



SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM MEIOS POROSOS

Alexandre Salgado Reis Peçanha

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador(es): Frederico Wanderley Tavares
Argimiro Resende Secchi

Rio de Janeiro
Maio de 2014

SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM MEIOS POROSOS

Alexandre Salgado Reis Peçanha

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Frederico Wanderley Tavares, D.Sc.

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Prof. Carlos Augusto Guimarães Perlingeiro, D.Sc.

Profa. Rita de Cássia Lazzarini Dutra, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MAIO DE 2014

Peçanha, Alexandre Salgado Reis

Simulação de Escoamento Multifásico em Meios Porosos/Alexandre Salgado Reis Peçanha.

– Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2014.

XI, 114 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Frederico Wanderley Tavares

Argimiro Resende Secchi

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2014.

Referências Bibliográficas: p. 102-106.

1. Simulação de Reservatórios. 2. Meios Porosos. 3. Simulação Termodinâmica. I. Tavares, Frederico Wanderley *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

“Eu tentei 99 vezes e falhei, mas
na centésima tentativa eu consegui.
Nunca desista de seus objetivos
mesmo que esses pareçam
impossíveis, a próxima tentativa
pode ser a vitoriosa.”

Albert Einstein

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

SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM MEIOS POROSOS

Alexandre Salgado Reis Peçanha

Maio/2014

Orientadores: Frederico Wanderley Tavares
Argimiro Resende Secchi

Programa: Engenharia Química

No presente trabalho é proposto um mecanismo de virtualização de meios porosos em entidades denominadas Redes de Matthews de forma a permitir o estudo de fenômenos físico-químicos de interesse na escala de poro. Além disso, um modelo de escoamento simplificado é criado com base nas equações de Navier-Stokes possibilitando o estudo da saturação e da permeabilidade de tais meios porosos quando percolados por fluidos. Possibilitando o estudo dos fenômenos de equilíbrio de fases, foi criado um pacote termodinâmico – Mammoth – com uma ampla gama de algoritmos e modelos disponíveis. Os dados aferidos por meios dos experimentos computacionais foram divididos em duas categorias: 1) Validação da virtualização do meio poroso, na qual o ensaio simulado de intrusão de mercúrio é contraposto com dados experimentais da literatura; 2) Ensaio de escoamento, em que é promovido o escoamento multifásico de fluidos no meio poroso permitindo a avaliação das curvas de produção e de permeabilidade. Os resultados apresentados nesta dissertação são muito promissores e podem servir de base para o desenvolvimento de simuladores em que a variação composicional seja importante.

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

SIMULATION OF MULTIPHASE FLOW IN POROUS MEDIA

Alexandre Salgado Reis Peçanha

May/2014

Advisors: Frederico Wanderley Tavares

Argimiro Resende Secchi

Department: Chemical Engineering

In this work a methodology for the virtualization of porous media in entities called Matthews Networks was implemented, allowing the study of physicochemical phenomena in the pore scale. Furthermore, a simplified flowing model was created based in the Navier-Stokes equations allowing the study of saturation and permeability of such porous media when percolated by fluids. For the correct study of the phase equilibria phenomena, a thermodynamic framework called Mammoth was used. This system allows the study of phase equilibria using many kinds of algorithms. The data was acquired by computational experiments that were classified in: 1) Validation of the virtualization procedure of the porous media, where the experiments simulate the Mercury intrusion. The results are compared with data from the literature; 2) Flow experiments, where the fluids flow is promoted in the porous media allowing the measurement of oil production and permeability curves. Results shown here are promising and the methodology proposed could be used for development of a new reservoir simulator in which compositional distributions are important.

Sumário

1. Introdução.....	1
2. O Meio Poroso	6
2.1. Revisão Bibliográfica	6
2.2. Implementação.....	8
2.3. Materiais e Métodos.....	10
2.3.1. Metodologia Computacional	10
3. Modelo Termodinâmico para Equilíbrio de Fases	24
3.1. A descrição termodinâmica de uma mistura.....	24
3.1.1. Equilíbrio Líquido-Vapor em Misturas	24
3.2. A metodologia para cálculo do ELV em misturas complexas.....	26
3.2.1. O Critério do Plano Tangente.....	27
3.2.2. Metodologia de Cálculo do Equilíbrio de Fases.....	28
3.2.3. Metodologia de Inicialização do Problema de Flash.....	32
3.2.4. Propriedades dos Componentes.....	33
3.2.5. Implementação Computacional	33
3.2.6. <i>Benchmark</i> da Implementação Proposta.....	34
3.2.7. Performance dos Sistemas Executados.....	40
3.2.8. Conclusões.....	41
3.3. Modelagem do Escoamento.....	42
3.4. Modelagem Básica.....	45
3.4.1. Modelo de Escoamento Bifásico Isotérmico Incompressível.....	45
3.4.2. Discretização para o modelo de rede de percolação.....	57
3.4.3. Consistência Numérica do Modelo.....	61
3.4.4. Considerações.....	63
3.5. Modelo de Escoamento N-Fásico Isotérmico	64
3.6. Acoplamento de Sistema de Equilíbrio de Fases.....	66

3.6.1.	Paralelização Utilizando <i>Threads</i> e Otimização de Código	68
3.6.2.	Paralelização utilizando MPI.....	69
3.6.3.	Comparativo das Implementações.....	69
4.	Resultados	73
4.1.	Aferição Experimental de Dados de Rocha Arenítica	73
4.2.	Digitalização da Rocha Arenítica	77
4.2.1.	Simulação de Intrusão de Fluido com Sistema Bifásico LL	79
4.2.2.	Simulação de Intrusão de Fluido com Sistema Isotérmico Bifásico LL que Evolui para sistema Isotérmico Trifásico VLL.....	83
4.2.3.	Simulação de WAG	85
4.2.4.	Estudo de Sistema em Escala Real Utilizando a Metodologia Proposta..	88
5.	Conclusões e Sugestões.....	99
6.	Referências Bibliográficas	102
A.	Métodos Numéricos	107
a.	Solvers.....	107
b.	Roots.....	107
c.	Newton-Raphson.....	107
d.	FSolve / Levenberg-Marquardt	108
e.	Algoritmos de Integração	108
f.	Ordinary Differential Equation System (ODE).....	109
g.	DifferentialAlgebraicEquation System	111
h.	<i>Benchmark</i> e Resultados	113

Lista de Figuras

Figura 1: Arranjo de rede para validar a área superficial - MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991)	14
Figura 2: Organograma de aferição e validação da área superficial.....	15
Figura 3: Fluxograma do algoritmo de simulação de intrusão de mercúrio simplificado.	23
Figura 4: Organograma das interfaces do algoritmo de equilíbrio.....	34
Figura 5: Comparação de Resultados com a Mistura Y8 descrita em 3.2.6.3 e utilizando a equação de estado de Peng-Robinson.....	38
Figura 6: Permeabilidade relativa em função da saturação da água ROSA (2006)	44
Figura 7: Cunha de escoamento de fases.....	52
Figura 8: Rede de percolação básica	57
Figura 9: Mapa de pressão do meio poroso com poros e gargantas sem distribuição estatística.	62
Figura 10: Evolução no tempo de uma simulação de fluido A penetrante e B saturante	63
Figura 11: Tempo de processamento vs NPS em um sistema assumidamente bifásico e em um sistema que sofre flash multifásico.....	67
Figura 12: Comparação da carga computacional em função do plugin de modelo de fase	67
Figura 13: Vários cenários de paralelização.....	70
Figura 14: Comparação entre a execução serial e a melhor paralelização encontrada...	70
Figura 15: Cenários de Paralelização sem Otimização do Flash Multifásico	71
Figura 16: Comparação entre execução serial e a melhor paralelização no sistema sem otimização no flash multifásico.....	72
Figura 17: Intrusão de Mercúrio em Areia Redhill 30	75
Figura 18: Ensaio de Intrusão de Mercúrio em Areia Redsand HH.....	76
Figura 19: Simulação com Arenito Clashac A de (MATHEWS, 1999)	78
Figura 20: Simulação com Arenito Clashac B de (MATHEWS, 1999).....	79
Figura 21: Ensaio de Injeção de Salmoura para Recuperação de Óleo.....	82
Figura 22: Permeabilidade Relativa Simulada e Experimental	82
Figura 23: Recuperação de Óleo contra Volume Injetado	84
Figura 24: Diferencial de Pressão para Manter o Fluxo Constante.....	84
Figura 25: Recuperação de Hidrocarbonetos pelo processo WAG	87

Figura 26: Modelo do reservatório estudado. Imagem extraída de BATISTA, COUTINHO, <i>et al.</i> (2010).....	88
Figura 27: Corte de água do poço 1.....	90
Figura 28: Corte de água do poço 2.....	90
Figura 29: Curvas de Produção (fração recuperada vs V_p injetado).....	91
Figura 30: Comparação de erros entre os timesteps medidos, letras representam o NPS e números o poço em estudo	92
Figura 31: Erro médio total de cada NPS	93
Figura 32: Tempo de execução dos ensaios	93
Figura 33: Comparação das curvas de produção: real vs simulada.....	94
Figura 34: Histograma de corte 10% de água para o poço 1 re-escalados para reservatório real	96
Figura 35: Histograma de corte 10% de água para o poço 2 re-escalado para reservatório real	96
Figura 36: Benchmark dos Métodos de Integração com o Problema de Robertson.....	113
Figura 37: Benchmark de Sistema VLL.....	114

Lista de Tabelas

Tabela 1: Comparativo da capacidade de encontrar o mínimo global de diferentes otimizadores no algoritmo de flash	36
Tabela 2: Comparativo da capacidade de encontrar o mínimo global em um sistema de separação de fases complexo.....	37
Tabela 3: BIC para sistema SourGas utilizando EoS de Peng-Robinson.....	39
Tabela 4: Sistema VLLE - Comparação entre este trabalho e PAN (1998).....	39
Tabela 5: Sistema VLLE utilizando EoS e UNIFAC.....	40
Tabela 6: Benchmark em função do tempo dos algoritmos de otimização.....	41
Tabela 7: Resultados de Permeabilidade Absoluta para Redhill30.....	75
Tabela 8: Resultados de Permeabilidade Absoluta para Redhill HH.....	76
Tabela 9: Propriedades do Arenito Clashac A experimentais e simuladas.	78
Tabela 10: Parâmetros de um Plug Real de Arenito.....	79
Tabela 11: Resultados obtidos após virtualização.....	80
Tabela 12: Propriedades de Fluidos na Simulação WAG.....	86
Tabela 13: Propriedades do Reservatório.....	89
Tabela 14: Propriedades dos Poços.....	89
Tabela 15: Resultados do History Matching.....	98

CAPÍTULO I

1. Introdução

A engenharia de reservatórios constitui uma de pesquisa e de desenvolvimento importante para a engenharia de petróleo, e nesta área diversos profissionais se utilizam de informações sobre propriedades e características de rochas e fluidos contidos nas formações portadoras de óleo. Como objetivo, estes profissionais buscam identificar o potencial de produção destas formações e aplicar métodos que possam maximizar os ganhos e minimizar os custos relacionados à exploração de reservatórios que tenham anomalias geológicas ROSA (2006).

Segundo LABASTIE (2011) para suprir a demanda de energia nos próximos anos, a capacidade de recuperação do óleo precisa ser aumentada, uma vez que, com as tecnologias atualmente utilizadas, apenas cerca de 35% do petróleo disponível no reservatório consegue ser recuperado, ou seja, para cada barril produzido, cerca de dois barris ficam no poço e não podem ser diretamente recuperados.

Neste contexto, diversas tecnologias de recuperação secundária e até terciária são utilizadas, a citar: injeção de água, injeção de vapor e combustão *in situ*, sendo que a mais utilizada atualmente é a de injeção de água, por ser relativamente mais barata, ainda mais no contexto *off-shore*. Uma das formas de aumentar a capacidade de produção de um reservatório é o método de WAG (*Water Alternating Gas*); uma metodologia que visa à injeção alternada de água e gás em um reservatório de forma a resultar em uma produção de hidrocarbonetos superior à injeção de água ou gás separadamente. Entretanto, esta metodologia envolve o estudo de vários fenômenos e processos físico-químicos extremamente complexos, relacionados com escoamentos em meios porosos.

Desta forma, a simulação de reservatórios é uma solução de engenharia para definição de planos estratégicos frente à enorme quantidade de incertezas associadas ao processo de recuperação de fluidos. Tal estratégia é utilizada em diversos campos de estudo que visam à produção de petróleo: planejamento, estudo de viabilidade, otimização, estudo de recuperação avançada de fluidos, “*history matching*”, etc.

No processo de simulação destes reservatórios existem dois processos largamente estudados na literatura: a resolução direta dos sistemas formados pelas equações de conservação e os modelos baseados em mecânica estatística.

No contexto de reservatórios de hidrocarbonetos, a primeira abordagem é considerada o padrão, sendo utilizada nos principais simuladores comerciais, como: Imex (CMG) e Eclipse (Schlumberger), sendo o primeiro, um simulador que tem como base a metodologia de diferenças finitas aplicada ao modelo de “*Black Oil*” e o segundo, a metodologia de volumes finitos e modelo composicional de fluidos.

Recentemente, com o advento dos supercomputadores, os simuladores comerciais são considerados os padrões da indústria, uma vez que cumprem a sua missão fim – simular o escoamento de fluidos – com erros aceitáveis, sendo uma ferramenta valiosa no processo de tomada de decisão.

O desempenho tanto quantitativo quanto qualitativo destes simuladores foge ao escopo deste trabalho, cabendo ressaltar apenas que à medida que o sistema físico simulado aumenta a sua complexidade, a demanda computacional e de armazenamento aumentam, muitas vezes, tornando-se proibitivo, ou no mínimo, pouco acessível.

A simulação que utiliza métodos finitos¹ (MF) como metodologia de integração necessita de artifícios de cálculo complexos de forma a manter a robustez do sistema e a estabilidade durante a integração. Ao aplicar tais artifícios a sistemas multifásicos, cada fase possui o seu próprio conjunto de equações, o que torna quase inviável a inserção de novas variáveis e modelos – um empecilho aos estudos mais personalizados – o que abre espaço para criação de modelos simplificados onde a adição de novos fenômenos ao modelo seja natural.

Estes estudos, entretanto, não se iniciaram no campo da simulação de reservatórios, e sim no campo da simulação de escoamento em meios complexos. Um exemplo deste tipo de estudo é a utilização de redes correlacionadas para estudo de

¹ Designação genérica para as metodologias de discretização como diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos, muito aplicados na resolução de problemas distribuídos.

fenômenos de transporte, como pode ser visto em SAFFMAN (1960), RUSHTON (1966) e SINGHAL (1970).

Basicamente, um simulador que usa MF apresenta modelos de fluido – “*Black Oil*” ou composicional – e um conjunto de equações para o fluxo. Neste contexto, muitas vezes as simplificações propostas para o sistema de equações algébrico diferenciais (DAE), não permitem a correta simulação de anomalias geológicas – como falhas, por exemplo, e tão pouco permitem uma abordagem mais incisiva em questões como interações fluido-fluido, rocha-fluido e fenômenos característicos de cada reservatório em particular (como formação de colônias de bactérias ou o efeito de dissolução da rocha do reservatório). Algumas anomalias que podem ser descritas por simuladores comerciais são estudadas por MIKYSHA (2010), onde, por exemplo, um mesmo modelo apresenta resultados completamente contraditórios do ponto de vista de planejamento, apenas por influência da ordem do método numérico utilizado na resolução do sistema DAE.

Estudos do uso de MF em simulação de reservatórios podem ser vistos em diversos trabalhos, com destaque para: HOTEIT (2008), onde o estudo de fluxos bifásicos incompressíveis em fraturas demonstra uma nova metodologia de acoplamento de malhas e onde várias metodologias de resolução numérica são estudadas para solução de equações acopladas a fluxos capilares e para MIKYSHA (2010) onde o método de Garlekin descontínuo é estudado em reservatórios composicionais.

Neste contexto, pode-se observar que tais simuladores, mesmo apresentando resultados compatíveis com a realidade, tornam-se ferramentas demasiadamente pesadas computacionalmente para descrever sistemas físico-químicos mais complexos – como reservatórios carbonáceos, por exemplo. Vale ressaltar, também, que nessas metodologias a maior parte do custo computacional é usado na resolução das equações de fluxo, sendo os modelos físico-químicos renegados ao segundo-plano, visto que muitas vezes o sistema de equilíbrio de fases é baseado em uma simples interpolação/extrapolação de dados PVT.

Tal abordagem não gera maiores problemas em reservatórios de hidrocarbonetos leves e com baixíssima salinidade, mas em reservatórios mais antigos ou de óleos mais pesado (como aqueles encontrados no Brasil), o comportamento de

fases possui um peso substancial no comportamento global do escoamento devido à complexidade intrínseca do sistema.

Na tentativa de simplificar esses cálculos e melhorar a qualidade dos dados obtidos por simulação, estudos de modelos estatísticos de fenômenos de escoamento foram feitos como, por exemplo, em DODSON e SAMPSON (1999).

Nos trabalhos de KING (1990) e KING (1999) o método da percolação com leis de escala foi utilizado para determinar uma correlação de escala e prever o período de *breakthrough*² em um reservatório de óleo do Atlântico Norte, tendo seus resultados contrapostos àqueles apresentados por um simulador de reservatórios comercial com sucesso. Os resultados deste trabalho provaram que é possível obter dados de produção de forma confiável por um custo computacional muito menor.

Desta forma, é possível observar que existe um extenso campo de estudos na simulação de reservatórios por abordagens diferentes daquela utilizada como padrão da indústria. Deve-se prestar especial atenção aos métodos que se utilizam de estruturas fractais (redes de percolação), metodologia estatística e metodologias estatísticas aliadas ao *scale up*.

Dentro desse contexto, este trabalho tem por objetivo o estudo do fenômeno do escoamento multifásico simplificado ao nível do poro, de forma a entender melhor os fenômenos físico-químicos que ocorrem e quais as suas implicações no processo de recuperação de óleo em um reservatório de hidrocarbonetos, por meio do cálculo das permeabilidades relativas à medida que o fenômeno dinâmico de escoamento e acomodação de fases ocorrem e sempre que possível comparando os dados apresentados com dados da literatura.

O principal foco deste trabalho está na construção, validação e teste de uma metodologia de digitalização e simulação de escoamento de fluidos em um meio poroso.

² Instante em que a água injetada em um poço alcança o poço produtor.

A dissertação será apresentada em mais quatro capítulos, conforme descrito a seguir:

Capítulo II: mostra a criação, digitalização, validação e simulação do meio poroso utilizado no estudo do escoamento multifásico;

Capítulo III: por meio de implementação própria e *benchmarks* da literatura define e testa modelos termodinâmicos utilizados neste trabalho, assim como mostra toda a modelização do escoamento nas redes por meio das deduções das equações de fluxo a partir das equações de Navier-Stokes;

Capítulo IV: versa sobre os resultados obtidos por meio da simulação de casos específicos;

Capítulo V: mostra as conclusões obtidas com os dados aferidos por este trabalho.

CAPÍTULO II

2. O Meio Poroso

2.1. Revisão Bibliográfica

O meio poroso é a estrutura fundamental das rochas reservatório, uma vez que em seus interstícios os hidrocarbonetos são aprisionados e armazenados. Desta forma, um estudo aprofundado destas estruturas se faz necessário, uma vez que o seu entendimento permite a elucidação de várias questões referentes às interações entre o escoamento e a estrutura de armazenamento assim como os efeitos que a estrutura pode gerar sobre o escoamento e a garantia do mesmo.

Desde os primórdios dos estudos envolvendo escoamento em meios porosos, como os estudos de Darcy, por exemplo, um altíssimo grau de incerteza é associado ao escoamento por estruturas porosas, gerando, por conseguinte, diversas teorias e abordagens. Em geral, essas incertezas são incluídas em uma variável conhecida como permeabilidade de Darcy (K), sendo o valor obtido de dados experimentais cuidadosamente adaptados ao modelo de interesse. SAFFMAN (1960)

Para obtenção desses dados experimentais, estudos foram conduzidos em colunas de areia e sílica, permitindo a obtenção de valiosos resultados, sem contanto permitir um estudo mais sofisticado do escoamento nos interstícios do meio em questão BATISTA, COUTINHO, *et al.* (2010).

Posteriormente, os primeiros modelos que permitiram tal estudo se utilizavam de um aparato de resina que permite a criação de elementos microestruturados, onde todo o escoamento pode ser observado e diversas variáveis de interesse, como tempo de percolação e pressão de injeção, por exemplo, podem ser controladas e muitas outras (como permeabilidade e saturação) podem ser inferidas por medidas diretas ou indiretas. STAUFFER e DIETRICH (2003)

Esse modelo físico, criado com base em microestruturas de resina, é uma representação 2D de um meio poroso real, que consiste em duas placas transparentes e paralelas onde os canais são gravados de forma previamente definida – em geral

seguindo uma distribuição probabilística. E desta forma era possível visualizar o comportamento do escoamento e também observar os mecanismos do ponto de vista da escala de poro. STAUFFER e DIETRICH (2003)

Com o passar dos anos, e com o aumento da complexidade dos problemas propostos, o uso do aparato de resina foi se tornando inviável, visto que alguns comportamentos de interesse (como a interação matriz-fluido) não podiam ser estudados de forma adequada, e com base nesta necessidade, foram estabelecidos os primeiros estudos relativos à simulação de meios porosos por meio computacional. Nesse interim, diversos modelos foram verificados, para diversas aplicações, a citar: colunas de cromatografia de permeação em gel, escoamento em colunas empacotadas e deslocamento de fluidos em meios porosos, dentre os quais o de maior difusão e adequação foi o modelo de redes correlacionadas.

Alguns dos pioneiros nesses estudos foram: SINGHAL (1970), MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991), MATTHEWS, MOSS, *et al.* (1993), SAHIMI (1995), DODSON e SAMPSON (1999) e STAUFFER e DIETRICH (2003), sendo que eles exerceram papel pioneiro neste campo, utilizando abordagens híbridas entre redes correlacionadas e mecânica dos fluidos.

A partir destas ideias, surgiram os primeiros estudos em que a representação computacional de rede correlacionada é definida por poros e canais, sendo importante citar dois trabalhos específicos, o de HASHEMI, KAVAK, *et al.* (2002) e MATTHEWS, MOSS e RIDGWAY (1995); o primeiro mostra a hibridação de um algoritmo de redes correlacionadas com elementos de mecânica dos fluidos, e o segundo a validação do uso de modelos de redes correlacionadas no estudo de meios porosos.

Basicamente, a ideia de uma rede correlacionada na simulação de um meio poroso, se baseia nos seguintes elementos formativos:

- ➔ Poros: representam os elementos de ligação dentro do meio. É a entidade virtual que permite que dois espaços vazios adjacentes possuam inter-relação;

→ Canais (Gargantas): representam os elementos vazios dentro do meio poroso. São eles que permitem que as propriedades do meio sejam simuladas.

Neste modelo, o escoamento entre dois poros pode ocorrer apenas por meio de um canal.

Com o avanço dos estudos de escoamento em redes, os modelos foram se tornando mais refinados, permitindo que diversas características fossem representadas (como o efeito de troca de massa entre as fases, e interações dinâmicas interfases), assim como permitindo uma maior gama de representações de materiais SAHIMI (1995), STAUFFER e DIETRICH (2003).

No presente estudo, tomaram-se por base os dados sugeridos em ROSA (2006) e em KING (1999) para as propriedades das rochas, a citar: porosidade, permeabilidade, capilaridade e tortuosidade.

Conjuntamente aos estudos da teoria de redes, podem-se destacar os estudos de STAUFFER e DIETRICH (2003), onde a teoria da percolação é aplicada a diversos fenômenos físicos, sendo o escoamento um deles.

No estudo de SAHIMI (1995), as duas linhas de estudo são fundidas, aplicando a teoria da percolação e a teoria de redes a problemas de escoamento, permitindo desta forma a simulação de fenômenos complexos, do ponto de vista do poro.

Utilizando as abordagens citadas é possível, portanto, definir um meio poroso virtual com base em propriedades básicas do meio poroso real, sendo que este trabalho acrescenta as seguintes características ao estudo da rede de percolação: o domínio é extrapolado para 3D, um pacote de equilíbrio de fases foi utilizado, e o fluxo é caracterizado.

2.2. Implementação

Embora seja quase impossível reproduzir virtualmente a estrutura de um meio poroso real, devido à sua estrutura e natureza caótica, a definição de um modelo

que consiga reproduzir suas propriedades, com um erro aceitável, é uma tarefa possível, porém complexa.

Inicialmente, devem-se definir quais propriedades do meio poroso que permitirão a criação de um modelo que o represente. Segundo MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991), tais propriedades são: área superficial, porosidade, distribuição de tamanho de poros, tortuosidade e interconectividade, sendo a distribuição de tamanho de poros e a interconectividade as principais. Ainda é possível inferir de MATTHEWS, MOSS e RIDGWAY (1995) que a presença de um valor chamado número de correlação – que representa o quanto os poros adjacentes possuem correlação de tamanho – é necessária para permitir que o meio poroso virtual apresente as características necessárias para ter representatividade do meio real.

De acordo com MATTHEWS, MOSS, *et al.* (1993), inúmeras geometrias e formulações de modelos foram testadas na literatura, como pode ser visto com mais detalhes nos trabalhos de KING (1990), LENORMAND, TOUBOL e ZARCONE (1988) e DULLIEN e CHATZIS (1985). Nestes estudos foram observados inúmeros arranjos, como sequências de capilares, colunas empacotadas com esferas e redes de tubos, sendo que uma das melhores correlações entre os dados experimentais e simulados é alcançada por meio de uma rede cartesiana composta de poros e canais, que representam respectivamente: os pontos de interconexão entre poros e os canais capilares entre dois pontos de interconexão.

Em MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991) e MATTHEWS, MOSS, *et al.* (1993), é proposto um modelo de rede correlacionada que permite a modelagem de meios porosos utilizando como dados de entrada, dados obtidos experimentalmente de uma amostra real, por meio de ensaios de B.E.T. ou Intrusão de Mercúrio. Vale ressaltar neste caso que o estudo utilizando estes métodos só permite acesso às informações da porção do meio poroso que está acessível ao exterior, uma vez que dados mais completos só poderiam ser obtidos por meio de exames mais detalhados como uma ultrassonografia com ressonância magnética, por exemplo. Todavia, os ensaios de B.E.T. ou de Intrusão de mercúrio são suficientes ao fim que se destina este trabalho, uma vez que segundo STAUFFER e DIETRICH (2003) uma interconectividade maior que 2,5 garante a existência de pelo menos um caminho que liga as duas extremidades em questão.

Desta forma, a implementação de uma estrutura de redes cartesianas baseadas em poros e canais e de interconectividade de no mínimo 2,5 garante que será possível o estudo da percolação de fluidos em seus interstícios, assim como garante que ensaios de B.E.T. ou intrusão de mercúrio são suficientes para serem utilizados como dados de entrada do modelo, permitindo que os meios de interesse sejam criados de forma virtual e permitam o estudo do escoamento.

Este trabalho, no que tange a virtualização do meio poroso, se distingue do trabalho de MATTHEWS, MOSS, *et al.* (1993) devido à sua flexibilidade com relação aos dados de entrada, uma vez que, enquanto na literatura, apenas a curva de intrusão de mercúrio funciona como dado de entrada, neste trabalho qualquer dado proveniente de análise textural (distribuição cumulativa de tamanho de poros, volume poroso, área superficial, porosidade, etc) ou de processo pode ser utilizado como dado de entrada, cabendo ressaltar que, neste trabalho, apenas dados texturais foram utilizados.

2.3. Materiais e Métodos

2.3.1. Metodologia Computacional

Inicialmente, para proceder-se a metodologia computacional necessita-se que os ensaios experimentais tenham sido feitos, visto que os dados de distribuição de tamanho de poros são os dados de entrada para o modelo e os valores de área superficial são os dados referenciais, nos quais o modelo computacional se pauta para validar o modelo construído.

Esta metodologia pode mudar caso a caso, dependendo dos dados disponíveis, mas em geral a sua estrutura não é alterada apenas os dados de entrada podem se tornar dados comparativos e os dados comparativos os dados de entrada.

Esta versatilidade é alcançada por meio da implementação modular dos algoritmos mostrados neste trabalho. Todos são acessíveis por meio de uma linguagem de script (Python), onde o problema a ser estudado pode ser modelado com base nos dados experimentais disponíveis e das perguntas que se quer responder.

2.3.1.1. Construção da Rede

Inicialmente, definem-se alguns dados de entrada do modelo:

1) *Nodes per Side* (NPS): define o número de poros que existem em cada eixo cartesiano, o correto dimensionamento desta variável permite a criação de uma rede 1D, 2D ou 3D;

2) Interconectividade: cada poro pode possuir, por definição do modelo, no máximo, 2, 4 ou 6 conexões de canais (1D, 2D e 3D respectivamente). Este valor é aferido por meio da média de todos os poros existentes no modelo virtual, permitindo desta forma a existência de números fracionários;

3) Distribuição de tamanho de Poros: este valor representa a distribuição de tamanho de poros do meio poroso, sendo utilizado na definição aleatória dos mesmos. Existem duas maneiras deste valor ser alimentado no sistema, como uma distribuição estatística propriamente dita (modelo – normal, lognormal, weibull, etc) ou por meio de dados amostrados que geram no sistema uma distribuição estatística personalizada;

4) Tamanho real do meio: é a dimensão em unidades reais (metros) do meio poroso em estudo, sendo necessário um correto dimensionamento entre as unidades em questão e o próprio valor de NPS, de modo que no estudo posterior de escoamento em meio poroso não ocorram fenômenos numéricos indesejáveis (difusão numérica, etc);

5) Valor de correlação: é um número que indica que há correlação entre o tamanho de um determinado canal e àqueles que o são adjacentes, permitindo desta forma que anomalias como um canal de grande diâmetro esteja conectado a um canal com diâmetro ínfimo. Neste caso, a variação deste elemento permite que estudos sejam conduzidos usando teorias de correlação de redes. Neste trabalho, optou-se por manter a abordagem de MATTHEWS, MOSS e RIDGWAY (1995) em que a distribuição de poros e correlações são obtidas por meio da resolução do problema inverso, de forma a minimizar o erro com relação ao dado de entrada aferido. O algoritmo de otimização utilizado neste caso foi o Direct-L.

Com base nestes dados de entrada, é possível construir uma rede correlacionada seguindo o seguinte algoritmo proposto neste trabalho³:

1. Criação de um vetor $NPS = [NPS_x, NPS_y, NPS_z]$;
2. Criação de um vetor de $NPS_x \times NPS_y \times NPS_z$ poros;
3. Criação de um vetor com o número total de canais;
 - a. Definir, por meio da distribuição estatística, o diâmetro do canal por meio de sorteio utilizando número pseudo-aleatório;
 - b. Definir, por meio dos dados de entrada, o comprimento do canal, dividindo-se o tamanho do plugue na direção em questão pelo total de poros naquela direção;
 - c. Relacionar a cada poro 6 canais, sendo que desta forma é criada a estrutura que define posição dos canais na rede cartesiana. Caso exista correlação na rede a relação dos canais com os poros é viciada e não aleatória.
4. Com base no valor de interconectividade, definir canais como tendo diâmetro zero de modo a respeitar a interconectividade média final;
5. Prosseguir para os ensaios de validação da rede.

2.3.1.2. Ensaio de Validação da Rede

A validação da rede é feita com base no ensaio de área superficial, outrossim, para sua realização é necessário avaliar a capacidade de percolação da rede e, quando necessário, promover a reestruturação da rede. Estes ensaios são definidos a seguir.

³ É importante notar que no contexto deste capítulo a palavra vetor está sendo aplicada no sentido de computação científica, onde este termo refere-se a uma lista de entidades virtuais, sendo que estas entidades podem ser números (inteiros, pontos flutuantes, pontos flutuantes duplos, etc), caracteres ou entidades virtuais, como classes. Sendo que um dos itens de maior importância neste aspecto é que um vetor é um elemento virtual que possui uma ordenação específica.

Ensaio de Capacidade de Percolação da Rede

Este ensaio visa verificar se existe uma conexão válida (ou seja, em que todos os canais possuam diâmetro maior que zero) entre duas faces da rede cartesiana. No caso deste estudo, as faces de interesse são aquelas onde existirá fluxo.

O ensaio se baseia na utilização algoritmo de Hoshen-Kopelman para identificação de grupamentos interligados, explicado em detalhes em JOAS (2006), aplicado a uma rede de percolação onde a dimensão (1D, 2D ou 3D) não é definida a priori.

1. Cada um dos nós (poros) é identificado por uma etiqueta;
2. Quando dois nós (poros) adjacentes possuem conexão (canal com diâmetro maior que zero) as duas etiquetas são convertidas em uma só. Esta operação é efetuada nas 3 dimensões;
3. Todas as outras etiquetas com valor igual às duas convertidas anteriormente também são convertidas;
4. Repete-se o item 2-3 até não haverem mais etiquetas para serem renomeadas;
5. Mapeiam-se as estruturas com a mesma etiqueta. Cada uma destas estruturas é denominada cluster;
6. Verificam-se todos os clusters que permitem percolação (possuem acesso de uma face de interesse à outra). Destas a maior delas (que possui maior número de nós (poros)) é denominada cluster principal, as outras são denominadas clusters secundários. Todos os clusters que permitem acesso são denominados clusters percolantes;
7. Os clusters não percolantes são identificados e suas propriedades (tamanho, capacidade de percolação, etc) são aferidas;
8. Três vetores são retornados, um com o cluster principal, outro com os clusters secundários e um terceiro com os clusters não percolantes; estes vetores podem ser vazios ou não.

Ensaio de Validação pela Área Superficial

Este ensaio utiliza os dados obtidos pelo Ensaio de Capacidade de Percolação da Rede e permite que a rede cartesiana possa ser validada como representativa do meio real. Vale ressaltar que a área superficial apresentará um valor abaixo daquele obtido experimentalmente, uma vez que o meio simulado não apresenta ranhuras, tendo este valor que ser corrigido por meio de um fator de proporcionalidade MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991).

O arranjo apresentado na Figura 1 é empregado para definir o valor numérico da área superficial.

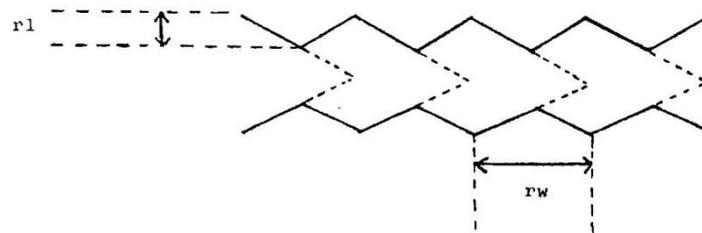


Figura 1: Arranjo de rede para validar a área superficial - MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991)

Desta forma, o valor obtido de área superficial precisa ser corrigido com base nesse fator de proporcionalidade.

O algoritmo de Validação pela Área Superficial, proposto neste trabalho, é explicado adiante:

1. Alimenta-se uma rede de percolação recém-criada, com a área superficial experimental e define-se o erro tolerável da área superficial aferida em relação à área superficial real;
2. Aplica-se o ensaio de Capacidade de Percolação da Rede;
3. Verifica-se a existência de um cluster principal. Caso não exista o ensaio falha e uma nova rede deve ser criada;
4. De posse dos clusters percolantes, afere-se a área superficial interna dos canais, lembrando que por força do modelo os poros não possuem área superficial;

5. Corrige-se a área total aferida nos clusters percolantes pelo fator de proporcionalidade;
6. Compara-se a área aferida com a área superficial real, caso o erro seja maior que o tolerável, aplica-se o algoritmo de reestruturação da rede e retorna-se ao item 4 até passar no teste ou o dispositivo de loop infinito ser ativado;
7. Caso de loop infinito, retorna-se ao item 1, caso contrário a rede está validada.

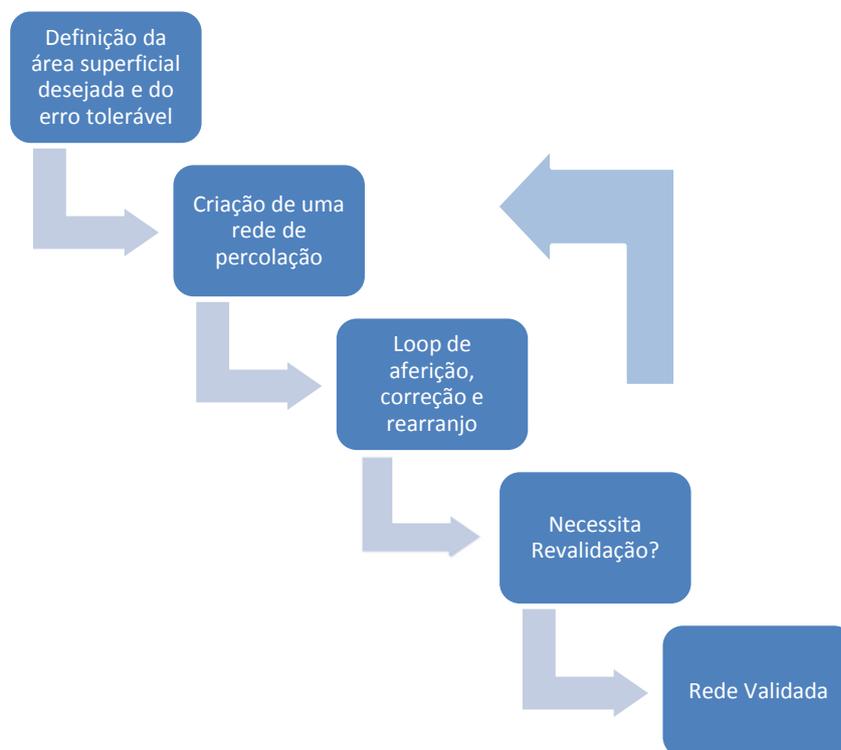


Figura 2: Organograma de aferição e validação da área superficial

Ensaio de Reestruturação de Rede

Este ensaio possui por finalidade adequar a área superficial da rede da forma menos invasiva possível, tentando adequar o valor buscado com o mínimo de interferência externa no meio. Uma abordagem invasiva corrigiria a área superficial rapidamente, todavia destruiria toda a estrutura porosa que se deseja virtualizar.

O procedimento proposto neste trabalho é mostrado a seguir:

1. Verifica-se a existência de clusters não percolantes. Caso existam, são definidos como agente de reestruturação. Caso não existam valores pseudo-aleatórios acoplados a uma distribuição estatística são definidos como agentes de reestruturação;
2. Verifica-se se o erro é positivo (área superficial maior do que o valor desejado) ou negativo (área superficial menor do que a do valor desejado);
3. Seleciona-se um canal dos clusters não percolantes que influencie no sentido oposto ao erro calculado. A escolha é feita com base no valor que minimizará o desvio em questão.

Este canal é então substituído de forma aleatória nos clusters percolantes de forma a corrigir o erro;

Vale ressaltar que este método deve se auto limitar de forma a não permitir que canais retirados dos clusters percolante retornem ao loop de ajuste, de forma a não criar uma iteração infinita. Isto é alcançado por meio do uso de listas de pertinência, uma vez que um canal já pertenceu a um cluster, quando retirado dele, não pode retornar.

2.3.1.3. Ensaio de Aferição de Valores de Interesse

De posse de uma rede de percolação devidamente validada é possível aplicar diversos ensaios que permitem o cálculo de várias variáveis de interesse ao estudo do escoamento e/ou do próprio meio poroso em sua estrutura. Os principais ensaios executados nas redes validadas são os seguintes:

- Cálculo de porosidade;
- Cálculo da tortuosidade;
- Cálculo da permeabilidade;
- Cálculo de intrusão de mercúrio.

Ensaio do Cálculo de Porosidade

É necessário avaliar os dados definidos na variável de NPS e de tamanho real do meio poroso de forma a permitir que este ensaio não retorne valores irrealizáveis.

Neste ensaio, o cálculo da porosidade de uma amostra é feito utilizando-se a seguinte equação:

$$\epsilon = \frac{\text{volume de vazios}}{\text{volume total}} = \frac{\text{volume de fluido em suspensão}}{\text{volume total}}$$

Desta forma, calcula-se o volume total da célula como o produto das 3 dimensões, e o volume de vazios como o volume total dos canais presentes na célula (tanto dos clusters percolantes como dos não percolantes), lembrando que os poros são considerados como entidades virtuais de ligação que não possuem volume.

Ensaio do Cálculo da Tortuosidade

De acordo com o trabalho de MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991) o ensaio do cálculo da tortuosidade é baseado, por hipótese, na existência de um gradiente, e que cada camada da célula está fixada sobre um potencial discreto. Desta forma, um elemento discreto (partícula imaginária) é colocado para percorrer a célula do ponto de maior potencial para o ponto de menor potencial, e assim o valor da tortuosidade é calculado por um procedimento de amostragem, da seguinte forma:

$$\tau = \frac{\text{comprimento do caminho percorrido}}{\text{comprimento do menor caminho possível}}$$

A necessidade da imposição de um potencial imaginário advém do fato de que sem essa restrição, o elemento discreto pode percorrer várias vezes um caminho

no sentido oposto do gradiente, fazendo com que os resultados obtidos sejam irreais e não tenham qualquer relação com os resultados experimentais.

Para validar os resultados obtidos via simulação, foram utilizados os dados obtidos no trabalho de MACDONALD (1989), por meio da equação:

$$D_{eff} = \frac{D_{ab}}{\tau}$$

Em que D_{eff} é a difusividade efetiva do gás no meio poroso, D_{ab} é o coeficiente de difusividade de Maxwell e τ é a tortuosidade do meio.

Vale ressaltar que com base nos estudos preliminares deste trabalho, ficou constatado que o menor caminho possível possui probabilidade maior que 99% de estar no cluster principal, e desta maneira, a busca pelo mesmo é sempre iniciada por esse cluster. Além disso o cálculo deste valor não leva em conta nenhum gradiente imaginário, ele utiliza-se da metodologia de amostragem de um “Randon Walker” baseado em probabilidades conforme proposto por STAUFFER e DIETRICH (2003) e modificado neste trabalho para operar em 3D

Assim, o seguinte algoritmo é utilizado para o cálculo da tortuosidade do meio:

1. Alimenta-se uma rede de percolação já validada, define-se respectivamente a face de injeção e a de produção; determina-se o total de amostragens que será feito (o padrão é 10% do valor de $NPS_x \times NPS_y \times NPS_z$, valor este advindo da experiência com o ensaio, mas puramente empírico);
2. Executa-se o algoritmo de Hoshen-Kopelman para identificação dos clusters percolantes e do cluster principal;
3. Executa-se o algoritmo de identificação do menor caminho possível (obtido por amostragem, conforme explicado acima);

4. Alimenta-se no sistema o elemento discreto, garantindo que este sempre percorrerá a rede no sentido positivo do gradiente, escolhendo dentre os caminhos possíveis aquele sorteado com base na probabilidade de fluxo, que é avaliado por meio da equação de Poiseuille (o fluxo é proporcional à quarta potência do raio do capilar, donde advém a probabilidade de escoamento);
5. Armazena-se em um vetor o valor da tortuosidade no elemento;
6. Retorna ao item 4 até o total de amostragens ser feito;
7. Determina-se o valor médio da tortuosidade do meio.

Ensaio do Cálculo da Permeabilidade

Um dos grande problemas no estudo dos meios porosos tem sido os questionamentos advindos da indagação de como calcular a permeabilidade a partir do conhecimento da geometria dos vazios intrínsecos ao meio.

A permeabilidade absoluta é normalmente calculada em termos da Lei de Darcy, que pode ser escrita da seguinte forma:

$$Q_{canal} = - \frac{k S_{canal} \Delta P}{\mu l_{node}}$$

Em que Q_{canal} é a vazão volumétrica do escoamento de um fluido incompressível, S_{canal} é a área da seção reta do canal, μ é a viscosidade do fluido, l_{node} é o comprimento espacial onde o gradiente de pressão é aferido, k [m²/s] é a permeabilidade absoluta e ΔP é o diferencial de pressão entre as extremidades do canal.

Segundo MATTHEWS, MOSS, *et al.* (1993), a permeabilidade em uma rede correlacionada é um parâmetro que advém de inúmeros parâmetros primários, como diâmetros, comprimentos, posições de poros e canais. Para o cálculo deste parâmetro, necessariamente um procedimento de cálculo de médias precisa ser usado.

Em geral essas médias se utilizam de parâmetros característicos como a porosidade efetiva, a área externa acessível por unidade de volume do sólido, o diâmetro característico de canal, a tortuosidade e o fator de formação.

Na literatura, existem diversos trabalhos relativos a metodologias para correlacionar tais parâmetros no cálculo da permeabilidade, sendo que uma revisão pode ser encontrada em SCHEIDEGGER (1974).

De todos os métodos verificados por SCHEIDEGGER (1974), o mais simples é a utilização de um conjunto de capilares com diâmetro definido. Neste sistema, a porosidade pode ser prontamente calculada e correlacionada com as equações de Darcy e Hagen-Poiseuille, chegando à seguinte relação:

$$k = \frac{\phi d^2}{32}$$

Em que ϕ é a porosidade efetiva e d o diâmetro do capilar.

Devido a inúmeras inconsistências com a realidade física e o modelo matemático, este modelo serve apenas para fins pedagógicos. Entretanto, no trabalho de Kozeny [apud. SCHEIDEGGER (1974)], o diâmetro de capilar é corrigido para um diâmetro médio de capilar, e, assim, passa-se a utilizar o seguinte modelo de permeabilidade:

$$k = \frac{c\phi^3}{S^2}$$

Em que c é a constante de Kozeny (que varia entre 0,50 e 0,66 de acordo com o material para k em [m²/s]), ϕ a porosidade efetiva e S a área superficial do sólido acessível externamente.

Este modelo ainda pode ser corrigido de acordo com a tortuosidade, gerando a seguinte equação:

$$k = \frac{c\phi^3}{\tau S^2}$$

Mais recentemente, KATZ e THOMPSON (1986), definiu a seguinte relação para a permeabilidade:

$$k = \frac{1}{226} \left(\frac{d^2}{F} \right)$$

Em que d representa o diâmetro equivalente à pressão necessária para promover o *breakthrough*⁴ e F é o fator de formação, cuja definição e metodologia de obtenção é mostrada por KATZ e THOMPSON (1986).

Em MATTHEWS, MOSS, *et al.* (1993) e em MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999) uma metodologia específica para meios porosos compostos por redes correlacionadas é explorada. Basicamente em um meio 3D composto por poros e canais, com correlação e conectividade definida pelo usuário, a seguinte equação de fluxo é válida:

$$Q = -\frac{\pi}{8\mu} \Omega \left(\frac{r_{canal}^4}{l_{canal}} \right) \Delta P$$

Após a comparação desta equação com a equação de Darcy, chega-se à seguinte relação:

$$k = \frac{\pi}{8} \Omega \left(\frac{r_{canal}^4}{l_{canal}} \right) \left(\frac{l_{célula}}{S_{célula}} \right)$$

Em que $\Omega(\)$ é um operador de média, r o diâmetro do capilar, l e os sub-índices canal e célula representam, respectivamente, um canal e a própria rede de percolação.

⁴ Verificar ensaio de intrusão de mercúrio.

Ensaio de Simulação de Intrusão de Mercúrio

Segundo MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991) a Porosimetria de Mercúrio é o método mais utilizado para investigação da distribuição de tamanhos de poros em rochas⁵. Este método envolve que mercúrio seja forçado para dentro da rocha por meio de pressões cada vez maiores. A medida que a pressão aumenta, poros cada vez menores são invadidos. O volume de mercúrio introduzido é registrado em função da pressão exercida e, posteriormente, com base no volume de amostra e da porosidade da mesma, o volume de mercúrio pode ser convertido em percentagem de espaço vazio ocupado.

As leituras de pressão são convertidas para diâmetro de canal por meio da equação de Laplace para a capilaridade:

$$d = - \frac{4\sigma\cos(\theta)}{p}$$

Em que σ é a tensão superficial do mercúrio, θ é o ângulo de contato do mercúrio com a superfície e p a pressão capilar.

Cabe ressaltar que este ensaio é puramente computacional, sendo que os dados experimentais com os quais estes ensaios foram comparados foram retirados da literatura.

⁵ Atualmente existem metodologias de ultrassonografia, ressonância magnética e algumas metodologias indiretas como a do equipamento Micromeritics ASAP 2010.

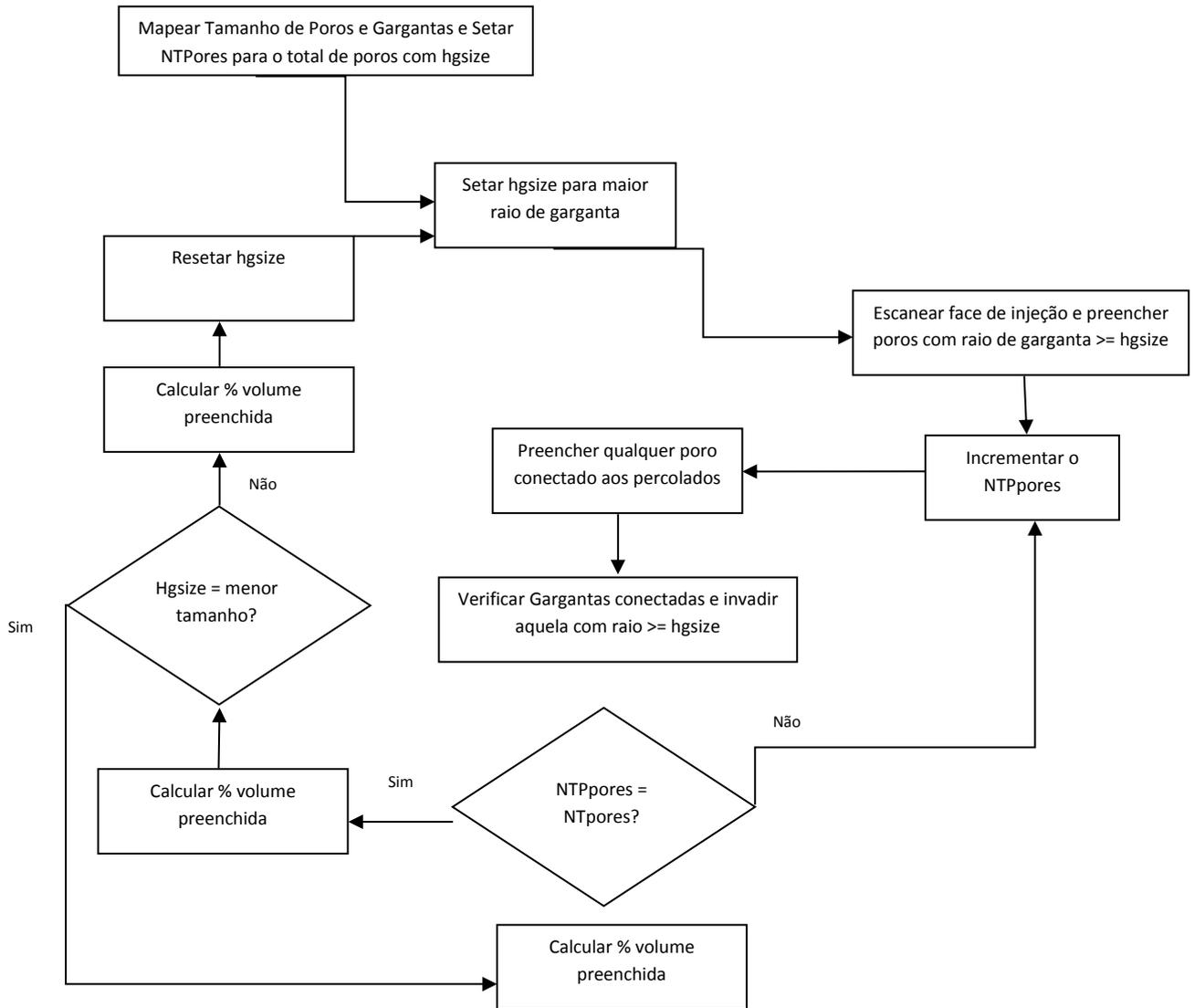


Figura 3: Fluxograma do algoritmo de simulação de intrusão de mercúrio simplificado.

CAPÍTULO III

3. Modelo Termodinâmico para Equilíbrio de Fases

3.1. A descrição termodinâmica de uma mistura

O estado termodinâmico de um sistema com uma única substância pura e em uma única fase é completamente especificado fixando o valor de duas variáveis de estado intensivas, em geral pressão e temperatura, e o seu tamanho e estado termodinâmico é fixado pela especificação do número de mols ou da massa juntamente com a especificação de duas variáveis de estado. Esta teoria é aprofundada de forma bastante pedagógica em SANDLER (2006).

Em uma mistura monofásica de C componentes, intuitivamente espera-se que o estado termodinâmico seja definido ao fixar-se o valor de duas variáveis intensivas do sistema e de $C-1$ frações molares.

Um detalhamento completo a respeito da termodinâmica das misturas pode ser encontrado em SANDLER (2006) e em PRAUSNITZ, LICHTENTHALER e AZEVEDO (1999), não sendo do interesse deste trabalho um enfoque por demasiado aprofundado.

3.1.1. Equilíbrio Líquido-Vapor em Misturas

O marco zero para qualquer estudo envolvendo equilíbrio de fases é o critério da igualdade de potenciais químicos, que diz que quando existe equilíbrio de fases, o potencial químico de cada componente nas diferentes fases é idêntico, além do fato das fases estarem em equilíbrio térmico e mecânico (o que é imposto pela uniformidade de temperatura e pressão em todo o sistema).

É válido considerar que ao lidar-se com líquidos, o problema de equilíbrio de fases torna-se mais complexo devido ao maior efeito relacionado às forças de van der Waals, pontes de hidrogênio, polarizações, etc, sendo desta forma, mais conveniente utilizar os modelos de coeficiente de atividade (energia de excesso de Gibbs) ou uma equação de estado que seja pelo menos cúbica no volume.

No estudo do fenômeno do equilíbrio de fases duas abordagens são as mais conhecidas, a abordagem $\phi - \phi$ e a abordagem $\gamma - \phi$. A primeira se utiliza dos coeficientes de fugacidade calculados a partir de uma equação de estado, tanto para a fase líquida, quanto para a fase vapor. A segunda se utiliza do coeficiente de fugacidade calculado a partir de uma equação de estado para a fase vapor e do coeficiente de atividade calculado a partir de um modelo de energia de excesso de Gibbs (e.g. NRTL, UNIFAC, UNIQUAC, etc).

3.1.1.1. As equações de estado (EoS)

Existem várias equações de estado descritas na literatura. Essas precisam representar o comportamento PVT de um sistema ao longo de grandes intervalos de temperatura e pressão com acurácia aceitável tanto para gases e líquidos. Além disso, elas não devem ser complexas de modo a levar a dificuldades numéricas ou analíticas quando de suas utilizações.

Do ponto de vista do estudo do equilíbrio de fases, as equações polinomiais cúbicas apresentam características compatíveis com aquelas necessárias aos sistemas multifásicos.

Dentre as EoS mais utilizadas em simuladores de processo consagrados estão, Redlich-Kwong REDLICH e KWONG (1948), Peng-Robinson PENG e ROBINSON (1978), Patel-Teja PATEL e TEJA (1982), Soave-Redlich-Kwong SOAVE (1984), Valderrama-Cisternas VALDERRAMA e CISTERNAS (1986). Outras podem ser citadas, todavia, neste trabalho, preferiu-se restringir o estudo às equações supracitadas, sendo que outros modelos podem ser encontrados descritos em maiores detalhes em PRAUSNITZ, LICHTENTHALER e AZEVEDO (1999).

Neste trabalho, por tratar-se do estudo de misturas de hidrocarbonetos simples, a equação de Peng-Robinson será utilizada. Sabe-se, entretanto que este modelo, gera desvios em relação ao volume de aproximadamente 7% para líquidos a temperaturas reduzidas próximas a 0,65 e de até 27% próxima à temperatura crítica, segundo PENG e ROBINSON (1978).

3.1.1.2. Os modelos de energia de G^E

Segundo SMITH, VAN NESS e ABBOTT (2000), em geral G^E/RT é uma função da temperatura, da pressão e da composição, porém para líquidos em pressões baixas e moderadas é uma função muito fraca de P. Consequentemente, a dependência com a pressão do coeficiente de atividade é normalmente desprezada.

Os desenvolvimentos teóricos feitos com base na termodinâmica molecular do comportamento de soluções líquidas estão baseados no conceito de composição local. No interior de uma solução líquida, composições locais, diferentes da composição global da mistura, são supostamente responsáveis pelas orientações moleculares de curto alcance e não-aleatórias que resultam de diferenças no tamanho molecular e das forças intermoleculares. O conceito foi introduzido por G.M. Wilson, com um modelo conhecido como a equação de Wilson como pode ser visto em WILSON (1964). O sucesso desta equação na correlação de dados em simulações de equilíbrio líquido-vapor incitou o desenvolvimento de modelos de composição local alternativos, mais notadamente a equação de NRTL RENON e PRAUSNITZ (1968) e a equação UNIQUAC ABRAMS e PRAUSNITZ (1975). Vale ressaltar que um desenvolvimento posterior de interesse é o método UNIFAC FREDENSLUNG, JONES e PRAUSNITZ (1977).

Existem outros modelos para a energia de Gibbs em excesso, mas que fogem ao escopo deste trabalho, esses modelos podem ser observados em PRAUSNITZ, LICHTENTHALER e AZEVEDO (1999).

3.2. A metodologia para cálculo do ELV em misturas complexas

As metodologias $\gamma - \phi$ e $\phi - \phi$ são muito úteis, entretanto para a sua utilização, é necessário conhecer, a priori, o número de fases no qual o sistema irá se dividir e/ou utilizar uma metodologia auxiliar de cálculo de estabilidade da mistura, o que, do ponto de vista computacional, não representa um algoritmo que compense o custo computacional e que não possui uma garantia de robustez.

Nas palavras de MICHELSEN (1982), este problema pode ser resolvido com a minimização da energia livre de Gibbs.

Uma solução para este problema é a verificação da estabilidade da fase em estudo, desta forma, o número de fases em um problema de equilíbrio pode ser reduzido, diminuindo a demanda de recursos computacionais. Esta verificação é baseada no critério do plano tangente de Gibbs. MICHELSEN (1982)

3.2.1. O Critério do Plano Tangente

Em uma dada temperatura T_0 e pressão P_0 , uma mistura com C componentes com um vetor \mathbf{z} de frações molares, tem sua energia livre de Gibbs calculada por:

$$G_0 = \sum_i n_i \mu_i^0$$

Em que μ_i^0 é o potencial químico do i -ésimo componente na mistura.

Considerando que esta mistura é dividida em duas fases com $(N - \epsilon)$ e ϵ mols, respectivamente, sendo que a quantidade ϵ de mols na segunda fase é infinitesimal, representa-se o vetor fração molar desta fase por \mathbf{y} .

A mudança na energia livre de Gibbs será:

$$\Delta G = G_1 + G_2 - G_0 = G(N - \epsilon) + G(\epsilon) - G_0$$

Uma expansão em série de Taylor de G_1 , descartando o termo de segunda ordem em ϵ , leva a:

$$G(N - \epsilon) = G(N) - \epsilon \sum_i y_i \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_N = G_0 - \epsilon \sum_i y_i \mu_i^0$$

O que leva a:

$$\Delta G = G(\epsilon) - \epsilon \sum_i y_i \mu_i^0 = \epsilon \sum_i y_i (\mu_i(\mathbf{y}) - \mu_i^0)$$

O critério de estabilidade definido exige que a energia livre de Gibbs esteja no seu mínimo global, assim, um critério necessário e suficiente é:

$$F(\mathbf{y}) = \sum_i y_i (\mu_i(\mathbf{y}) - \mu_i^0) \geq 0$$

Este critério pode ser expandido para misturas multifásicas.

Neste caso, é necessário que todas as espécies possuam potencial químico idêntico em todas as fases.

É possível mostrar que para um sistema multifásico satisfazendo as condições de isopotencial, o valor da função F não depende da fase investigada, assim a equação de estabilidade anteriormente deduzida é condição suficiente para garantir a estabilidade.

No seu trabalho, MICHELSEN (1982) determina uma metodologia para o cálculo da estabilidade de fases com base nos coeficientes de atividade e/ou fugacidade, assim como determina uma metodologia para a separação de fases MICHELSEN (1982). Apesar de útil, esta abordagem foi aprimorada ao longo dos anos, como pode ser visto nos trabalhos de WASYLKIEWICZ e UNG (2000) e de NICHITA, GOMEZ e LUNA (2002).

3.2.2. Metodologia de Cálculo do Equilíbrio de Fases

Utilizando a modelagem para a distância do plano tangente de Gibbs em função dos coeficientes de fugacidade, tem-se:

$$F(\mathbf{y}) = \sum_i y_i (\ln(y_i \phi_i(\mathbf{y})) - \ln(z_i \phi_i(\mathbf{z})))$$

Em que o vetor \mathbf{z} representa a composição de uma fase já testada e dita estável e ϕ o coeficiente de fugacidade.

Este problema pode ser identificado como um problema de minimização de uma função objetivo multimodal padrão, onde existem diversos mínimos. Em geral existem três formas de solucioná-lo: a busca exaustiva pelos pontos estacionários, a resolução do sistema de equações formado pelas derivadas primeiras em função de (N-1) frações molares ou a utilização de um algoritmo de otimização global.

Duas metodologias para o algoritmo de divisão de fases (split) foram estudadas:

3.2.2.1. Extensão do algoritmo de Rachford-Rice para o caso multifásico.

Neste caso utiliza-se o balanço material:

$$\sum_{i=1}^{nc} \beta_j x_{ij} = z_i \quad j = 1, np$$

Em que β_j é função de partição entre duas fases, x_{ij} e fração molar do i -ésimo componente na j -ésima fase e z_i a fração molar do i -ésimo componente na mistura inicial.

$$\sum_{i=1}^{np} \beta_j = 1$$

A constante de equilíbrio é obtida por meio da seguinte relação:

$$K_{ji} = \frac{x_{i,np}}{x_{i,j}} = \frac{\phi_{ji}}{\phi_{npi}} \quad i = 1, nc; j = 1, np - 1$$

Substituindo as equações, chega-se a:

$$x_{npi} = \frac{z_i}{1 + \sum_{j=1}^{np-1} \beta_j \left(\left(\frac{1}{K_{ji}} \right) - 1 \right)} \quad i = 1, n$$

Aplicando a equação de restrição $\sum_{i=1}^{nc} x_{ji} = 1$, tem-se o seguinte conjunto de equações:

$$g_j(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{nc} \frac{\left(\left(\frac{1}{K_{ij}} \right) - 1 \right) z_i}{1 + \sum_{j=1}^{np-1} \beta_j \left(\frac{1}{K_{ji}} - 1 \right)}$$

Este sistema de equações pode ser resolvido utilizando-se o método de Newton ou outro método iterativo robusto (neste trabalho foi utilizado o método de Levenberg-Marquardt, após a transformação em um problema de mínimos quadrados). Entretanto esta metodologia carece de robustez uma vez que a medida que o número de fases estáveis aumenta, a possibilidade de desaparecimento de fases durante o processo de solução iterativo aumenta, o que leva à necessidade de garantir a robustez do método de controle de estabilidade (um algoritmo de otimização com convergência global garantida) e de implementação de artifícios de programação que detectem quando uma fase se exauriu durante a resolução do sistema de equações.

Estes óbices levam à conclusão de que a utilização do algoritmo de Rachford-Rice para um problema onde milhares de cálculos de equilíbrio de fases com número de fases desconhecido, a priori, não é aconselhável uma vez que o gasto computacional será proibitivo.

Outra abordagem possível para o problema do equilíbrio de fases é a proposta de MILCHENSEN (1994), onde a seguinte função objetivo (TPD – Tangent Plane Distance) é definida:

$$TPD(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{j=1}^{np} \beta_j - \sum_{i=1}^{nc} z_i \ln(E_i)$$

Em que:

$$E_i = \sum_{j=1}^{np} \frac{\beta_j}{\phi_{ij}}$$

Desta forma define-se um problema de otimização:

$$\begin{aligned} Q(\boldsymbol{\beta}) &\rightarrow \min \\ \text{s. t. } 0 &\leq \beta_i \leq 1 \end{aligned}$$

Neste trabalho foi escolhida e utilizada a abordagem de MILCHENSEN (1994) por meio de uma versão modificada do algoritmo DIRECT-L GABLONSKY e KELLEY (2001), inicialmente implementada na biblioteca computacional NLOpt⁶, além disso *benchmarks* foram feitos com um algoritmo genético modificado

⁶ Steven G. Johnson, The NLOpt nonlinear-optimization package, <http://ab-initio.mit.edu/nlopt>

PEÇANHA (2008) e com uma *bind*⁷ atrelada ao software AIMMS, para utilização do algoritmo BARON⁸ SAHINIDIS (1996).

3.2.3. Metodologia de Inicialização do Problema de Flash

Neste trabalho a inicialização do algoritmo utiliza as seguintes equações para o cálculo do ponto de bolha e orvalho, respectivamente:

$$y_i = K_i z_i$$

$$y_i = \frac{z_i}{K_i}$$

A “constante” de equilíbrio é estimada pela relação proposta por WILSON (1969):

$$K_i = P_{r_i} \exp[5.37(1 + \omega_i)(1 - T_{r_i}^{-1})]$$

Em que P_r e T_r representam, respectivamente, a pressão e a temperatura reduzida.

⁷ Estrutura de programação que permite interação com um programa/biblioteca externa por meio de uma camada simplificada de código. No caso deste trabalho uma implementação servidor/cliente local foi utilizada.

⁸ É importante notar que a introdução de uma *bind* com um software terceiro gera no mínimo mais uma camada de software, o que eleva os tempos de execução e demanda computacional, podendo inclusive, algumas vezes, gerar ruídos na comunicação entre os dois softwares o que pode potencialmente levar a resultados equivocados a longo prazo (muitas iterações na função objetivo), por conta de erros de arredondamento oriundos da conversão de valores da precisão dupla para precisão de ponto flutuante, uma vez que a biblioteca do AIMMS trabalha originalmente com valores de ponto flutuante.

Por meio destes dados, é calculado um sistema flash bifásico, de forma a fornecer valores de K_i e dos coeficientes de fugacidade mais calibrados para o cálculo do problema de otimização.

3.2.4. Propriedades dos Componentes

Todas as propriedades dos componentes de interesse aos estudos deste trabalho foram baseados em dados da literatura, do NIST e quando não disponível, os dados são estimados por meio de modelos de estimação baseado em contribuição de grupos, como o proposto em CONSTANTINOUS e GANI (1994).

3.2.5. Implementação Computacional

A implementação computacional do algoritmo de flash multifásico foi feita com base nos seguintes paradigmas: TDD⁹, Orientação à Objetos, Orientação à Interface, Orientação à Plugins e Reutilização de Código BECK (2003).

A implementação se baseou na metodologia de: Implementação – Otimização – Implementação, de forma que o algoritmo computacional foi implementado em Python 2.7 e todos os “*bottlenecks*” foram solucionados com implementações em C++, de forma a permitir o melhor custo benefício possível entre tempo de implementação e tempo de execução.

As implementações, feitas em código híbrido, utilizando C++, foram compiladas no sistema MSys utilizando o compilador GNU GCC 4.8.1 e o construtor SCons e *binds* implementadas pelo autor para fazer a comunicação C++/Python.

O algoritmo é baseado na estrutura mostrada na Figura 4, onde a interface IUniverse faz interface com o usuário.

A interface IEquilibria implementa toda metodologia de equilíbrio, no caso deste trabalho a minimização da energia livre de Gibbs em excesso. A interface

⁹ Test-DrivenDevelopment: metodologia de programação onde os problemas que podem ocorrer com o software são previstos e a implementação é feita de forma a evitá-los. Uma das grandes vantagens desta metodologia é que todos os testes relativos ao software são feitos iterativamente ao próprio desenvolvimento.

IMixture implementa todos os métodos relativos às propriedades de mistura, assim como a interface IComponente implementa todos os métodos relativos às propriedades dos componentes. A interface IEquilibria repousa sobre as interfaces IEoS e IGibbsExcess que implementam os modelos de coeficiente de fugacidade e coeficiente de atividade, respectivamente. A biblioteca Beholder contém implementação dos métodos numéricos pertinentes, além do algoritmo de otimização.

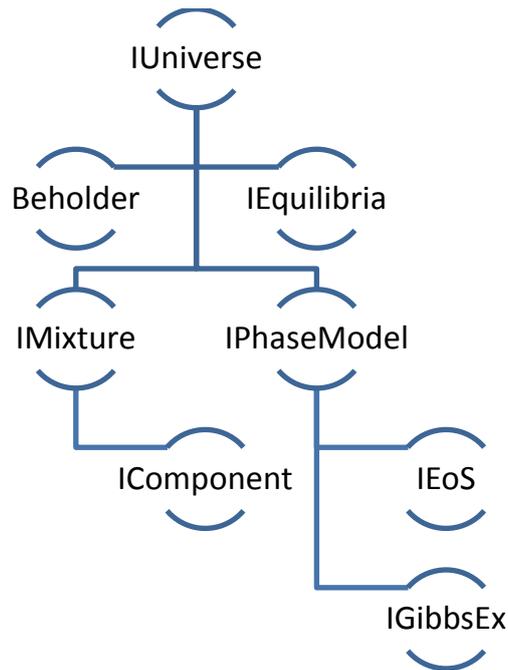


Figura 4: Organograma das interfaces do algoritmo de equilíbrio

3.2.6. **Benchmark da Implementação Proposta**

Foram escolhidos 4 problemas teste para a aferição da robustez da implementação proposta: $H_2S + CH_4$, mistura de n-propanol + n-butanol + benzeno + água (PBBA), mistura de Yarborough YARBOROUGH (1972), sistema “sourgas” ROBINSON (1978).

3.2.6.1. H₂S + CH₄

Este problema foi inicialmente proposto por MICHELSEN (1982), trata-se de uma mistura equimolar de metano com sulfeto de hidrogênio (gás sulfídrico) a uma temperatura de 463,15°C e 4,053.10⁶ Pa.

Utilizou-se neste sistema a EoS SRK com o coeficiente de interação binário (BIC) de 0,8. Segundo NICHITA, GOMEZ e LUNA (2002) existem 4 pontos estacionários na função objetivo (TPD) proposta por MILCHENSEN (1994).

O mínimo global para a fase estável encontra-se em (0.968, 0,032).

Neste ponto, testa-se a estabilidade do sistema:

Ao testar-se um sistema VL, encontra-se TPD negativo, ou seja, trata-se de um sistema instável.

Ao testar-se um sistema LL, encontra-se TPD positivo, ou seja, trata-se de um sistema estável.

Verifica-se, neste caso, que além de todo o procedimento de flash, é necessário acoplar um passo extra de inteligência computacional que faça a verificação entre as fases líquidas e as fases vapor. É importante notar que MICHELSEN (1982) pressupôs que a EoS conseguiria modelar fidedignamente tanto a fase líquida quanto a fase vapor, desta forma, em sua implementação bastaria modificar o coeficiente calculado pela outra raiz já calculada. No presente trabalho, devido à sua implementação modular (que será explicada adiante), não é possível fazer tal suposição, o usuário escolhe, por meio da definição do problema em linguagem de script, um modelo a ser utilizado para representar a fase vapor e um modelo para a fase líquida, e o algoritmo implementado faz todos os testes. Esta flexibilidade sobrepõe o possível *overtime* adicionado ao sistema, uma vez que para executar a simulação do mesmo sistema em estudo, basta a implementação do novo modelo e não do algoritmo inteiro.

Tabela 1: Comparativo da capacidade de encontrar o mínimo global de diferentes otimizadores no algoritmo de flash

Fase de Teste (CH ₄ : H ₂ S)	Sistema	TPD Genético ¹⁰ (FOB, % de vezes que encontrou o global, ponto global)	TPD DIRECT-L (FOB, ponto global)	TPD BARON (FOB, ponto global)	TPD MICHELSEN (1982)
0,50 : 0,50	VL	-8,23e-2 (30%) (0,92; 0,08)	-8,25e-2 (0,92; 0,08)	-8,25e-2 (0,92; 0,08)	-8,25e-2 (0,92; 0,08)
0,11 : 0,89	LL	5,00e-3 (40%) (0,90; 0,1)	5,607e-3 (0,92; 0,08)	5,607e-3 (0,92; 0,08)	5,607e-3 (0,92; 0,08)
0,98; 0,02	VL	9,95e-1 (20%) (0,09; 0,91)	1,09e-2 (0,11; 0,89)	1,09e-2 (0,11; 0,89)	1,09e-2 (0,11; 0,89)

Pode-se verificar, segundo a Tabela 1, que todos os algoritmos em questão alcançaram o mínimo esperado, todavia é conveniente afirmar que o algoritmo genético, no melhor dos casos, conseguiu encontrar o mínimo global 40% das vezes. Cabe ressaltar que tal resultado poderia ser melhorado com um *setup* fino, específico para o algoritmo genético em questão, todavia este passo foge ao escopo deste trabalho. Igualmente, por meio deste ensaio foi possível averiguar que a implementação da metodologia do teste de estabilidade encontra-se de acordo com aquela proposta por MICHELSEN (1982).

3.2.6.2. Mistura de PBBA

Esta mistura foi extraída de TESSIER (2000), o modelo NRTL para a fase líquida teve os seus parâmetros extraídos do mesmo trabalho.

Esta mistura foi escolhida pois em algoritmos de otimização globais demanda muito tempo computacional, servindo de balizamento para aferição de tempo em sistemas complexos.

¹⁰ O algoritmo genético pode ser utilizado para encontrar mínimos globais, mas não é, por definição, um método de otimização global, na verdade é um método estatístico. Em todos os ensaios computacionais foi utilizada a metodologia de 10 execuções para verificar quantas vezes o mínimo global (ou valor próximo ao mesmo) era localizado.

Tabela 2: Comparativo da capacidade de encontrar o mínimo global em um sistema de separação de fases complexo.

Fase de Teste (C ₃ :C ₄ :C ₆ H ₆ :H ₂ O)	Sistema	TPD Genético (FOB, % de vezes que encontrou o global, ponto global)	TPD DIRECT-L (FOB, ponto global)	TPD BARON (FOB, ponto global)	TPD TESSIER (2000)
(0,148:0,052:0,600:0,200) ¹¹	VL	-0,3398 (90%)(1,81.10 ⁻² , 6.20.10 ⁻⁴ , 4,48.10 ⁻³ , 0,977)	-0,3398 (1,81.10 ⁻² , 6.20.10 ⁻⁴ , 4,48.10 ⁻³ , 0,977)	-0,3398 (1,81.10 ⁻² , 6.20.10 ⁻⁴ , 4,48.10 ⁻³ , 0,977)	-0,3398 (1,81.10 ⁻² , 6.20.10 ⁻⁴ , 4,48.10 ⁻³ , 0,977)
(0,250:0,250:0,250:0,250)	VL	3,0790.10 ⁻² (3,53.10 ⁻² , 5,73.10 ⁻³ ; 6,75.10 ⁻³ :0,952)	3,0790.10 ⁻² (3,53.10 ⁻² :5,73.10 ⁻³ : 6,75.10 ⁻³ :0,952)	3,0790.10 ⁻² (3,53.10 ⁻² :5,73.10 ⁻³ : 6,75.10 ⁻³ :0,952)	3,0790.10 ⁻² (3,53.10 ⁻² , 5,73.10 ⁻³ ; 6,75.10 ⁻³ :0,952)

Pode-se verificar, segundo a Tabela 2 que todos os algoritmos em questão alcançaram o mínimo esperado e assim como no exemplo anterior, o algoritmo genético necessita de um *setup* mais fino.

Por meio deste ensaio, foi possível verificar que mesmo em sistemas complexos, o algoritmo de teste de estabilidade de fases utilizado encontra-se de acordo com o que é proposto na literatura.

3.2.6.3. Mistura de Yarborough (Y8)

Esta mistura é constituída de uma combinação de normal alcanos C₁, C₂, C₃, nC₅, C₇ e nC₁₀, respectivamente nas seguintes frações molares: 0,8097; 0,0566; 0,0306; 0,0457; 0,033; 0,0244. Para o cálculo do flash desta mistura utilizou-se a EoS de Peng-Robinson com todos os BICs iguais a zero.

Neste experimento foi aferida a capacidade da implementação de calcular a curva Pressão x Temperatura, além dos pontos de bolha e orvalho.

Para verificar quando existe uma ou duas fases é feito o teste de estabilidade: com TPD < 0, a fase é considerada instável e os resultados obtidos são

¹¹ Em TESSIER (2000) não existe dados quanto um teste para um sistema LL, desta forma, por se tratar de um benchmark, não foram colocados dados relativos a este teste.

utilizados para inicializar o flash. Quando o cálculo de flash é feito em uma região de uma única fase, o algoritmo retorna a solução trivial.

A comparação dos resultados pode ser vista na Figura 5:

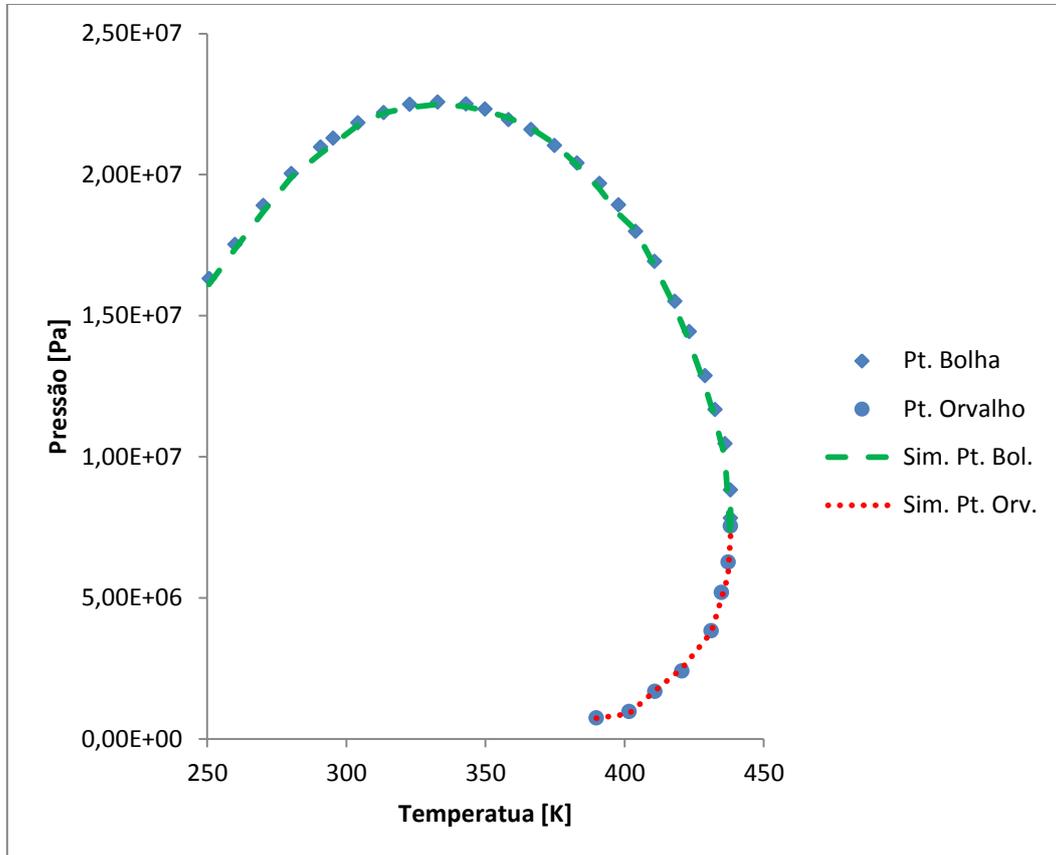


Figura 5: Comparação de Resultados com a Mistura Y8 descrita em 3.2.6.3 e utilizando a equação de estado de Peng-Robinson.

Por meio da Figura 5 pode-se verificar que a metodologia implementada neste trabalho corresponde àquela apresentada na literatura, de forma que o erro absoluto percentual foi de 1,721%.

3.2.6.4. Sistema “SourGas”

Neste sistema existe uma grande região de pressões à temperatura de 451°C onde existe um equilíbrio VLL, segundo ROBINSON (1978). Utilizou-se a EoS de Peng-Robinson, com os seguintes BICs extraídos de PAN (1998) e apresentados na Tabela 3.

Tabela 3: BIC para sistema SourGas utilizando EoS de Peng-Robinson

Componente	C ₂	C ₃	H ₂ S	CO ₂	N ₂
K _{c1-j}	0,0000	0,0000	0,1000	0,1250	0,0310
K _{c2-j}	-	0,0000	0,0800	0,1350	0,0420
K _{c3-j}	-	-	0,0800	0,1500	0,0910
K _{h2s-j}	-	-	-	0,120	0,2000
K _{co2-j}	-	-	-	-	-0,0200

Após o cálculo de flash a 451°C e 2,19x10⁶Pa utilizando-se o algoritmo DIRECT-L, chegou-se aos resultados apresentados na Tabela 4, sendo os mesmos comparados com aqueles encontrados em PAN (1998).

Tabela 4: Sistema VLLE - Comparação entre este trabalho e PAN (1998)

Componente	Fração na Alimentação	Fração molar na fase					
		Líqu. Rico em HC		Líqu. Rico em H ₂ S		Vapor	
		Este Trabalho	PAN (1998)	Este Trabalho	PAN (1998)	Este Trabalho	PAN (1998)
C ₁	0,70592	0,5199	0,5282	0,0723	0,0666	0,8560	0,8577
C ₂	0,06860	0,1681	0,1598	0,0270	0,0261	0,0130	0,0113
C ₃	0,02967	0,0730	0,0760	0,0072	0,0075	0,0005	0,0006
H ₂ S	0,10559	0,1869	0,1879	0,8625	0,8688	0,0095	0,0094
CO ₂	0,01996	0,0411	0,0371	0,0286	0,0304	0,0082	0,0082
N ₂	0,07026	0,0110	0,0110	0,0014	0,0006	0,1129	0,1129

Pode-se verificar pela Tabela 4 que os desvios deste trabalho em relação ao trabalho de PAN (1998) são menores que 1%, sendo, provavelmente, advindos das diferentes metodologias de cálculo entre os dois trabalhos.

Para fins de comparação este sistema também foi estudado utilizando um sistema híbrido de solução, ou seja, a fase gasosa é representada pela EoS de Peng-

Robinson com BICs da Tabela 3 e a fase líquida é representada utilizando o modelo UNIFAC. A coluna A representa as iterações VL sendo calculadas pelo modelo UNIFAC padrão e as LL sendo calculadas pelo modelo UNIFAC modificado por LARSEN e RASMUSSEN (1981) para líquidos. A coluna B representa todas as interações sendo calculadas pelo modelo UNIFAC padrão.

Tabela 5: Sistema VLLE utilizando EoS e UNIFAC

Componente	Fração na Alimentação	Fração molar na fase					
		Líqu. Rico em HC		Líqu. Rico em H ₂ S		Vapor	
		A	B	A	B	A	B
C ₁	0,70592	0,4951	0,4935	0,0823	0,0770	0,8351	0,8409
C ₂	0,06860	0,1600	0,1465	0,0297	0,0291	0,0190	0,0163
C ₃	0,02967	0,0795	0,0724	0,0072	0,0073	0,0065	0,0053
H ₂ S	0,10559	0,1948	0,2123	0,8598	0,8565	0,0155	0,0147
CO ₂	0,01996	0,0601	0,0687	0,0233	0,0344	0,0142	0,0133
N ₂	0,07026	0,0105	0,0066	0,0045	0,0006	0,1102	0,1106

Pode-se verificar por comparação entre a Tabela 4 e a Tabela 5 que a utilização dos modelos UNIFAC padrão e modificado na avaliação do equilíbrio de fases altera os resultados apresentados na literatura de forma considerável. Cabe ressaltar que a resolução do conjunto de equações pertinentes ao uso do coeficiente de atividade ao invés do uso do coeficiente de fugacidade no algoritmo de Split e no algoritmo de teste de estabilidade aumenta o número de equações a serem resolvidos, o que aumenta a demanda computacional.

3.2.7. Performance dos Sistemas Executados

Foi feito um “*benchmark*” para aferir a velocidade da resolução do algoritmo de separação de fases nos sistemas estudados de forma a verificar a velocidade média de resolução de sistemas complexos.

Tabela 6: Benchmark em função do tempo dos algoritmos de otimização

Sistema	Feed	DIRECT-L	Genético	Baron ¹²	Literatura
H ₂ S + CH ₄	0,50 : 0,50	753,55	2787,65	21,27 (6,38)	NA
	0,11 : 0,89	57,65	25,87	6,88 (2,06)	NA
	0,98; 0,02	59,21	27,12	9,45 (2,84)	NA
PBBA	0,148:0,052:0,600:0,200	298,70	5,85	6,47 (1,94)	47,31
	0,25:0,25:0,25:0,25	270,50	9,65	8,45 (2,54)	35,21
Yarborough	Fixo	0,54	1,25	3,45 (1,04)	NA
“SourGas”	Fixo	0,33	3,28	3,21 (0,96)	NA

3.2.8. Conclusões

Foi possível observar que com o *benchmark* dos sistemas estudados o algoritmo de equilíbrio de fases possui capacidade de representar os fenômenos em sistemas complexos ligados ao contexto dos reservatórios de petróleo, uma vez que será utilizado um sistema bem mais simples nos experimentos computacionais utilizados neste trabalho.

É possível aferir, também, que o melhor algoritmo de otimização a ser utilizado seria o Baron, uma vez que o mesmo apresenta tempos reduzidos de execução computacional, entretanto o mesmo faz parte do software AIMMS (para uso não comercial), o que implicaria no uso constante de uma *bind* computacional que degrada, de forma bastante custosa, a performance computacional do mesmo. O uso do algoritmo Genético seria interessante, entretanto este não garante que o mínimo global seja alcançado, e desta forma, por ser uma parte crítica no processo de cálculo de escoamento, necessita-se de uma solução mais robusta. Desta forma, foi utilizado o

¹² Foi aferido que o tempo médio consumido na comunicação (uma vez que foi utilizada uma *bind*) representa cerca de 70% do tempo total, desta forma o tempo estimado do algoritmo é o valor entre parêntesis. Cabe ressaltar que a própria aferição interfere no processo, e desta forma a utilização do algoritmo em questão sem nenhuma *Bind* pode levar à conclusões diferentes.

algoritmo Direct-L que apresenta bons resultados em relação ao tempo de execução e apresentou bom desempenho ao alcançar o mínimo global¹³.

3.3. Modelagem do Escoamento

Segundo FOX e MCDONALD (2001), ao lidarmos com fluidos em movimento, estaremos necessariamente preocupados com a descrição de um campo de velocidade. Um escoamento, neste caso, pode ser classificado como uni, bi ou tridimensional em função do número de coordenadas espaciais necessárias para se especificar o campo de velocidade. Embora a maioria dos campos de escoamento sejam intrinsecamente tridimensionais, a análise baseada em um número menor de dimensões é, com frequência, significativa.

Em geral, o ponto de partida de um escoamento é o estudo do fluxo de fluidos incompressíveis. Essa simplificação, em geral, se aplica aos líquidos, mas em casos muito especiais também pode ser aplicado à gases.

A primeira lei de interesse, quanto fala-se a respeito de escoamento em reservatórios de hidrocarbonetos é a Lei de Darcy. Henry Darcy (1803-1858), foi o primeiro a verificar que existia uma relação entre a vazão de fluido que atravessava um leito de areia e a carga associada a essa vazão. Em suas experiências, Darcy também constatou que as dimensões do leito poroso afetavam os resultados obtidos e apresentou uma relação matemática que se tornaria a base para a compreensão dos fenômenos de escoamento de fluidos através de meios porosos:

$$Q = \frac{KS(h_i - h_o)}{L}$$

¹³ Mesmo se tratando de um algoritmo de otimização global, muitas vezes ele pode falhar em sua missão, seja por ter excedido o número máximo de iterações ou de avaliações da função objetivo. Em um algoritmo de otimização global, apenas pode-se garantir que o mínimo global foi alcançado se não houverem limitações em termos de avaliações de funções objetivo, tempo de execução, etc.

Em que Q é a vazão volumétrica através do leito poroso, K é uma constante de proporcionalidade que depende do meio poroso, S é a área transversal do meio poroso, L é o comprimento do leito poroso e (h_i-h_o) é a diferença de carga em termos de altura.

A experiência de Darcy foi posteriormente estendida a outros fluidos, quando então se verificou que a constante de proporcionalidade K era uma função também da viscosidade μ e do peso específico γ do fluido utilizado, ou seja:

$$K = \left(\frac{k}{\mu}\right) \gamma$$

Para um mesmo leito poroso, a nova constante de proporcionalidade k independe do tipo de fluido em escoamento, desde que o meio poroso esteja totalmente saturado com esse fluido. Assim k é uma característica exclusiva do meio poroso, sendo denominada permeabilidade absoluta, conforme constata ROSA (2006).

Definido o termo de permeabilidade absoluta, pode-se ver que esta é uma propriedade intrínseca do meio, e que as experiências de Darcy se pautaram apenas em um único fluido percolando o leito poroso em questão. Para proceder o estudo de mais de um fluido percolando o meio ao mesmo tempo, é necessária a introdução dos conceitos de permeabilidade efetiva e de permeabilidade relativa.

Segundo ROSA (2006), a vazão de uma fase em um meio poroso saturado com dois ou mais fluidos é sempre menor que a vazão de uma fase quando somente ela satura o meio poroso, quando tem-se duas ou mais fases a capacidade de transmissão de um destes fluidos se chama permeabilidade efetiva do meio ao fluido considerado. O quociente entre a permeabilidade efetiva e a permeabilidade absoluta é a permeabilidade relativa.

Uma curva de permeabilidade relativa em função da saturação da água, em um meio poroso contendo água e óleo, pode ser observada na Figura 6.

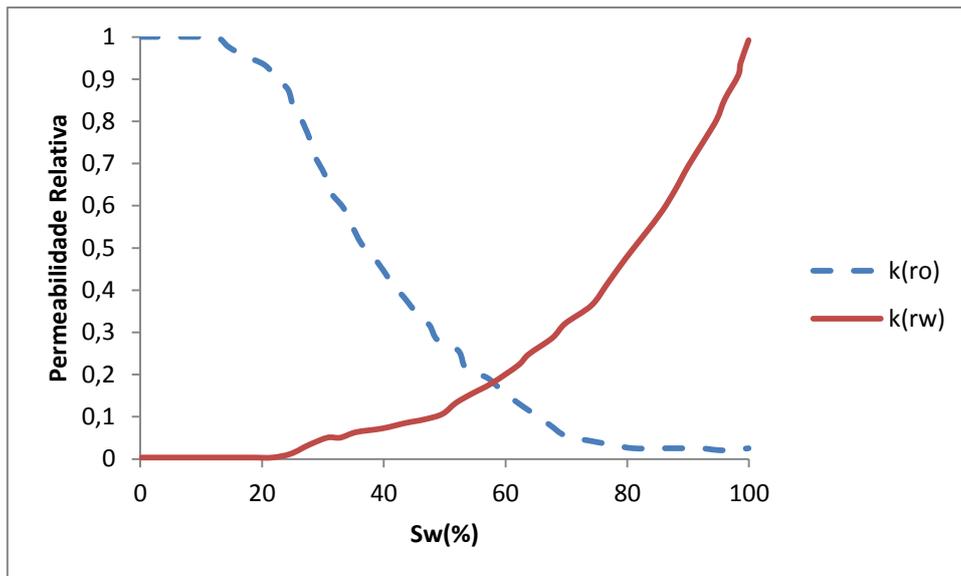


Figura 6: Permeabilidade relativa em função da saturação da água ROSA (2006)

Uma discussão interessante neste momento é o experimento de embebição. Imagine um meio poroso completamente saturado com um fluido 1, neste momento a permeabilidade efetiva deste fluido é igual à permeabilidade absoluta. Imagine agora que um fluido 2, imiscível com o fluido 1 comece a ser lentamente introduzido no meio poroso. No início ele ainda não consegue fluir e sua permeabilidade efetiva é nula.

À medida que a saturação do fluido 1 diminui, a sua permeabilidade relativa vai caindo. Entretanto o fluido 2 ainda não formou uma fase contínua do ponto de influxo ao ponto de efluxo. Neste momento o fluido 1 possui uma saturação chamada funicular e o fluido 2 uma saturação insular. No ponto que o fluido 2 está na iminência de efluir, este está no instante de *breakthrough* ou em sua saturação crítica. A medida que mais fluido 2 é inserido no meio, a saturação do fluido 1 é diminuída até um valor mínimo, chamado de saturação irreduzível.

Existem diversos fatores que influenciam a permeabilidade relativa, dentre eles pode-se citar: o processo de saturação (a permeabilidade da embebição é diferente daquela da drenagem), a molhabilidade e a consolidação do meio poroso.

Neste trabalho, o maior interesse recairá no processo de saturação, onde é simulado o processo de recuperação secundária com injeção de fluidos.

3.4. Modelagem Básica

3.4.1. Modelo de Escoamento Bifásico Isotérmico Incompressível

Neste trabalho, será proposto o modelo a seguir para o escoamento em uma rede poroso representada por uma rede de percolação, conforme apresentado anteriormente.

Basicamente o modelo de um fenômeno físico é composto de balanço de massa, balanço de energia, balanço de quantidade de movimento (ou momentum) e equações constitutivas. No modelo em questão, deve-se utilizar o balanço de massa, de quantidade de movimento e as equações constitutivas, uma vez que a temperatura é considerada constante, o que torna o balanço de energia desnecessário.

Inicialmente fazem-se as seguintes considerações:

- Os fluidos são incompressíveis;
- A força gravitacional é representada pelo vetor $[0,0, g]^T$;
- A interação fluido-rocha é considerada desprezível;
- A interação entre fases é considerada como sem deslizamento;
- Os escoamentos das fases são independentes entre si.

Com base nestes argumentos, inicialmente, é definido o balanço de massa por componente:

$$\frac{dM_A^{i,j,k}}{dt} = \sum_{d=0}^5 M_A^d$$

$$\frac{dM_B^{i,j,k}}{dt} = \sum_{d=0}^5 M_B^d$$

Sabe-se, entretanto, que o fluxo mássico que é calculado por meio da equação:

$$\dot{M} = \rho Q$$

Assim, reescrevendo, tem-se:

$$\frac{dM_A^{i,j,k}}{dt} = \rho_A \sum_{d=0}^5 (Q_A^d)^{i,j,k}$$

$$\frac{dM_B^{i,j,k}}{dt} = \rho_B \sum_{d=0}^5 (Q_B^d)^{i,j,k}$$

Posteriormente, equaciona-se o balanço de momentum em coordenadas cilíndricas no meio em questão. Note, entretanto, que neste momento a única consideração é a de Fluido Newtoniano de massa específica constante.

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\phi}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{v_\phi^2}{r} \right) \\ & = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} - \frac{v_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \right] + \rho g_r \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial v_\phi}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\phi}{\partial r} + \frac{v_\phi}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + v_z \frac{\partial v_\phi}{\partial z} + \frac{v_r v_\phi}{r} \right) \\ & = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \phi} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_\phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\phi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 v_\phi}{\partial z^2} - \frac{v_\phi}{r^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} \right] + \rho g_\phi \end{aligned}$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{u_\phi}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \phi} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_z$$

Com o equacionamento básico do fenômeno, pode-se simplificar o sistema de forma a inserir suas principais peculiaridades.

→ O fluxo está em regime permanente: $\frac{\partial}{\partial t} = 0$

→ As componentes radial e centrífuga são nulas: $v_r = v_\phi = 0$

→ O fluxo é eixo simétrico: $\frac{\partial}{\partial \phi} = 0$

→ O fluxo é totalmente desenvolvido: $\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$

Assim chega-se às seguintes equações:

$$\frac{\partial p}{\partial r} = 0$$

$$\mu \left[\frac{2}{r^2} \left(\frac{\partial v_r}{\partial \phi} \right) \right] = 0$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) = \frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial z}$$

Resolvendo-se a terceira equação, chega-se à seguinte relação:

$$v_z = \frac{1}{4\mu} \frac{\partial p}{\partial z} r^2 + c_1 \ln(r) + c_2$$

Uma vez que v_z necessita ser finito em $r = 0$, $c_1=0$.

A condição de “sem escorregamento” necessita que $v_z=0$ quando $r = R$, o que leva a:

$$c_2 = -\frac{1}{4\mu} \frac{\partial p}{\partial z} R^2$$

E assim, finalmente, chega-se a:

$$v_z = -\frac{1}{4\mu} \frac{dp}{dz} (R^2 - r^2)$$

Aplicando a média na direção radial e considerando uma queda de pressão constante, após algum algebrismo, chega-se à:

$$\langle v_z \rangle = \frac{D^2}{32\mu} \frac{\Delta P}{L}$$

E assim à equação de Hagen-Poiseuille:

$$\Delta P = \frac{32\mu L \langle v_z \rangle}{D^2}$$

Entretanto, no atual modelo, a velocidade de escoamento não é um fator de interesse, assim, é possível reescrever esta equação da seguinte maneira:

$$Q = \frac{\pi D^2}{4} \langle v_z \rangle$$

$$\Delta P = \frac{128\mu L Q}{\pi D^4}$$

Assim tem-se uma relação de fluxo e pressão bem definida derivada diretamente das equações de Navier-Stokes, ou seja, ela não sofre qualquer dependência com a modelagem do sistema em estudo.

Neste momento, têm-se dois conjuntos de equações e um conjunto de equações constitutivas.

Entretanto, ainda não há um conjunto de equações para resolver o mapa de pressão. Para tal, pode-se utilizar a equação da continuidade em coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial (\rho v_\phi)}{\partial \phi} + \frac{\partial (\rho v_z)}{\partial z} = 0$$

Entretanto, antes que a mesma seja estudada, é interessante analisar a modelagem da rede de fluxo.

A rede de fluxo em estudo é formada por dutos capilares, nos quais o fluxo pode ser satisfatoriamente modelado pela equação de Hagen-Poiseuille, por definição. Entretanto, a equação de Hagen-Poiseuille não foi concebida para representar o escoamento de mais de uma fase.

Para sobrepujar essa limitação, faz-se uma aproximação de escoamento pseudo-monofásico, para tal, considera-se que cada fase escoar por um capilar independente. Para isso, basta que seja encontrada uma relação adequada entre os fluxos.

Inicialmente, define-se uma relação que é independente de hipóteses:

$$Q = Q_A + Q_B$$

Reescrevendo a equação de Hagen-Poiseuille em função do fluxo, tem-se:

$$Q = \left(\frac{\pi D^4}{128 \mu L} \right) \Delta P = \left(\frac{S^2}{8 \pi \mu L} \right) \Delta P$$

Assim, a equação torna-se:

$$\left(\frac{S^2}{8 \pi \mu L} \right) \Delta P = \left(\frac{S_A^2}{8 \pi \mu_A L} \right) \Delta P + \left(\frac{S_B^2}{8 \pi \mu_B L} \right) \Delta P$$

Simplificando-se, chega-se a:

$$\frac{S^2}{\langle \mu \rangle} = \frac{S_a^2}{\mu_a} + \frac{S_b^2}{\mu_b}$$

Sabe-se também que há a seguinte relação:

$$S = S_a + S_b$$

Assim, chega-se a:

$$\frac{S^2}{\mu} = \frac{S_a^2}{\mu_a} + \frac{(S - S_a)^2}{\mu_b}$$

Operacionando, chega-se a:

$$\frac{S^2}{\mu} = \frac{S_A^2}{\mu_A} + \frac{S^2 - 2S_A S + S_A^2}{\mu_B}$$

$$\frac{S^2}{\mu} = \frac{\mu_B S_A^2 + \mu_A S^2 - 2\mu_A S_A S + \mu_A S_A^2}{\mu_A \mu_B}$$

$$\left(\frac{\mu_A \mu_B}{\mu}\right) S^2 = \mu_B S_A^2 + \mu_A S^2 - 2\mu_A S_A S + \mu_A S_A^2$$

$$(\mu_A + \mu_B) S_A^2 - (2\mu_A S) S_A - \left[\mu_A - \left(\frac{\mu_A \mu_B}{\mu}\right)\right] S^2 = 0$$

$$\Psi_1 S_A^2 + \Psi_2 S_A + \Psi_3 S^2 = 0$$

Na equação acima, sabe-se, *a priori*, o valor de S , uma vez que tal valor advém do capilar, independentemente dos fluidos que por ele escoam. Assim, a supracitada equação, torna-se uma equação de segundo grau, onde os coeficientes são funções da área da seção reta do capilar e da viscosidade dos fluidos que por ele escoam.

Cabe salientar que nessa equação, uma das raízes será fisicamente irrealizável (negativa), assim, apenas uma das raízes representará a área de interesse.

Entretanto, este escoamento se dará em uma área representada por uma cunha (zona representada pela cor branca na Figura 7), assim, é necessário calcular o diâmetro hidráulico equivalente para o capilar de mesma área.

Para tal, procede-se da seguinte maneira:

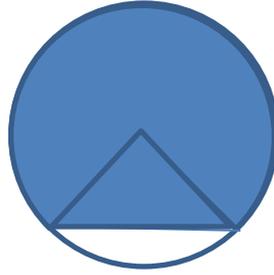


Figura 7: Cunha de escoamento de fases

$$S_A + S_T = \frac{\alpha R^2}{2}$$

$$S_T = \frac{R^2 \text{sen}(\alpha)}{2}$$

$$S_A = \frac{\alpha R^2}{2} - \frac{R^2 \text{sen}(\alpha)}{2} = \frac{R^2}{2} (\alpha - \text{sen}(\alpha)) = \frac{D^2}{8} (\alpha - \text{sen}(\alpha))$$

$$S_A = \left(\frac{D^2}{8} \right) (\alpha - \text{sen}(\alpha))$$

Vale notar que o valor de S_A já é conhecido, desta forma, deve-se resolver o sistema implícito em α , lembrando que o valor estará em radianos.

Com o valor de α conhecido, é possível calcular o perímetro da cunha, por meio da equação:

$$P_A = \frac{\alpha R}{2} + R\sqrt{2(1 - \cos(\alpha))} = \frac{\alpha D}{4} + \frac{D}{2}\sqrt{2(1 - \cos(\alpha))}$$

$$P_B = \left(\frac{(2\pi - \alpha)D}{4} \right) + \frac{D}{2}\sqrt{2(1 - \cos(\alpha))}$$

E assim, pode-se calcular o diâmetro hidráulico por meio da equação:

$$D_H^A = \frac{4S_A}{P_A}$$

$$D_H^B = \frac{4S_B}{P_B}$$

Assim, verifica-se que a equação de Hagen-Poiseuille irá funcionar apenas como equação de estado. Desta forma, torna-se necessária mais uma equação para resolver o campo de pressão ao longo do domínio em estudo.

Para tal, é possível utilizar a equação da continuidade, dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = 0$$

Note que neste momento voltou-se a se utilizar a notação em coordenadas cartesianas, uma vez que o mapa os pontos de continuidade não ocorrem nas gargantas da rede de percolação e sim nos nós.

Verificando as relações de massa, e considerando que a densidade é equivalente à média ponderada das fases, tem-se:

$$\rho = w_a \rho_a + w_b \rho_b$$

$$w_a = \frac{M_a}{M_a + M_b}$$

$$w_b = 1 - w_a$$

Para ter-se uma visão mais simplificada do problema, escreve-se a equação da continuidade em função dos fluxos, supondo as velocidades constantes:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{Q_x}{S_x} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{Q_y}{S_y} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{Q_z}{S_z} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right) = 0$$

Cabe lembrar que os fluxos devem ser reescritos de forma a tornar a equação verossímil à realidade sem reduzir a sua resolução. Assim, sabendo-se que o fluxo na direção x advém das faces norte e sul, na direção y das faces leste e oeste e na direção z das faces de topo e de fundo, tem-se que o fluxo na direção d é o somatório do fluxo advindo das duas faces normais à citada direção, donde pode-se reescrever a equação acima como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{Q_x^N}{S_x^N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^N + \frac{Q_x^S}{S_x^S} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^S + \frac{Q_y^W}{S_y^W} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)^W + \frac{Q_y^E}{S_y^E} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)^E + \frac{Q_z^T}{S_z^T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^T + \frac{Q_z^B}{S_z^B} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^B = 0$$

Além disso, definiu-se os fluxos como pseudo-monofásico, ou seja, o fluxo de cada fase é independente. Assim, deve definir os fluxos em separado:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{(Q_A + Q_B)_x^N}{S_x^N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^N + \frac{(Q_A + Q_B)_x^S}{S_x^S} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^S + \frac{(Q_A + Q_B)_y^W}{S_y^W} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)^W \\ + \frac{(Q_A + Q_B)_y^E}{S_y^E} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)^E + \frac{(Q_A + Q_B)_z^T}{S_z^T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^T + \frac{(Q_A + Q_B)_z^B}{S_z^B} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^B = 0 \end{aligned}$$

Estudando-se a equação da continuidade. Inicialmente, sabe-se que ambos os fluidos são incompressíveis, entretanto nos nós o fluido é considerado como uma mistura perfeita onde a densidade é calculada pela média das massas ponderadas pela fração mássica, assim tem-se as seguintes equações de interesse:

$$\rho = \omega_A \rho_A + (1 - \omega_A) \rho_B$$

$$\omega_A = M_A (M_A + M_B)^{-1}$$

Assim, sabe-se que:

$$\partial \rho = \rho_A \partial \omega_A - \rho_B \partial \omega_A = (\rho_A - \rho_B) \partial \omega_A$$

$$\partial \omega_A = -M_A (M_A + M_B)^{-2} \partial M_A + (M_A + M_B)^{-1} \partial M_A$$

$$\partial \omega_A = \frac{1}{(M_A + M_B)} (1 - \omega_A) \partial M_A$$

E pode-se chegar a:

$$\partial \rho = \left[\left(\frac{\rho_A - \rho_B}{M_A + M_B} \right) (1 - \omega_A) \right] \partial M_A$$

Neste caso, é possível reescrever o sistema algébrico diferencial em função das suas variáveis de entrada (M_A , M_B , P), entretanto, há um inconveniente nesta abordagem: ao reescrever a densidade como uma função de ∂M_A , é necessário derivar a equação uma vez a fim de possibilitar o cálculo do valor de ∂P , e desta forma surgiria um termo $\partial^2 M_A$ o que tornaria o Sistema Algébrico Diferencial (DAE) em índice 2, o que complicaria consideravelmente a sua solução.

A fim de minimizar este problema, introduz-se a Hipótese da Pseudo-Compressibilidade LEMOS (2011), ou seja, o fluido passa a ser compressível, mas o

seu estágio compressível é tão curto quanto possível e assim o comportamento apresentado é o de um fluido incompressível na maior parte do intervalo de interesse.

Essa é uma maneira de lidar com o acoplamento pressão-velocidade (P-V). Nesta formulação, a equação da continuidade é modificada pela adição da derivada com relação ao tempo do termo de pressão.

A incompressibilidade artificial ou pseudo-compressibilidade tem como base admitir que a variação da densidade não ocorre de forma significativa e que a variação tanto da pressão como da densidade estão relacionadas à velocidade do som, que por sua vez apresenta um valor finito. Esta suposição permite construir uma relação direta entre os campos de velocidade e pressão, na equação da continuidade.

A velocidade de propagação do som para um escoamento isentrópico é dado pela expressão:

$$a^2 = \frac{\xi p}{\rho}$$

Em que:

$$\xi = \frac{c_p}{c_v}$$

Assim é possível reescrever a densidade como:

$$\rho = \left(\frac{\xi}{a^2}\right) p$$

$$\partial \rho = \left(\frac{\xi}{a^2}\right) \partial p$$

E aplicando-se esta equação à equação da continuidade, chega-se a:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\xi}{a^2}\right) \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{(Q_A + Q_B)_x^N}{S_x^N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)^N + \frac{(Q_A + Q_B)_x^S}{S_x^S} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)^S + \frac{(Q_A + Q_B)_y^W}{S_y^W} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)^W \\ + \frac{(Q_A + Q_B)_y^E}{S_y^E} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)^E + \frac{(Q_A + Q_B)_z^T}{S_z^T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right)^T + \frac{(Q_A + Q_B)_z^B}{S_z^B} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right)^B = 0 \end{aligned}$$

3.4.2. Discretização para o modelo de rede de percolação

A rede de percolação em estudo é composta por um conjunto de gargantas e nós conectados entre si de forma pré-determinada e assim representam o meio poroso. Um exemplo simplificado deste modelo em 2D pode ser visto na Figura 8

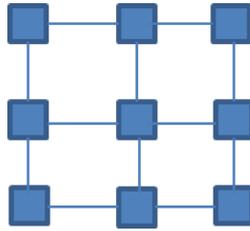


Figura 8: Rede de percolação básica

É importante notar que na discretização proposta, os mapas de propriedades são calculados nos nós (cubos) e as propriedades das gargantas (linhas) são basicamente utilizadas como dados de discretização e resolução de equações de estado e constitutivas.

Assim, inicialmente discretiza-se as equações de fluxo mássico:

$$\frac{dM_A^{i,j,k}}{dt} = -\frac{\pi\rho_A}{128\mu_A} \sum_{d=0}^5 \left(\frac{D_d^4}{L_d}\right)_A (P_{i,j,k} - P_d)$$

$$\frac{dM_B^{i,j,k}}{dt} = -\frac{\pi\rho_B}{128\mu_B} \sum_{d=0}^5 \left(\frac{D_d^4}{L_d}\right)_B (P_{i,j,k} - P_d)$$

Observando-se a equação da continuidade, verifica-se que os termos de interesse na discretização são da forma $\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^d$. Uma abordagem interessante é o uso das diferenças finitas de primeira ordem, ou seja:

$$\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^d \approx \left(\frac{\rho^i - \rho^{i-1}}{x^i - x^{i-1}}\right)$$

Reescrevendo a equação da continuidade em uma forma mais compacta, tem-se:

$$\left(\frac{\gamma}{a^2}\right) \frac{dP^{i,j,k}}{dt} + \sum_{d=0}^5 \left(\frac{Q_A + Q_B}{S}\right)^d \left(\frac{\rho^{i,j,k} - \rho^d}{L^d}\right) = 0$$

Substituindo as equações constitutivas, tem-se:

$$\left(\frac{\gamma}{a^2}\right) \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{d=0}^5 \left\{ \left[\left(\frac{4}{128D_d^2L^d}\right) \left(\frac{D_A^4}{\mu_A} + \frac{D_B^4}{\mu_B}\right)^d \right] \left(\frac{\rho^{i,j,k} - \rho^d}{L^d}\right) (P^{i,j,k} - P^d) \right\} = 0$$

Sabendo-se que a equação da densidade em função da massa pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\rho = \rho_B + (\rho_A - \rho_B)\omega_A$$

$$\rho = \rho_B + (\rho_A - \rho_B) \left(\frac{M_A}{M_A + M_B} \right)$$

Assim, a equação da continuidade discretizada torna-se:

$$\left(\frac{\gamma}{a^2} \right) \frac{dP^{i,j,k}}{dt} + \sum_{d=0}^5 \left\{ \left[\left(\frac{4}{128(DL)_d^2} \right) \left(\frac{D_A^4}{\mu_A} + \frac{D_B^4}{\mu_B} \right)^d (\rho_A - \rho_B) \right] \left(\frac{M_A^{i,j,k}}{M_A^{i,j,k} + M_B^{i,j,k}} \right) - \frac{M_A^d}{M_A^d + M_B^d} \left(\frac{P^{i,j,k} - P^d}{L_d} \right) \right\} = 0$$

$$\left(\frac{\gamma}{a^2} \right) \frac{dP^{i,j,k}}{dt} + \sum_{d=0}^5 \left\{ \left[\left(\frac{4}{128(DL)_d^2} \right) \left(\frac{D_A^4}{\mu_A} + \frac{D_B^4}{\mu_B} \right)_d (\rho_A - \rho_B) \right] (\omega_A^{i,j,k}) - \omega_A^d \left(\frac{P^{i,j,k} - P^d}{L_d} \right) \right\} = 0$$

Assim, tem-se o conjunto completo de equações que devem ser resolvidas a fim de integrar o sistema.

3.4.2.1. Falhas no Sistema de Discretização

Ao olhar-se atentamente o termo $\left(\frac{D_d^4}{L_d} \right)$, vemos que este termo correlaciona dois nós, sendo que $D_d = D_d(\omega_A^{i,j,k}, \omega_A^d)$, ou seja, deve existir uma relação definida pelo usuário.

Uma escolha aparentemente óbvia seria utilizar a média entre os dois nós e assim calcular o diâmetro de interesse. Entretanto, essa abordagem é equivocada e provoca a quebra no balanço de massa. Note que na fronteira de injeção, apenas um fluido é injetado, desta forma, o diâmetro equivalente de cada fase representará 50%,

pois o nó de injeção não possui o fluido saturado e o primeiro nó do meio poroso não possui fluido injetado. Ao olharmos o escoamento do fluido injetado, nada especial acontece pois o fluido penetra no meio poroso, como era de se esperar, entretanto ao olharmos o fluido saturante existe uma conexão de pseudo-poro com o nó injetor e como o fluxo ocorre da maior pressão para a menor pressão, o modelo assumirá que existirá um fluxo de fluido saturante do nó injetor, o que é fisicamente impossível visto que o nó injetor não possui tal fluido.

Visto notadamente que a abordagem da média proporciona erros grosseiros, uma abordagem mais conservadora aponta para a utilização do menor valor de saturação, ou seja: $D_d = D_d(\text{Mín}\{\omega_a^{i,j,k}, \omega_a^d\})$. A abordagem também apresenta uma falha: nos primeiros instantes, o mínimo de saturação será zero, e desta forma, nunca haverá a possibilidade de intrusão do fluido percolante, uma vez que nunca existirá um pseudo-poro para que tal fenômeno ocorra.

Com base nestes dados, uma abordagem mais consistente é considerar a existência de dois fenômenos concomitante no meio poroso: a difusão e o escoamento advectivo, desta forma, quando não houver fluido percolante em um dos nós, ocorrerá a difusão e quando houver possibilidade, a advecção ocorrerá. Uma maneira relativamente simples de acoplar esta idéia ao modelo seria:

$$Q_A = (1 - \omega_A^{Min}) \left[- \left(\frac{\pi}{128\mu_A} \right) \left(\frac{D_A^4}{L} \right) (P_{i,j,k} - P_d) \right] + (\omega_A^{Min}) \left[-D_{Fick} \left(\frac{C_{i,j,k} - C_d}{L} \right) \right]$$

Em que ω_A^{Min} e ω_B^{Min} representam o valor da menor fração mássica do fluido A ou B nas duas extremidades do capilar onde ocorre o escoamento. Assim reescrevendo as equações de fluxo, chega-se a:

$$\frac{dM_A^{i,j,k}}{dt} = -\rho_A \left\{ \sum_{d=0}^5 \left(\frac{\pi(1 - \omega_A^{Min})}{128\mu_A} \right) \left(\frac{D_d^4}{L_d} \right)_A (P_{i,j,k} - P_d) \right. \\ \left. + \sum_{d=0}^5 (\omega_A^{Min}) \left(\frac{D_{Fick}^{AB}}{L} \right) (C_{i,j,k}^A - C_d^A) \right\}$$

$$\frac{dM_B^{i,j,k}}{dt} = -\rho_B \left\{ \sum_{d=0}^5 \left(\frac{\pi(1 - \omega_B^{Min})}{128\mu_B} \right) \left(\frac{D_d^4}{L_d} \right)_B (P_{i,j,k} - P_d) \right. \\ \left. + \sum_{d=0}^5 (\omega_B^{Min}) \left(\frac{D_{Fick}^{AB}}{L} \right) (C_{i,j,k}^B - C_d^B) \right\}$$

Desta forma a abordagem mais conservadora, além de acrescentar o modelo de difusão deve, também, limitar o avanço no tempo até instante da eminência do desaparecimento da última porção de um fluido no poro. Isso permitirá ao sistema de equações se adaptar tanto matemática quanto fisicamente, uma vez que um avanço no tempo maior, gerará apenas uma adaptação matemática, gerando massas negativas de fluido, ou seja pontos de geração ou sorvedouros de fluido.

3.4.3. Consistência Numérica do Modelo

Este modelo foi testado com um sistema simples de fluido A + fluido B¹⁴ com propriedades de fluido semelhantes às de um sistema H₂O + óleo em uma rede de 10x10x1 com dados do meio poroso, extraídos de KING (1990). Na Figura 6, pode-se verificar o comportamento do mapa de pressão em um meio poroso com todos os poros do mesmo tamanho. Vale ressaltar que o “efeito ondulado”, que se assemelha à uma frente de onda, observado é fruto da redução de resolução inserida no sistema por conta da discretização do meio.

¹⁴ Foi feita a utilização da palavra semelhante uma vez que não se levou em consideração a separação de fases e qualquer tipo de interação termoquímica entre os fluidos.

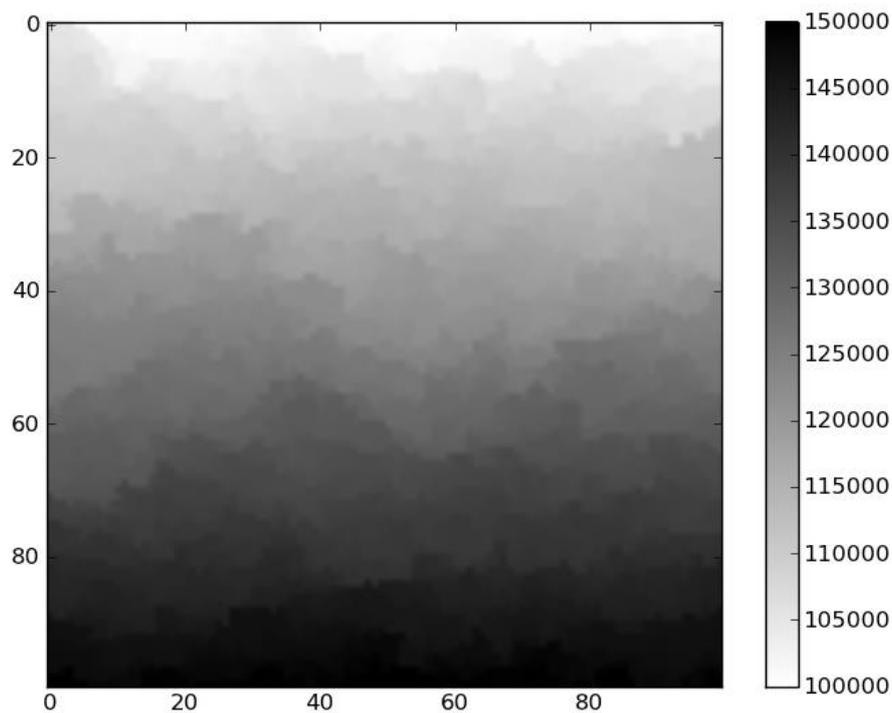
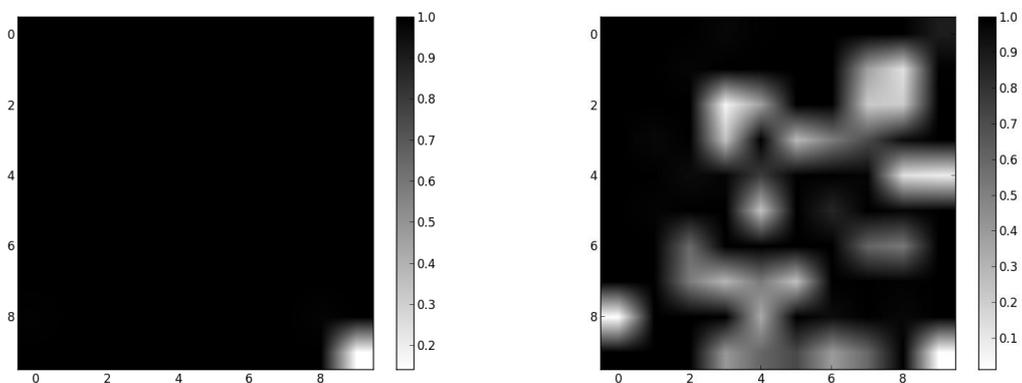


Figura 9: Mapa de pressão do meio poroso com poros e gargantas sem distribuição estatística.

A Figura 10 mostra o mapa de saturação do fluido B (semelhante ao óleo) em um meio com as mesmas características do anterior, entretanto com uma distribuição de tamanho de poros normal, com uma pressão de injeção de $1,0 \times 10^6$ Pa, pressão de produção de $1,0 \times 10^5$ Pa e com tamanho físico de amostra de $2,5 \times 2,5 \times 0,5$ cm³, com todas as superfícies seladas e o fluxo e influxo sendo feito do Oeste (face inferior) para o Leste (face superior).



Instante $t = 1,0 \cdot 10^{-2}$ s

Instante $t = 1,0 \cdot 10^0$ s

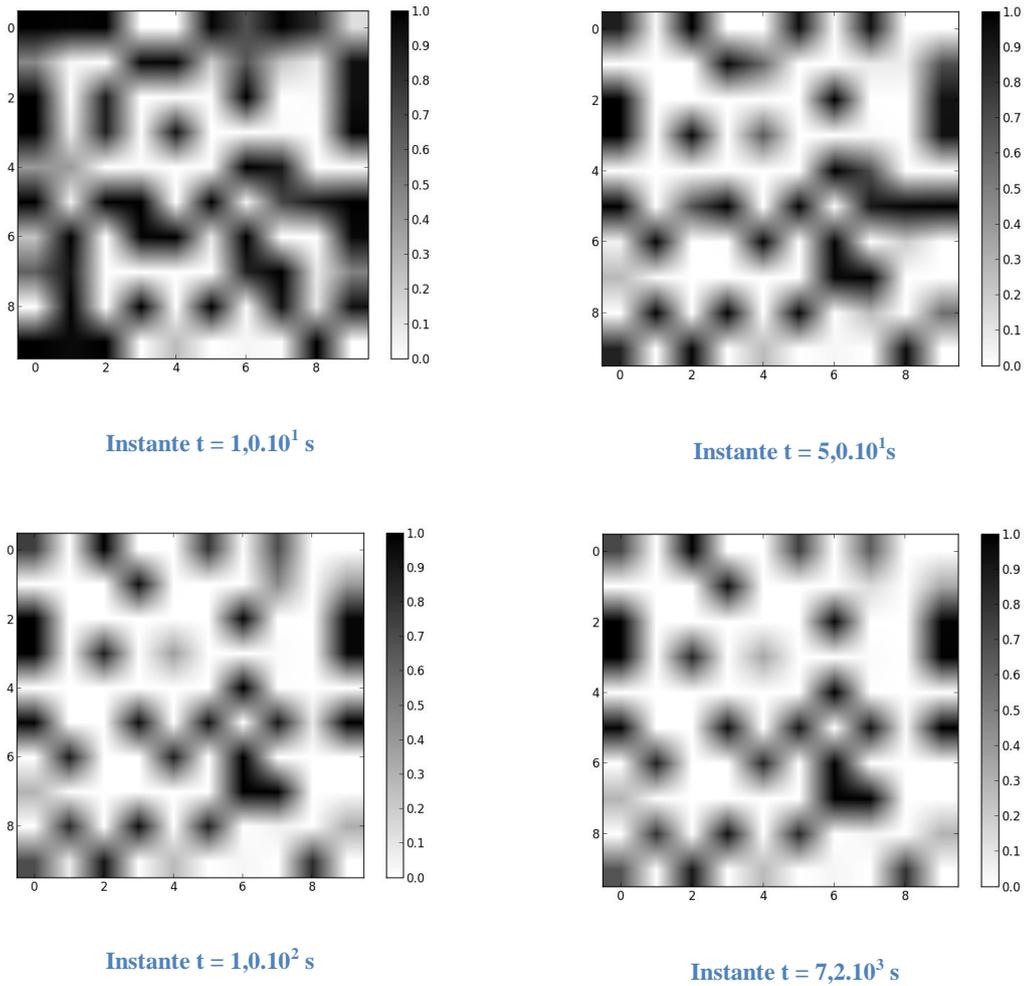


Figura 10: Evolução no tempo de uma simulação de fluido A penetrante e B saturante

3.4.4. Considerações

Foi verificado que o modelo proposto conseguiu representar o comportamento de um sistema bifásico imiscível e isotérmico, entretanto este trabalho busca a representação de um sistema com no mínimo 3 fases e assim, mostra-se a necessidade de expandir o modelo proposto.

3.5. Modelo de Escoamento N-Fásico Isotérmico

Assim como na modelagem bifásica e partindo-se das mesmas premissas e hipóteses, pode-se escrever o seguinte sistema de equações:

$$\left(\frac{dM_p^{i,j,k}}{dt} \right)_j = \left(\rho_j \sum_{d=0}^5 Q_p^d \right)_j$$

Em que p representa a p-ésima fase do sistema e j representa o j-ésimo componente presente na fase p.

Utilizando a equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\left(\frac{\partial \left(\rho \frac{Q_x}{S_x} \right)}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \left(\rho \frac{Q_y}{S_y} \right)}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \left(\rho \frac{Q_z}{S_z} \right)}{\partial x} \right) \right] = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{Q_x}{S_x} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{Q_y}{S_y} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{Q_z}{S_z} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right) \right] = 0$$

Os argumentos matemáticos utilizados na modelagem anterior continuam válidos, entretanto não são, de forma alguma, convenientes na resolução do problema quando o expandimos para p fases. Desta forma, o uso de uma equação de estado torna-se mais adequado e conveniente. Assim:

$$\rho = \rho(\omega, p, T)$$

Sabe-se que:

$$Q = \sum_{p=0}^{np} Q_p$$

Então:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{(\sum_{p=0}^{np} Q_p)_x}{S_x} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{(\sum_{p=0}^{np} Q_p)_y}{S_y} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{(\sum_{p=0}^{np} Q_p)_z}{S_z} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right) \right] = 0$$

Reescrevendo em função de um ponto na rede tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{(\sum_{p=0}^{np} Q_p)_N}{S_N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial L_N} \right)^N + \frac{(\sum_{p=0}^{np} Q_p)_S}{S_S} \left(\frac{\partial \rho}{\partial L_S} \right)^S + \frac{(\sum_{p=0}^{np} Q_p)_W}{S_W} \left(\frac{\partial \rho}{\partial L_W} \right)^W \right. \\ \left. + \frac{(\sum_{p=0}^{np} Q_p)_E}{S_E} \left(\frac{\partial \rho}{\partial L_E} \right)^E + \frac{(\sum_{p=0}^{np} Q_p)_T}{S_T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial L_T} \right)^T + \frac{(\sum_{p=0}^{np} Q_p)_B}{S_B} \left(\frac{\partial \rho}{\partial L_B} \right)^B \right] \\ = 0 \end{aligned}$$

Fazendo-se uma apresentação por diferenças finitas, tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial L_i} = \left(\frac{\rho^i - \rho^{i-1}}{L^i - L^{i-1}} \right)$$

Assim, reescrevendo a equação, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{Q_N}{S_N} \left(\frac{\rho^{i,j,k} - \rho^d}{L_N} \right)^N + \frac{Q_S}{S_S} \left(\frac{\rho^{i,j,k} - \rho^d}{L_S} \right)^S + \frac{Q_W}{S_W} \left(\frac{\rho^{i,j,k} - \rho^d}{L_W} \right)^W \right. \\ \left. + \frac{Q_E}{S_E} \left(\frac{\rho^{i,j,k} - \rho^d}{L_E} \right)^E + \frac{Q_T}{S_T} \left(\frac{\rho^{i,j,k} - \rho^d}{L_T} \right)^T + \frac{Q_B}{S_B} \left(\frac{\rho^{i,j,k} - \rho^d}{L_B} \right)^B \right] = 0 \end{aligned}$$

Entretanto, deve-se levar em conta que se tem N_p fases, e assim existe uma equação da continuidade para cada uma delas, sendo a equação da π -ésima fase:

$$\frac{\partial \rho_\pi}{\partial t} + \left[\frac{Q_N^\pi}{S_N^\pi} \left(\frac{\rho_\pi^{i,j,k} - \rho_\pi^d}{L_N} \right)^N + \frac{Q_S^\pi}{S_S^\pi} \left(\frac{\rho_\pi^{i,j,k} - \rho_\pi^d}{L_S} \right)^S + \frac{Q_W^\pi}{S_W^\pi} \left(\frac{\rho_\pi^{i,j,k} - \rho_\pi^d}{L_W} \right)^W + \frac{Q_E^\pi}{S_E^\pi} \left(\frac{\rho_\pi^{i,j,k} - \rho_\pi^d}{L_E} \right)^E + \frac{Q_T^\pi}{S_T^\pi} \left(\frac{\rho_\pi^{i,j,k} - \rho_\pi^d}{L_T} \right)^T + \frac{Q_B^\pi}{S_B^\pi} \left(\frac{\rho_\pi^{i,j,k} - \rho_\pi^d}{L_B} \right)^B \right] = 0$$

Neste ponto, a única informação que ainda não se tem é a área de escoamento, desta forma, aproveita-se o conceito apresentado anteriormente e verifica-se a Figura 7, considerando-se neste momento, o fluido A como sendo o fluido saturante (aquele de maior concentração no poro) e o fluido B como a soma de todos os outros fluidos, desta forma, utilizando o mesmo raciocínio apresentado anteriormente chega-se ao diâmetro hidráulico do capilar equivalente.

Cabe ressaltar que a área do segundo capilar representa o somatório de (N_p-1) fluxos, então a mesma, a posteriori, é fracionada de acordo com o volume de cada um dos fluidos de interesse.

3.6. Acoplamento de Sistema de Equilíbrio de Fases

O acoplamento do sistema de equilíbrio de fases torna-se bastante natural na modelagem supracitada.

Ele determina a quantidade de equações que serão resolvidas, uma vez que a partir dele sabe-se quantas fases existirão no sistema em estudo, além de permitir o cálculo de propriedades e demais variáveis de interesse do processo.

É conveniente afirmar que a carga computacional demandada ao ser adicionado um sistema de equilíbrio de fases ao sistema de escoamento em uma rede de percolação aumenta de forma significativa. Como mostrado na Figura 11, onde um sistema de fluidos A e B (com propriedades semelhantes à água e ao óleo) e um sistema

com uma mistura C1-C6 + H₂O foram simulados e tiveram seus tempos de execução aferidos em uma execução serial em um único processador. Cabe ressaltar que o meio poroso de testes para cada NPS foi o mesmo.

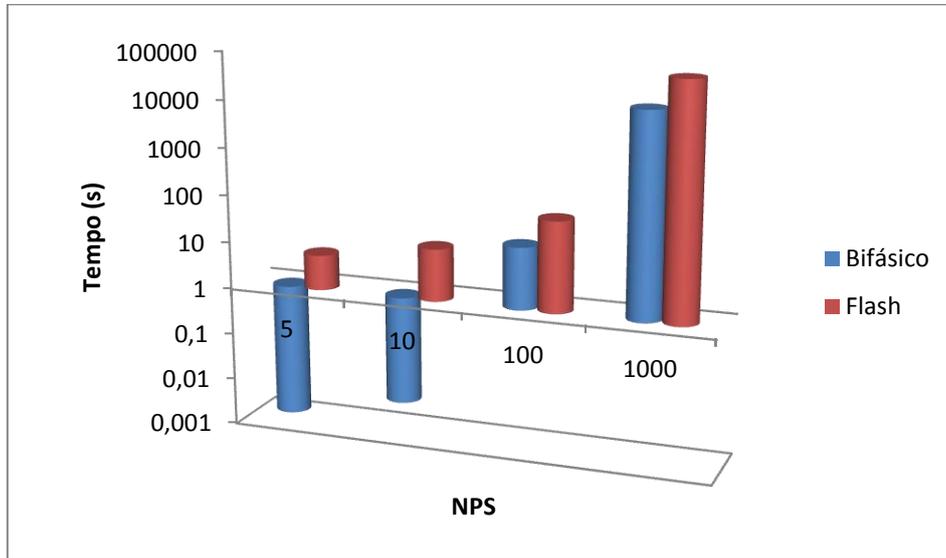


Figura 11: Tempo de processamento vs NPS em um sistema assumidamente bifásico e em um sistema que sofre flash multifásico.

É importante notar que o teste apresentado na Figura 11 apresentou o melhor cenário possível, com fases gasosas e líquidas sendo representadas por equações de estado cúbicas, a Figura 12 nos mostra o paralelo entre a utilização de equações de estado e de equações de estado com modelos de energia de excesso (UNIFAC).

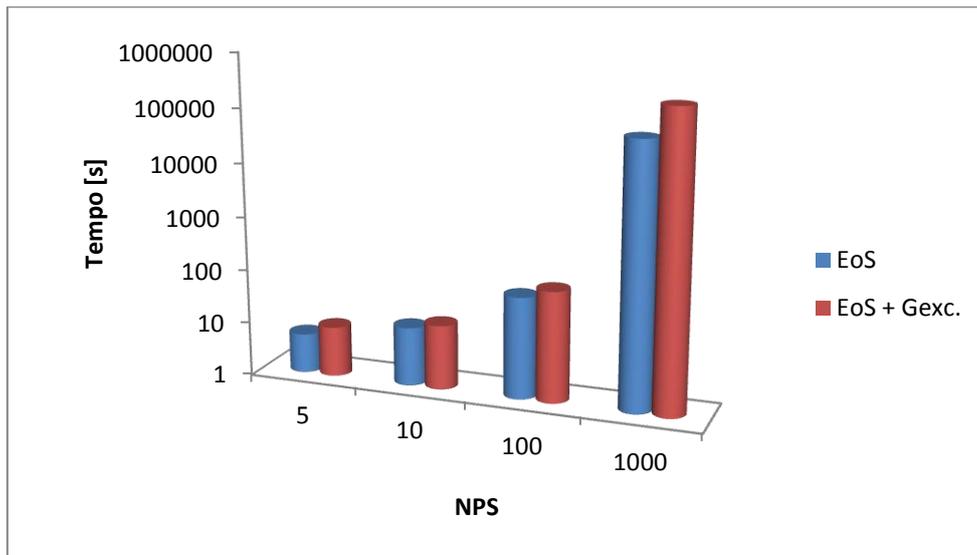


Figura 12: Comparação da carga computacional em função do plugin de modelo de fase

Posteriormente, buscou-se uma estratégia de paralelização, com base em duas tecnologias distintas, a distribuição em uma única máquina (paralelização por *threads* e por otimização de código) e a distribuição utilizando conjuntos de máquinas (clusters) – via MPI (Message Passing Interface). Ambas as abordagens possuem suas vantagens e desvantagens sendo que a dicotomia entre ambas foge ao escopo deste trabalho, sendo duas excelentes referências: PACHECO (1996) e TAY (2013). Outrossim é conveniente citar dois óbices com relação à implementação de uma metodologia de paralelização:

Neste tipo de desenvolvimento a plataforma alvo é de extrema importância, uma vez que ela permite uma série de otimizações;

O uso de camadas de *binds* na programação gera diversos *bottlenecks* de execução, gerando dificuldades adicionais em processos de *garbage collection* dentre outros.

3.6.1. Paralelização Utilizando *Threads* e Otimização de Código

No presente trabalho, este tipo de paralelização pode apenas trabalhar em uma camada do código de cada vez: Na criação, manutenção e transformação das redes de percolação ou no sistema de equilíbrio de fases, uma vez que os *solvers* possuem uma arquitetura diferenciada que não suporta *threads*.

Assim, cabe inicialmente definir *threads*, segundo a Wikipedia¹⁵, *Thread* (Ou Linha/Encadeamento de execução) é uma forma de um processo dividir a si mesmo em duas ou mais tarefas que podem ser executadas concorrentemente. O suporte à *thread* é fornecido pelo próprio sistema operacional, no caso da linha de execução ao nível do núcleo, ou implementada através de uma biblioteca de uma determinada linguagem.

Tendo definido *Thread*, foi utilizada a implementação da biblioteca computacional Boost para um sistema de *Threads* SCHÄLING (2011), para os sistemas de criação e processamento de redes de percolação, assim como para o sistema

¹⁵ [HTTP://pt.wikipedia.org/wiki/Thread_\(ciência_da_computação\)](http://pt.wikipedia.org/wiki/Thread_(ciência_da_computação))

termodinâmico e de separação de fases. O sistema de cálculo matemático (Beholder), em geral, utiliza a implementações próprias, além de outras da biblioteca Eigen GUENNEBAUD 2011 que possui o contexto de *multi-thread* implementado diretamente ao nível do *kernel* do código C++, sem uma camada de controle acessível ao usuário.

3.6.2. Paralelização utilizando MPI

Segundo PACHECO (1996), MPI ou Message Passing Interface é um padrão de comunicação de dados em computação paralela. O objetivo do MPI é prover um amplo padrão para escrever programas com passagem de mensagens de forma prática, portátil, eficiente e flexível.

Sua maior vantagem é o fato de todas as camadas do sistema poderem trabalhar em sinergia, uma vez que desde o *solver* até as camadas superiores do software têm acesso à biblioteca MPI¹⁶. Neste caso, não foi possível utilizar a biblioteca Eigen, uma vez que esta não possui suporte ao MPI, entretanto devido à implementação orientada a interfaces, foi possível, facilmente, adaptar todo o sistema de solvers e de álgebra linear à biblioteca de álgebra linear com suporte à MPI Petsc BALAY, GROPP, *et al.* (1997) . Algumas implementações relacionadas ao processo de criação e evolução da rede de percolação e ao sistema termodinâmico foram adaptados.

3.6.3. Comparativo das Implementações

O comparativo se deu por meio da execução de casos teste em módulo serial e posterior execução em paralelo. A execução em serial foi feita em uma máquina Intel Pentium DV-4 1234CA, com 4GB de memória RAM, as execuções de *threads* e MPI em máquina simples foram feitas na mesma máquina. As execuções em cluster foram feitas em cluster Beowulf com 5 máquinas AMD FX-8350 Bulldozer com 16 GB de memória RAM e um masternode Intel Core i7 de 32 GB de memória RAM, toda a

¹⁶ O MPI é um padrão de comunicação, existem diversas implementações do mesmo como o MPICH, MPICH-2, Boost-MPI, etc. A implementação utilizada neste trabalho foi a MPICH-2 devido à sua compatibilidade com o compilador utilizado.

estrutura suportada em uma rede Gigabit Ethernet 1000/1000, suportada em switches CISCO, totalizando 40 núcleos físicos a 4,0GHz.

Os resultados são apresentados na Figura 13, onde o ensaio computacional foi realizado com uma mesma rede de percolação para todos os modelos de paralelização. A execução em cluster foi estudada com o melhor cenário possível – uma rede de percolação de nps x nps x nps, com distribuição normal percolada por um sistema químico de C1-C6 + H₂O representado por um sistema de flash multifásico baseado no algoritmo de minimização do TPD apresentado no item 3.2.2 deste trabalho.

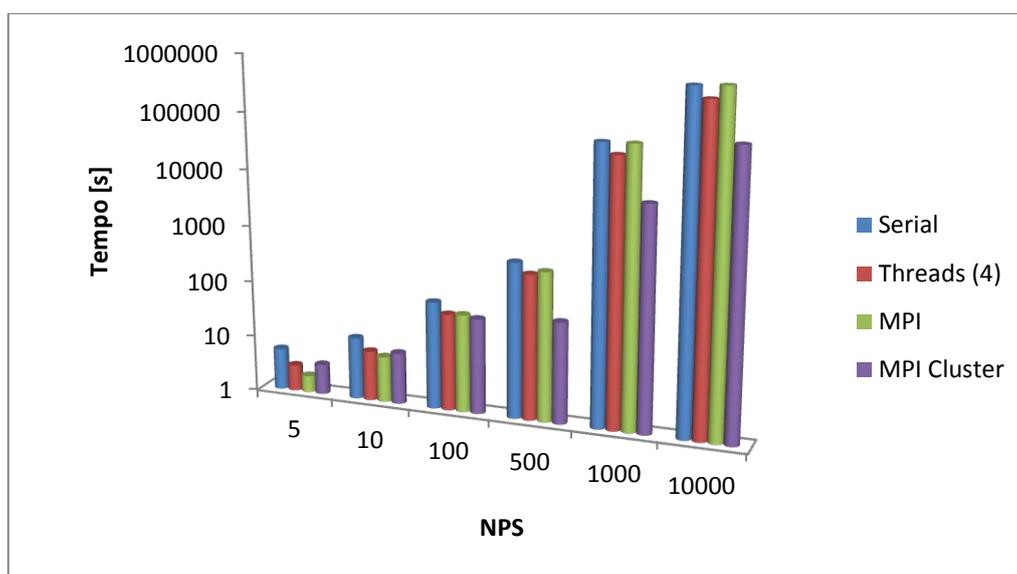


Figura 13: Vários cenários de paralelização

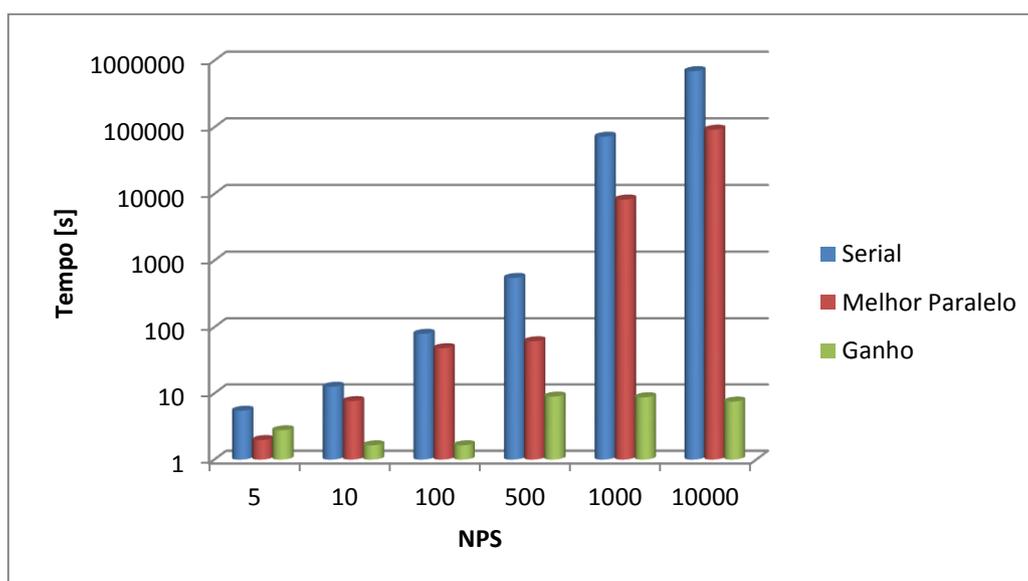


Figura 14: Comparação entre a execução serial e a melhor paralelização encontrada

Pode-se verificar, por meio das Figura 13 e Figura 14 que com as abordagens diretas, ou seja, a inclusão da metodologia de paralelização no algoritmo de integração (via alteração ou adaptação do framework de álgebra linear) não produz ganhos significativos, uma vez que os melhores resultados na paralelização não ultrapassam um aumento de velocidade de 1 ordem de grandeza.

Pode-se notar neste caso que quase não houve *speedup* neste estudo. Uma provável causa seria a otimização do sistema flash não estar adequada, ou seja, o algoritmo de otimização estar terminando devido ao número máximo de iterações ter sido atingido e não por ter encontrado o mínimo global.

Frente a isso, foi executado o mesmo algoritmo alterando o modelo que representa o flash de multifásico para o modelo de Rachford-Rice limitado a no máximo 3 fases, ou seja, desta maneira a hipótese de que o algoritmo de flash multifásico por minimização do TPD esteja limitando o processamento.

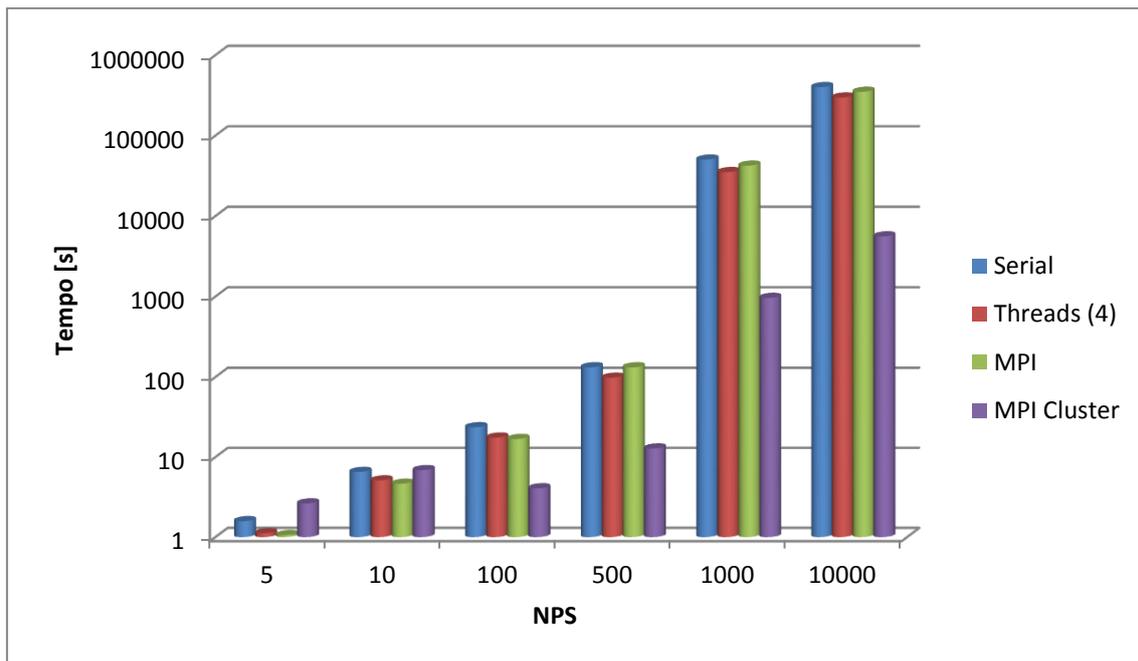


Figura 15: Cenários de Paralelização sem Otimização do Flash Multifásico

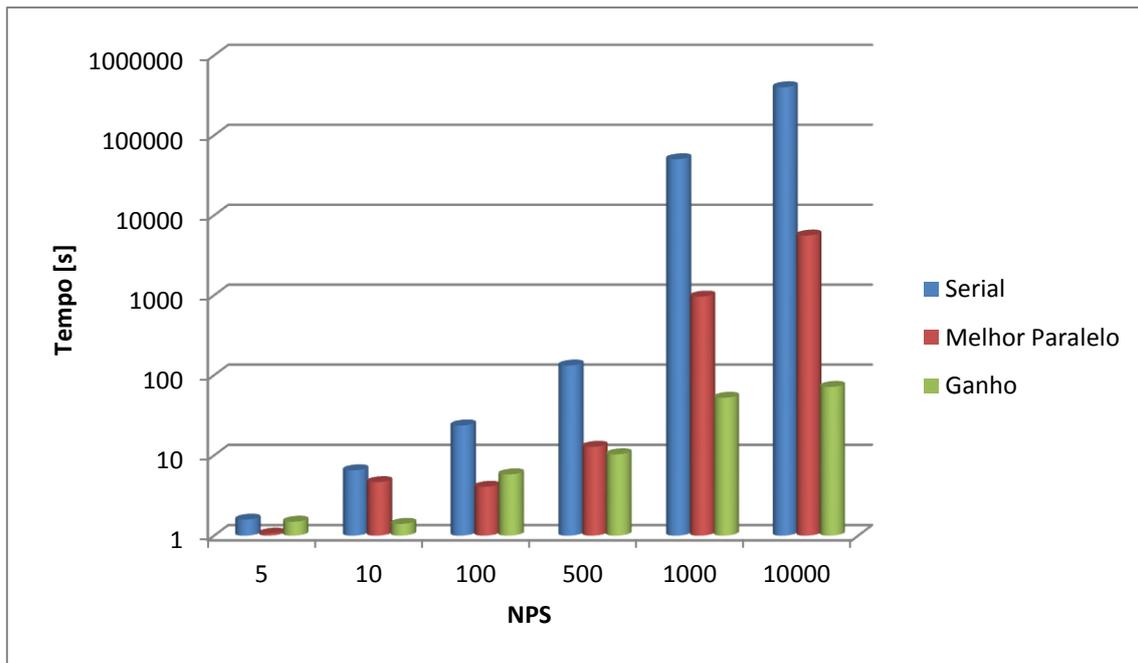


Figura 16: Comparação entre execução serial e a melhor paralelização no sistema sem otimização no flash multifásico

Como pode ser visto na Figura 15 e Figura 16 ao retirar-se a otimização do sistema de flash multifásico, o comportamento da curva de *speedup* assume um comportamento inicialmente linear evoluindo para um comportamento assintótico em torno de 1,5 ordens de grandeza.

Pode-se concluir que existe espaço para o estudo da paralelização do código em questão, igualmente, foge ao escopo deste trabalho aprofundar os estudos nesta área.

CAPÍTULO IV

4. Resultados

4.1. Aferição Experimental de Dados de Rocha Arenítica

Verificando-se a possibilidade de virtualizar dados de meios porosos por meio dos ensaios de cálculo do volume poroso pelo método de Barret-Joyner-Halenda (BJH) e pelo método de intrusão de mercúrio, conforme citado no Capítulo 2, buscou-se na literatura dados experimentais de rochas reservatório. Os trabalhos de MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999) foram utilizados como balizamento e meio de calibração para o algoritmo, uma vez que não apresentava resultados de rochas reservatórios propriamente ditas, apenas material semelhante utilizado como rocha reservatório sintética. O trabalho de SPEARING (1991) e MATTHEWS, MOSS, *et al.* (1993) apresentam resultados de rochas areníticas de reservatório (arenito Clashac, ambas as amostras cedidas pela *British Gas*).

Após a obtenção dos dados da literatura, procedeu-se a simulação do meio poroso, inicialmente verificando a resolução necessária para simulação. Segundo a literatura STAUFFER e DIETRICH (2003), quando o NPS de uma rede cartesiana correlacionada for maior que 3 ela alcançou a dimensão fractal necessária para que os dados dela aferidos sejam independentes da sua dimensão. Todavia, no trabalho de KING (1999) as simulações são feitas com redes de pelo menos NPS = 10 com corpos de prova da ordem de 5 x 5 x 5 cm.

Caso 1: Meio poroso sintético de Areia Redhill 30 MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999)

Este caso estuda um leito poroso sintético de dimensões 1,383 x 1,082 x 1,082 mm³. O método de aferição utilizado foi a intrusão de mercúrio de forma a promover a comparação dos resultados experimentais e os simulados.

Por ser tratar de um meio poroso físico muito pequeno (1,619 mm³), optou-se por utilizar um NPS de 10. A distribuição para virtualização do meio poroso foi a distribuição normal com média 200 μ m e desvio padrão de 110 μ m. A porosidade foi estimada como sendo da ordem de 16%, uma vez que não é citado este dado em MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999), mas o mesmo dado é referenciado em um artigo anterior MATTHEWS, MOSS e RIDGWAY (1995).

Para sua construção utilizou-se a seguinte metodologia¹⁷:

Utilizaram-se dados da Curva de Intrusão de mercúrio extraída de MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999) para aferição da distribuição de tamanho de poros. Assim integrando todos os dados anteriores como tamanho da célula e porosidade, foi possível a virtualização do meio poroso.

De posse da rede virtualizada, procedeu-se o ensaio de intrusão de mercúrio de forma a reproduzir a curva experimental. Neste procedimento, as gargantas e poros eram comutados dentro da rede de forma a permitir o fluxo de mercúrio de forma a respeitar o ensaio experimental.

Após encontrar a curva de intrusão compatível com a experimental, foram aferidos dados como conectividade e permeabilidade absoluta.

Procedeu-se a serialização¹⁸ do meio estudado para uso futuro do mesmo meio em outros ensaios.

Os resultados obtidos podem ser observados na Figura 17, onde nota-se que a metodologia de simulação apresenta uma queda no volume cumulativo de poros um pouco mais suave que no ensaio experimental, com um erro percentual menor que 5%. Tal desvio pode ser atribuído ao fato de o meio poroso ser uma estrutura real e o meio virtual ter sido criado a partir de uma distribuição estatística.

¹⁷ É conveniente observar que a metodologia de virtualização da rede varia caso a caso e depende dos dados disponíveis. A metodologia apresentada no Capítulo II é um guia para um caso geral, outrossim cabe afirmar que todas as ferramentas apresentadas no referido Capítulo podem ser usadas em ordens e procedimentos um pouco diferentes daquele apresentado.

¹⁸ Em ciência da computação é o termo utilizado para destacar que a entidade virtual foi salva em algum meio perpétuo de forma que ele possa ser reutilizado futuramente. Em termos leigos seria o procedimento de “Salvar um documento”.

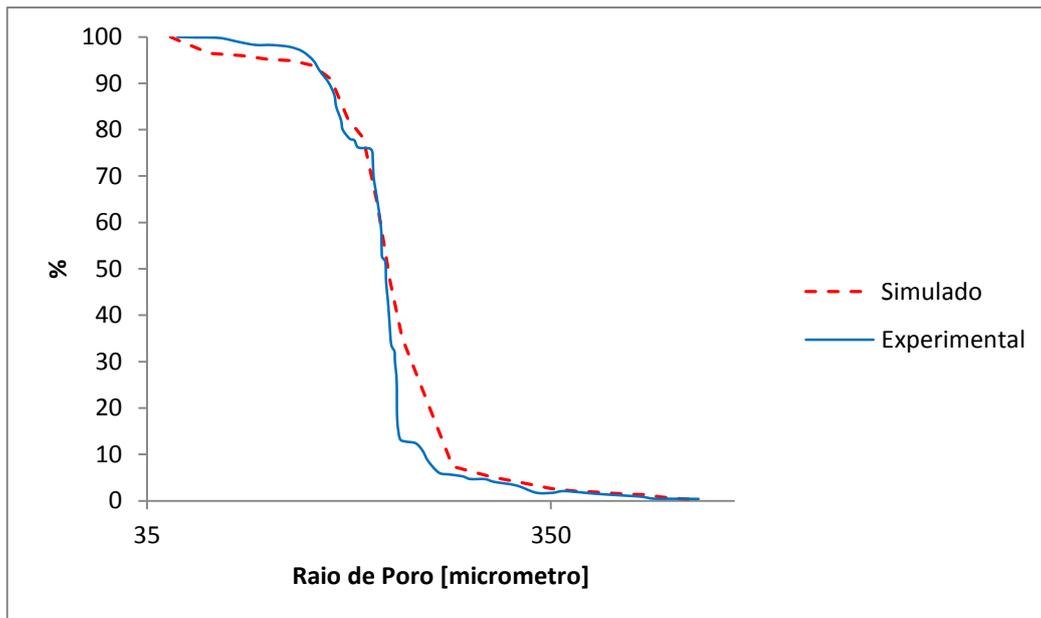


Figura 17: Intrusão de Mercúrio em Areia Redhill 30

Posteriormente ao ensaio de intrusão de mercúrio, foi aferida a permeabilidade absoluta do meio virtualizado, chegando-se aos resultados expostos na Tabela 7.

Tabela 7: Resultados de Permeabilidade Absoluta para Redhill30

Meio Poroso (Redhill 30)	Experimental	Neste Trabalho	MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999)
Permeabilidade Absoluta [mD]	799	674	438
Porosidade	16%	18,5%	15%
Conectividade	3,7	3,5 (3,47)	3,7 ¹⁹

É conveniente afirma que nas propriedades aferidas, este trabalho apresentou um desvio de -16% na permeabilidade absoluta, 16% na porosidade e 5% na conectividade o que mesmo sendo um valor alto, consegue melhorar os valores apresentados na literatura para este tipo de virtualização.

¹⁹ MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999) utiliza este dado como dado de entrada em sua modelagem e este trabalho afere este dado após criação da rede.

Caso 2: Meio poroso sintético de Areia Redhill HH MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999)

Este caso estuda um leito poroso sintético de dimensões 1,383 x 1,082 x 1,082 mm³ nas mesmas condições do meio poroso Redhill 30, citado no Caso 1: Meio poroso sintético de Areia Redhill 30 . Desta vez a porosidade foi da ordem de 26% e a distribuição utilizada foi customizada dos dados aferidos de MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999), uma vez que a distribuição de tamanhos de partículas não podia ser caracterizada por nenhuma distribuição padrão.

Posteriormente ao ensaio de intrusão de mercúrio, foi aferida a permeabilidade absoluta do meio virtualizado.

Tabela 8: Resultados de Permeabilidade Absoluta para Redhill HH

Meio Poroso (Redhill HH)	Experimental	Neste Trabalho	MATHEWS, MATTHEWS e HUGGETT (1999)
Permeabilidade Absoluta [Da]	1,07	0,89	0,30
Porosidade	16%	18,5%	15%
Conectividade	3,8	3,3 (3,27)	3,8

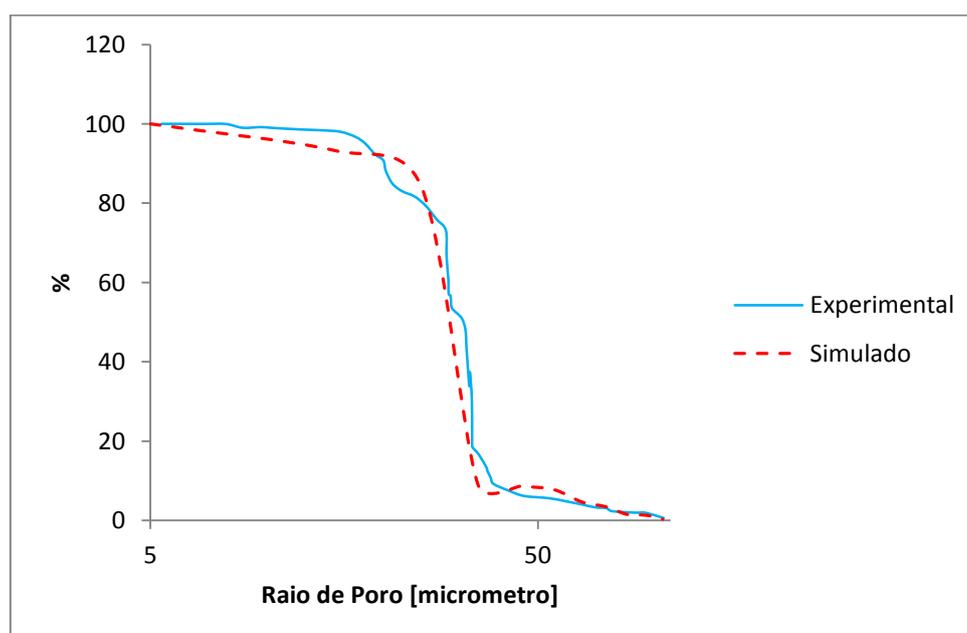


Figura 18: Ensaio de Intrusão de Mercúrio em Areia Redhill HH

Pode-se verificar, por meio da Tabela 8 e da Figura 18 que, neste caso, o desvio também foi menor que 5% e o desvio das propriedades aferidas, como no ensaio da areia RedHill 30, também ficou em torno de 15%. O maior desvio em relação ao ensaio anterior ficou por conta da conectividade, que neste ensaio teve um desvio da ordem de 15% contra 5% no caso anterior.

Estes desvios são esperados, uma vez que a metodologia proposta utiliza um problema inverso cujo o universo de soluções apresenta diversas redes de percolação diferentes que reproduzem a curva e/ou propriedades de entrada, mas não garantem que as propriedades de saída serão idênticas àquelas apresentadas experimentalmente.

É importante concluir que por meio das aferições feitas no meio poroso sintético, tanto com a areia RedHill 30 quanto com a areia RedHill HH, foi possível verificar que com as ferramentas propostas no Capítulo II, é possível a reprodução das propriedades de interesse de um meio poroso real.

4.2. Digitalização da Rocha Arenítica

Este caso estuda um meio poroso real de dimensões 5,00 x 5,00 x 5,00 cm³. O método de aferição utilizado foi o de adsorção de gases em camadas multimoleculares proposto por Brunauer – Emmet – Teller (BET).

Os dados presentes em MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991) são:

- Área superficial: 0,37 m²/g
- Densidade: 2,64 g/cm³
- Porosidade 11,3%
- Distribuição: Customizada
- Intrusão de Mercúrio: Sim

Utilizou-se, por metodologia de virtualização do meio poroso, o seguinte procedimento:

- ➔ Criação de poros e capilares com base na distribuição estatística fornecida;
- ➔ Ajuste da porosidade;
- ➔ Ajuste de área superficial por meio de reajuste dos poros acessíveis;
- ➔ Processo de ajuste da curva de intrusão de mercúrio.

Tabela 9: Propriedades do Arenito Clashac A experimentais e simuladas.

Meio Poroso (Arenito Clashac A)	Experimental	Neste Trabalho	MATTHEWS, SPEARING e PETER (1991)
Permeabilidade Absoluta [mD]	193	187,12	64
Porosidade	11,3%	14,8%	11,3%
Área superficial [m ² /g]	0,37	0,32	0,37
Tortuosidade	NA	$\mu = 2,1$ $\sigma = 1,34$ (média e desvio padrão)	$\mu = 2,5$ $\sigma = 1,78$ (média e desvio padrão)
Conectividade	NA	2,78	3,12

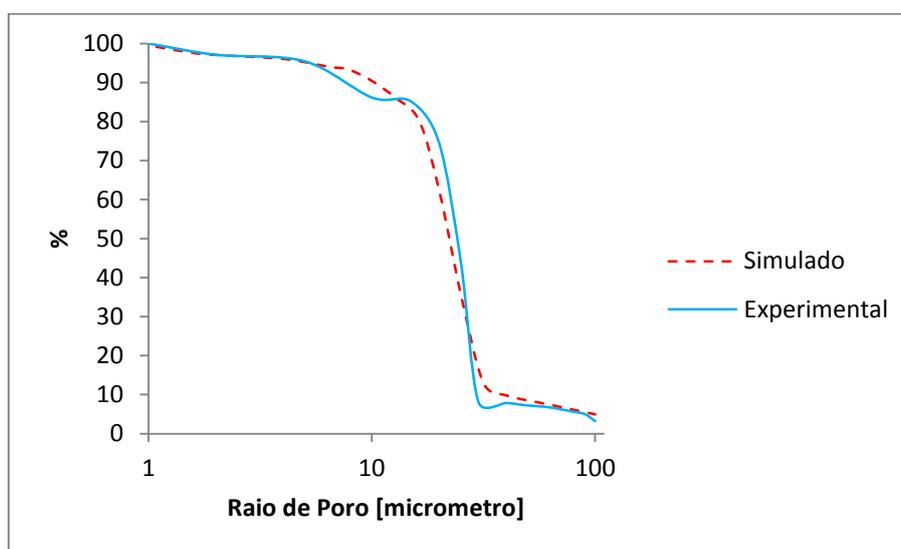


Figura 19: Simulação com Arenito Clashac A de (MATHEWS, 1999)

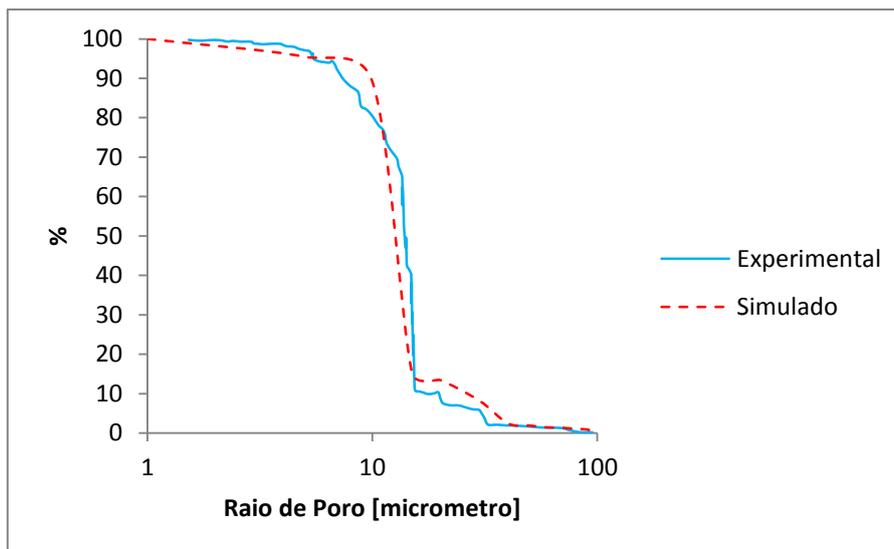


Figura 20: Simulação com Arenito Clashac B de (MATHEWS, 1999)

A partir da comparação dos resultados apresentados na Figura 19, na Figura 20 e na Tabela 9 é possível inferir que a metodologia proposta apresenta baixos desvios (<5%) em relação à permeabilidade absoluta e à área superficial, assim como na reprodução da curva de intrusão de mercúrio, com desvios menores que 10%.

4.2.1. Simulação de Intrusão de Fluido com Sistema Bifásico LL

Inicialmente, virtualizou-se um meio poroso que atendesse às especificações de CURBELO (2006), apresentadas na

Tabela 10:

Tabela 10: Parâmetros de um Plug Real de Arenito

Comprimento L (cm)	Diâmetro D (cm)	Porosidade (%)	Permeabilidade (mD)
8,82	3,8	23,26	2,48

Uma vez que não foi fornecida a distribuição de tamanhos de partícula nem de poros, sendo que a única informação disponível era o fato de que o material era Arenito, utilizou-se a distribuição amostral do Arenito Clashac, antevendo que tal

metodologia poderia gerar distúrbios no resultado final, tanto pela falta de um resultado conciso de distribuição de tamanho de partículas quanto pelo fato do plug ser cilíndrico e do meio virtualizado um paralelogramo.

Ao final da virtualização tomando por função objetivo a minimização do erro no cálculo da permeabilidade do meio poroso, chegou-se aos resultados apresentados na Tabela 11, utilizando a metodologia de virtualização de meios porosos apresentada no Capítulo 2.

Tabela 11: Resultados obtidos após virtualização

Comprimento X (cm)	Comprimento Y (cm)	Comprimento Z (cm)	Porosidade (%)	Permeabilidade (mD)
3,8	3,8	8,82	25,78	2,94

Pode-se verificar que esta metodologia apresentou um desvio da ordem de 11% na porosidade e de 19% na permeabilidade, valores que estão dentro do desvio do procedimento, como pode ser visto nos exemplos anteriores. Neste caso tais desvios são agravados pelo fato de um plugue (testemunho) cilíndrico ser aproximado por um paralelogramo.

Por se tratar de uma mistura de fluidos imiscíveis, o framework termodinâmico não foi utilizado neste ponto.

Assim, o processo de simulação foi dividido em 3 partes, conforme foi feito no trabalho de CURBELO (2006).

1. Saturação do meio com salmoura;
2. Injeção de óleo até saturação do meio;
3. Recuperação do óleo por injeção salmoura.

A salmoura utilizada foi uma solução 2% em peso de KCl, com pH de 5,58, densidade de 1,03 g/mL e viscosidade de 1 cP a 26°C.

O óleo é uma mistura de petróleo e querosene na razão de 2:3 em volume, respectivamente, apresentando uma densidade de 0,8 g/mL e uma viscosidade de 2,9 cP a 26°C.

A injeção foi feita pela face oeste a $3,07 \times 10^5$ Pa e a produção foi feita pela face leste $1,05 \times 10^5$ Pa. Todas as outras faces foram seladas para o fluxo.

Na primeira etapa, saturou-se completamente o meio com salmoura de forma a todo o volume poroso acessível externamente estar saturado com o fluido, tendo sido injetado um total de 26 mL de salmoura na versão simulada e de 22 mL no trabalho de CURBELO (2006).

Na segunda etapa, após a saturação com óleo, o testemunho ficou saturado com 23 mL de óleo (3 mL de salmoura residual) e o trabalho de CURBELO (2006) absorveu 20 mL de óleo (2 mL de salmoura residual).

Na terceira etapa, foi simulado o processo de recuperação de óleo por injeção de fluido, conforme pode ser visto na Figura 21.

Pode-se observar que os resultados obtidos estão consistentes com aqueles encontrados na literatura, O modelo simulado não leva em conta interação fluido-rocha e desta forma não consegue acompanhar certas tendências do processo. Em outros casos, a tendência é acompanhada, mas a magnitude não consegue ser reproduzida, como também pode ser visto na Figura 22.

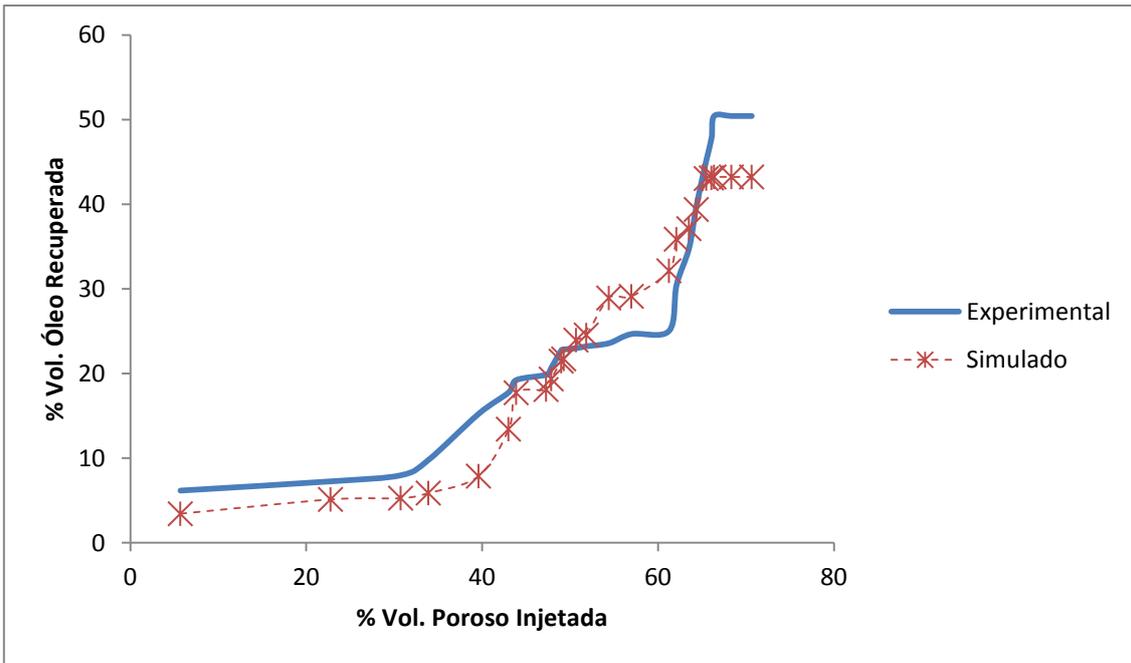


Figura 21: Ensaio de Injeção de Salmoura para Recuperação de Óleo

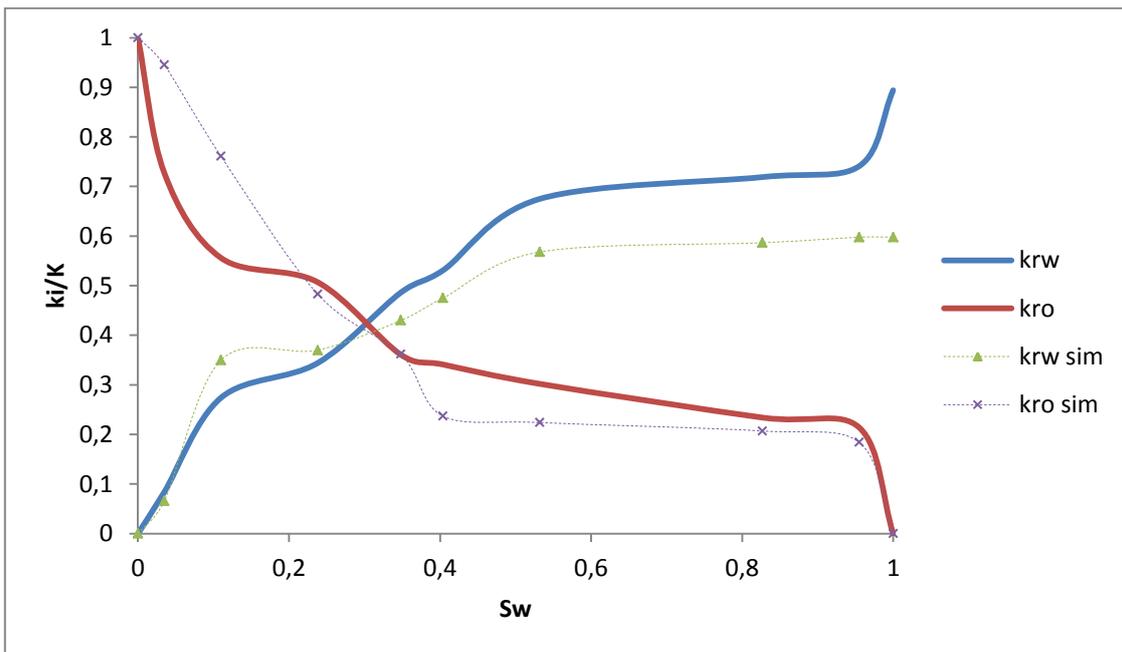


Figura 22: Permeabilidade Relativa Simulada e Experimental

4.2.2. Simulação de Intrusão de Fluido com Sistema Isotérmico Bifásico LL que Evolui para sistema Isotérmico Trifásico VLL

Neste ensaio simulou-se um caso de um plugue inicialmente saturado por óleo sintético onde foi injetada água à vazão constante.

Inicialmente define-se uma mistura sintética simplificada que agirá como a fase oleosa. Neste trabalho, optou-se por utilizar um sistema de Metano (C1) e n-Butano (C4), conforme definido em SOHRABI, SHAHVERDI e FATEMI (2010). Esta mistura possui pressão crítica de $1,282 \times 10^7$ Pa (1860 psia) e temperatura crítica de 311,15K (38°C).

Para aferir as propriedades físicas e termodinâmicas desta mistura utilizou-se dados presentes no Webbook da NIST²⁰ e quando as informações não estavam disponíveis, utilizou-se a metodologia de estimação de parâmetros termodinâmicos proposta por CONSTANTINOUS e GANI (1994).

No modelo termodinâmico utilizou-se a equação de estado de Peng-Robinson, com regra de mistura de van der Waals.

Desta forma determinou-se a injeção à vazão constante de água pura. De forma a facilitar a ação do método numérico aplicado, de forma a não impor grandes perturbações ao sistema, foi determinada uma injeção de $1\mu\text{L/s}$. O produto e o diferencial de pressão foram aferidos constantemente e comparados ao *benchmark* de PERGORARO (2012).

No presente estudo, foram utilizados plugues virtuais de arenito Clashac com permeabilidade de 65 mD e porosidade da ordem de 18%, diâmetro de 5 cm e comprimento de 65 cm, sendo que os valores de diâmetros de capilares foi aferido por meio de sorteio utilizando números pseudo-aleatórios a partir da distribuição cumulativa de tamanho de poros extraída de MATTHEWS, MOSS e RIDGWAY (1995) e o NPS selecionado foi de 25 x 25 x 300.

²⁰ <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

A simulação foi realizada em 100 meios porosos diferentes, sendo o resultado médio apresentado a seguir. O desvio padrão encontrado foi menor que 1%, desta forma não foi apresentado nos gráficos para minimizar a poluição visual.

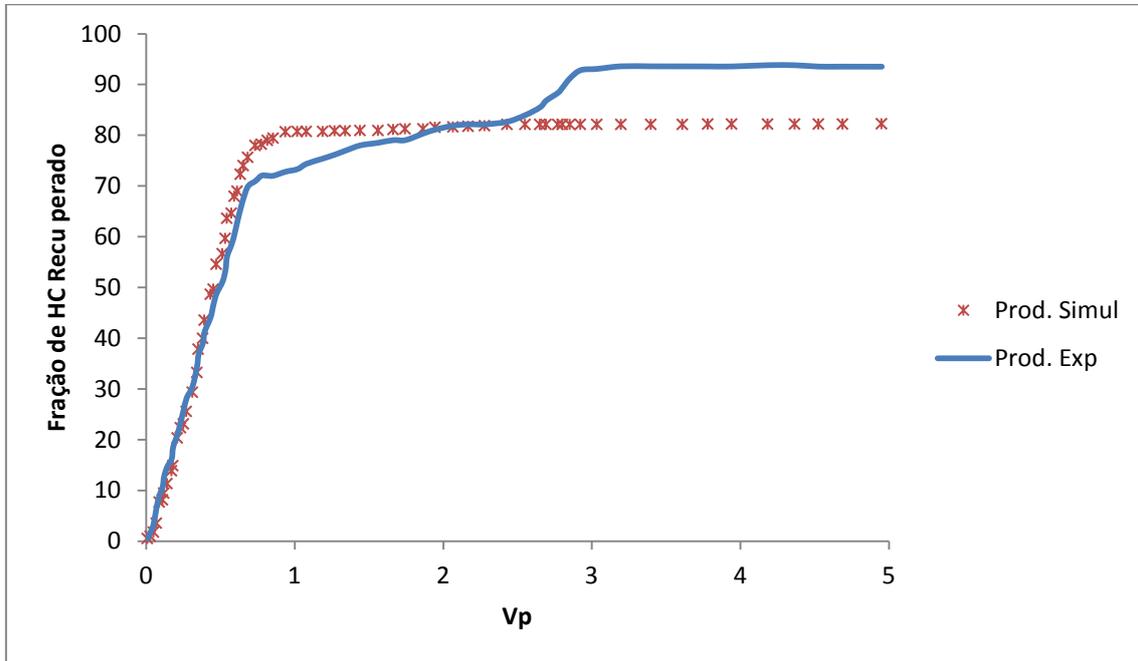


Figura 23: Recuperação de Óleo contra Volume Injetado

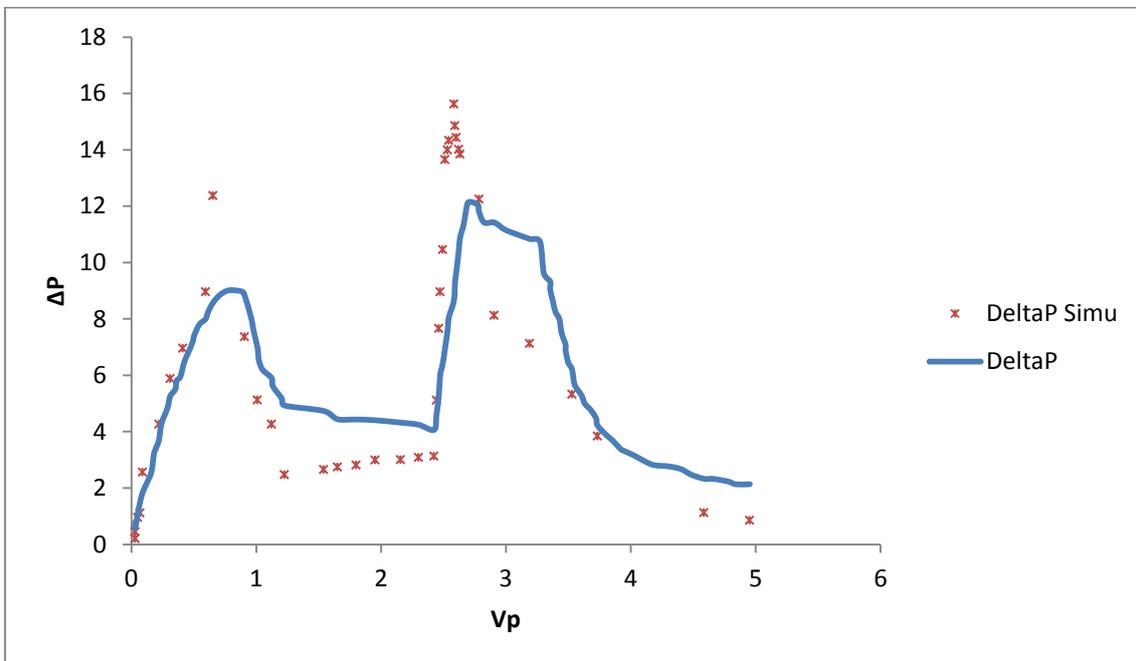


Figura 24: Diferencial de Pressão para Manter o Fluxo Constante

Pode ser observado que os resultados simulados apresentam concordância com os dados experimentais apresentados por PERGORARO (2012).

Na Figura 23 é possível observar que próximo à injeção de 3 Vp (Volume poroso), a simulação deixa de acompanhar o aumento da produção, acredita-se que tal descolamento se deve ao fato de que neste ponto a fase gasosa (na simulação) é parcialmente absorvida pela fase oleosa, gerando uma queda de pressão muito mais acentuada que nos dados experimentais, como pode ser visto na Figura 24, de tal maneira que não foi possível identificar se tal limitação se deve ao modelo termodinâmico ou ao modelo simplificado de escoamento.

4.2.3. Simulação de WAG

A primeira aplicação de WAG reportada na literatura ocorreu em 1957 no campo North Pembiana, operado pela Mobil Oil Company na província de Alberta, no Canadá. Desde então, cerca de 60 aplicações foram reportadas na literatura, a maioria localizada nos EUA e iniciada na década de 80.

Os solventes historicamente utilizados no processo WAG foram predominantemente, hidrocarbonetos leves (HC) e CO₂. O uso do CO₂ se deu principalmente nos EUA, devido à disponibilidade de extensas jazidas em terra.

Em seu trabalho, PERGORARO (2012), descreve a idéia por trás do processo de WAG como: “alternar bancos de gás e água, de forma que haja trapeamento parcial do primeiro pelo segundo fluido, levando a efeitos de histerese de permeabilidade relativa capazes de reduzir a mobilidade do gás e provocar seu escoamento em regiões inicialmente não varridas. A água permite, para uma mesma quantidade de gás disponível, maximizar o volume de rocha contatada. Além disso, ajuda a carrear em direção aos poços produtores, o óleo descolado pelo gás. Esta técnica foi denominada Injeção Alternada de Água e Gás e não é raro que com ela se consiga atingir saturações residuais de óleo menores do que se conseguiria isoladamente com água ou gás.”

No presente estudo, foram utilizados plugues virtuais de arenito Clashac com permeabilidade de 65mD e porosidade da ordem de 18%, diâmetro de 5cm e comprimento de 65cm.

Neste ensaio, por se considerar o efeito termodinâmico, foi utilizada água pura, uma vez que a utilização de modelos que representam a presença de eletrólitos

foge ao escopo deste trabalho. A fase gás a ser injetada no processo de recuperação foi o CO₂ puro.

As propriedades dos fluidos são apresentadas na Tabela 12:

Tabela 12: Propriedades de Fluidos na Simulação WAG

Propriedade	Experimental	Este Trabalho
Viscosidade do Gás	0,0249 cP	POLING, PRAUSNITZ e O'CONNEL (2000) ²¹
Viscosidade do Óleo	0,0405 cP	
Viscosidade da Água	0,68 cP	
Densidade do Gás	211,4 Kg/m ³	
Densidade do Óleo	317,4 Kg/m ³	
Densidade da Água	992,9 Kg/m ³	

O experimento consistiu nas seguintes etapas:

1. Criação de 100 plugues com as características citadas;
2. Saturação dos plugues com o óleo sintético;
3. Injeção de água de forma a calcular a saturação irreduzível de água;
4. Início do Experimento;
 - a) Saturação do plugue com óleo sintético;
 - b) Injeção de água (W1) até alcançar a saturação irreduzível de óleo;
 - c) Injeção de gás (G1);
 - d) Injeção de água (W2);

²¹ Os dados utilizados seguem modelos matemáticos apresentados em POLING, PRAUSNITZ e O'CONNEL (2000) de forma que não se afere um valor pontual, todos os valores são aferidos por meio da composição e de regras de mistura específicas.

e) Injeção de gás (G2).

5. Aferição e cálculo dos resultados.

Nestes experimentos, os fluidos são injetados à vazão constante ($1\mu\text{L}/\text{s}$), sendo que a vazão de produção é acompanhada e o diferencial de pressão medido.

Foi utilizada a equação de estado de Peng-Robinson com regra de mistura de Van der Waals para representar todas as fases.

O período de injeção de água (W1) ocorre até a injeção de 1 volume poroso (V_p), de 1 a $2,5 V_p$ o CO_2 é injetado (G1), de $2,5$ a $3,5$ água é injetada (W2) e de $3,5$ a 5 novamente gás é injetado (G2).

Devido à sua natureza probabilística, os resultados dos 100 plugues de NPS $5 \times 5 \times 65$ variam em torno de uma média, com desvios positivos e negativos. Para cada ponto aferido durante a simulação, foi calculada a média e o desvio positivo (sigma +) e o negativo (sigma -) e apresentados na Figura 25.

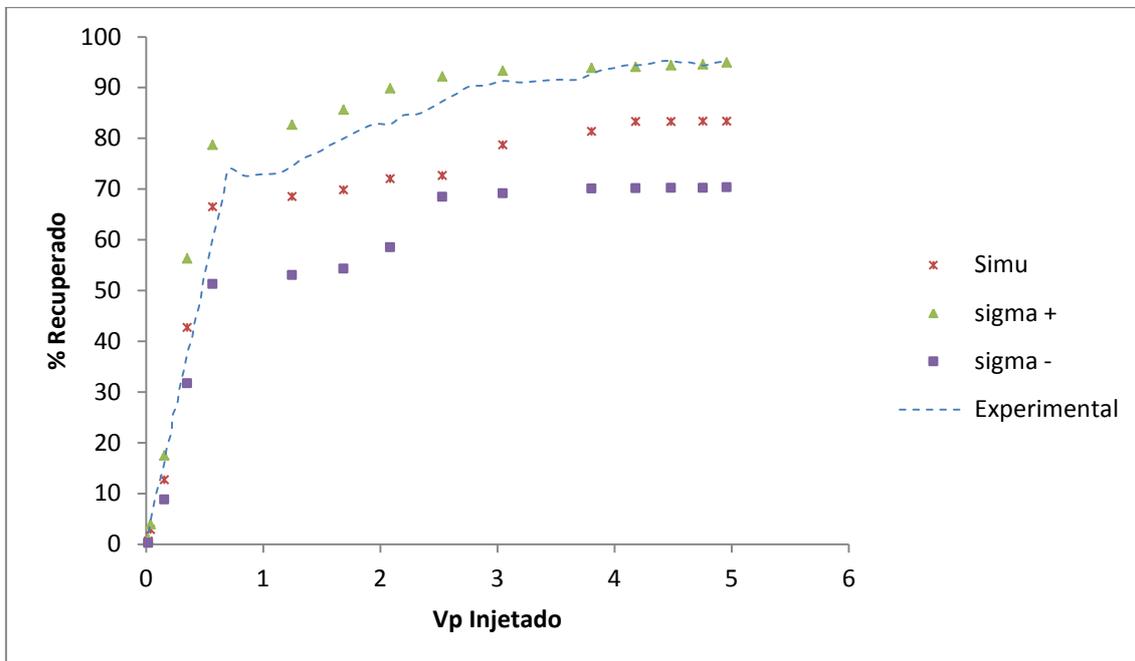


Figura 25: Recuperação de Hidrocarbonetos pelo processo WAG

Pode-se observar que a simulação de recuperação de hidrocarbonetos por meio do processo de WAG apresentou um desvio relativo médio²² de cerca de 19,16%. Este é um valor relativamente alto, entretanto, deve-se levar em conta que o NPS utilizado neste ensaio foi de 5 x 5 x 65, ou seja, uma rede de baixo refinamento, cabendo ressaltar também que tal caso de estudo também apresenta comportamento trifásico bastante complexo.

Todavia é importante notar que, ao contrário do estudo de caso anterior onde o desvio padrão foi menor que 1%, neste caso o desvio padrão foi da ordem de +25,58% e -26,79%, sendo que os dados reais de produção estiveram sempre dentro da faixa predita pela simulação.

4.2.4. Estudo de Sistema em Escala Real Utilizando a Metodologia Proposta

Para verificar a validade do modelo proposto em escalas maiores, utilizou-se os dados de simulação de reservatórios de hidrocarbonetos apresentada por BATISTA, COUTINHO, *et al.* (2010), utilizando software próprio onde as equações do modelo foram linearizadas pelo método de Newton e solucionadas pelo método do gradiente biconjugado estabilizado (BICGSTAB).

A Figura 26 mostra o reservatório utilizado no estudo em questão.

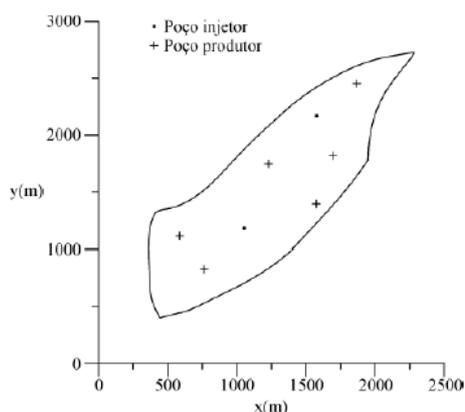


Figura 26: Modelo do reservatório estudado. Imagem extraída de BATISTA, COUTINHO, *et al.* (2010)

²² $D = \left(\frac{|Dado_{exp} - Dado_{sim}|}{Dado_{exp}} \right) \times 100$

De acordo com BATISTA, COUTINHO, *et al.* (2010), o reservatório apresentado na Figura 26 apresenta as propriedades da Tabela 13:

Tabela 13: Propriedades do Reservatório

Propriedade	Valor
Altura	15 [m]
Porosidade	0,30
Permeabilidade Absoluta do Meio	$0,3 \cdot 10^{-12}$ [m ²]
Raio dos Poços	0,122 [m]
Pressão Inicial	$2,068 \cdot 10^7$ [Pa]
Saturação Inicial de Água	0,2
Saturação de Óleo Residual	0,2
Densidades	1000,0 kg/m ³ (Na pressão de Ref.)
Pressão de Referência	$2,068 \cdot 10^7$ [Pa]
Viscosidade da Água	$10^{-3} [1 + 1,45 \cdot 10^{-12} (P - 1,38 \cdot 10^7)]$ [Pa.s]
Viscosidade do Óleo	$1,163 \cdot 10^{-2} [1 + 1,45 \cdot 10^{-12} (P - 1,38 \cdot 10^7)]$ [Pa.s]

No trabalho, foram utilizados 1160 volumes 58 x 20 x 1 e o passo de tempo de 1 dia, e os resultados foram obtidos ao longo do tempo 500, 2000, 3500, 6000 dias. Os poços possuem os dados da Tabela 14:

Tabela 14: Propriedades dos Poços

Poços		Taxa de Fluxo [m ³ /dia]	Coordenadas	
Injetor			x	y
	1	254,02	906	1343
Produtor	2	174,87	1468	2218
	1	79,49	593	1031
	2	95,04	406	1281
	3	79,49	1093	1843

	4	47,69	1468	1531
	5	63,59	1593	1906
	6	63,59	1781	2468

Os resultados de produção real são apresentados na Figura 27, Figura 28 e Figura 29:

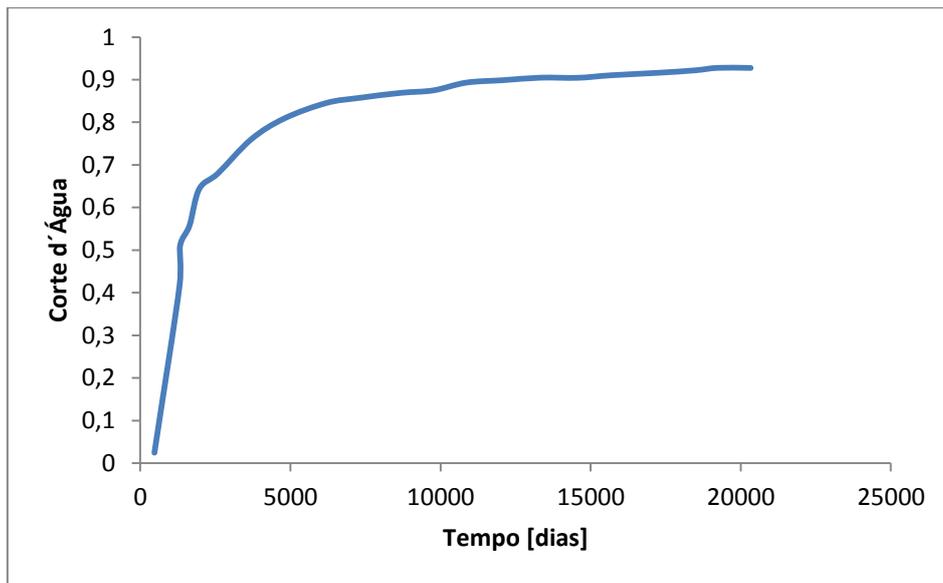


Figura 27: Corte de água do poço 1

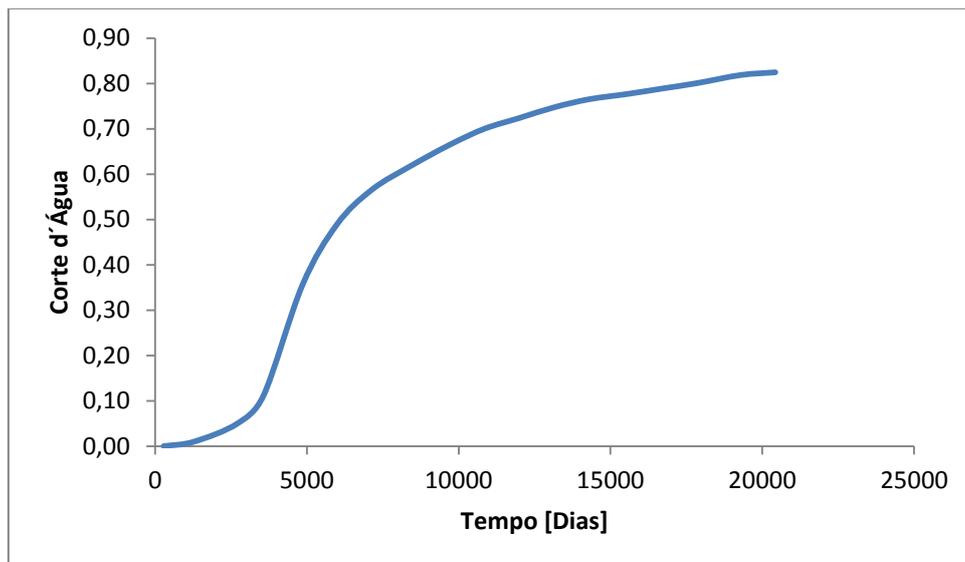


Figura 28: Corte de água do poço 2

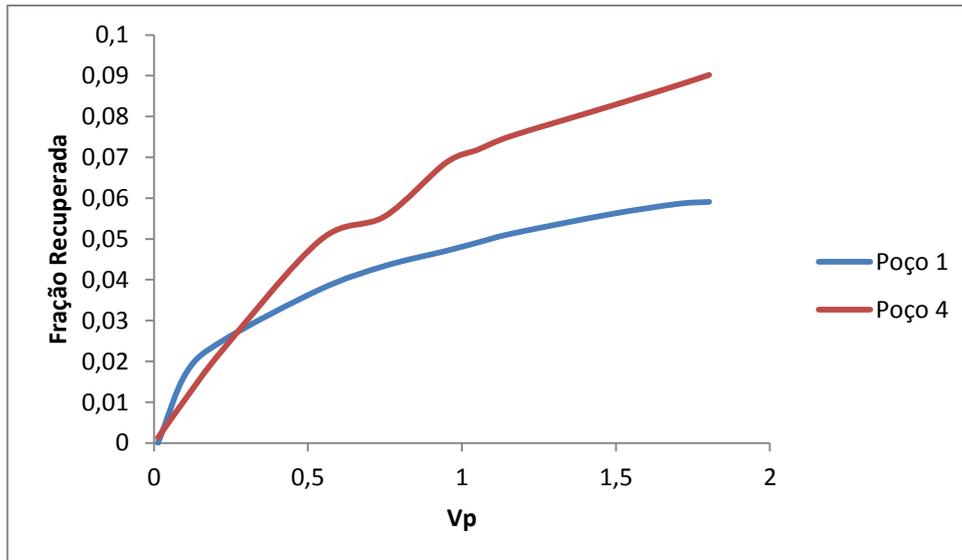


Figura 29: Curvas de Produção (fração recuperada vs Vp injetado)

4.2.4.1. Caso 1: Utilizando a rede proposta com dimensão de reservatório

Neste ensaio foram criadas redes cúbicas de 3000 x 2500 x 15 m³ com diversos NPS, sendo que se selou a mesma (tornou-se as gargantas iguais a zero) no contorno apresentado na Figura 26.

Os poços foram simulados como entidades virtuais que agem como sorvedouros ou fontes de fluidos em toda a sua extensão, fisicamente sendo representados por cilindros de raio 0,122m, conforme descrito na Tabela 13.

As redes criadas apresentaram os seguintes NPS: 58 x 20 x 1 (A), 100 x 40 x 2 (B), 400 x 160 x 8 (C), 3000x2500x15 (D), 18000x15000x90 (E), sendo que todas foram ajustadas para apresentarem os mesmo dados de porosidade, permeabilidade absoluta. Por falta de um detalhamento maior de análise textural da rocha, optou-se determinar que a distribuição de tamanho de poros segue aquela do Arenito Clashac, citada anteriormente e utilizada na simulação da produção por WAG.

O meio inicialmente foi saturado com água e posteriormente foi injetado com óleo na pressão inicial determinada na Tabela 13, até ocorrer o *breakthrough* de óleo, sendo avaliada na ocasião a saturação inicial de água.

As propriedades físico-químicas do meio são aquelas fornecidas pela biblioteca termodinâmica Mammoth que implementa os modelos apresentados em

POLING, PRAUSNITZ e O'CONNEL (2000) para o cálculo de todas as propriedades de interesse.

Durante o ciclo de produção, foi mantido o regime de injeção constante, permitindo que a pressão variasse, o *timestep* da simulação foi adaptado à escala dos poros, de forma que não fosse possível injetar mais de 100 volumes de poro médio por *timestep*. Por questões de comparação, os valores aferidos mantiveram o valor na escala de m³/dia.

Inicialmente, fez-se necessário aferir qual valor de NPS permitiria a melhor representação do meio poroso e tal representação foi escolhida com base no tempo de *breakthrough*.

Como os dados de *breakthrough* não são diretamente fornecidos, utilizou-se os dados de corte d'água nos poços 1 e 4, sendo o NPS escolhido aquele que apresentar menor erro relativo percentual no tempo em que o corte d'água é igual a 10%.

Os resultados do estudo de NPS são mostrados na Figura 30 até a Figura 32, pode-se verificar que os desvios apresentados pelos NPS mais grosseiros são inaceitáveis, e os desvios apresentados pelos NPS muito refinados apresentam tempos de execução proibitivos.

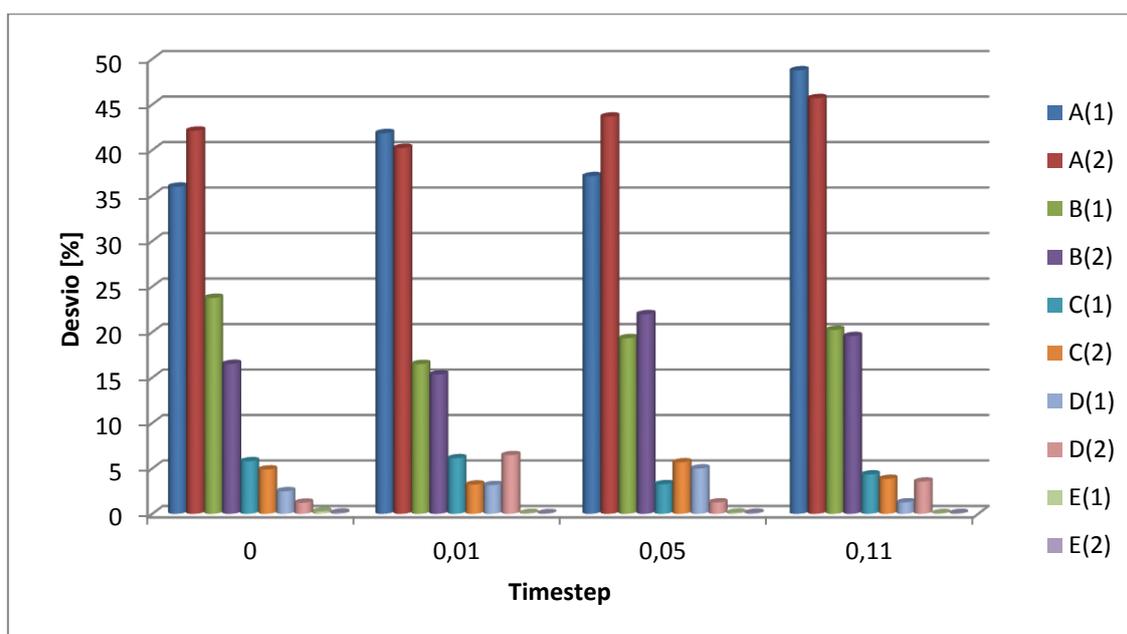


Figura 30: Comparação de erros entre os timesteps medidos, letras representam o NPS e números o poço em estudo

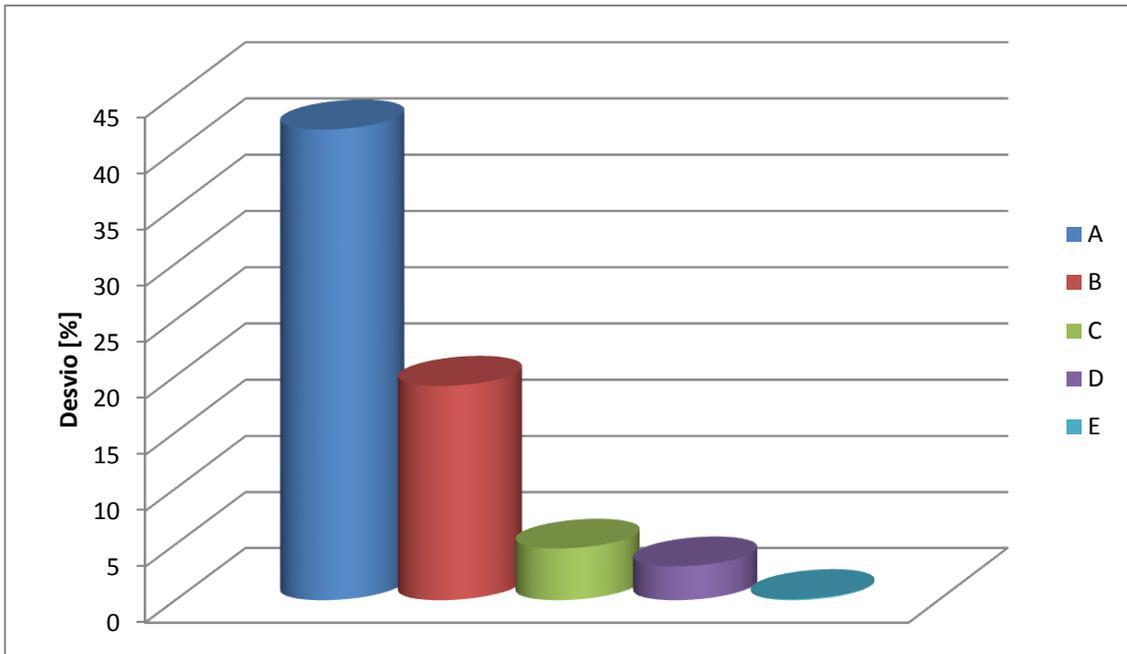


Figura 31: Erro médio total de cada NPS

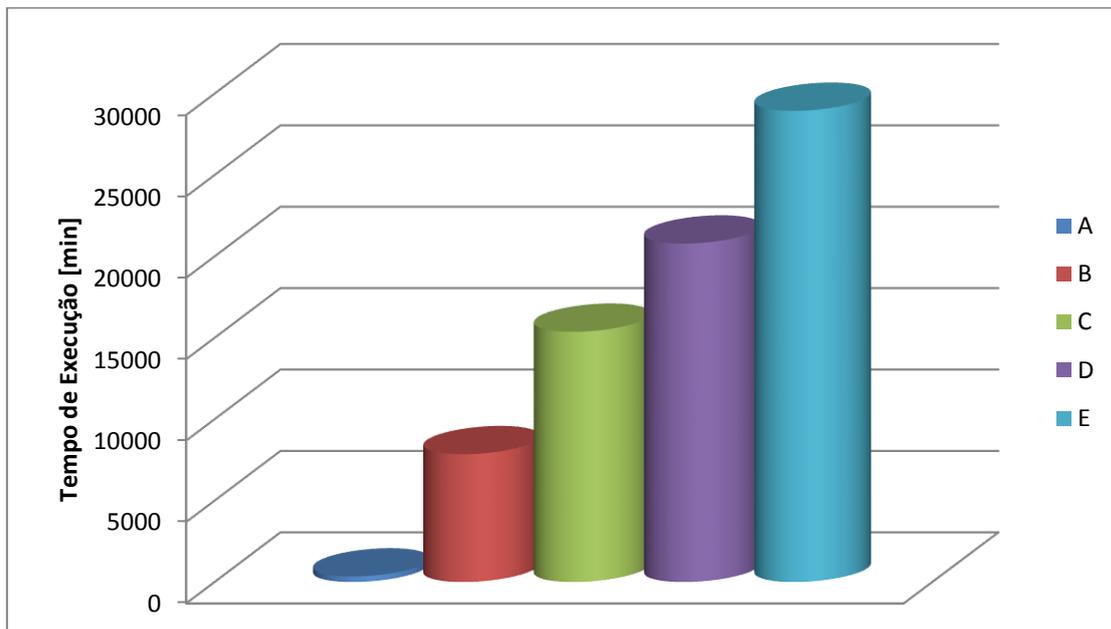


Figura 32: Tempo de execução dos ensaios

Após selecionado, o NPS 400 x 160 x 8, pela sua relação custo x benefício, operou-se a simulação completa dos 20000 dias de forma a aferir as curvas de produção e posteriormente utilizar os resultados obtidos no estudo do caso 2, por meio da abordagem de KING (1999).

Após a simulação, obtiveram-se os dados de produção, apresentados na Figura 33.

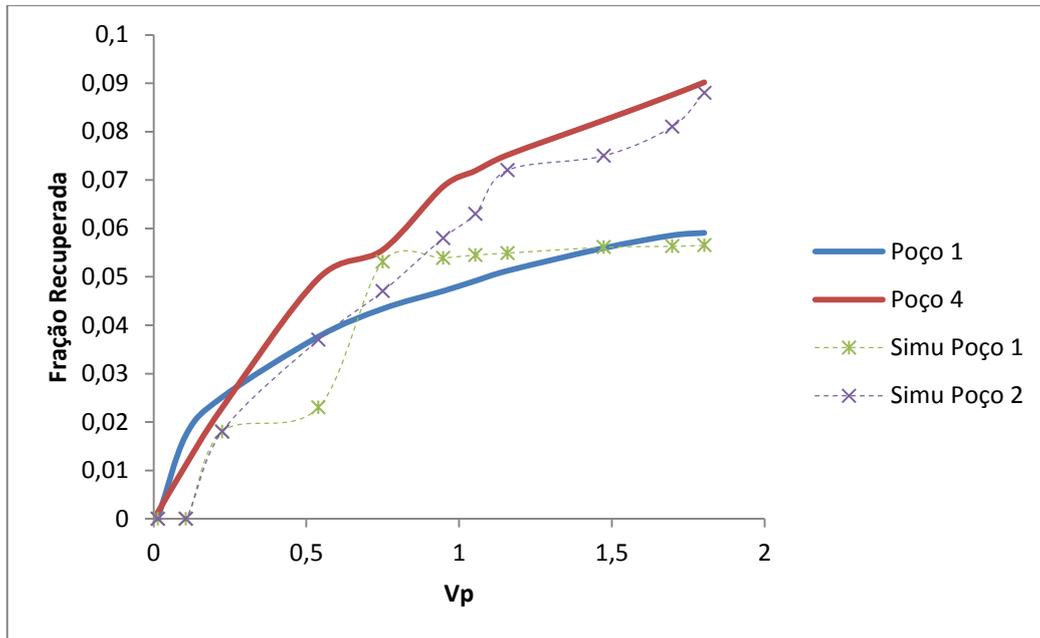


Figura 33: Comparação das curvas de produção: real vs simulada

Pode-se notar na Figura 33 que com o uso da metodologia proposta a tendência da produção é seguida, todavia o comportamento típico da parte linear de subida da curva de produção não consegue ser reproduzido, sendo esta uma limitação do modelo proposto.

4.2.4.2. Caso 2: Utilizando a abordagem de KING (1999) para predição do tempo de *breakthrough*

Em KING (1999), é proposta uma metodologia de cálculo de tempo de *breakthrough* por meio da teoria da percolação de STAUFFER e DIETRICH (2003), onde um modelo estatístico utiliza por base a dimensão do meio poroso, o fator *net-to-gross* (proporção do meio poroso com permeabilidade finita e maior que zero em relação aquela quase nula ou nula) e a distância entre os pontos do corpo produtor e o poço de produção.

O modelo estatístico pode ser representado pela seguinte equação:

$$P(t_{br}|r, L, p) \sim \frac{1}{r^{d_t}} \left(\frac{t_{br}}{r^{d_t}}\right)^{-g_t} f_1\left(\frac{t_{br}}{r^{d_t}}\right) f_2\left(\frac{t_{br}}{L^{d_t}}\right) f_3\left(\frac{t_{br}}{|p - p_c|^{-v d_t}}\right)$$

Em que:

$$f_1(x) = \exp(-ax^{-\phi})$$

$$f_2(x) = \exp(-bx^\psi)$$

$$f_3(x) = \exp(-cx^\pi)$$

Sendo tbr o tempo de *breakthrough*, L o tamanho do reservatório em unidades adimensionais ($L \sim \sqrt[3]{Volume}$ ou $L = \min(L_x, L_y, L_z)$)²³, r a distância média entre todos os poços e p o parâmetro *net-to-gross* (utilizando 275mD como valor de *cutoff* como o limite de permeabilidade quase nula KING (1999)), os outros valores do modelo foram fornecidos por KING (2002) como: $d_t = 1,33$; $g_t = 1,90$; $a = 1,1$; $b = 5,0$; $c = 1,6$ para $p < p_c$ e $2,6$ para $p > p_c$; $\phi = 3,0$; $\psi = 3,0$; $\pi = 1,0$; $v = 4/3$; $p_c = 0,668$; Tais valores não serão discutidos neste trabalho, pois foge completamente ao escopo de comparação, mas maiores detalhes podem ser encontrados em DOKHOLYAN, LEE e BULDYREV (1998).

É de vital importância ressaltar que tais estudos são de fundo probabilístico, sendo necessária a execução de diversos cálculos para aferir dados confiáveis.

Como pode-se observar, a idéia da metodologia de KING (2002) é obter resultados de reservatórios em tamanho real por meio de dados de uma simulação de reservatórios bem menores, como de um plugue, por exemplo. Assim, gerou-se um plugue virtual de $4 \times 4 \times 9 \text{ cm}^3$ (NPS 40 x 40 x 90) e propriedades geofísicas iguais às da Tabela 13. O parâmetro r do modelo (distância entre os poços) foi calculado com base em poços com distância equivalente àqueles apresentados por BATISTA, COUTINHO, *et al.* (2010). Sendo que foram criadas entidades virtuais que simulam o comportamento dos poços produtores e injetores e todas as faces da rede de percolação cúbica foram seladas.

Foram simuladas 100 rodadas de meios com as mesmas propriedades geofísicas, entretanto com redes diferentes. Desta forma, aplicando-se os dados obtidos

²³ Ambos os modelos apresentam bons resultados, sendo o primeiro apresentado em KING (1999) e o segundo em DOKHOLYAN, LEE e BULDYREV (1998).

de tempo de *breakthrough* (neste caso, assim como no capítulo anterior, o tempo de *breakthrough* foi substituído pelo tempo de corte de 10% de água).

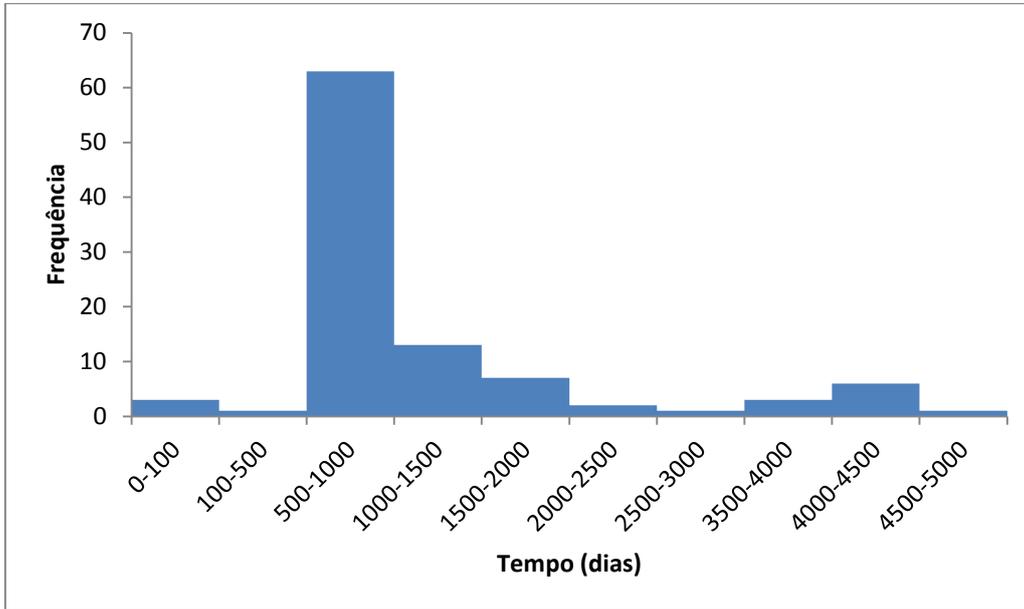


Figura 34: Histograma de corte 10% de água para o poço 1 re-escalados para reservatório real

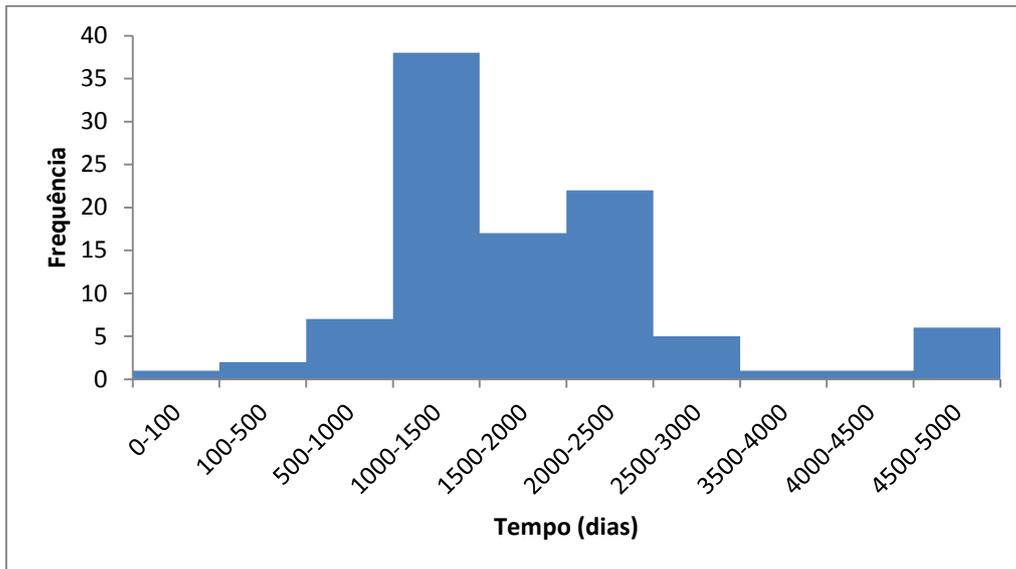


Figura 35: Histograma de corte 10% de água para o poço 2 re-escalado para reservatório real

A partir da Figura 34 e da Figura 35 é possível observar que o tempo de corte de 10% em água para o poço 1 é de aproximadamente 750 dias e para o poço 2 é de 1250 dias (o valor real para o poço 1 é de 641 dias e para o poço 2 de 1286 dias).

4.2.4.3. Caso 3: History Matching

Segundo ROSA (2006), o processo de ajuste histórico tem como objetivo a determinação dos parâmetros do reservatório e do aquífero, bem como do modelo de influxo d'água. Uma vez determinados, os modelos do aquífero e os volumes de óleo e gás do reservatório, podem ser usados para previsão do comportamento do reservatório.

O procedimento consiste no ajuste de um ou mais modelos matemáticos aos dados históricos, até que se obtenha uma discrepância aceitável entre os dados do modelo. Durante o processo, os parâmetros do reservatório e/ou aquífero podem ser alterados para que se obtenha o melhor ajuste possível.

Para executar o procedimento supracitado, utilizou-se os dados da Figura 29, e de posse do algoritmo de otimização DIRECT-L, operou-se de forma a minimizar o erro absoluto percentual da curva de produção dos dois poços, ajustando os dados de porosidade, conectividade e média e desvio padrão de uma distribuição normal de tamanho de poros.

Desta forma, foi possível aferir, via history matching, os dados supracitados e a partir da célula de percolação formada aferir propriedades como permeabilidade absoluta, por exemplo.

Tomando por função objetivo:

$$\min \sum_{poço=0}^{np} \sum_{ponto=0}^{total\ pontos} \left(\frac{\|P_{exp} - P_{sim}\|}{P_{exp}} \right)$$

Em que o *poço* representa o poço produtor em estudo, *np* o número total de poços em estudo e os *pontos* representam os pontos na curva histórica de produção que estão sendo utilizados

Inicialmente, de forma a acelerar o processo, visto que cada simulação do escoamento dura em torno de 11 dias, utilizou-se uma rede de 40 x 16 x 1 para aferir os dados preliminares e acelerar o processo, tal rede é simulada em tempo inferior a 3 horas (por iteração).

Após a otimização da rede em questão, pelo princípio da dimensão fractal, explicado em KING (1999), os valores aferidos encontrar-se-ão próximos aqueles da rede em tamanho real.

Com os dados obtidos da rede de 40 x 16 x 1, cria-se uma nova rede de percolação de 400 x 160 x 8 e novamente aplica-se o algoritmo de otimização chegando-se ao valor final.

É importante relembrar o fato de que para aferir cada ponto, são simuladas 10 redes de percolação diferentes e a média do valor de interesse é aferida, e que em cada simulação feita, os passos de saturação com líquido, saturação com óleo e produção por injeção são feitas.

Os resultados aferidos encontram-se na Tabela 15, onde se pode verificar que o uso da curva de produção para definição das propriedades de reservatório por meio da metodologia proposta apresentou desvios menores que 15%, valores os quais, segundo ROSA (2006), podem ser considerados dentro do erro da metodologia de History Matching.

Tabela 15: Resultados do History Matching

Propriedade	Valor Real	Valor HM 1ª etapa	Valor HM 2ª etapa
Porosidade	0,30	0,275	0,326
Permeabilidade Absoluta do Meio	$0,30 \cdot 10^{-12} \text{ [m}^2\text{]}$	$0,21 \cdot 10^{-12} \text{ [m}^2\text{]}$	$0,34 \cdot 10^{-12} \text{ [m}^2\text{]}$
Média de Tamanho de Poro	NA	Personalizada Extraída de MATTHEWS, MOSS e RIDGWAY (1995)	
Desvio de Tamanho de Poro	NA		
Saturação Inicial de Água	0,2	0,23	0,25
Saturação de Óleo Residual	0,2	0,15	0,18

CAPÍTULO V

5. Conclusões e Sugestões

Com base no apresentado neste trabalho é possível concluir que a abordagem de uma rede de percolação para simulação de reservatórios de hidrocarbonetos se mostrou bastante promissora, uma vez que utilizando tal técnica é possível simular escoamento de fluidos complexos por meio de uma metodologia computacionalmente menos custosa que as técnicas tradicionais.

Foi desenvolvida uma metodologia utilizando dados disponíveis na literatura, tanto para a simulação dos escoamentos e curvas de produção quanto para a criação dos meios porosos virtuais. No primeiro caso, as curvas de produção, em geral, estão vinculadas a correntes sintéticas e/ou a meios porosos sintéticos ou que não foram diretamente retirados de reservatórios de hidrocarbonetos, mas de formações geológicas com as mesmas propriedades petrofísicas. No segundo caso, as informações disponíveis a respeito do meio poroso são deveras simplificadas, em sua maioria gráficos de intrusão de mercúrio e/ou distribuição cumulativa de tamanho de poros. Estes dados de análise textural, neste trabalho, foram suficientes para determinar um meio poroso de interesse assim como a possibilidade de simulação de escoamento neste meio, todavia tal análise textural não mostra as relações entre as estruturas do meio poroso de forma adequada a um estudo mais aprofundado onde a relação entre os fluidos molhantes e não-molhantes seja levada em conta na modelagem.

Apesar das limitações de informações disponíveis, foi possível a criação de um meio poroso virtual que, por meio de sua estrutura, consegue reproduzir o comportamento da análise de intrusão de mercúrio com baixos erros.

Após a reprodução do meio poroso em uma entidade virtual, houve a necessidade de desenvolvimento de um *framework* termodinâmico de forma a permitir o desenvolvimento dos cálculos de interesse do flash. Tal sistema foi criado de forma a permitir que o modelo seja flexível o suficiente para utilização de equações de estado cúbicas e modelos de energia livre em excesso. Foram implementados algoritmos diversos daqueles disponíveis na literatura e teve seus desempenhos comparados

àqueles disponíveis na literatura, apresentando resultados compatíveis e com desvios reduzidos.

Do ponto de vista do escoamento, a capacidade de representar o fenômeno do escoamento foi comprovada por meio da simulação da saturação de um meio poroso com um fluido e posteriormente estendida para n-fases.

A partir dos resultados obtidos, pode-se concluir que a metodologia proposta para simulação da produção/recuperação de hidrocarbonetos de meios porosos virtuais consegue reproduzir os comportamentos já estudados na literatura. Por meio desta metodologia, as interações entre todos os elementos do sistema petro-físico podem ser levadas em conta, de forma mais ou menos simplificada.

Vários casos de interesse foram abordados neste estudo, desde a intrusão de uma simples fase no meio poroso, passando pela simulação de intrusão e produção de fluidos em um plugue e a alteração na metodologia de produção (WAG). Posteriormente, a produção de um reservatório em escala real foi estudada, demonstrando que apesar do alto custo computacional é possível a utilização desta metodologia em todos os contextos.

Além destas simulações, uma abordagem estatística foi estudada de forma a verificar a possibilidade de criação de um sistema de *scaleup* a partir da simulação de um sistema em tamanho reduzido. Foi verificado que tal abordagem permite a estimação do ponto de *breakthrough* de água, todavia o modelo utilizado ainda necessita de estudos com relação ao seu uso para previsão de curvas ou assíntotas de produção.

Finalmente, utilizou-se a metodologia proposta no estudo de *history matching* de um reservatório real, sendo que a mesma abordagem, permitiu de forma simplificada a obtenção de dados de reservatório.

Cabe ressaltar que o grande interesse deste trabalho é verificar a possibilidade de utilização desta metodologia nas simulações de reservatório e de escoamento em plugues, sendo que desta forma, em momento algum, existe um compromisso formal em estudar todas as formas de aceleração de código e de paralelização – apesar do estudo conter elementos correlatos.

Com base em tudo que foi apresentado é correto afirmar que a metodologia proposta consegue representar comportamentos do escoamento multifásico simplificado em um reservatório de hidrocarbonetos, permitindo desta forma aferir dados de interesse na escala do poro.

Em trabalhos futuros, sugere-se um estudo aprofundado da paralelização das metodologias propostas, uma vez que verificou-se que existe potencial de *speedup* e este é o grande diferencial que permitirá a aplicação desta metodologia na P&D industrial.

Cabe ressaltar, também, que um estudo que utilize a formulação proposta para a virtualização do meio poroso por meio de ensaios de processo (como aferição de curvas de produção ou de permeabilidade relativa).

Por último sugere-se que seja introduzido um módulo de interação rocha-fluido, de forma a permitir o estudo da dissolução da matriz rochosa no fluido percolante, problema esse muito comum nos estudos experimentais de percolação de testemunhos com fluido de injeção/produção.

6. Referências Bibliográficas

- ABRAMS, D. S.; PRAUSNITZ, J. M. **AIChE J.**, vol 21, 1975. 116-128.
- BALAY, S. et al. **Efficient Management of Parallelism in Object Oriented Numerical Software Libraries**. [S.l.]: Birkha User Press, 1997.
- BATISTA, F. A. et al. Escoamento Bifásico (Óleo-Água) em Reservatório de Petróleo com Geometria Irregular Incluindo Injeção de Água: Efeito da Localização dos Poços no Fator de Recuperação de Óleo. **Mecânica Computacional XXIX**, 2010. 8481-8501.
- BECK, K. **Test Driven Development: By Example**. [S.l.]: Addison-Wesley, 2003.
- BRENAN, K. E.; CAMPBELL, S. L.; PETZOLD, L. R. **Numerical Solution of Initial Value Problems in Differential Algebraic Equations**. [S.l.]: SIAM, 1996.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Análise Numérica**. [S.l.]: Thompson, 2003.
- CONSTANTINOUS, L.; GANI, R. New Group Contribution Method for Estimating Properties of Pure Components. **AIChE J.**, vol. 40, 1994. 1697-1710.
- CURBELO, F. D. S. **Recuperação Avançada de Petróleo Utilizando Tensoativos**. [S.l.]. 2006.
- DODSON, C. T. J.; SAMPSON, W. W. Spatial Statistics of Stochastic Fiber Networks. **Journal of Statistical Physics**, vol. 96. nos. 1/2, 1999. 447-457.
- DOKHOLYAN, N. V.; LEE, Y.; BULDYREV, S. V. Scaling of the distribution of shortest paths in percolation. **J. Stat. Phys.**, vol. 93, 1998. 603-613.
- DULLIEN, I.; CHATZIS, F. A. L. **Int. Chem. Eng.**, vol. 25, p. 47, 1985.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. Rio de Janeiro: LTC, 2001.
- FREDENSLUNG, R. L.; JONES; PRAUSNITZ, J. M. **AIChE J.**, vol 21, 1977. 1086-1099.
- GABLONSKY, J. M.; KELLEY, C. T. A locally-biased form of the DIRECT algorithm. **J. Global Optimization** , vol. 21, 2001. 27-37.
- GUENNEBAUD, G. Eigen: A C++ Linear Algebra Library. **Eigen Official Web Site**, 2011. Disponível em: <<http://eigen.tuxfamily.org>>.
- HASHEMI, M. et al. Computer Simulation of gas generation and transport in landfills - I: quasi-steady-state condition. **Chemical Engineering Science**, vol. 57, 2002. 2475-2501.

- HORN, R. A.; JOHNSON, C. R. **Matrix Analysis**. UK: Cambridge University Press, 1999.
- HOTEIT, H. An efficient numerical model for incompressible two-phase flow in fractured media. **Advances in water resources.**, vol. 31, 2008. 891-905.
- JOAS, C. **Introduction to the Hoshen-Kopelman algorithm and its application to nodal domain statistics**. Nodal Week - Weizmann Institute. Rehovot - Israel: [s.n.]. 2006.
- KATZ, A. J.; THOMPSON, A. H. **Physical Review B**, vol. 34, 1986. 8179.
- KING, M. **Phys. Rev. A**, vol. 42, p. 4780, 1990.
- KING, P. R. . B. N. V. . D. Using Percolation Theory To Predict Oil Field Performance. **Physica A**, vol. 314, 2002. 103-108.
- KING, P. R. Applications of statistical physics to the oil industry: predicting oil recovery using percolation theory. **Physica A**, 274, 1999.
- LABASTIE, A. Increasing recovery factors: a necessity. **Journal of Petroleum Technology**, Agosto 2011.
- LARSEN, L. B.; RASMUSSEN, A. F. UNIFAC parameter table for prediction of liquid-liquid equilibriums. **Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.**, vol. 20, 1981. 331-339.
- LEMONS, E. M. **Implementação de um método de volumes finitos de ordem superior com tratamento multibloco aplicado à simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos**. Tese de Doutorado - PEQ - COPPE - UFRJ. Rio de Janeiro, p. 267. 2011.
- LENORMAND, R.; TOUBOL, E.; ZARCONE, C. **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 189, p. 61, 1988.
- LOURAKIS, M. I. A. **A Brief Description of the Levenberg-Marquardt Algorithm Implemented by levmar**. Greece: Foudation for Research and Technology, 2005.
- MACDONALD, R. A. Computer Model of a Porous Medium. **International Journal of Thermophysics**, vol. 9, 1989. 1061-1069.
- MATHEWS, T.; MATTHEWS, G. P.; HUGGETT, S. Estimating particle size distribution from a network model of porous media. **Powder Technology**, vol. 104, 1999. 169-179.
- MATTHEWS, G. P. et al. Network calculation of mercury intrusion and absolute permeability in sandstone and other porous media. **Powder Technology**, vol. 76, p. 95-107, 1993.

- MATTHEWS, G. P.; MOSS, A. K.; RIDGWAY, C. J. The effects of correlated networks on mercury intrusion simulations and permeabilities of sandstone and other porous media. **Powder Technology**, vol. 83, 1995. 61-77.
- MATTHEWS, G. P.; SPEARING, M.; PETER, G. Modelling Characteristic Properties of Sandstones. **Transport in Porous Media**, vol. 6, p. 71-90, 1991.
- MICHELSEN, M. L. The Isothermal Flash Problem. Part I. Stability. **Fluid Phase Equilibria**, vol. 9, 1982. 1-19.
- MICHELSEN, M. L. The Isothermal Flash Problem. Part II. Phase-Split Calculation. **Fluid Phase Equilibria**, vol. 9, 1982. 21-40.
- MIKYSHA, J. Implementation of higher order methods for robust and efficient compositional simulation. **Journal of Computational Physics**, vol. 229, 2010. 2898-2913.
- MILCHENSEN, M. L. Calculation of Multiphase Equilibrium. **Computers and Chemical Engineering**, vol. 18, 1994. 545-550.
- NICHITA, D. V.; GOMEZ, S.; LUNA, E. Multiphase equilibria calculation by direct minimization of Gibbs free energy with a global optimization method. **Computers and Chemical Engineering**, vol. 26, 2002. 1703-1724.
- PACHECO, P. **Parallel Programming with MPI**. [S.l.]: [s.n.], 1996. ISBN ISBN-10: 1558603395.
- PAN, H. Complex Multiphase equilibrium calculation by direct minimization of Gibbs free energy by use of simulated annealing. **SPE Reservoir Evaluation and Engineering**, n. 36-42, 1998.
- PANTELIDES, C. The Consistent Initialization of Differential-Algebraic Systems. **J. Sci. and Stat. Comput.**, 9, 1988.
- PATEL, N. C.; TEJA, A. S. A New Cubic Equation of State for Fluids and Fluid Mixtures. **Chemical Engineering Science**, vol. 37, no. 3, 1982. 463-473.
- PEÇANHA, A. S. R. **Desenvolvimento de um Método Híbrido de Otimização para Estimação de Parâmetros Termodinâmicos**. XXIX CILAMCE. Maceio: [s.n.]. 2008.
- PENG, D.; ROBINSON, D. B. A New Two-Constant Equation of State. **Ind. Eng. Quim. Fundam**, vol. 15, no. 1, 1978. 59-64.
- PERGORARO, R. T. **Escoamento Trifásico em Meios Porosos: Permeabilidade Relativa Óleo-Gás-Água**. [S.l.]. 2012.
- PETZOLD, L. A. **Adescription of DASSL: a Differential / Algebraic System Solve** - Proceedings of IMACS World Congress. Montreal: [s.n.]. 1982.

POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNEL, J. P. **The Properties of Gases and Liquids**. 5^a. ed. [S.l.]: [s.n.], 2000.

PRAUSNITZ, J. M.; LICHTENTHALER, R. N.; AZEVEDO, E. G. **Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria**. New Jersey: Prentice Hall International, 1999.

REDLICJ, O.; KWONG, J. N. S. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions. **On the Thermodynamics of Solutions V**, 1948. 233-244.

RENON, H.; PRAUSNITZ, J. M. **AIChE J.**, vol. 14, 1968. 135-144.

ROBINSON, D. B. **The equilibrium phase properties of a synthetic sour gas mixture and a simulated natural gas mixture**. Tulsa. 1978.

ROSA, A. J. **Engenharia de Reservatórios de Petróleo**. Rio de Janeiro: Interciência, 2006.

RUSHTON, K. R. Ground-Water flow studies by resistance network. **Geotechnique**, vol. 16, issue 3, 1966. 264-.

SAFFMAN, P. G. Dispersion due to molecular diffusion and macroscopic mixing in flow through a network of capillaries. **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 7, issue 2, 1960. 194-208.

SAHIMI, M. **Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock**. [S.l.]: Wiley, 1995.

SAHINIDIS, N. V. Baron: A general purpose global optimization software package. **J. Global Optimization**, vol. 8, 1996. 201-205.

SANDLER, S. I. **Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics**. [S.l.]: Wiley, 2006.

SCHÄLING, B. **The Boost C++ Library**. [S.l.]: XML Press, 2011.

SCHEIDEGGER, A. E. **The Physics of FlowThrough Porous Media**. Toronto: University of Toronto Press, 1974.

SECCHI, A. R. DASSLC - User's Manual Version 3.2, 2007.

SECCHI, A. R.; MORARI, M.; BISCAIA, E. C. Dawrs: A differential-algebraic system solver by waveform relaxation method. **Proceedings of The Sixth Distributed Memory Computing Conference**, 1991.

SINGHAL, A. K. Network model study of multiphase flow behavior of porous media. **Journal of Petroleum Technology**, vol. 22, 1970. 583-.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. Rio de Janeiro: LTC, 2000.

SOAVE, G. Improvement of The Van der Waals Equation of State. **Chemical Engineering Science**, vol. 39, no. 2, 1984. 357-369.

SOHRABI, M.; SHAHVERDI, H.; FATEMI, M. **Experimental and Theoretical Three-Phase Relative Permeability for WAG Injection in Mixed Wet and Low IFT Systems**. International Symposium of the Society of Core Analysis. Halifaz: [s.n.]. 2010.

SPEARING, M. Modeling Characteristic Properties of Sandstones. **Transport in Porous Media**, vol. 6, 1991. 71-90.

STAUFFER; DIETRICH. **Introduction to Percolation Theory**. [S.l.]: Taylor & Francis, 2003.

TAY, R. **OpenCL Parallel Programming Development Cookbook**. [S.l.]: [s.n.], 2013.

TESSIER, S. R. Reliable phase stability analysis for excess Gibbs energy models. **Chem. Eng. Science**, vol. 55, 2000.

VALDERRAMA, J. O.; CISTERNAS, L. A. A Cubic Equation of State for Polar and Other Complex Mixtures. **Fluid Phase Equilibria**, vol. 29, 1986. 431-438.

WASYLKIEWICZ, S. K.; UNG, S. Global Phase Stability Analysis for Heterogeneous Reactive Mixtures and Calculation of Reactive Liquid-Liquid and Vapor-Liquid-Liquid Equilibria. **Fluid Phase Equilibria**, vol. 175, 2000. 253-272.

WILSON, G. A. **Modified Redlich-Kwong equation of state, application to general physical data calculation**. American Institute of Chemical Engineering 65th National Meeting. Cleveland: [s.n.]. 1969. p. 15C.

WILSON, G. M. **J. Am. Chem. Soc.**, vol. 86, 1964. 127-130.

YARBOROUGH, L. Vapor-Liquid equilibrium data for multicomponent mixtures containing hydrocarbon and non-hydrocarbon components. **Journal of Chemical Engineering Data**, vol. 17, 1972. 129-133.

A. Métodos Numéricos

No decorrer do presente estudo, diversos métodos numéricos foram utilizados. Este capítulo visa uma explanação básica a respeito de cada um deles, fontes para implementação e deduções simples.

Quando considerado necessário, são feitas explanações mais aprofundadas, mas em geral tais explicações são referenciadas.

a. Solvers

Dentre os principais solvers utilizados na solução de equações em geral, podem-se destacar os seguintes: Roots, Newton-Raphson e Levenberg-Marquardt.

b. Roots

Este solver foi proposto por HORN e JOHNSON (1999), ele retorna as n raízes de um polinômio de grau n . Primordialmente este solver é utilizado na resolução de equações de estado cúbicas (EoS), tendo como input os coeficientes do polinômio em estudo. Neste trabalho houve a necessidade de implementar um módulo de suporte a Números Complexos, de forma a permitir a aferição de forma fidedigna de todas as raízes, e no caso do uso do algoritmo com EoS, permitir a exclusão de raízes complexas de forma mais rápida.

c. Newton-Raphson

Este solver é uma reimplementação do algoritmo de Newton-Raphson para resolução de sistemas não-lineares de dimensão n . O algoritmo implementado neste trabalho foi aquele proposto por BURDEN e FAIRES (2003).

Na implementação deste algoritmo, optou-se pela criação de uma interface IDerivative, onde o usuário pode selecionar a função de cálculo da derivada dentre as automáticas (diferenças centrais, diferenças finitas) e aquelas inseridas pelo próprio usuário.

Cabe ressaltar que cuidado deve ser tomado ao utilizar-se deste algoritmo, uma vez que não se pode garantir a robustez do mesmo, uma vez que a depender do método que implementa a derivada, não se pode garantir a convergência do algoritmo.

d. FSolve / Levenberg-Marquardt

O solver FSolve é bastante conhecido no meio acadêmico, sendo bastante utilizado em softwares proprietários como o Matlab e o Mathematica. A depender do software em questão, a implementação do mesmo varia muito, sendo que o maior ponto em comum é a utilização do algoritmo de Levenberg-Marquardt.

Neste trabalho utilizou-se o algoritmo modificado proposto por LOURAKIS (2005) e assim como no solver Newton, optou-se pela implementação de uma interface IDerivative.

e. Algoritmos de Integração

Da forma como o sistema de equações exposto no Capítulo 2 foi proposto é possível a utilização tanto de um algoritmo voltado para ODE como o de um algoritmo voltado para DAE, cada um dos algoritmos estudados apresenta as suas próprias vantagens e desvantagens que não cabem ser aprofundadas neste estudo.

Neste trabalho optou-se simplesmente por verificar o tempo de execução e a robustez dos algoritmos integradores para o problema alvo, de forma a identificar aquele que apresentasse o melhor custo benefício para o ataque ao problema de escoamento.

Uma vez que a simplicidade no uso dos algoritmos de integração é fundamental, optou-se por adaptar cada um deles, adicionando uma nova camada de programação (camada de comunicação ou wrapper) que implementava uma interface chamada IIntegrator, de forma que o problema enxergue todos os algoritmos como uma única caixa preta, não distinguindo a forma de funcionamento de cada um deles, apenas aferindo os outputs em função dos inputs fornecidos.

É conveniente adicionar que cada um dos supracitados algoritmos foi implementado em uma linguagem computacional específica, sendo necessário muitas vezes a criação de uma camada de interpretação/tradução, como é o caso do ODEPack, por exemplo, que foi implementado totalmente em Fortran77, o que levou a uma demanda de criar uma camada de tradução para a linguagem ANSI C e de uma terceira camada que permita a utilização da biblioteca em C no C++. Estas manobras computacionais, em geral, geram um atraso mínimo, todavia no momento que passa-se a lidar com quantidades muito grandes de dados (como é o caso da rede 1000x1000x1000) este atraso passa a ser considerável.

A verificação de tais *bottlenecks* só é possível utilizando-se softwares específicos para este propósito, neste trabalho optou-se pelo uso do GoogleTest (<http://code.google.com/p/googletest>) para profiling no C++ e pela biblioteca nativa do Python destinada à profiling de código. Em geral foi verificado que o código utilizado não permitia maiores otimizações, sendo que o maior gasto de tempo se encontrava no Kernel do algoritmo propriamente dito.

Outro elemento aferido nos sistemas em estudo foi a possibilidade de utilização de bibliotecas internas ou *third-party* que permitissem o uso de matrizes esparsas, uma vez que estas reduzem drasticamente o uso de memória do sistema e aumentam de forma avassaladora a velocidade do processo de integração (como pode ser visto na discussão mais adiante).

f. Ordinary Differential Equation System (ODE)

Em matemática, uma equação diferencial ordinária é uma função que possui uma variável independente e suas variáveis. Estas equações aparecem em diversos contextos nos estudos das ciências.

Uma vez que em um fenômeno várias derivadas e funções se tornam inevitavelmente correlacionadas umas às outras por meio de equações, uma equação diferencial é o resultado que permite uma descrição dinâmica do problema, sua evolução e variação. Não raramente as quantidades são definidas por meio de taxas ou gradientes de quantidades.

Em geral uma ODE pode ser definida implicitamente da seguinte forma:

$$F(x, y, y', y'', \dots, y^n) = 0$$

Computacionalmente existem diversos pacotes computacionais que permitem a resolução de tais sistemas de equações, dentre os mais utilizados pode-se citar: Limex, Radau5, VODE, CVODE.

Limex

É um algoritmo que utiliza o método de extrapolação h em sistemas algébricos diferenciais lineares implícitos em Jacobianos densos, bandados ou esparsos.

Em geral este método resolve uma equação do tipo:

$$B(t, y) \cdot y'(t) = f(t, y)$$

Em que B é uma matriz nxn de rank menor ou igual a n.

Este algoritmo utiliza rotinas de álgebra linear implementadas na BLAS ou na LAPACK, podendo utilizar solvers diretos como a MA28 da biblioteca Harwell, ou solvers iterativos como o GMRES e BICGSTAB (Gradiente Biconjugado Estabilizado), o pré-condicionador utilizado em geral é o ILU da BLAS.

Radau5

O RADAU5 é uma implementação para utilização do método de Runge-Kutta implícito de ordem 5 para problemas da forma:

$$My' = f(x, y)$$

Com a possibilidade de singularidade da matriz M, com output denso.

Em geral esta biblioteca utiliza algoritmos e métodos implementados na LAPACK.

VODE / CVODE

É um método de ordem e passo variável. Em sistemas não rígidos ele utiliza as fórmulas de Adams-Multon, com ordem variável de 1 a 12. Para problemas rígidos, ele utiliza um framework BDF (*Backward Differentiation Formulaes*) com ordem variando entre 1 e 5. Para ambos os problemas, o sistema não linear é resolvido a cada passo de integração.

Na resolução do sistema em cada passo de integração, a solução do sistema pode ser obtida utilizando solvers diretos e lineares como Newton ou Krylov ou solvers iterativos com GMRES, BiCGSTAB e TFQMR.

Cabe ressaltar que as duas variações correspondem à implementação em Fortran (VODE) e a implementação em C (CVODE).

O (C)VODE apresenta também uma implementação em paralelo que permite a execução utilizando a biblioteca MPI.

g. Differential Algebraic Equation System

Em matemática, sistemas algébricos diferenciais – DAE (*Differential Algebraic Equations*) – são sistemas de equação que possuem a forma geral:

$$F(\dot{x}(t), x(t), t) = 0$$

Em que $x: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$, $x(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$.

A solução de um DAE consiste em duas partes, a primeira: busca por valores iniciais consistentes, e a segunda: cálculo da trajetória. Neste contexto é conveniente definir o índice de derivação como a derivada de maior ordem necessária no processo de aquisição de valores iniciais consistentes.

Um problema bastante comum e não trivial na resolução de DAE é a redução de índice, uma vez que a maioria dos solvers de ODE e de equações algébricas necessita de sistemas da forma:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, y, t)$$

$$g(x, y, t) = 0$$

Sendo desta forma uma tarefa complexa a conversão de um DAE arbitrário em algoritmos que suportem apenas ODEs.

Existem várias técnicas para este fim, como por exemplo o algoritmo de Pantelides PANTELIDES (1988) ou o método da variável fantasma (*DummyVariable*)

Dasslc/Dassl

O algoritmo de solução de equações algébricas diferenciais denominado DASSL foi criado pela Professora L. Petzold da Universidade de Santa Bárbara em 1983 e pode ser encontrado em [HTTP://www.netlib.org/ode/ddassl.f](http://www.netlib.org/ode/ddassl.f), sendo que maiores referencias podem ser encontradas em BRENAN, CAMPBELL e PETZOLD (1996).

A DASSLC é uma implementação baseada em C puro que implementa e estende a biblioteca DASSL. A DASSLC na verdade é um spin-off da biblioteca DAWRS SECCHI, MORARI e BISCAIA (1991) e maiores informações podem ser obtidas em SECCHI (2007).

Apesar da biblioteca DASSLC apresentar melhores resultados que a DASSL originalmente implementada, ambas implementam a mesma metodologia numérica (*Backward Differentiation Formulae – BDF*), e foge ao escopo deste trabalho fazer uma análise de profile de ambas as implementações, sendo que daqui por diante a família de solvers DASSL estarão sempre se relacionando à utilização da DASSLC – versão que não necessita de implementação de *binds* nem *wrappers* em torno do código Fortran.

IDA

É um pacote de solução para DAE da forma:

$$F(x, x, t) = 0$$

Escrito em C puro que deriva diretamente do pacote DASPK . O método de integração do IDA é o BDF de ordem e coeficiente variável, sendo que a ordem do método varia entre 1-5.

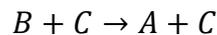
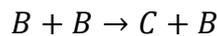
Os sistemas de solução dos sistemas não lineares seguem os mesmos métodos apresentados no algoritmo VODE para ODEs.

h. Benchmark e Resultados

Problema de Robertson

Após a implementação dos pacotes de integração foi aferido os resultados obtidos por meio de um problema de *benchmark* muito conhecido na Engenharia Química: o Problema de Robertson.

Este problema consiste em um sistema rígido de 3 equações diferenciais ordinárias que representa um problema de cinética autocatalítica.



Pode-se ver, na Figura 36, que os algoritmos DASSL e RADAU apresentam vantagem sobre os outros, sendo que o primeiro necessita de mais passos de integração, enquanto o segundo necessita de maior número de avaliações da função integrada.

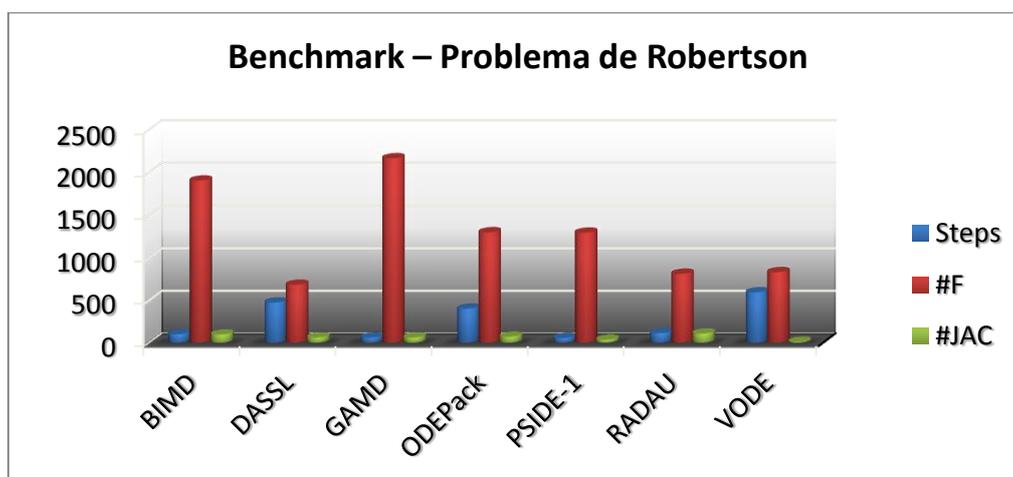


Figura 36: Benchmark dos Métodos de Integração com o Problema de Robertson

(Steps = Passos de integração, #F = número de avaliações da função, #JAC = número de avaliações do Jacobiano)

Benchmark Problema de Intrusão

Foi feito um estudo simples em um problema de intrusão em um meio saturado com vapor (C1-C3) no ponto de orvalho, representado por uma rede de percolação 10 x 10 x 10 (representando um meio físico de 5 x 5 x 5 cm) e poros e capilares segundo a distribuição probabilística normal. O sistema termodinâmico aplicado foi aquele exposto no Capítulo 2.

O tempo de *breakthrough* com intrusão de líquido no meio vazio foi calculado como 5 segundos, com vazão de injeção de $1,0 \times 10^{-6}$ m³/s e pressão de produção igual a pressão de orvalho e pressão de injeção igual ao dobro da pressão de orvalho.

O vetor injeção-produção foi o Oeste-Leste, sendo todas as outras faces da rede de percolação lacradas.

O problema foi simulado do tempo 0,0000 s até o tempo 5,0000 segundos, sendo os resultados de interesse apresentados abaixo.

Todas as propriedades Termodinâmicas de interesse foram extraídas do Web Book da NIST (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>).

Neste caso, por meio da Figura 37, pode-se ver que o algoritmo DASSL levou vantagem sob os demais, de forma que, apesar de necessitar de mais passos de integração, precisou de menos avaliações da função integrada e de cálculo do Jacobiano.

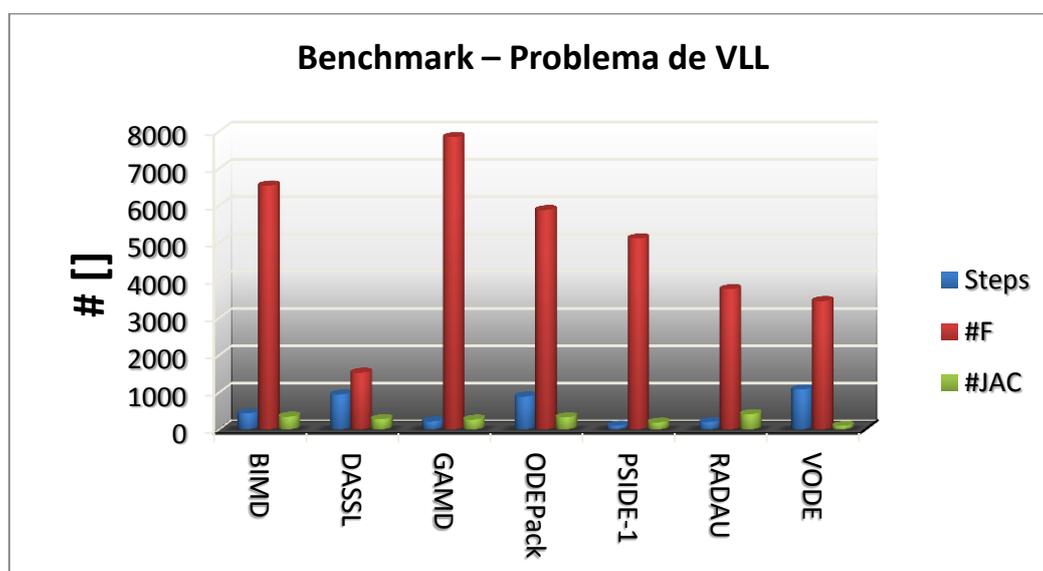


Figura 37: Benchmark de Sistema VLL