a_3 \rho_r^3 + a_4 \rho_r^4)^3 \cdot (a_1 + 2a_2 \rho_r + 3a_3 \rho_r^2 + 4a_4 \rho_r^3) \cdot \left( \frac{\partial \rho_r}{\partial y_n} \right), \quad (\text{F.2.5})$$

onde,

$$\frac{\partial \rho_r}{\partial y_n} = \frac{\partial}{\partial y_n} \left( \frac{\rho}{\rho'_c} \right) = \frac{\partial}{\partial y_n} \left( \rho \sum_{i=1}^{n_e} (y_i v_{ci}) \right), \quad (\text{F.2.6})$$

$$\frac{\partial \rho_r}{\partial y_n} = \left( \frac{\partial \rho}{\partial y_n} \right) \left( \sum_{i=1}^{n_c} (y_i v_{ci}) \right) + \rho (v_{cn} - v_{c1}). \quad (\text{F.2.7})$$

A derivada da densidade em relação à fração molar já foi deduzida anteriormente.

Para finalizar, resta d terminar a derivada do parâmetro  $\xi$  em relação à composição:

$$\frac{\partial \xi}{\partial y_n} = \frac{\partial}{\partial y_n} \left[ \frac{\left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i T_{ci} \right)^{\frac{1}{6}}}{\left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i M_i \right)^{\frac{1}{2}} \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i P_{ci} \right)^{\frac{2}{3}}} \right]. \quad (\text{F.2.8})$$

A derivada acima parece bastante complexa; porém, trata-se da derivada do quociente de uma função pelo produto de duas outras. Para simplificar, definem-se as seguintes funções:

$$t = \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i T_{ci} \right)^{\frac{1}{6}}, \quad (\text{F.2.9})$$

$$m = \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i M_i \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{F.2.10})$$

$$p = \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i P_{ci} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (\text{F.2.11})$$

A derivada, então, poderá ser representada por:

$$\frac{\partial}{\partial y_n} \left( \frac{t}{m p} \right) = \frac{\frac{\partial t}{\partial y_n} m p - t \left( p \frac{\partial m}{\partial y_n} + m \frac{\partial p}{\partial y_n} \right)}{(m p)^2}. \quad (\text{F.2.12})$$

Resolvendo separadamente as derivadas das funções t, m e p, obtém-se:

$$\frac{\partial t}{\partial y_n} = \frac{\partial}{\partial y_n} \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i T_{c_i} \right)^{\frac{1}{6}} = \frac{T_{c_n} - T_{c_1}}{6} \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i T_{c_i} \right)^{-\frac{5}{6}}, \quad (\text{F.2.13})$$

$$\frac{\partial m}{\partial y_n} = \frac{\partial}{\partial y_n} \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i M_i \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{M_n - M_1}{2} \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i M_i \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (\text{F.2.14})$$

$$\frac{\partial p}{\partial y_n} = \frac{\partial}{\partial y_n} \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i P_{c_i} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{P_{c_n} - P_{c_1}}{1,5} \left( \sum_{i=1}^{n_c} y_i P_{c_i} \right)^{-\frac{1}{3}}. \quad (\text{F.2.15})$$

Substituindo as Equações F.2.9 a F.2.11 e F.2.13 a F.2.15 na Equação F.2.12, obtém-se a solução da derivada em F.2.8. Fica desta forma determinada a derivada da viscosidade de uma fase em relação à fração molar de um componente.

As expressões obtidas nesta Seção permitem a determinação da derivada da viscosidade de uma fase em relação à fração molar de um componente nesta mesma fase. Para a viscosidade do gás, no entanto, a consideração da pressão capilar como função da tensão interfacial permite a determinação de sua derivada em relação a fração molar de um componente na fase líquida através da regra da cadeia:

$$\frac{\partial \mu_g}{\partial x_n} = \frac{\partial \mu_g}{\partial P_g} \frac{\partial P_g}{\partial x_n}. \quad (\text{F.2.16})$$

### F.3 Derivada da Viscosidade em Relação à Saturação de Gás

Resta apenas a derivada da viscosidade do gás em relação à variável primária saturação de gás:

$$\frac{\partial \mu_g}{\partial S_g} = \frac{\partial \mu_g}{\partial P_g} \frac{\partial P_g}{\partial S_g} . \quad (\text{F.3.1})$$

Expressando a pressão na fase gás em função da pressão capilar e derivando em relação à saturação de gás, obtém-se:

$$\frac{\partial \mu_g}{\partial S_g} = \frac{\partial \mu_g}{\partial P_g} \frac{\partial P_c}{\partial S_g} . \quad (\text{F.3.2})$$

A derivada da pressão capilar em relação à saturação de gás é obtida da curva de pressão capilar disponível.

## Apêndice G

### Derivadas da Pressão Capilar

Foi visto na construção do modelo matemático (Capítulo 3) que a pressão capilar é uma função da tensão interfacial e da saturação de gás. Foi assumido que a curva de pressão capilar informada ( $Pc_{go}^i$ ) corresponde à tensão interfacial inicial ( $\sigma_o$ ). Para qualquer outra tensão interfacial  $\sigma$ , o valor da pressão capilar gás-óleo deverá ser corrigido da seguinte forma:

$$Pc_{go} = Pc_{go}^i \frac{\sigma}{\sigma_o} . \quad (3.3.3)$$

Da equação acima obtém-se as derivadas da pressão capilar em relação às variáveis primárias:

$$\frac{\partial Pc_{go}}{\partial P} = \frac{Pc_{go}^i}{\sigma_o} \frac{\partial \sigma}{\partial P} , \quad (G.1)$$

$$\frac{\partial Pc_{go}}{\partial S_g} = \frac{\sigma}{\sigma_o} \frac{\partial Pc_{go}^i}{\partial S_g} , \quad (G.2)$$

$$\frac{\partial Pc_{go}}{\partial x_n} = \frac{Pc_{go}^i}{\sigma_o} \frac{\partial \sigma}{\partial x_n} , \quad (G.3)$$

$$\frac{\partial P c_{go}}{\partial y_n} = \frac{P c_{go}^i}{\sigma_o} \frac{\partial \sigma}{\partial y_n}. \quad (G.4)$$

Pela correlação de Macleod-Sugden foi visto que a tensão interfacial é dada por:

$$\sigma^{\frac{1}{4}} = \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} (\rho_o x_i - \rho_g y_i), \quad (3.3.2)$$

onde:  $\sigma$  é a tensão interfacial da mistura em d/cm,  $P_{ch_i}$  é o “parachor” do componente  $i$ ,  $x_i$  e  $y_i$  são as frações molares do componente  $i$  nas fases líquido e gás,  $\rho_o$  e  $\rho_g$  são as densidades molares das fases em gmol/cm<sup>3</sup>.

Derivando-se a Equação 3.3.2 em relação a cada uma das variáveis primárias, obtém-se :

$$\frac{\partial \sigma}{\partial P} = 4 \left[ \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} (\rho_o x_i - \rho_g y_i) \right]^3 \left[ \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} \left( \frac{\partial \rho_o}{\partial P} x_i - \frac{\partial \rho_g}{\partial P} y_i \right) \right], \quad (G.5)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x_n} = 4 \left[ \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} (\rho_o x_i - \rho_g y_i) \right]^3 \left[ \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} \left( \frac{\partial \rho_o}{\partial x_n} x_i + \frac{\partial x_i}{\partial x_n} \rho_o \right) \right], \quad (G.6)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial y_n} = -4 \left[ \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} (\rho_o x_i - \rho_g y_i) \right]^3 \left[ \sum_{i=1}^{n_c} P_{ch_i} \left( \frac{\partial \rho_g}{\partial y_n} y_i + \frac{\partial y_i}{\partial y_n} \rho_g \right) \right]. \quad (G.7)$$

Substituindo-se as Equações G.5 a G.7 nas Equações G.1 a G.4 obtém-se as expressões finais para as derivadas da pressão capilar em relação à pressão, saturação e composições. A derivada da pressão capilar em relação à saturação de gás é obtida numericamente da tabela de pressão capilar fornecida.

## Apêndice H

### Derivadas das Equações de Equilíbrio Termodinâmico

Foi visto no Capítulo 3 que o equilíbrio termodinâmico num bloco  $i$  pode ser representado pela igualdade das fugacidades de cada componente  $c$  nas fases óleo e gás:

$$\bar{f}_{c_i} = f_{c,o} - f_{c,g} = 0 \quad , \quad (4.2.2)$$

para  $c = 1, 2, 3, \dots, n_c$  ;  $i = 1, 2, 3, \dots, n_b$ .

À exemplo das equações de fluxo, a Equação 4.2.2 será derivada em relação à cada uma das variáveis primárias; derivadas estas que constituirão as  $n_c$  últimas linhas de cada matriz constituinte da diagonal principal da matriz Jacobiana.

É importante observar que a Equação 4.2.2 não é função das variáveis das células vizinhas, sendo todas as derivadas avaliadas na própria célula  $i$ . Por este motivo, são nulos os termos correspondentes às derivadas da equação de equilíbrio termodinâmico nas matrizes que constituem as diagonais inferior e superior.

As derivadas das fugacidades em relação à pressão e à composição são obtidas a partir da expressão que define o coeficiente de fugacidade, proveniente da equação de Peng e Robinson e já apresentada na Seção 5.2:

$$\ln \varphi_j = -\ln(z-B) + (z-1) B_j^* - \frac{A}{2^{1.5} B} (A_j^* - B_j^*) \ln \left[ \frac{z+2,414 B}{z-0,414 B} \right]. \quad (5.2.11)$$

Abaixo estão transcritas algumas expressões, já apresentadas na Seção 5.2, que serão úteis no entendimento das deduções que se seguem. Nestas expressões, a fração molar do componente  $i$  na fase líquido ou gás é representada genericamente por  $y_i$ :

$$A = \frac{a_T P}{R^2 T^2}, \quad (5.2.9)$$

$$B = \frac{bP}{RT}, \quad (5.2.10)$$

$$B_j^* = \frac{b_j}{b}, \quad (5.2.12)$$

$$A_j^* = \frac{1}{a_T} \left[ 2 a_{T_j}^{0.5} \sum_i y_i a_{T_i}^{0.5} (1 - \delta_{ij}) \right], \quad (5.2.13)$$

onde,

$$b = \sum_{i=1}^{n_c} y_i b_i, \quad (5.2.2)$$

$$b_i = \Omega_b \frac{R T_{C,i}}{P_{C,i}}, \quad (5.2.3)$$

$$a_T = \sum_{i=1}^{n_c} \sum_{j=1}^{n_c} y_i y_j \left( a_{T_i} a_{T_j} \right)^{0.5} (1 - \delta_{ij}), \quad (5.2.4)$$

$$a_{T_i} = a_{C_i} \alpha_i, \quad (5.2.5)$$

$$a_{C_i} = \Omega_a \frac{R^2 T_{c_i}^2}{P_{C_i}} , \quad (5.2.6)$$

$$\alpha_i^{0.5} = 1 + (0,37464 + 1,54226 \omega_i - 0,26992 \omega_i^2) (1 - T_{r_i}^{0.5}) . \quad (5.2.7)$$

Substituindo-se a definição de coeficiente de fugacidade ( $\phi$ ), dada na Seção 5.2, na Equação 5.2.11 e rescrevendo-a para fase óleo, obtém-se:

$$\ln\left(\frac{f_{c,o}}{P x_c}\right) = -\ln(z_o - B) + (z_o - 1) \frac{b_c}{b} - \frac{A}{2^{1.5} B} \left( \frac{2 \sum_{i=1}^{n_c} x_i \alpha_{i,c}}{a_T} - \frac{b_c}{b} \right) \ln\left[\frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B}\right]. \quad (H.1)$$

Definindo-se  $E$  como a expressão:

$$E = - \frac{A}{2^{1.5} B} \left( \frac{2 \sum_{i=1}^{n_c} x_i \alpha_{i,c}}{a_T} - \frac{b_c}{b} \right) , \quad (H.2)$$

a equação logarítmica pode ser rescrita na seguinte forma:

$$\ln\left(\frac{f_{c,o}}{P x_c}\right) = -\ln(z_o - B) + (z_o - 1) \frac{b_c}{b} + E \ln\left[\frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B}\right] , \quad (H.3)$$

$$\ln\left(\frac{f_{c,o}}{P x_c}\right) - \ln\left[\frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B}\right]^E + \ln(z_o - B) = (z_o - 1) \frac{b_c}{b} . \quad (H.4)$$

Utilizando-se as propriedades dos logarítmos e explicitando a fugacidade na Equação H.4, obtém-se:

$$f_{c,o} = \frac{P x_c}{(z_o - B)} \left[ \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right]^E \exp \left[ (z_o - 1) \frac{b_c}{b} \right] . \quad (\text{H.5})$$

Para fase gás a expressão será semelhante, bastando substituir  $z_o$  e  $x_c$  por  $z_g$  e  $y_c$ .

### H.1 Derivada da Fugacidade em Relação à Pressão

Com objetivo de simplificar a representação da Equação H.5, permitindo um melhor acompanhamento das derivadas a serem desenvolvidas, definem-se as seguintes variáveis:

$$\lambda = z_o - B , \quad (\text{H.1.1})$$

$$\beta = \left[ \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right]^E , \quad (\text{H.1.2})$$

$$\eta = \exp \left[ (z_o - 1) \frac{b_c}{b} \right] ; \quad (\text{H.1.3})$$

e a Equação H.5 é rescrita como:

$$f_{c,o} = P x_c \frac{\beta \eta}{\lambda} . \quad (\text{H.1.4})$$

Procedendo-se ao cálculo da derivada da fugacidade em relação à pressão:

$$\frac{\partial f_{c,o}}{\partial P} = x_c \frac{\beta \eta}{\lambda} + P x_c \left( \frac{\frac{\partial (\beta \eta)}{\partial P} \lambda - \beta \eta \frac{\partial \lambda}{\partial P}}{\lambda^2} \right) , \quad (\text{H.1.5})$$

$$\frac{\partial f_{c,o}}{\partial P} = x_c \frac{\beta \eta}{\lambda} + \frac{P x_c}{\lambda^2} \left[ \left( \eta \frac{\partial \beta}{\partial P} + \beta \frac{\partial \eta}{\partial P} \right) \lambda - \beta \eta \frac{\partial \lambda}{\partial P} \right]. \quad (\text{H.1.6})$$

Derivando as variáveis auxiliares, obtém-se:

$$\frac{\partial \lambda}{\partial P} = \frac{\partial z_o}{\partial P} - \frac{\partial B}{\partial P}, \quad (\text{H.1.7})$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial P} = E \left( \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right)^{E-1} \frac{\partial}{\partial P} \left( \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right), \quad (\text{H.1.8})$$

onde,

$$\frac{\partial}{\partial P} \left( \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right) = \frac{(z_o - 0,414 B) \left( \frac{\partial z_o}{\partial P} + 2,414 \frac{\partial B}{\partial P} \right) - (z_o + 2,414 B) \left( \frac{\partial z_o}{\partial P} - 0,414 \frac{\partial B}{\partial P} \right)}{(z_o - 0,414 B)^2}; \quad (\text{H.1.9})$$

a derivada da terceira variável auxiliar será:

$$\frac{\partial \eta}{\partial P} = \eta \frac{b_c}{b} \frac{\partial z_o}{\partial P}. \quad (\text{H.1.10})$$

Substituindo as Equações H.1.7 a H.1.10 na Equação H.1.6 ficará determinada a derivada da fugacidade de um componente na fase óleo em relação à pressão, uma vez que as derivadas de  $z$  e  $B$  já foram determinadas no Apêndice E. A Equação H.1.6 bem como as variáveis auxiliares e derivadas serão também utilizadas para fase gasosa, substituindo-se  $z_o$  e  $x_c$  por  $z_g$  e  $y_c$ .

## H.2 Derivada da Fugacidade em Relação à Composição

As derivadas da fugacidade em relação à composição dependem das propriedades do componente 1, cujas frações molares são expressas em função das demais. O desenvolvimento a seguir será para o cálculo da derivada da fugacidade de um componente na fase líquida em relação a fração molar de um componente na fase líquida. As expressões aqui deduzidas poderão ser utilizadas na fase gasosa, bastando substituir  $z_o$  e  $x_c$  por  $z_g$  e  $y_c$ .

Partindo-se da equação da fugacidade em sua representação simplificada:

$$f_{c,o} = P x_c \frac{\beta \eta}{\lambda} , \quad (\text{H.1.4})$$

a derivada da fugacidade em relação à composição será:

$$\frac{\partial f_{c,o}}{\partial x_n} = P \frac{\beta \eta}{\lambda} \frac{\partial x_c}{\partial x_n} + P x_c \frac{\partial}{\partial x_n} \left( \frac{\beta \eta}{\lambda} \right), \quad (\text{H.2.1})$$

para  $c=1,2,\dots,n_c$  ;

$n=2,3,\dots, n_c$  ;

$$\frac{\partial f_{c,o}}{\partial x_n} = P \frac{\beta \eta}{\lambda} \frac{\partial x_c}{\partial x_n} + \frac{P x_c}{\lambda^2} \left[ \left( \eta \frac{\partial \beta}{\partial x_n} + \beta \frac{\partial \eta}{\partial x_n} \right) \lambda - \beta \eta \frac{\partial \lambda}{\partial x_n} \right]. \quad (\text{H.2.2})$$

A derivada no primeiro termo do segundo membro da Equação H.2.2 já foi vista anteriormente. Resta determinar as derivadas das variáveis auxiliares  $\lambda$ ,  $\beta$  e  $\eta$ .

A derivada da variável  $\lambda$  resulta na seguinte expressão:

$$\frac{\partial \lambda}{\partial x_n} = \frac{\partial z_o}{\partial x_n} - \frac{\partial B}{\partial x_n} . \quad (\text{H.2.3})$$

A obtenção da derivada de  $\beta$ , entretanto, não se faz de forma imediata:

$$\frac{\partial \beta}{\partial x_n} = \frac{\partial}{\partial x_n} \left( \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right)^E , \quad (\text{H.2.4})$$

onde  $z_o, B$  e  $E$  são funções da composição. Para funções quaisquer  $v$  e  $w$  de uma variável  $x$ , pode-se demonstrar, utilizando-se as propriedades dos logaritmos, que:

$$\frac{\partial v^w}{\partial x} = (v^w) (\ln v) \left( \frac{\partial w}{\partial x} \right) + (v^{w-1}) (w) \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (\text{H.2.5})$$

então, aplicando-se na Equação H.2.4 o obtido na Equação H.2.5, resulta:

$$\frac{\partial \beta}{\partial x_n} = \left( \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right)^E \ln \left( \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right) \frac{\partial E}{\partial x_n} + E \left( \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right)^{E-1} \frac{\partial}{\partial x_n} \left( \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right). \quad (\text{H.2.6})$$

Tendo sido definida:

$$E = - \frac{A}{2^{1.5} B} \left( \frac{2 \sum_{i=1}^{n_c} x_i a_{i,c}}{a_T} - \frac{b_c}{b} \right), \quad (\text{H.2})$$

sua derivada em relação à composição será dada por:

$$\frac{\partial E}{\partial x_n} = - \frac{1}{2^{1.5}} \left( \frac{2 \sum_{i=1}^{n_c} x_i a_{i,c}}{a_T} - \frac{b_c}{b} \right) \left( \frac{B \frac{\partial A}{\partial x_n} + A \frac{\partial B}{\partial x_n}}{B^2} \right) - \frac{A}{2^{1.5} B} \left[ \frac{-2 \sum_{i=1}^{n_c} (x_i a_{i,c})}{a_T^2} \frac{\partial a_T}{\partial x_n} + \frac{2}{a_T} \frac{\partial \sum_{i=1}^{n_c} (x_i a_{i,c})}{\partial x_n} + \frac{b_c}{b^2} \frac{\partial b}{\partial x_n} \right], \quad (\text{H.2.7})$$

onde,

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{n_c} (x_i a_{i,c})}{\partial x_n} = (1 - \delta_{n,c}) (a_{T_n} a_{T_c})^{0.5} - (1 - \delta_{1,c}) (a_{T_1} a_{T_c})^{0.5}. \quad (\text{H.2.8})$$

Para concluir a determinação da derivada de  $\beta$  em relação à composição, resta apenas:

$$\frac{\partial}{\partial x_n} \left( \frac{z_o + 2,414 B}{z_o - 0,414 B} \right) = \frac{(z_o - 0,414 B) \left( \frac{\partial z_o}{\partial x_n} + 2,414 \frac{\partial B}{\partial x_n} \right) - (z_o + 2,414 B) \left( \frac{\partial z_o}{\partial x_n} - 0,414 \frac{\partial B}{\partial x_n} \right)}{(z_o - 0,414 B)^2}. \quad (\text{H.2.9})$$

A derivada da terceira variável auxiliar será:

$$\frac{\partial \eta}{\partial x_n} = \frac{\partial}{\partial x_n} \exp \left[ (z_o - 1) \frac{b_c}{b} \right], \quad (\text{H.2.10})$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial x_n} = \eta \left[ (1 - z_o) \frac{b_c}{b^2} \frac{\partial b}{\partial x_n} + \frac{b_c}{b} \frac{\partial z_o}{\partial x_n} \right]. \quad (\text{H.2.11})$$

A determinação final da derivada da fugacidade em relação à composição se obtém substituindo na Equação H.2.2 as variáveis auxiliares e suas derivadas, determinadas pelas Equações H.2.3, H.2.6, H.2.7, H.2.8, H.2.9 e H.2.11. As derivadas referenciadas e não explicitadas neste apêndice, o foram anteriormente.