



Universidade do Estado do Rio de Janeiro  
Centro de Tecnologia e Ciências  
Instituto Politécnico

Lucas Barros Lima


Simulação numérica de escoamentos não-isotérmicos em  
reservatórios do tipo *shale gas*

Nova Friburgo

2023

Lucas Barros Lima

**Simulação numérica de escoamentos não-isotérmicos em reservatórios do tipo  
*shale gas***



Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Dr. Helio Pedro Amaral Souto  
Orientador: Prof. Dr. Grazione de Souza

Nova Friburgo  
2023

CATALOGAÇÃO NA FONTE  
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/E

B277 Lima, Lucas Barros.  
Simulação numérica de escoamentos não-isotérmicos em reservatórios do tipo *shale gas* / Lucas Barros Lima - 2023.  
95 f. : il.

Orientadores: Helio Pedro Amaral Souto e Grazione de Souza.  
Dissertação (mestrado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Gás – Escoamento – Métodos de simulação - Teses. 2. Gás natural – Teses. 3. Métodos dos volumes finitos – Teses. I. Souto, Helio Pedro Amaral. II. Souza, Grazione de. III. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV. Título.

CDU 662.67:519.6

Bibliotecária Fernanda Souza Cruz CRB7/7361

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta dissertação, desde que citada a fonte.

---

Assinatura

---

Data

Lucas Barros Lima

**Simulação numérica de escoamentos não-isotérmicos em reservatórios do tipo  
*shale gas***

Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 14 de dezembro de 2023.

Banca Examinadora:

---

Prof. Dr. Grazieme de Souza  
Instituto Politécnico - UERJ (Orientador)

---

Profa. Dra. Camila Martins Saporetti  
Instituto Politécnico - UERJ

---

Dr. Juan Diego dos Santos Heringer  
Université de Pau et des Pays de l'Adour - UPPA

---

Prof. Dr. Diego Campos Knupp  
Instituto Politécnico - UERJ

Nova Friburgo

2023

## AGRADECIMENTOS

Agradeço profundamente aos meus orientadores, Helio Pedro e Grazione de Souza, não apenas pela orientação precisa e dedicada, mas também pelo apoio constante e pelos insights valiosos que foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho.

Meu sincero agradecimento aos amigos, em especial ao professor Grazione e a Milane, pela amizade, suporte emocional e por todos os momentos compartilhados durante esta etapa de minha jornada acadêmica, que tornaram todos os desafios muito mais leves e superáveis.

Aos meus pais, dedico um agradecimento todo especial: por me darem a vida, por serem meu porto seguro, meu incentivo constante e por me apoiarem incondicionalmente em cada passo que dou. Esta conquista também é de vocês.

Expresso minha gratidão à CAPES/CNPq pelo suporte financeiro, essencial para a realização desta pesquisa. Este apoio foi decisivo para o meu desenvolvimento acadêmico e abriu portas para oportunidades valiosas de crescimento profissional.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para este trabalho e para a minha formação, meu mais sincero obrigado. Cada palavra de incentivo, cada gesto de apoio, e cada momento compartilhado têm um valor inestimável para mim. Guardarei todos na memória com grande carinho.

Por fim, gostaria de expressar minha gratidão à comunidade acadêmica e aos colegas de pesquisa, cujas discussões e colaborações enriqueceram significativamente este trabalho. Seu engajamento e contribuições foram fundamentais para o seu desenvolvimento e aprimoramento.

## RESUMO

LIMA, L. B. *Simulação numérica de escoamentos não-isotérmicos em reservatórios do tipo shale gas*. 2023. 95 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2023.

Neste estudo, aplicou-se o Método dos Volumes Finitos para modelar o escoamento não-isotérmico em reservatórios de *shale gas*, levando em consideração os efeitos de adsorção e escorregamento. A investigação abordou o comportamento do escoamento durante a utilização de aquecedores estáticos para recuperação melhorada. O modelo desenvolvido incorporou variações na permeabilidade absoluta com a temperatura e no volume de gás adsorvido com mudanças de temperatura e pressão. A abordagem numérica adotada foi formulada de maneira totalmente implícita, com linearização pelo Método de Picard e resolução do sistema de equações discretas linearizadas pelo Método dos Gradientes Conjugados. As análises dos resultados permitiram compreender os efeitos de escorregamento e adsorção no escoamento de *shale gas* em diferentes cenários de produção de gás natural, incluindo discussões sobre o comportamento da vazão de produção sob pressão prescrita no poço produtor. Esta pesquisa contribui para uma melhor compreensão dos processos envolvidos no escoamento não-isotérmico em reservatórios de *shale gas*, fornecendo insights importantes para a otimização da produção e o desenvolvimento de estratégias de recuperação.

Palavras-chave: simulação numérica de reservatórios; *shale gas*; escorregamento; escoamento não-isotérmico; adsorção.

## ABSTRACT

LIMA, L. B. *Numerical simulation of non-isothermal flows in shale gas reservoirs*. 2023. 95 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2023.

In this study, the Finite Volume Method was applied to model non-isothermal flow in shale gas reservoirs, taking into account the effects of adsorption and slip. The investigation addressed flow behavior when using static heaters for enhanced recovery. The model developed incorporated variations in absolute permeability with temperature and in the volume of adsorbed gas with changes in temperature and pressure. The numerical approach adopted was formulated in a completely implicit manner, with linearization using the Picard Method and resolution of the system of linearized discrete equations using the Conjugated Gradients Method. Analysis of the results allowed us to understand the effects of slip and adsorption on the flow of shale gas in different natural gas production scenarios, including discussions on the behavior of the production flow under pressure prescribed in the producing well. This research contributes to a better understanding of the processes involved in non-isothermal flow in shale gas reservoirs, providing important insights for optimizing production and developing recovery strategies.

Keywords: numerical reservoir simulation; shale gas; slippage; non-isothermal flow; adsorption.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Representação da geometria do reservatório. . . . .	24
Figura 2 - Elemento bidimensional para a discretização . . . . .	27
Figura 3 - Representação do domínio discretizado por $3 \times 3$ volumes finitos . . . . .	31
Figura 4 - Fluxograma para um passo de tempo do simulador numérico. . . . .	38
Figura 5 - Representação geral de matriz penta-diagonal para o caso 2D . . . . .	40
Figura 6 - Interface gráfica . . . . .	42
Figura 7 - Ilustração do posicionamentos do poço produtor e aquecedores . . . . .	44
Figura 8 - Exemplo de distribuição espacial do número de Knudsen . . . . .	44
Figura 9 - Comparação da solução numérica com a analítica para perfis de pressão ao longo de $x$ com avanço do tempo . . . . .	46
Figura 10 - Comparação da solução numérica com a analítica pelos perfis de tempe- ratura ao longo de $x_D$ com avanço do tempo . . . . .	48
Figura 11 - Comparação da solução numérica com a analítica pelos perfis de tempe- ratura ao longo de $x_D$ para $t_D = 3,28 \times 10^{-4}$ e com diferentes malhas . . . . .	48
Figura 12 - Resultados para diferentes malhas . . . . .	50
Figura 13 - Resultados para diferentes valores do $\Delta t$ inicial . . . . .	51
Figura 14 - Resultados para diferentes valores do $F_{\Delta t}$ . . . . .	52
Figura 15 - Resultados para diferentes valores da permeabilidade . . . . .	54
Figura 16 - Resultados para diferentes valores da densidade do gás . . . . .	55
Figura 17 - Resultados para diferentes valores da porosidade . . . . .	56
Figura 18 - Resultados para diferentes valores de $\kappa_r$ . . . . .	58
Figura 19 - Resultados para diferentes valores de $\kappa_g$ . . . . .	59
Figura 20 - Resultados para diferentes valores de $t_{max}$ . . . . .	60
Figura 21 - Resultados para diferentes valores de $q_{sc}$ . . . . .	61
Figura 22 - Resultados para diferentes valores de $h_{pos}$ . . . . .	62
Figura 23 - Resultados para diferentes valores de $q_H$ . . . . .	63
Figura 24 - Distribuição espacial da pressão em $t = 365$ dias . . . . .	64
Figura 25 - Distribuição espacial da pressão em $t = 1.461$ dias . . . . .	64
Figura 26 - Distribuição espacial da pressão em $t = 2.922$ dias . . . . .	65
Figura 27 - Distribuição espacial da pressão em $t = 14.610$ dias . . . . .	65
Figura 28 - Distribuição espacial da temperatura em $t = 365$ dias . . . . .	66
Figura 29 - Distribuição espacial da temperatura em $t = 1.461$ dias . . . . .	66
Figura 30 - Distribuição espacial da temperatura em $t = 2.922$ dias . . . . .	67
Figura 31 - Distribuição espacial da temperatura em $t = 14.610$ dias . . . . .	67
Figura 32 - Produção acumulada e taxa de produção . . . . .	69
Figura 33 - Valores do número de Knudsen . . . . .	71



Figura 34 - Valores da permeabilidade absoluta . . . . .	72
Figura 35 - Produção acumulada e taxa de produção . . . . .	73
Figura 36 - Saldo de energia . . . . .	74
Figura 37 - Carta para o fator de compressibilidade $Z$ . . . . .	87
Figura 38 - Curvas de temperatura e pressão pseudocríticas segundo as correlações de <a href="#">Sutton (1985)</a> . . . . .	88
Figura 39 - Curvas de viscosidade para diferentes composições de gás natural pela correlação de <a href="#">Lee, Gonzalez e Eakin (1966)</a> . . . . .	90

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Parâmetros gerais para as simulações . . . . .	42
Tabela 2 - Parâmetros da rocha . . . . .	43
Tabela 3 - Parâmetros do fluido. . . . .	43
Tabela 4 - Parâmetros usados na solução da equação da difusão . . . . .	46
Tabela 5 - Parâmetros usados na solução da equação de advecção-difusão . . . . .	47
Tabela 6 - Malhas computacionais . . . . .	49
Tabela 7 - Parâmetros para testes de sensibilidade . . . . .	53
Tabela 8 - Aumento de produção variando número de aquecedores . . . . .	68
Tabela 9 - Coeficientes para cálculo de $Z$ . . . . .	89

## SUMÁRIO

	<b>INTRODUÇÃO</b>	10
1	<b>MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO</b>	15
1.1	<b>Hipóteses</b>	15
1.2	<b>Modelo de permeabilidade aparente</b>	16
1.3	<b>Conservação da massa</b>	19
1.4	<b>Balço de energia</b>	22
1.5	<b>Condições iniciais e de contorno</b>	24
2	<b>METODOLOGIA NUMÉRICO-COMPUTACIONAL</b>	26
2.1	<b>Discretização</b>	26
2.1.1	<u>Equações da conservação de massa e da quantidade de movimento</u>	27
2.1.2	<u>Equação da conservação de energia</u>	32
2.1.3	<u>Acoplamento poço-reservatório</u>	35
2.2	<b>Decomposição de operadores e metodologia de linearização</b>	36
3	<b>RESULTADOS</b>	41
3.1	<b>Informações e parâmetros gerais</b>	41
3.2	<b>Verificação do simulador</b>	45
3.2.1	<u>Comparação com as soluções analíticas</u>	45
3.2.2	<u>Convergência numérica</u>	48
3.2.3	<u>Análise de sensibilidade</u>	52
3.3	<b>Desempenho do método de recuperação aprimorada</b>	68
	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS</b>	75
	<b>REFERÊNCIAS</b>	80
	<b>APÊNDICE A – Determinação das propriedades físicas</b>	85

## INTRODUÇÃO

A transição para alternativas mais limpas na matriz energética, como o gás natural, é crucial para enfrentar o aquecimento global e as mudanças climáticas. Este combustível tem o potencial de atender à crescente demanda energética, especialmente com a população urbana mundial projetada para aumentar em quase 2,5 bilhões até 2050, conforme o relatório *Prospectos de Urbanização Mundial* da ONU (United Nations, 2022). Esse crescimento, concentrado principalmente na Ásia e na África, e a conseqüente urbanização acelerada demandarão mais energia, ao mesmo tempo em que se faz necessário um esforço global para reduzir as emissões e combater os efeitos do aquecimento global.

### Gás natural

O gás natural desempenha um papel crucial na transição para fontes mais limpas de energia (INTERNATIONAL ENERGY AGENCY, 2019). Com emissões consideravelmente inferiores ao carvão e ao óleo, o gás natural é uma opção versátil para geração de energia, aquecimento, transporte e insumo industrial (EPA, 2021). Além de sua eficiência na redução das emissões de carbono durante a combustão, produzindo cerca de metade das emissões do dióxido de carbono em comparação com o carvão e aproximadamente 30% menos do que o óleo (EPA, 2021), o gás natural também oferece uma pegada de carbono reduzida ao longo de todo o ciclo de vida, desde a extração até o uso final.

No entanto, é importante destacar que, embora produza menos carbono, não é isento de impactos ambientais, especialmente em extrações de fontes não-convencionais, como o gás de folhelho (United Nations, 2021). A indústria deve focar em tecnologias, como o CCS, para reduzir emissões e melhorar a eficiência (Administration, 2020).

Em meio a essa transição, é imperativo continuar explorando alternativas renováveis e investir em tecnologias que promovam a sustentabilidade (United Nations, 2021; Administration, 2020).

### *Shale gas*

O folhelho é uma rocha argilosa de origem sedimentar (Branco, 2014) e o termo *shale gas* se refere ao folhelho que atua como reservatório de gás natural. Nos últimos anos, a produção de gás natural a partir de formações de folhelho tem se tornado uma fonte crescente e significativa para a extração de gás, com destaque para os Estados Unidos como líderes nessa produção.

De acordo com dados da [Administration \(2021\)](#), o gás de folhelho representou mais da metade do gás natural produzido nos Estados Unidos em 2020. O aumento da importância do *shale gas* na produção geral de gás natural destaca a necessidade de pesquisa & desenvolvimento, nas áreas de simulação numérica e de engenharia de reservatórios, para a otimização da extração nesses tipos de jazidas ([Holditch, 2007](#); [King et al., 2016](#); [Ross et al., 2015](#); [Ruppel, 2012](#)).

Um dos principais desafios na extração do *shale gas* são as características únicas dessas formações rochosas ([Euzen, 2011](#)). Ao contrário dos reservatórios convencionais de gás natural, que são tipicamente compostos de rocha porosa e permeável, elas são rochas densas que apresentam baixas permeabilidades e porosidades. Isso significa que ele encontra-se preso em pequenos bolsões ou fraturas dentro da rocha, dificultando a sua extração.

## Simulação Numérica de Reservatórios

A engenharia e a simulação numérica de reservatórios desempenham um papel significativo na compreensão e na otimização da extração de gás de folhelho ([Strickland; Purvis; Blasingame, 2011](#)). Ambas usam modelos físico-matemáticos e computacionais para simular o comportamento dos fluidos dentro das formações rochosas, permitindo que os engenheiros compreendam melhor o escoamento do gás natural, nas rochas do tipo folhelho, e escolham estratégias otimizadas para extraí-lo.

Estudos recentes, sobre a adsorção de gás natural, por exemplo, têm mostrado a importância da escolha de um modelo acurado para descrever o seu escoamento em rochas do tipo folhelho, auxiliando a melhorar o entendimento da quantidade de gás natural que possa estar armazenada e que seja passível de ser produzida ([Li et al., 2016](#); [Whitson et al., 2016](#); [Lu et al., 2017](#)). Por outro lado, outras investigações têm se concentrado na ocorrência dos efeitos não-Darcy, tais como o escorregamento do gás na superfície porosa ([Florence et al., 2007](#); [Civan, 2010](#); [Civan; Rai; Sondergeld, 2011](#)). Esse tipo de comportamento, que surge em determinadas rochas de baixa permeabilidade absoluta, favorece o transporte de massa e pode ter um impacto não desprezível na eficiência da extração de gás. Então, ele deve ser levado em consideração quando do desenvolvimento do projeto das operações de extração ([Klinkenberg, 1941](#)).

Outro tema relevante nesse campo é o fraturamento hidráulico ou *fracking*, que é uma técnica utilizada para viabilizar a extração do gás de folhelho. Essa técnica envolve a injeção de uma mistura de água, areia e produtos químicos, sob alta pressão, nas formações rochosas de modo a criar caminhos preferenciais para escoar o gás, favorecendo o seu transporte até o poço produtor fraturado ([Aminzadeh, 2018](#)). Essa técnica tem sido objeto de muito debate devido aos seus potenciais impactos ambientais como, por

exemplo, a contaminação das águas subterrâneas. Contudo, estudos recentes mostram que se o processo for bem projetado e executado, os riscos de impactos ambientais são baixos (Taskinsoy, 2013). Em geral, poços horizontais hidráulicamente fraturados têm sido aplicados na recuperação de gás em reservatórios do tipo *shale* (Aminzadeh, 2018).

Em outras palavras, a extração do *shale gas* tornou-se, nos últimos anos, uma fonte considerável de gás natural. As características únicas das formações rochosas de folhelho apresentam desafios significativos para a sua extração. Assim sendo, a engenharia e a simulação de reservatórios, incluindo os modelos de adsorção, os efeitos de do escorregamento e o escoamento não-isotérmico, tornam-se essenciais para se entender e otimizar a extração e a produção do *shale gas*. Conseqüentemente, é fundamental a busca pelos melhores métodos de recuperação, não apenas do ponto de vista técnico, mas também econômico e ambiental. Isso só pode ser alcançado a partir de uma compreensão aprofundada do escoamento do gás nas formações de folhelho.

## Métodos Térmicos de Recuperação

Nos últimos anos, o emprego de métodos térmicos na produção do *shale gas* tem se popularizado. A transferência de calor para a formação rochosa pode proporcionar uma melhoria significativa na recuperação do gás, liberando a parcela que se encontra adsorvida na matriz porosa. Neste estudo, o foco será direcionado à utilização de aquecedores estáticos e ao estudo da sua influência sobre o escoamento não-isotérmico do *shale gas* (Li et al., 2018; Liu et al., 2020; Liu et al., 2023).

Aquecedores estáticos fazem parte da tecnologia de aquecimento *in-situ*, que tem sido usada na recuperação avançada de petróleo (*Enhanced Oil Recovery*, EOR) (Harvey; Arnold; El-Feky, 1979; Yuan et al., 2003). No contexto da produção do *shale gas*, eles podem ser usados para aquecer a formação de folhelho circundante, acarretando no aumento da produção de gás em função da liberação do gás adsorvido, que passa a estar presente livremente nos poros (Liu et al., 2023). De fato, o processo de aquecimento pode ser realizado de várias formas, e.g., empregando equipamentos baseados no uso de resistência elétrica, de ondas eletromagnéticas ou da combustão *in-situ* (Harvey; Arnold; El-Feky, 1979; Liu et al., 2020; Liu et al., 2023).

A correlação entre a temperatura e a permeabilidade absoluta,  $k(T)$ , também é um fator que pode ser considerado ao se usar métodos térmicos para a recuperação do *shale gas*. À medida que a temperatura aumenta, a permeabilidade absoluta da matriz de folhelho também pode aumentar, devido a mudanças cristalográficas, favorecendo o escoamento de gás através da formação (Jamaluddin et al., 2000). No entanto, a relação entre elas não é direta e depende de vários fatores, tais como a mineralogia e o conteúdo orgânico no folhelho. Assim, o seu entendimento é essencial para se projetar e otimizar os

métodos de recuperação térmica para o *shale gas*. Estudos como os de [Zhang et al. \(2020\)](#) demonstraram que essa correlação pode ser influenciada pela composição do folhelho e pelo tipo de método de estimulação térmica utilizado. Portanto, é fundamental que se continue a aprimorar a sua compreensão, de modo a se melhorar a eficiência dos métodos térmicos.

Além dos aquecedores estáticos, a combustão também pode ser usada para impulsionar a recuperação do *shale gas*. [Chapiro e Bruining \(2015\)](#) a estudaram e descobriram que a combustão *in-situ* pode aumentar significativamente o fator recuperação, aumentando a permeabilidade da formação de folhelho. Eles também descobriram que esse processo pode resultar na liberação de uma quantidade significativa de energia, que pode ser usada para compensar o custo do processo de aquecimento.

É importante observar que o escoamento não-isotérmico em reservatórios do tipo *shale gas* é um fenômeno complexo, que envolve uma combinação de processos físicos e químicos, incluindo a adsorção e a difusão. [Liu et al. \(2020\)](#) investigaram a resposta de um reservatório de folhelho quando da injeção de água quente, e descobriram que a distribuição de temperatura, dentro do reservatório, tem um impacto significativo na produção de gás. Eles também verificaram que o estudo da simulação do escoamento no reservatório pode fornecer informações valiosas sobre a otimização do processo de recuperação térmica.

## Objetivo

Este estudo visa realizar a simulação numérica do escoamento não-isotérmico em reservatórios de *shale gas*, considerando os efeitos do escorregamento ([Florence et al., 2007](#)) e da adsorção do gás ([Xue et al., 2019](#)) durante a recuperação térmica com o uso de aquecedores estáticos. Em outras palavras, o objetivo principal é acrescentar ao simulador pré-existente a injeção de energia térmica e os modelos de [Florence et al. \(2007\)](#), [Chapiro e Bruining \(2015\)](#) e [Xue et al. \(2019\)](#), de forma a melhor compreender o comportamento complexo do escoamento nesses reservatórios não-convencionais e quantificar os benefícios da recuperação térmica, contribuindo assim para o avanço do conhecimento nessa área crucial da indústria de energia.

O simulador utilizado como base para este estudo foi desenvolvido pelo grupo de pesquisa do Laboratório de Modelagem Multiescala e Transporte de Partículas (LAB-TRAN) ([Lopes, 2016](#); [Pessanha, 2018](#); [Lima, 2021](#)). Ele foi adaptado e aprimorado para analisar a produção de gás sob diferentes cenários, permitindo uma abordagem mais abrangente na investigação dos efeitos da recuperação térmica em reservatórios de *shale gas*.

## Organização do trabalho

Dado o contexto discutido neste capítulo, que aborda a recuperação de hidrocarbonetos, a implementação de técnicas de recuperação térmica, a modelagem numérica de reservatórios e a definição dos objetivos desta dissertação, o Capítulo 1 inicia com uma revisão da literatura, a apresentação das equações que governam o escoamento não-isotérmico, além de algumas das principais correlações utilizadas na determinação das propriedades físicas pertinentes. Em seguida, são listadas, inicialmente, as hipóteses assumidas para a modelagem físico-matemática e encerra-se com a proposição das condições iniciais e de contorno. Os parâmetros e as demais correlações empregadas para o cálculo das propriedades físicas são detalhados no Apêndice A.

A seguir, no Capítulo 2 é introduzido o procedimento de discretização das equações diferenciais parciais governantes usando o Método dos Volumes Finitos, convertendo-as em conjuntos de equações algébricas não-lineares. Depois, trata-se da técnica de linearização e, em seguida, da solução de sistemas de equações linearizadas utilizando o método dos Gradientes Conjugados. Nele, também apresenta-se um fluxograma detalhado para se obter a solução numérica.

Os resultados obtidos são apresentados e discutidos no Capítulo 3. Também é feita uma verificação do simulador, confrontando os seus resultados com aqueles de problemas simplificados que possuem soluções analíticas, mediante uma análise da convergência numérica. Além disso, são realizados testes de sensibilidade da solução numérica quando da variação de alguns dos principais parâmetros físicos. Posteriormente, realizou-se, também, uma investigação no que diz respeito ao aumento da produção quando do uso do método de aquecimento.

Finalmente, no último capítulo, são expostas as principais conclusões e as propostas para trabalhos futuros ligados ao tema de pesquisa considerado.



# 1 MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO

Este capítulo é dedicado ao modelo físico-matemático considerado. As hipóteses adotadas na construção do modelo são listadas na Seção 1.1 e a Seção 1.2 trata da permeabilidade aparente para o escoamento de gás natural, incluindo a lei de Darcy modificada. Em seguida, nas Seções 1.3 e 1.4, apresenta-se os balanços de massa e de energia, os quais são utilizados na obtenção das equações diferenciais parciais governantes, cujas variáveis dependentes são a pressão da fase gás e a temperatura média do meio poroso. Finalmente, a Seção 1.5 contém as condições inicial e de contorno utilizadas. As correlações necessárias para o cálculo das propriedades físicas da rocha e do fluido, com exceção das definidas neste capítulo, são descritas no Apêndice A.

## 1.1 Hipóteses

Neste trabalho, avançou-se no sentido de, partindo de elementos presentes em modelos da literatura, construir um simulador numérico para a resolução das equações governantes do escoamento não-isotérmico de gás em um reservatório do tipo *shale gas*. Viabiliza-se, assim, a investigação dos efeitos físicos combinados da adsorção e do escorregamento do gás, quando da injeção de energia térmica via aquecedores estáticos, com o objetivo de se melhorar a produção. Assim, considera-se que a permeabilidade absoluta é uma função da temperatura,  $\bar{k}(T)$ , baseando-se no trabalho de [Chapiro e Bruining \(2015\)](#), e assumiu-se que o fenômeno da adsorção dependente da pressão e da temperatura, conforme abordado em [Xue et al. \(2019\)](#). Portanto, a construção da ferramenta computacional deve permitir uma discussão sobre a combinação dos efeitos físicos no escoamento, analisando a melhoria da produção devido à aplicação de aquecedores estáticos.

A seguir, lista-se as hipóteses consideradas no modelo físico-matemático aqui adotado:

1. O escoamento é não-isotérmico, bidimensional no plano  $xy$ , monofásico e em regime transiente;
2. Há equilíbrio térmico local entre a rocha e o fluido;
3. Presença de termo fonte de energia térmica (geração volumétrica de calor);
4. O meio poroso é ligeiramente compressível e com compressibilidade constante;
5. O meio poroso é homogêneo e anisotrópico em relação à permeabilidade absoluta na condição inicial;

6. O meio poroso não possui água conata (irreduzível) em seus poros, sendo completamente saturado apenas pelos hidrocarbonetos na forma gasosa;
7. Presença de termo sorvedouro de massa, poço produtor;
8. O fluido, gás natural seco, é newtoniano, compressível e de composição constante;
9. Há adsorção de gás na rocha;
10. Não ocorrem reações químicas;
11. Desconsidera-se efeitos inerciais e turbulentos;
12. Trocas térmicas por radiação e a dissipação hidrodinâmica desprezíveis;
13. Não ocorrem efeitos eletrocinéticos; e
14. Há escorregamento do gás.

## 1.2 Modelo de permeabilidade aparente

A permeabilidade absoluta  $\bar{k}$  é definida como sendo uma medida da capacidade de um fluido escoar através dos poros da formação rochosa (Rosa; Carvalho; Xavier, 2006) no escoamento monofásico. Na sua forma mais geral, ela é representada por um tensor, tensor de permeabilidade, considerado neste trabalho como sendo diagonal. Assim, em se tratando do escoamento bidimensional, no plano  $xy$ , tem-se:

$$\bar{k} = \begin{bmatrix} k_x & 0 \\ 0 & k_y \end{bmatrix},$$

onde  $k_x$  e  $k_y$  indicam as permeabilidades absolutas nas direções dos eixos  $x$  e  $y$ , respectivamente.

De forma a considerar a influência da temperatura na permeabilidade absoluta, optou-se por utilizar a abordagem de Chapiro e Bruining (2015), que por sua vez se basearam no trabalho de Jamaluddin et al. (2000). Assim, para  $k$  sendo uma função escalar,

$$k(T, t) = \underbrace{\text{máx}}_{t \geq 0} \min \left\{ \exp \left[ \frac{T - T_{res}}{350} \ln(5) \right] k_{ini}, 5k_{ini} \right\},$$

onde  $k_{ini}$  é a permeabilidade absoluta inicial e  $T_{res}$  a temperatura inicial do reservatório. Esta correlação considera, por simplicidade, que  $k$  cresce exponencialmente até cinco vezes seu valor original para um aumento da temperatura  $T - T_{res} = 350\text{K}$  (Chapiro;

Bruining, 2015). É importante salientar que nesta dissertação, diferentemente do trabalho de Chapiro e Bruining (2015), considera-se que o gás natural não atinja a temperatura de ignição. Isso se deve ao foco do presente trabalho, que não está na modelagem da combustão *in situ*, uma vez que os aquecedores serão posicionados nas proximidades do poço produtor e suas posições serão estáticas.

A permeabilidade absoluta encontra-se presente na lei de Darcy clássica (Darcy, 1856), que expressa a conservação da quantidade de movimento no escoamento em meios porosos, comumente vista na forma (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001)

$$\mathbf{v} = -\frac{\bar{k}}{\mu_g} (\nabla p - \rho_g g \nabla D), \quad (1)$$

onde  $\mathbf{v}$  é a velocidade superficial do escoamento (uma vazão dividida por uma área),  $\mu_g$  é a viscosidade do gás,  $p$  é a pressão do fluido,  $\rho_g$  é a massa específica do gás,  $g$  é a magnitude da aceleração da gravidade e  $D$  é a profundidade.

Sabidamente, existe um conjunto de hipóteses para as quais a lei de Darcy clássica é válida e elas podem ser encontradas em Aziz e Settari (1979). Dentre as quais, por exemplo, o escoamento ser laminar. Caso contrário, emprega-se formas modificadas da lei de Darcy original, levando ao uso da chamada permeabilidade aparente no lugar da permeabilidade absoluta (Li et al., 2016).

Um dos efeitos, classificados como do tipo não-Darcy, que pode ser incorporado ao modelo de escoamento via permeabilidade aparente é o do escorregamento, também chamado de efeito Klinkenberg (Aziz; Settari, 1979). Ele surge quando o livre caminho médio das moléculas do gás possui uma escala comparável à dimensão dos poros (Florence et al., 2007). Nesse caso, de acordo com o trabalho pioneiro de (Klinkenberg, 1941), a permeabilidade aparente, a uma dada pressão  $p$ , é dada por

$$\bar{k}_a = \left(1 + \frac{b}{p}\right) \bar{k},$$

sendo  $b$  o parâmetro de Klinkenberg.

Alternativamente, há um modelo mais detalhado que utiliza o número de Knudsen ( $K_n$ ) que é a razão entre o livre caminho médio das moléculas ( $\lambda$ ) e um comprimento característico do meio poroso ( $R_h$ ) (Civan, 2010; Florence et al., 2007),

$$K_n = \frac{\lambda}{R_h},$$

onde

$$\lambda = \frac{\mu_g}{p} \sqrt{\frac{\pi Z R T_g}{2M}} = \frac{\mu_g}{p} \sqrt{\frac{\pi Z R_{ar} T_g}{2\gamma}}$$

e

$$R_h = 2\sqrt{2\tau} \sqrt{\frac{k_m}{\phi}},$$

sendo  $k_m$  obtido por uma média geométrica das permeabilidades absolutas nas direções principais, quando do caso anisotrópico, e  $\tau$  representa a tortuosidade do meio poroso, razão entre a distância total percorrida por uma molécula de fluido através da formação rochosa e o seu deslocamento efetivo (em linha reta). Além disso,  $Z$  é o fator de compressibilidade,  $R$  a constante universal dos gases,  $R_a$  a constante do gás considerado,  $\phi$  é a porosidade do meio,  $T_g$  a temperatura do gás,  $M$  a sua massa molecular e  $\gamma$  é a sua densidade.

Em função dos valores do número de Knudsen tem-se os seguintes regimes de escoamento (Civan; Rai; Sondergeld, 2011):

1. Contínuo, quando  $K_n \leq 10^{-3}$ ;
2. Com escorregamento, para  $10^{-3} < K_n < 0,1$ ;
3. De transição, se  $0,1 \leq K_n \leq 10$ ;
4. Molecular livre, se  $K_n \geq 10$ .

Segundo Civan, Rai e Sondergeld (2011), pode-se calcular a permeabilidade aparente usando a equação

$$\bar{k}_a = (1 + \alpha K_n) \left( 1 + \frac{4K_n}{1 - b'K_n} \right) \bar{k},$$

onde  $\alpha$  e  $b'$  são coeficientes do modelo de escoamento. Considerando as condições do regime de escorregamento, o coeficiente de rarefação  $\alpha$  é nulo e, em geral,  $b = -1$ . Assim, é comum encontrar na literatura (Florence et al., 2007)

$$\bar{k}_a = \left( 1 + \frac{4K_n}{1 + K_n} \right) \bar{k}.$$

Ainda nesse contexto, a velocidade  $\mathbf{v}$  do escoamento é determinada empregando-se uma lei de Darcy modificada (Carvalho et al., 2020). Assim, da equação (1), tem-se,

$$\mathbf{v} = -\frac{\bar{k}_a}{\mu_g} (\nabla p - \rho_g g \nabla D). \quad (2)$$

### 1.3 Conservação da massa

A conservação da massa no escoamento em meio poroso pode ser expressa, para o caso de interesse neste trabalho, como (Li et al., 2016)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\phi}{B_g} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_s}{B_g} V_{ads} \right) + \nabla \cdot \left( \frac{1}{B_g} \mathbf{v} \right) - \frac{q_{sc}}{V_b} = 0, \quad (3)$$

onde  $V_{ads}$  é o volume específico de gás adsorvido na superfície da rocha,  $V_b$  é o volume total (sólido mais poros) e  $B_g$  é o fator-volume-formação do gás (Ezekwe, 2010), uma propriedade tipicamente utilizada na engenharia de reservatórios, sendo a razão entre o volume de fluido medido nas condições de reservatório (pressão,  $p_{sc}$  e temperatura,  $T_{sc}$ , padrões) e de produção na superfície. Então,  $q_{sc}$  representa um termo fonte volumétrico nas condições padrão.

A partir da substituição da Eq. (2) na Eq. (3) obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\phi}{B_g} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_s}{B_g} V_{ads} \right) - \nabla \cdot \left[ \frac{\bar{k}_a}{B_g \mu_g} (\nabla p - \rho_g g \nabla D) \right] - \frac{q_{sc}}{V_b} = 0. \quad (4)$$

Segundo Xue et al. (2019),  $V_{ads}$  pode ser escrito como uma função da pressão e da temperatura,

$$V_{ads} = V_L \left[ \frac{K(T_g)p}{1 + K(T_g)p} \right],$$

onde  $V_L$  é o volume de Langmuir e  $K(T_g)$  é o coeficiente de adsorção dado por (Xue et al., 2019)

$$K(T_g) = K_0 T_g^{-1/2} e^{E_{ads}/RT_g},$$

onde  $K_0$  é uma constante e  $E_{ads}$  representa a energia de adsorção característica.

Em seguida, desconsidera-se o efeito de gravidade na Eq. (4), tendo-se em vista que o escoamento é bidimensional, no plano  $xy$ ,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\phi}{B} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_s}{B_g} V_{ads} \right) - \nabla \cdot \left( \frac{\bar{k}_a}{B_g \mu_g} \nabla p \right) - \frac{q_{sc}}{V_b} = 0. \quad (5)$$

Aqui, conforme avançado nas hipóteses consideradas, tem-se que  $\phi = (p, T_r)$  e  $B_g = f(p, T_g)$ . Então, utilizando a regra do produto,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\phi}{B_g} \right) = \frac{1}{B_g} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{B_g} \right) \quad (6)$$

enquanto que, empregando a regra da cadeia,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial \phi}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}$$

e

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{B_g} \right) = \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{1}{B_g} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{B_g} \right) \frac{\partial T}{\partial t}.$$

Considerando-se a relação revisada para a porosidade (Apêndice A), é possível escrever

$$\frac{\partial \phi}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p} \left\{ \phi^0 [1 + c_\phi(p - p^0) - c_{\phi T}(T - T^0)] \right\} \frac{\partial p}{\partial t} = \phi^0 c_\phi \frac{\partial p}{\partial t}$$

e

$$\frac{\partial \phi}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \phi^0 [1 + c_\phi(p - p^0) - c_{\phi T}(T - T^0)] \right\} \frac{\partial T}{\partial t} = -\phi^0 c_{\phi T} \frac{\partial T}{\partial t},$$

onde  $\phi^0$  é a porosidade na condição de referência na qual a pressão é  $p^0$  e a temperatura é  $T^0$ ,  $c_\phi$  é o coeficiente de compressibilidade da rocha e  $c_{\phi T}$  é o coeficiente de expansão térmica da rocha.

Para o termo contabilizando o gás adsorvido tem-se, de maneira similar, usando a regra do produto,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_s V_{ads}}{B_g} \right) = \frac{V_{ads}}{B_g} \frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \rho_s V_{ads} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{B_g} \right) + \frac{\rho_s}{B_g} \frac{\partial V_{ads}}{\partial t},$$

de forma que, da regra da cadeia,

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} = \frac{\partial \rho_s}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \rho_s}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}$$

onde

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p} \left\{ \rho_s^0 [1 + c_\rho(p - p^0) - c_{\rho T}(T - T^0)] \right\} \frac{\partial p}{\partial t} = \rho_s^0 c_\rho \frac{\partial p}{\partial t}$$

e

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \rho_s^0 [1 + c_\rho(p - p^0) - c_{\rho T}(T - T^0)] \right\} \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho_s^0 c_{\rho T} \frac{\partial T}{\partial t},$$

sendo  $\rho_s^0$  a massa específica da formação *shale*, na pressão e na temperatura de referência,  $c_\rho$  é o coeficiente de compressibilidade e  $c_{\rho T}$  é o coeficiente de expansão térmica, ambos da formação *shale*.

Prosseguindo, também faz-se uso da regra da cadeia no caso da derivada primeira

de  $V_{ads}$  em relação ao tempo,

$$\frac{\partial V_{ads}}{\partial t} = \frac{\partial V_{ads}}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial V_{ads}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t},$$

onde, segundo [Xue et al. \(2019\)](#),

$$\frac{\partial V_{ads}}{\partial p} = \frac{V_L K(T)}{(1 + K(T)p)^2},$$

$$\frac{\partial V_{ads}}{\partial T} = \frac{V_L K(T)p}{(1 + K(T)p)^2} \left( -\frac{1}{2T} + \frac{E_{ads}}{RT^2} \right).$$

Após substituição de todas essas expansões na Eq. (6), o termo de acúmulo de massa de gás livre pode ser escrito na forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\phi}{B_g} \right) = \left[ \frac{\phi^0 c_\phi}{B_g} + \phi \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{1}{B_g} \right) \right] \frac{\partial p}{\partial t} - \left[ \frac{\phi^0 c_{\phi T}}{B_g} - \phi \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{B_g} \right) \right] \frac{\partial T}{\partial t},$$

enquanto que, para o acúmulo de gás adsorvido,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_s V_{ads}}{B_g} \right) &= \frac{V_{ads}}{B_g} \left( \frac{\partial \rho_s}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \rho_s}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \right) + \rho_s V_{ads} \left[ \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{1}{B_g} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{B_g} \right) \frac{\partial T}{\partial t} \right] \\ &\quad + \frac{\rho_s}{B_g} \left( \frac{\partial V_{ads}}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial V_{ads}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \right) \\ &= \left[ \frac{V_{ads} \rho_s^0 c_\rho}{B_g} + \rho_s V_{ads} \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{1}{B_g} \right) + \frac{\rho_s}{B_g} \frac{V_L K(T)}{(1 + K(T)p)^2} \right] \frac{\partial p}{\partial t} \\ &\quad - \left[ \frac{V_{ads} \rho_s^0 c_{\rho T}}{B_g} - \rho_s V_{ads} \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{B_g} \right) - \frac{\rho_s}{B_g} \frac{V_L K(T)p}{(1 + K(T)p)^2} \left( -\frac{1}{2T} + \frac{E_{ads}}{RT^2} \right) \right] \frac{\partial T}{\partial t}, \end{aligned}$$

Agora, a fim de se chegar a uma forma compacta, os seguintes coeficientes são introduzidos:

$$\Gamma'_p = \left[ \frac{\phi^0 c_\phi}{B_g} + \phi \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{1}{B_g} \right) \right],$$

$$\Gamma'_{p,ads} = \left[ \frac{V_{ads} \rho_s^0 c_\rho}{B_g} + \rho_s V_{ads} \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{1}{B_g} \right) + \frac{\rho_s}{B_g} \frac{V_L K(T)}{(1 + K(T)p)^2} \right],$$

$$\Gamma'_T = \left[ \frac{\phi^0 c_{\phi T}}{B_g} - \phi \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{B_g} \right) \right]$$

e

$$\Gamma'_{T,ads} = \left[ \frac{V_{ads}\rho_s^0 c_{\rho T}}{B_g} - \rho_s V_{ads} \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{B_g} \right) - \frac{\rho_s}{B_g} \frac{V_L K(T)p}{(1 + K(T)p)^2} \left( -\frac{1}{2T} + \frac{E_{ads}}{RT^2} \right) \right].$$

Então, a partir da Eq. (5) chega-se à equação governante

$$(\Gamma'_p + \Gamma'_{p,ads}) \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left( \frac{\bar{k}_a}{B_g \mu_g} \nabla p \right) - S_m = 0, \quad (7)$$

onde

$$S_m = (\Gamma'_T + \Gamma'_{T,ads}) \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{q_{sc}}{V_b}. \quad (8)$$

A Eq. (7) é uma equação diferencial parcial (EDP) cuja variável dependente é a pressão do gás, sabendo-se que a temperatura também deve ser determinada via o balanço de energia. No caso das derivadas de  $B^{-1}$ , o cálculo deve ser realizado através de aproximações numéricas (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001).

#### 1.4 Balanço de energia

Para o balanço de energia, quando do escoamento de um fluido em um meio poroso, uma forma válida na escala de laboratório é dada por (Onur; Çinar, 2016)

$$\nabla \cdot (\phi \bar{k}_g \nabla T_g) + A\mathcal{H}(T_r - T_g) - \nabla \cdot (p\mathbf{v}) = \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_g h_g) + \nabla \cdot (\rho_g h_g \mathbf{v}) - \frac{q_{m,H}}{V_b} - \frac{q_{H,g}}{V_b}.$$

Ademais, levando em conta as relações  $h_g = c_{pg}T_g$ , sendo  $c_{pg}$  o calor específico do gás e  $T_g$  a sua temperatura, e  $q_{m,H} = (\rho_{sc,g}h_g + B_g p)q_{sc}$ , onde  $\rho_{sc,g}$  é a massa específica do gás em condições padrão, ela pode ser reescrita na forma

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_g c_{pg} T_g)}_{\text{Acúmulo}} - \underbrace{\nabla \cdot (\phi \bar{k}_g \nabla T_g)}_{\text{Difusão}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho_g h_g \mathbf{v})}_{\text{Advecção}} + \underbrace{\nabla \cdot (p\mathbf{v})}_{\text{Trabalho}} - \underbrace{\frac{q_{H,g}}{V_b}}_{\text{Fonte térmica}} - \underbrace{\frac{(\rho_{sc,g}h_g + B_g p)q_{sc}}{V_b}}_{\text{Poço produtor}} - \underbrace{A\mathcal{H}(T_r - T_g)}_{\text{Troca térmica: fluido-rocha}} = 0. \quad (9)$$



Analogamente, da conservação da energia aplicada à formação rochosa resulta

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} [\rho_r (1 - \phi) c_{pr} T_r]}_{\text{Acúmulo}} - \underbrace{\nabla \cdot [(1 - \phi) \bar{\kappa}_r \nabla T_r]}_{\text{Difusão}} - \underbrace{\frac{q_{H,r}}{V_b}}_{\text{Fonte térmica}} + \underbrace{A\mathcal{H}(T_r - T_g)}_{\text{Troca térmica: rocha-fluido}} = 0. \quad (10)$$

No entanto, como a velocidade da rocha é considerada nula, os termos advectivo e do trabalho não estão presentes na Eq. (10).

Embora possa se chegar a um modelo a uma equação sem a suposição de que ambas as fases, gás e rocha, encontram-se a uma mesma temperatura de equilíbrio, define-se a temperatura média do meio poroso  $T$  ao definir-se entalpia média como sendo a representativa do leito rochoso recheado (o fluido mais a rocha) (Moyne et al., 2000):

$$\rho c_p T = \phi (\rho_g c_{pg}) T_g + (1 - \phi) (\rho_r c_{pr}) T_r. \quad (11)$$

Neste estudo, opta-se por assumir a condição de equilíbrio térmico local, caracterizada pela igualdade entre as temperaturas médias do fluido e da rocha. Esta escolha metodológica contrasta com a abordagem adotada por Heringer (2018), que se baseia na premissa de não-equilíbrio térmico local. Deve-se ressaltar que trata-se de um caso particular do modelo mais geral introduzido por Moyne et al. (2000) e que, sob certas hipóteses, pode ser utilizado na prática (Quintard; Whitaker, 1995).

Portando, levando em conta a temperatura média definida na Eq. (13) e fazendo  $T_g = T_r = T$ , é possível se obter um modelo a uma equação a partir da adição das Eqs. (9) e (10) (Quintard; Whitaker, 1995; Moyne et al., 2000). Portanto, aqui, emprega-se a equação de energia disponibilizada na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) - \nabla \cdot (\bar{\kappa} \nabla T) - S_T = 0 \quad (12)$$

onde  $\bar{\kappa}$  é o tensor efetivo de dispersão térmica, levando em consideração a contribuição da condutividade térmica, excluindo-se as da tortuosidade e da dispersão hidrodinâmica (Moyne et al., 2000),

$$\bar{\kappa} = \phi \bar{\kappa}_g + (1 - \phi) \bar{\kappa}_r,$$

com o termo fonte sendo dado por

$$S_T = -\nabla \cdot (\rho_g h_g \mathbf{v}) + \frac{q_H}{V_b} + \frac{\rho_{sc,g} q_{sc} h_g}{V_b},$$

onde

$$\rho c_p = \phi (\rho_g c_{pg}) + (1 - \phi) (\rho_r c_{pr}) \quad (13)$$

e

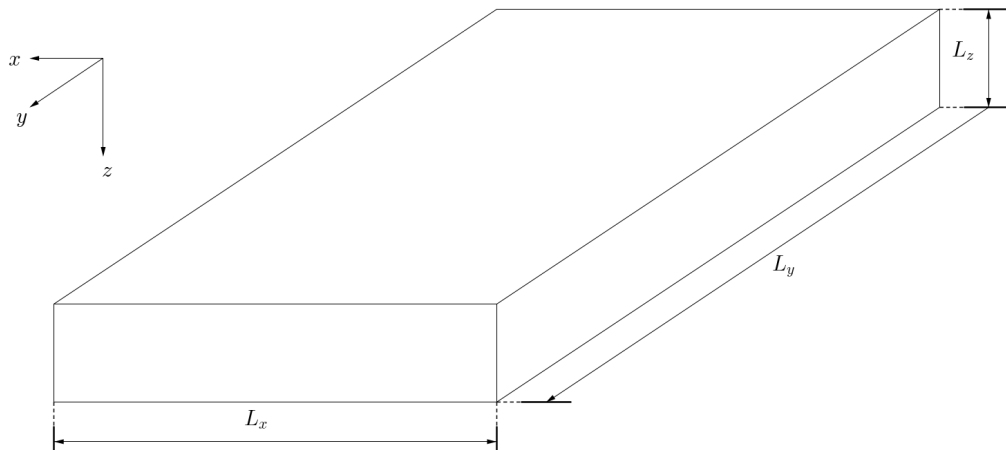
$$q_H = q_{H,g} + q_{H,r}.$$

Ainda neste contexto, conforme pôde ser visto, optou-se por desconsiderar a influência do trabalho na transferência de calor, removendo-se o termo  $-\nabla \cdot (p\mathbf{v})$ .

### 1.5 Condições iniciais e de contorno

Considera-se que o reservatório possua o formato de um paralelepípedo, conforme esquematizado na Figura 1. Portanto, as condições de contorno são impostas levando em conta a geometria adotada.

Figura 1 - Representação da geometria do reservatório.



Fonte: O autor, 2023.

Um fenômeno descrito por meio de equações diferenciais parciais parabólicas não está completo a menos que condições inicial e de contorno apropriadas sejam fornecidas (Hadamard, 1902). Então, para que o problema seja matematicamente bem-posto, prescreve-se a pressão e a temperatura iniciais do reservatório, em todo o seu domínio, para um dado instante de tempo arbitrário, ou seja,

$$p(x, y, T, t = 0) = p_0(x, y, T); \quad T(x, y, p, t = 0) = T_0(x, y, p).$$

No caso das condições de contorno, considera-se que o fluxo seja nulo nas fronteiras

do reservatório, ou seja, em  $x = y = 0$  e em  $x = L_x$  e  $y = L_y$ ,

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{x=0,L_x} = \left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)_{y=0,L_y} = 0; \quad \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=0,L_x} = \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{y=0,L_y} = 0$$

Além disso, a vazão prescrita do poço produtor,  $q_{sc}$ , é imposta via um termo de fonte mássica:

$$\frac{q_m}{\rho_{sc,g}} = q_{sc} = -J_w (p - p_{wf}), \quad (14)$$

onde  $p_{wf}$  é a pressão no fundo do poço na condição de produção (em inglês é chamado de *bottomhole flowing pressure* ([PetroWiki](#), )). A Eq. (14) permite o cálculo da pressão no poço, uma vez que a sua vazão seja prescrita (e vice-versa), sendo que a estratégia de cálculo do  $J_w$  (índice de produtividade) será apresentada na Seção 2.1.3.

De forma a se consolidar as equações governantes utilizadas, apresentam-se novamente as Eqs. (7) e (12), as quais governam o escoamento do gás e a transferência de calor no interior do reservatório, respectivamente. Assim, escreve-se a EDP em termos da pressão na forma

$$\left(\Gamma'_p + \Gamma'_{p,ads}\right) \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\bar{\bar{\Lambda}}' \nabla p\right) - S_m = 0, \quad (15)$$

onde

$$S_m = \left(\Gamma'_T + \Gamma'_{T,ads}\right) \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{q_{sc}}{V_b}$$

e

$$\bar{\bar{\Lambda}}' = \frac{\bar{\bar{k}}_a}{B_g \mu_g}.$$

Por outro lado, em se tratando do transporte de energia,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) - \nabla \cdot (\bar{\bar{\kappa}} \nabla T) - S_T = 0, \quad (16)$$

onde

$$S_T = -\nabla \cdot (\rho_g h_g \mathbf{v}) + \frac{q_H}{V_b} + \frac{(\rho_{sc,g} h_g) q_{sc}}{V_b}.$$

## 2 METODOLOGIA NUMÉRICO-COMPUTACIONAL

O sistema de equações diferenciais parciais introduzido no Capítulo 1 não possui uma solução analítica, a menos que hipóteses simplificadoras sejam adotadas. Portanto, necessita-se empregar um método numérico voltado para a resolução de equações diferenciais parciais, de modo a se obter as soluções aproximadas dessas equações. Basicamente, quando do uso de uma malha computacional, o processo de resolução consiste em um particionamento do domínio de resolução e na discretização das equações, quando elas são convertidas em equações algébricas.

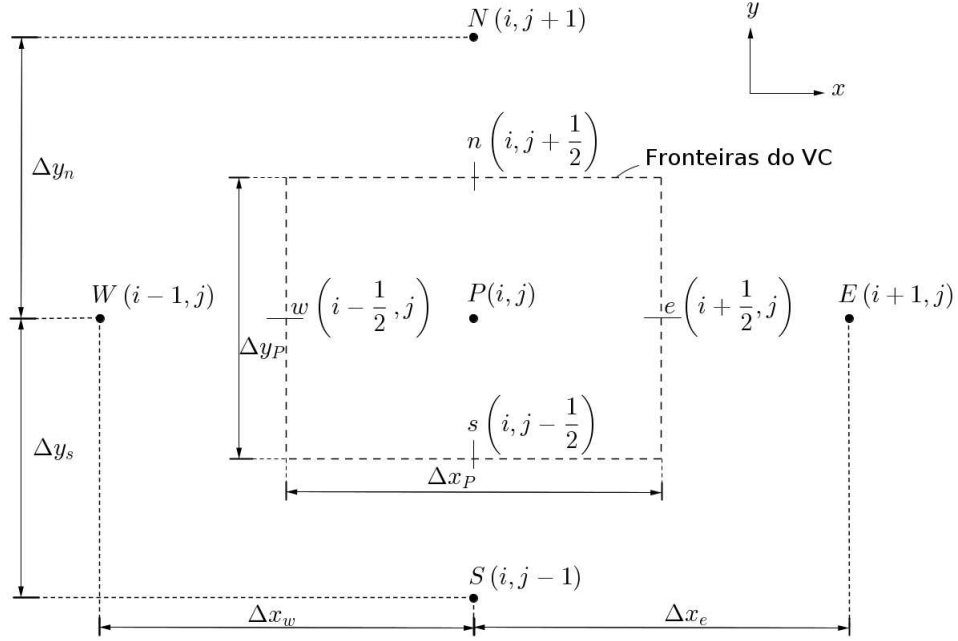
Nas Seções 2.1.1 e 2.1.2, respectivamente, aborda-se o processo de discretização dessas equações, cujas variáveis dependentes são a pressão e a temperatura, usando o Método dos Volumes Finitos. O acoplamento poço-reservatório é visto na Seção 2.1.3. Na estratégia adotada para se resolver os sistemas de equações algébricas, utiliza-se uma decomposição de operadores e uma técnica de linearização, introduzidas e discutidas na Seção 2.2.

### 2.1 Discretização

O Método dos Volumes Finitos (MVF) tem como ponto de partida a formulação integral das leis de conservação, o que lhe confere uma série de vantagens (LeVeque, 2002). Dentre estas vantagens, destacam-se a capacidade de preservar quantidades conservadas, como massa, momento e energia, ao longo do processo de discretização do domínio, o que contribui para a obtenção de soluções numericamente estáveis e conservativas. Outra vantagem significativa é a sua adaptabilidade a diferentes condições de contorno e interfaces, permitindo uma modelagem precisa de interações físicas complexas. Ademais, o MVF demonstra eficiência computacional em problemas com dominância de advecção, tornando-o uma opção atraente para simulações de dinâmica de fluidos.

O domínio é, então, particionado por *volumes de controle finitos*, como o ilustrado na Figura 2, e as equações governantes são integradas sobre cada um destes volumes e no tempo. Como consequência, obtém-se um sistema de equações algébricas cuja solução aproximada fornecerá os campos de pressão e temperatura média desejados.

Figura 2 - Elemento bidimensional para a discretização



Fonte: O autor, 2023.

### 2.1.1 Equações da conservação de massa e da quantidade de movimento

Inicia-se com a discretização da Eq. (15), integrando-a no tempo de  $t$  a  $t + \Delta t$  e no espaço, sobre o volume finito mostrado na Figura 2,

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[ (\Gamma'_p + \Gamma'_{p,ads}) \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot (\bar{\Lambda}' \nabla p) - S_m \right]_P dx dy dt = 0, \quad (17)$$

onde  $\Delta t$  é o passo de tempo.

Na sequência, tratar-se-á cada termo separadamente. Começa-se pelo termo de acúmulo:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e (\Gamma'_p + \Gamma'_{p,ads}) \frac{\partial p}{\partial t} dx dy dt &= \int_s^n \int_w^e (\Gamma'_p + \Gamma'_{p,ads})^{new} (p^{new} - p^{old}) dx dy \\ &\cong [(\Gamma'_p + \Gamma'_{p,ads})^{new} (p^{new} - p^{old})]_P \Delta x_P \Delta y_P \end{aligned}$$

de forma que os termos que contém um sobrescrito *new* são avaliados no tempo futuro  $t + \Delta t$  e os com *old* são conhecidos no tempo  $t$ .  $\Delta x_P$  e  $\Delta y_P$  são, respectivamente, os espaçamentos da malha espacial nas direções  $x$  e  $y$ .

Optou-se por se utilizar formulações totalmente implícitas no tempo. Então, todos os termos associados às derivadas espaciais terão seus valores avaliados em  $t + \Delta t$ . Os valores de  $(\Gamma'_p)^{new}$  e  $(\Gamma'_{p,ads})^{new}$  são determinados segundo a metodologia considerada

por [Ertekin, Abou-Kassem e King \(2001\)](#), que resulta em aproximações conservativas. Por exemplo, no caso do termo  $(\Gamma'_p)_P^{new}$ , utiliza-se

$$(\Gamma'_p)_P^{new} = \left[ \frac{\phi^0 c_\phi}{B_g^{new}} + \frac{\phi^{old}}{B_g^{old}} \frac{(B_g^{old}/B_g^{new}) - 1}{p^{new} - p^{old}} \right]_P.$$

No que diz respeito ao termo do gradiente de pressão, a sua integração resulta em:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[ \nabla \cdot (\bar{\Lambda}' \nabla p) \right] dx dy dt &= \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{k_{ax}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right] dx dy dt \\ &+ \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[ \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{k_{ay}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial y} \right) \right] dx dy dt \\ &\cong \left[ \left( \frac{k_{ax}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial x} \right)_e^{new} \Delta y_P - \left( \frac{k_{ax}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial x} \right)_w^{new} \Delta y_P \right] \Delta t \\ &+ \left[ \left( \frac{k_{ay}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial y} \right)_n^{new} \Delta x_P - \left( \frac{k_{ay}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial y} \right)_s^{new} \Delta x_P \right] \Delta t. \end{aligned}$$

Prosseguindo, as derivadas primeiras são aproximadas utilizando-se um esquema do tipo diferença centrada a três pontos,

$$\left( \frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \cong \frac{p_E - p_P}{\Delta x_e} \quad \text{e} \quad \left( \frac{\partial p}{\partial x} \right)_w \cong \frac{p_P - p_W}{\Delta x_w}$$

para a diferenciação em relação a  $x$  e, analogamente,

$$\left( \frac{\partial p}{\partial y} \right)_n \cong \frac{p_N - p_P}{\Delta y_n} \quad \text{e} \quad \left( \frac{\partial p}{\partial y} \right)_s \cong \frac{p_P - p_S}{\Delta y_s}$$

para as derivadas em relação a  $y$ .

Em seguida, do tensor  $\bar{\Lambda}'$  tem-se que

$$\Lambda'_x = \frac{k_{ax} \Delta y_P}{B_g \mu_g} \quad \text{e} \quad \Lambda'_y = \frac{k_{ay} \Delta x_P}{B_g \mu_g}$$

e, então,

$$\left( \frac{k_{ax}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \Delta y_P - \left( \frac{k_{ax}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial x} \right)_w \Delta y_P \cong \Lambda'_x \Big|_e \frac{(p_E - p_P)}{\Delta x_e} - \Lambda'_x \Big|_w \frac{(p_P - p_W)}{\Delta x_w},$$

$$\left( \frac{k_{ay}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial y} \right)_n \Delta x_P - \left( \frac{k_{ay}}{B_g \mu_g} \frac{\partial p}{\partial y} \right)_s \Delta x_P \cong \Lambda'_y \Big|_n \frac{(p_N - p_P)}{\Delta y_n} - \Lambda'_y \Big|_s \frac{(p_P - p_S)}{\Delta y_s}$$

e, finalmente,

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[ \nabla \cdot (\bar{\Lambda}' \nabla p) \right] dx dy dt &\cong \left[ \Lambda'_x \Big|_e \frac{(p_E - p_P)^{new}}{\Delta x_e} - \Lambda'_x \Big|_w \frac{(p_P - p_W)^{new}}{\Delta x_w} \right] \Delta t \\ &+ \left[ \Lambda'_y \Big|_n \frac{(p_N - p_P)^{new}}{\Delta y_n} - \Lambda'_y \Big|_s \frac{(p_P - p_S)^{new}}{\Delta y_s} \right] \Delta t. \end{aligned}$$

Agora, para o termo fonte, a partir de um desenvolvimento semelhante,

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e S_m dx dy dt &= \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[ (\Gamma'_T + \Gamma'_{T,ads}) \frac{\partial T}{\partial t} \right] dx dy dt \\ &+ \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left( \frac{q_{sc}}{V_b} \right) dx dy dt, \end{aligned}$$

Portanto,

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e S_m dx dy dt \cong \left[ (\Gamma'_T + \Gamma'_{T,ads})^{new} (T^{new} - T^{old})_P + \left( \frac{q_{sc}}{V_b} \right)_P^{new} \Delta t \right] \Delta x_P \Delta y_P,$$

onde aproximações conservativas foram consideradas na integração do primeiro termo do lado direito do sinal de igualdade (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001).

Assim, multiplicando-se ambos os lados da Eq. (17) por  $L_z/\Delta t$  e escrevendo-a em termos das pressões avaliadas nos nós dos volumes de controle,

$$\Lambda_P p_P^{new} = \Lambda_e p_E^{new} + \Lambda_w p_W^{new} + \Lambda_n p_N^{new} + \Lambda_s p_S^{new} + (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old}, \quad (18)$$

sabendo-se que os seus diferentes coeficientes são dados por

$$\Lambda_P = (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} + \Lambda_e + \Lambda_w + \Lambda_n + \Lambda_s,$$

$$\Lambda_e = \left( \frac{k_{ax} \Delta y_P L_z}{B_g \mu_g \Delta x_e} \right)_e^{new},$$

$$\Lambda_w = \left( \frac{k_{ax} \Delta y_P L_z}{B_g \mu_g \Delta x_w} \right)_w^{new},$$

$$\Lambda_n = \left( \frac{k_{ay} \Delta x_P L_z}{B_g \mu_g \Delta y_n} \right)_n^{new},$$

$$\Lambda_s = \left( \frac{k_{ay} \Delta x_P L_z}{B_g \mu_g \Delta y_s} \right)_s^{new},$$

$$(S_m)_P^{new} = (q_{sc})_P^{new} + (\Gamma_T + \Gamma_{T,ads})^{new} (T_P^{new} - T_P^{old}),$$

onde  $\Gamma_p = \Gamma'_p V_b / \Delta t$ ,  $\Gamma_{p,ads} = \Gamma'_{p,ads} V_b / \Delta t$ ,  $\Gamma_T = \Gamma'_T V_b / \Delta t$  e  $\Gamma_{T,ads} = \Gamma'_{T,ads} V_b / \Delta t$ .

Os termos  $\Lambda_e$ ,  $\Lambda_w$ ,  $\Lambda_n$  e  $\Lambda_s$  são chamados de transmissibilidades e as propriedades que devem ser avaliadas nas faces dos volumes finitos são calculadas por médias harmônicas (Heringer, 2018).

Das condições de contorno, apresentadas na Seção 1.5, é preciso um tratamento específico para as correspondentes aos volumes finitos localizados nas fronteiras do domínio discreto. Assim, faz-se uso da nomenclatura presente na Figura 3, onde  $i$  e  $j$  enumeram os volumes de acordo com a posição espacial e  $n_x$  e  $n_y$  representam os números totais de volumes finitos nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente. Então:

1. em  $i = j = 1$ ,

$$\Lambda_P p_P^{new} - \Lambda_e p_E^{new} - \Lambda_n p_N^{new} = (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old};$$

2. em  $i = 2, 3, \dots, n_x - 2, n_x - 1$  e  $j = 1$ ,

$$-\Lambda_w p_W^{new} + \Lambda_P p_P^{new} - \Lambda_e p_E^{new} - \Lambda_n p_N^{new} = (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old};$$

3. em  $i = n_x$  e  $j = 1$ ,

$$-\Lambda_w p_W^{new} + \Lambda_P p_P^{new} - \Lambda_n p_N^{new} = (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old};$$

4. em  $i = 1$  e  $j = 2, 3, \dots, n_y - 2, n_y - 1$ ,

$$-\Lambda_s p_S^{new} + \Lambda_P p_P^{new} - \Lambda_e p_E^{new} - \Lambda_n p_N^{new} = (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old};$$

5. em  $i = 2, 3, \dots, n_x - 2, n_x - 1$  e  $j = 2, 3, \dots, n_y - 2, n_y - 1$ ,

$$-\Lambda_s p_S^{new} - \Lambda_w p_W^{new} + \Lambda_P p_P^{new} - \Lambda_e p_E^{new} - \Lambda_n p_N^{new} = (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old};$$



6. em  $i = n_x$  e  $j = 2, 3, \dots, n_y - 2, n_y - 1$ ,

$$-\Lambda_s p_S^{new} - \Lambda_w p_W^{new} + \Lambda_P p_P^{new} - \Lambda_n p_N^{new} = (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old};$$

7. em  $i = 0$  e  $j = n_y$ ,

$$-\Lambda_s p_S^{new} + \Lambda_P p_P^{new} - \Lambda_e p_E^{new} = (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old};$$

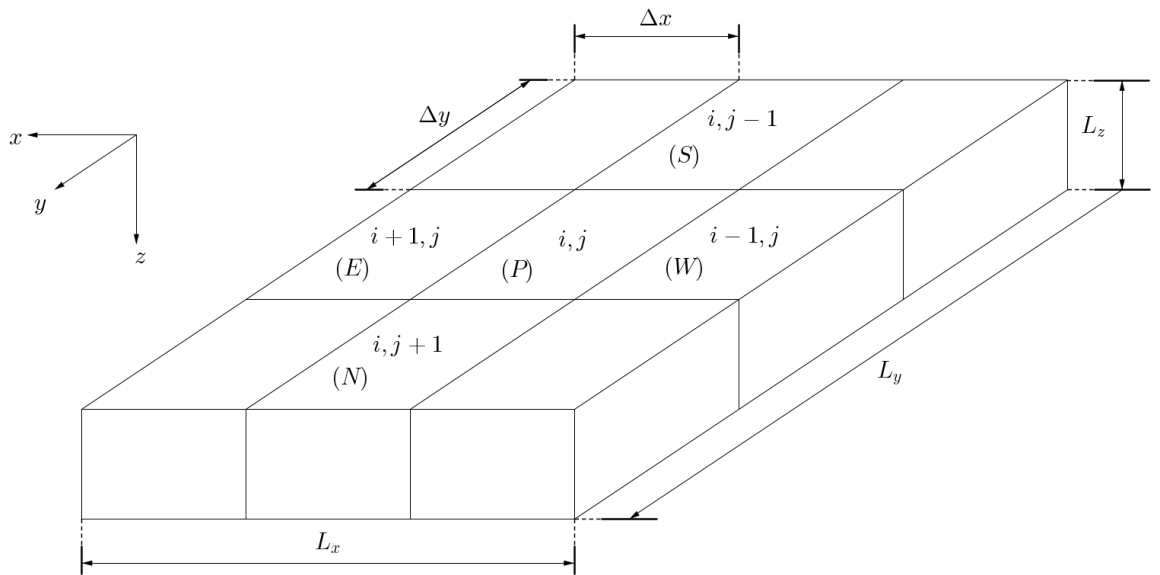
8. em  $i = 2, 3, \dots, n_x - 2, n_x - 1$  e  $j = n_y$ ,

$$-\Lambda_s p_S^{new} - \Lambda_w p_W^{new} + \Lambda_P p_P^{new} - \Lambda_e p_E^{new} = (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old};$$

9. em  $i = n_x$  e  $j = n_y$ ,

$$-\Lambda_s p_S^{new} - \Lambda_w p_W^{new} + \Lambda_P p_P^{new} = (S_m)_P^{new} + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new} p_P^{old}.$$

Figura 3 - Representação do domínio discretizado por  $3 \times 3$  volumes finitos



Fonte: O autor, 2023.

### 2.1.2 Equação da conservação de energia

Finda a etapa de discretização das equações que governam o escoamento, passa-se à integração da equação da Eq. (16) no tempo e sobre um volume finito,

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) - \nabla \cdot (\bar{\kappa} \nabla T) - S_T \right] dx dy dt = 0. \quad (19)$$

Dando prosseguimento, considera-se separadamente a integração de todos os termos e inicia-se com o de acúmulo,

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) dx dy dt \cong [(\rho c_p)^{new} T^{new} - (\rho c_p)^{old} T^{old}]_P \Delta x_P \Delta y_P.$$

Passa-se, agora, à discretização do termo difusivo,

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \nabla \cdot (\bar{\kappa} \nabla T) dx dy dt \cong & \left[ \kappa_x \Big|_e \left( \frac{T_E - T_P}{\Delta x_e} \right)^{new} - \kappa_x \Big|_w \left( \frac{T_P - T_W}{\Delta x_w} \right)^{new} \right] \Delta y_P \Delta t \\ & + \left[ \kappa_y \Big|_n \left( \frac{T_N - T_P}{\Delta y_n} \right)^{new} - \kappa_y \Big|_s \left( \frac{T_P - T_S}{\Delta y_s} \right)^{new} \right] \Delta x_P \Delta t. \end{aligned}$$

cujo desenvolvimento foi análogo ao empregado no termo contendo a divergência do gradiente de pressão.

No que diz respeito ao termo  $S_T$ , presente nesse equação,

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e S_T dx dy dt = & - \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e [\nabla \cdot (\rho_g h_g \mathbf{v})] dx dy dt \\ & + \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left( \frac{q_H}{V_b} \right) dx dy dt \\ & + \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left( \frac{\rho_{sc} h_g q_{sc}}{V_b} \right) dx dy dt. \end{aligned} \quad (20)$$

e inicia-se pelo termo de advecção, onde  $\rho_g = \rho_{sc}/B_g$ ,

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \nabla \cdot \left( \rho_g h_g \frac{\bar{k}_a}{\mu_g} \nabla p \right) dx dy dt \cong \left[ \rho_{sc} h_g \Lambda'_x \Big|_e \frac{(p_E - p_P)^{new}}{\Delta x_e} - \rho_{sc} h_g \Lambda'_x \Big|_w \frac{(p_P - p_W)^{new}}{\Delta x_w} \right] \Delta t$$

$$+ \left[ \rho_{sc} h_g \Lambda'_y \Big|_n \frac{(p_N - p_P)^{new}}{\Delta y_n} - \rho_{sc} h_g \Lambda'_y \Big|_s \frac{(p_P - p_S)^{new}}{\Delta y_s} \right] \Delta t.$$

e finaliza-se com os termos fonte/sorvedouro,

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left( \frac{q_H}{V_b} \right) dx dy dt \cong \left( \frac{q_H}{V_b} \right)_P^{new} \Delta x_P \Delta y_P \Delta t,$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left( \frac{\rho_{sc,g} h_g q_{sc}}{V_b} \right) dx dy dt \cong \left( \frac{\rho_{sc,g} h_g q_{sc}}{V_b} \right)_P^{new} \Delta x_P \Delta y_P \Delta t.$$

Então, substituindo-se os resultados das integrações na Eq. (20), obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e S_T dx dy dt &\cong \left[ (\rho_{sc} h_g) \Lambda'_x \Big|_e \frac{(p_E - p_P)^{new}}{\Delta x_e} - (\rho_{sc} h_g) \Lambda'_x \Big|_w \frac{(p_P - p_W)^{new}}{\Delta x_w} \right] \Delta t \\ &+ \left[ (\rho_{sc} h_g) \Lambda'_y \Big|_n \frac{(p_N - p_P)^{new}}{\Delta y_n} - (\rho_{sc} h_g) \Lambda'_y \Big|_s \frac{(p_P - p_S)^{new}}{\Delta y_s} \right] \Delta t \\ &+ \left( \frac{q_H}{V_b} + \frac{\rho_{sc,g} q_{sc} h_g}{V_b} \right)_P^{new} \Delta x_P \Delta y_P \Delta t. \end{aligned}$$

Portanto, a partir dos resultados obtidos com a discretização dos diferentes termos, da expressão para a vazão no poço e após a multiplicação da Eq. (19) por  $L_z/\Delta t$ ,

$$\Phi_P T_P^{new} = \Phi_e T_E^{new} + \Phi_w T_W^{new} + \Phi_n T_N^{new} + \Phi_s T_S^{new} + (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho_{c_p} V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old}, \quad (21)$$

sendo que os seus coeficientes são calculados segundo as seguintes equações:

$$\Phi_P = \frac{(\rho_{c_p} V_b)_P^{new}}{\Delta t} + \Phi_e + \Phi_w + \Phi_n + \Phi_s,$$

$$\Phi_e = \left( \frac{\kappa_x \Delta y_P L_z}{\Delta x_e} \right)_e^{new},$$

$$\Phi_w = \left( \frac{\kappa_x \Delta y_P L_z}{\Delta x_w} \right)_w^{new},$$

$$\Phi_n = \left( \frac{\kappa_y \Delta x_P L_z}{\Delta y_n} \right)_n^{new},$$

$$\Phi_s = \left( \frac{\kappa_y \Delta x_P L_z}{\Delta y_s} \right)_s^{new},$$

$$(S_T)_P^{new} = (q_H)_P^{new} + [(\rho_{sc} h_g + B_g p) q_{sc}]_P^{new} + \varphi,$$

$$\varphi = \Lambda_{T,e} p_E^{new} + \Lambda_{T,w} p_W^{new} + \Lambda_{T,n} p_N^{new} + \Lambda_{T,s} p_S^{new} - (\Lambda_{T,e} + \Lambda_{T,w} + \Lambda_{T,n} + \Lambda_{T,s}) p_P^{new},$$

onde  $\Lambda_{T,\eta} = [(\rho_{sc} h_g) \Lambda]_{\eta}$  para cada direção  $\eta = e, w, n, s$ .

Assim como no caso da equação para a pressão do fluido, também se deve considerar os casos dos volumes finitos que se encontram nas fronteiras do reservatório. Combinando as condições de contorno, a depender da posição,

1. em  $i = j = 1$ ,

$$\Phi_P T_P - \Phi_e T_E^{new} - \Phi_n T_N^{new} = (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old};$$

2. em  $i = 2, 3, \dots, n_x - 2, n_x - 1$  e  $j = 1$ ,

$$-\Phi_w T_W^{new} + \Phi_P T_P^{new} - \Phi_e T_E^{new} - \Phi_n T_N^{new} = (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old};$$

3. em  $i = n_x$  e  $j = 1$ ,

$$-\Phi_w T_W^{new} + \Phi_P T_P^{new} - \Phi_n T_N^{new} = (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old};$$

4. em  $i = 1$  e  $j = 2, 3, \dots, n_y - 2, n_y - 1$ ,

$$-\Phi_s T_S^{new} + \Phi_P T_P^{new} - \Phi_e T_E^{new} - \Phi_n T_N^{new} = (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old};$$

5. em  $i = 2, 3, \dots, n_x - 2, n_x - 1$  e  $j = 2, 3, \dots, n_y - 2, n_y - 1$ ,

$$-\Phi_s T_S^{new} - \Phi_w T_W^{new} + \Phi_P T_P^{new} - \Phi_e T_E^{new} - \Phi_n T_N^{new} = (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old};$$

6. em  $i = n_x$  e  $j = 2, 3, \dots, n_y - 2, n_y - 1$ ,

$$-\Phi_s T_S^{new} - \Phi_w T_W^{new} + \Phi_P T_P^{new} - \Phi_n T_N^{new} = (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old};$$

7. em  $i = 0$  e  $j = n_y$ ,

$$-\Phi_s T_S^{new} + \Phi_P T_P^{new} - \Phi_e T_E^{new} = (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old},$$

8. em  $i = 2, 3, \dots, n_x - 2, n_x - 1$  e  $j = n_y$ ,

$$-\Phi_w T_W^{new} - \Phi_s T_S^{new} + \Phi_P T_P^{new} - \Phi_e T_E^{new} = (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old},$$

9. em  $i = n_x$  e  $j = n_y$ ,

$$-\Phi_s T_S^{new} - \Phi_w T_W^{new} + \Phi_P T_P^{new} = (S_T)_P^{new} + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old}}{\Delta t} T_P^{old}.$$

### 2.1.3 Acoplamento poço-reservatório

No acoplamento poço-reservatório, a vazão no poço pode ser relacionada com a sua pressão via a equação (Peaceman, 1978)

$$q_{sc} = -J_w(p - p_{wf}),$$

onde  $J_w$  é índice de produtividade e  $p_{wf}$  é a pressão no poço.

Para o problema considerado neste trabalho (Peaceman, 1978),

$$J_w = \left[ \frac{2\pi \sqrt{k_{ax} k_{ay}} L_z}{B_g \mu_g \ln \left( \frac{r_{eq}}{r_w} \right)} \right]_P^{new}$$

onde  $r_w$  é o raio do poço e  $r_{eq}$  é o raio equivalente, determinado por (Peaceman, 1983):

$$r_{eq} = 0,28 \left[ \frac{\sqrt{\sqrt{\frac{k_{ay}}{k_{ax}}} (\Delta x)^2 + \sqrt{\frac{k_{ax}}{k_{ay}}} (\Delta y)^2}}{\sqrt[4]{\frac{k_{ax}}{k_{ay}}} + \sqrt[4]{\frac{k_{ay}}{k_{ax}}}} \right]_P,$$

tendo sido adaptada para o seu uso com as permeabilidades aparentes (Pessanha et al., 2020).

## 2.2 Decomposição de operadores e metodologia de linearização

A abordagem selecionada baseou-se na resolução sequencial dos sistemas linearizados de equações algébricas, associados a cada variável dependente. Esta estratégia, também empregada em trabalhos anteriores (Rousset, 2010; Vennemo, 2016), implica a resolução independente e sequencial dos dois sistemas lineares. Primeiro determina-se a pressão e, em seguida, a temperatura média.

A linearização das equações algébricas (18) e (21) envolve um processo iterativo para ajustar os coeficientes e os valores das variáveis dependentes. Nesse contexto, o sobrescrito  $v$  denota os valores determinados na iteração anterior, enquanto que  $v + 1$  refere-se aos valores a serem calculados na iteração atual.

Por exemplo, ao tratar da pressão  $p$  (avaliada em  $t + \Delta t$ ), os coeficientes da equação discretizada são inicialmente determinados com base nos valores de  $p^v$  e  $T^v$ . Subsequentemente, por meio da resolução do sistema de equações lineares, obtém-se uma solução para  $p \cong p^{v+1}$ . Esse processo é iterado até que o critério de convergência para a pressão seja satisfeito. O mesmo procedimento é, então, repetido para a temperatura, para o mesmo passo de tempo, caracterizando o método iterativo de Picard (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001).

No caso da temperatura, os coeficientes e as propriedades são inicialmente atualizados a partir dos valores de  $T^v$  e  $p^{v+1}$ , considerando que o termo fonte na equação do balanço de energia recebe informações da pressão recentemente determinada ( $p^{v+1}$  na iteração  $v$ ). Em seguida, uma estimativa para  $T \cong T^{v+1}$  é obtida e a convergência é verificada. Se ela não for atingida, o processo iterativo é continuado.

As condições iniciais são empregadas como as estimativas preliminares nesta abordagem. Após o início das iterações de Picard, os valores obtidos na última iteração tornam-se os iniciais para o próximo passo de tempo ( $p^{old} \cong p^{v+1}$  e  $T^{old} \cong T^{v+1}$ ).

A Figura 4 apresenta o fluxograma contendo as etapas da obtenção numérica dos valores da pressão e da temperatura média para um passo de tempo de cálculo, tendo-se em vista a decomposição de operadores. Dois critérios de convergência são adotados: um para a solução dos sistemas de equações ( $tol_1$ ) e outro para o método de Picard ( $tol_2$ ). A verificação da convergência ocorre comparando a maior variação (em valor absoluto), para uma dada incógnita na malha durante o processo iterativo, à tolerância especificada. A convergência é considerada alcançada se a variação for inferior ao valor da tolerância.

Assim, as Eqs. (18) e (21) podem ser reescritas na forma:

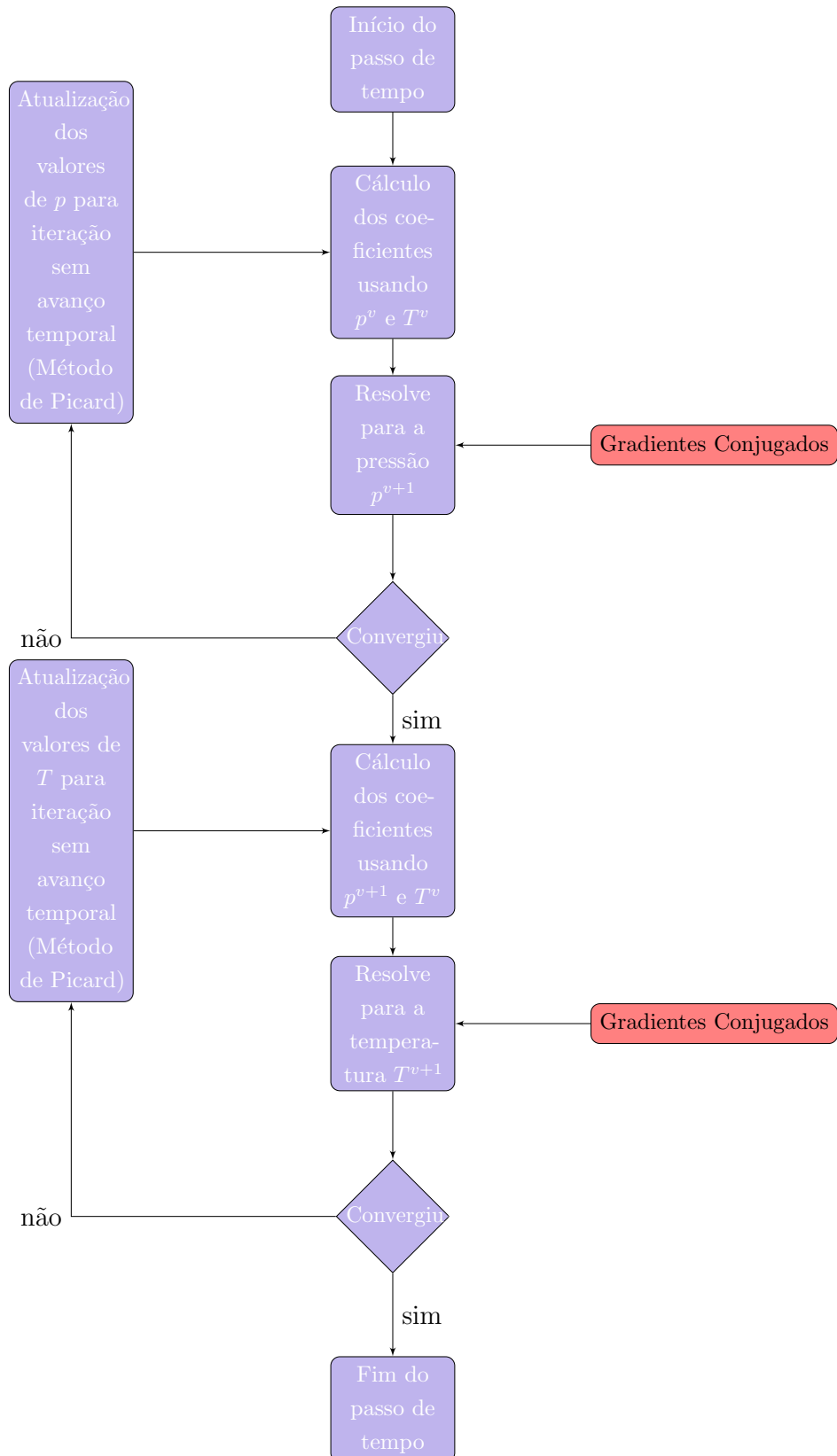
$$\Lambda_P^v p_P^{v+1} = \Lambda_e^v p_E^{v+1} + \Lambda_w^v p_W^{v+1} + \Lambda_n^v p_N^{v+1} + \Lambda_s^v p_S^{v+1} + S_{m,P}^v + (\Gamma_p + \Gamma_{p,ads})_P^{new,v} p_P^{old,v}$$

e

$$\Phi_P^v T_P^{v+1} = \Phi_e^v T_E^{v+1} + \Phi_w^v T_W^{v+1} + \Phi_n^v T_N^{v+1} + \Phi_s^v T_S^{v+1} + S_{T,P}^v + \frac{(\rho c_p V_b)_P^{old,v}}{\Delta t} T_P^{old,v},$$

onde os termos com os sobrescritos  $v$  e  $v + 1$  são avaliados no tempo  $n + 1$ .

Figura 4 - Fluxograma para um passo de tempo do simulador numérico.



Fonte: O autor, 2023.



Os sistemas de equações algébricas linearizadas, quando representados de forma matricial, possuem matrizes dos coeficientes que são esparsas e simétricas. Essa característica favorece a aplicação de um método iterativo para a resolução do sistema algébrico (Cunha, 2000).

Neste estudo, optou-se pelo Método dos Gradientes Conjugados tradicional (Saad, 2003), em função da sua facilidade de implementação e por ser adequado para a conversão para o processamento em paralelo.

De forma a ilustrar a forma matricial, optou-se por escrever o caso em que o domínio é dividido em 3x3 divisões, ou seja,  $n_x = n_y = 3$ . Assim, para um problema no formato  $\mathbf{Ax} = \mathbf{d}$ , escreve-se:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} P_1 & e_1 & 0 & n_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w_2 & P_2 & e_2 & 0 & n_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_3 & P_3 & 0 & 0 & n_3 & 0 & 0 & 0 \\ s_4 & 0 & 0 & P_4 & e_4 & 0 & n_4 & 0 & 0 \\ 0 & s_5 & 0 & w_5 & P_5 & e_5 & 0 & n_5 & 0 \\ 0 & 0 & s_6 & 0 & w_6 & P_6 & 0 & 0 & n_6 \\ 0 & 0 & 0 & s_7 & 0 & 0 & P_7 & e_7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_8 & 0 & w_8 & P_8 & e_8 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_9 & 0 & w_9 & P_9 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1^{new} \\ x_2^{new} \\ \vdots \\ x_{n_{xy}-1}^{new} \\ x_{n_{xy}}^{new} \end{bmatrix},$$

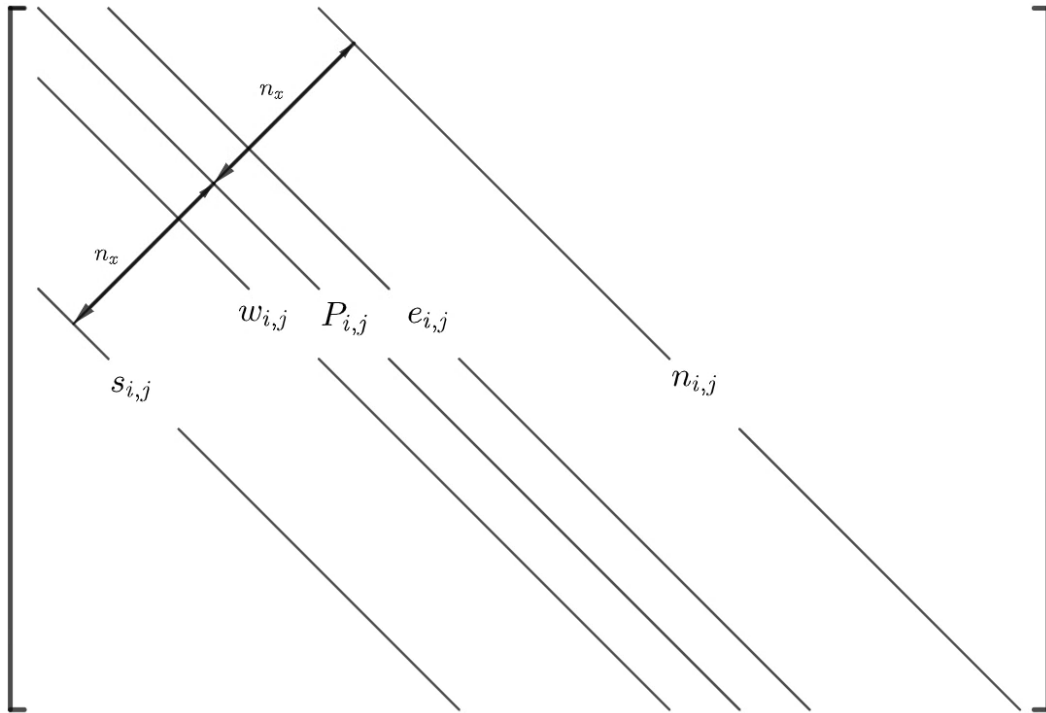
e

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 & \dots & d_{n_{xy}-1} & d_{n_{xy}} \end{bmatrix},$$

sendo que  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{d}$  são formadas de valores conhecidos dos coeficientes e termos fonte, respectivamente,  $\mathbf{x}$  é formado das incógnitas do problema, como  $p$  ou  $T$  e  $n_{xy} = n_x \cdot n_y$ .

De modo geral, a matriz penta-diagonal para uma dada combinação de divisões do domínio 2D tem a forma ilustrada na Figura 5, sendo que as diagonais referentes às células ao norte e ao sul estão  $n_x$  diagonais acima e abaixo, respectivamente, da diagonal principal.

Figura 5 - Representação geral de matriz penta-diagonal para o caso 2D



Fonte: O autor, 2023.

### 3 RESULTADOS

Este capítulo apresenta a discussão dos resultados numéricos da simulação do escoamento monofásico não-isotérmico de gás de folhelho, em um reservatório no qual foram instalados aquecedores estáticos e há um poço produtor. Inicialmente, na Seção 3.1, trata-se das informações e parâmetros gerais. Também são definidos os parâmetros adotados nas simulações e o caso de referência, bem como as características gerais dos estudos numéricos realizados.

Já na Seção 3.2, discute-se a metodologia de verificação do simulador, incluindo comparações entre as soluções analíticas e numéricas para alguns casos simplificados. Além disso, são mostrados os resultados do refinamento da malha e atestada a convergência numérica. Posteriormente, uma análise de sensibilidade é conduzida, explorando o comportamento dos resultados, para diferentes cenários de produção, nos quais alguns dos principais parâmetros e/ou propriedades físicas foram variados. Por fim, na Seção 3.3, investiga-se o desempenho do método térmico no que diz respeito à recuperação de *shale gas*, contemplando a influência do uso dos aquecedores estáticos.

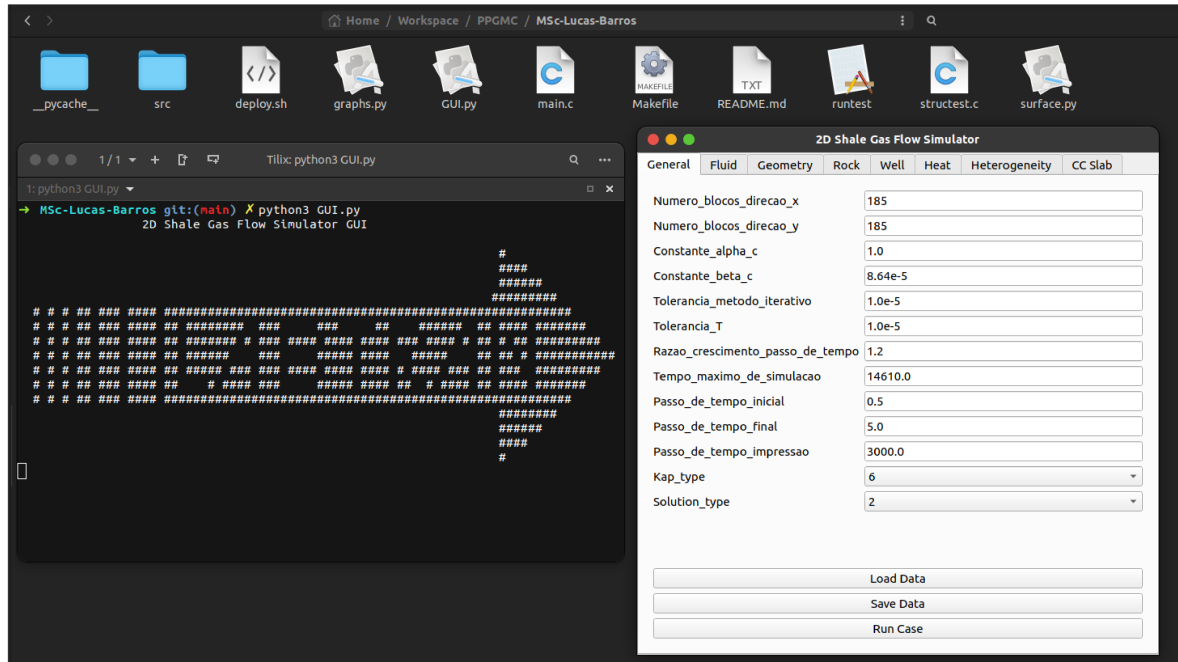
#### 3.1 Informações e parâmetros gerais

O simulador foi desenvolvido tomando por base aquele originalmente implementado em Pessanha (2018), destinado à resolução de escoamentos isotérmicos de gás, incorporando os efeitos de escorregamento e adsorção (Li et al., 2016). Esse simulador precedente já havia sido verificado, para o caso do escoamento sem os efeitos de escorregamento e adsorção, mediante uma confrontação entre os seus resultados e os obtidos com o simulador comercial IMEX (Computer Modelling Group, 2009).

O código numérico foi desenvolvido em linguagem de programação C, utilizando o editor de texto *Visual Studio Code* versão 1.82.2, tendo sido compilado com o gcc (*GNU C Compiler*) versão 11.4.0 e executado em um sistema operacional GNU/Linux (Ubuntu 22.04.03 LTS). De modo a favorecer a execução do código, além da visualização e modificação dos parâmetros de entrada, desenvolveu-se uma interface gráfica usando a biblioteca PyQt5 do Python, que pode ser vista na Figura 6. O projeto pode ser acessado pelo repositório: <https://github.com/LUCASBALIMA/lucasbalima.github.io.git>

As Tabelas 1, 2 e 3 fornecem as os valores das propriedades e dos parâmetros utilizados na definição do caso padrão, que leva em conta os efeitos da adsorção e do escorregamento do gás.

Figura 6 - Interface gráfica



Fonte: O autor, 2023.

Tabela 1 - Parâmetros gerais para as simulações

Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Divisões na direção $x$	$n_x$	185	-
Divisões na direção $y$	$n_y$	185	-
Tempo de simulação	$t_{max}$	1464	dia
Vazão em condições padrão	$q_{sc}$	-2.500	std m <sup>3</sup> /dia
Pressão inicial	$p_{inicial} = p^0$	45.000	kPa
Temperatura inicial	$T_{inicial} = T^0$	400,15	K
Passo de tempo inicial	$\Delta t_{inicial}$	0,5	dia
Passo de tempo final	$\Delta t_{final}$	5	dia
Dimensões do reservatório	$L_x = L_y$	1.080	m
Espessura do reservatório	$L_z$	40	m
Tolerância para a convergência da $p$	$tol_1$	$1 \times 10^{-5}$	kPa
Tolerância para a convergência da $T$	$tol_2$	$1 \times 10^{-5}$	K
Razão de crescimento do passo de $t$	$F_{\Delta t}$	1,2	-
Comprimento do poço	$L_{wf}$	40	m
Posição do poço em $x$	$x_w$	540	m
Posição do poço em $y$	$y_w$	540	m
Posição relativa do aquecedor	$h_{pos}$	20	m

Fonte: O autor, 2023.

Tabela 2 - Parâmetros da rocha

Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Permeabilidade absoluta	$k_x$ e $k_y$	$5 \times 10^{-18}$	$m^2$
Porosidade de referência	$\phi^0$	0,08	-
Calor específico da rocha	$c_{p,r}$	1,25604	$\text{kJ}/(\text{kg K})$
Condutividade térmica da rocha	$\kappa_r$	3,5	$\text{W}/(\text{m K})$
Massa específica da rocha	$\rho_s$	3.203,7	$\text{kg}/\text{m}^3$
Tortuosidade	$\tau$	1,41	-
Compressibilidade hidráulica do poro	$c_\phi$	$1,45 \times 10^{-6}$	$\text{kPa}^{-1}$
Compressibilidade térmica do poro	$c_{\phi,T}$	$5,4 \times 10^{-6}$	$\text{K}^{-1}$
Compressibilidade hidráulica da rocha	$c_\rho$	$10^{-6}$	$\text{kPa}^{-1}$
Compressibilidade térmica da rocha	$c_{\rho,T}$	$5,0 \times 10^{-9}$	$\text{K}^{-1}$

Fonte: O autor, 2023.

Tabela 3 - Parâmetros do fluido

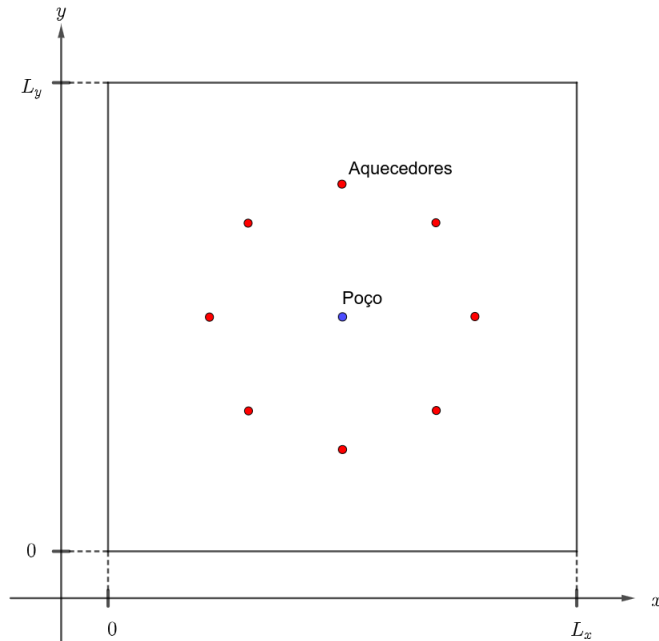
Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Pressão em condições padrão	$p_{sc}$	101,325	$\text{kPa}$
Temperatura em condições padrão	$T_{sc}$	298,15	$\text{K}$
Densidade do gás	$\gamma$	0,6	-
Calor específico do gás	$c_{p,g}$	2,5	$\text{kJ}/(\text{kg K})$
Condutividade térmica do gás	$\kappa_g$	0,075	$\text{W}/(\text{m K})$
Constante universal dos gases	$R$	8,3161	$\text{J}/(\text{mol K})$
Volume de Langmuir	$V_L$	$3,12398 \times 10^{-5}$	$\text{m}^3/\text{kg}$
Pressão de Langmuir	$p_L$	1.100	$\text{kPa}$
Energia de adsorção característica	$E_{ads}$	-20,936	$\text{J}/\text{mol}$
Coefficiente de adsorção	$K_0$	$3,2288 \times 10^{-9}$	$\text{K}^{0,5}$

Fonte: O autor, 2023.

Na Tabela 1, as tolerâncias  $tol_1$  e  $tol_2$  são aplicadas tanto ao método de Picard quanto ao dos Gradientes Conjugados. A simulação começa com um passo de tempo inicial  $\Delta t_{\text{inicial}}$ , que é multiplicado pelo fator de crescimento  $F_{\Delta t}$  para determinar o próximo passo de tempo. Esse procedimento continua até que o  $\Delta t_{\text{final}}$  seja alcançado e, então, ele é mantido constante. O tempo total de produção é definido como  $t_{\text{max}}$ .

O poço produtor está localizado nas coordenadas  $(x_w, y_w)$ , no plano  $xy$ , e possui um comprimento  $L_{wf}$ . Além disso,  $h_{pos}$  representa a distância entre os aquecedores e o poço produtor. Em um arranjo com 4 aquecedores (*five spot*), eles são alocados ao longo das direções  $x$  e  $y$  nos vértices de um quadrado. Por outro lado, com 8 aquecedores (*nine spot*), eles encontram-se nos vértices de um octógono, conforme ilustrado na Figura 7.

Figura 7 - Ilustração dos posicionamentos do poço produtor e aquecedores

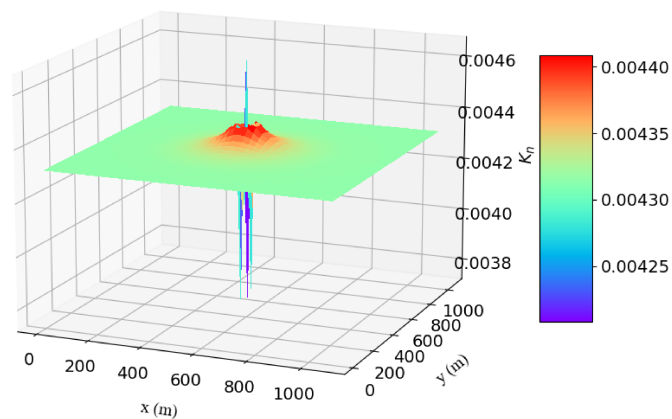


Fonte: O autor, 2023.

Optou-se por esquemas com 4 e com 8 aquecedores e um poço produtor por conta da geometria do modelo. Com estes cenários, a ideia foi colocar os aquecedores espelhados em relação ao poço produtor, que por sua vez fica no centro.

Em relação à faixa de valores do número de Knudsen, foi implementada uma checagem para interromper a simulação caso eles estejam fora da faixa da hipótese do contínuo/escorregamento. Uma distribuição dos valores de  $K_n$  no domínio, obtida para o caso padrão, é mostrada na Figura 8. Em todas as simulações realizadas, os valores ficaram compreendidos entre  $10^{-3}$  e 0,1.

Figura 8 - Exemplo de distribuição espacial do número de Knudsen



Fonte: O autor, 2023.

### 3.2 Verificação do simulador

Dentre as diversas formas de se verificar os resultados obtidos com o simulador, aqui optou-se por:

1. Considerar alguns casos simplificados e comparar os resultados numéricos com as suas soluções analíticas;
2. Verificar a tendência de convergência numérica à medida que se refina as malhas espacial e temporal; e
3. Realizar uma análise de sensibilidade variando alguns dos parâmetros físicos.

#### 3.2.1 Comparação com as soluções analíticas

A fim de se confrontar as soluções analíticas e numéricas, escolheu-se resolver um problema de difusão unidimensional. Nesse problema, os termos de fonte/sumidouro são eliminados e condições inicial e de contorno específicas são impostas.

Portanto, considera-se a Eq. (15), no caso dela ser homogênea e possuir um coeficiente de difusão constante,

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \alpha_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2},$$

onde

$$\alpha_p = \frac{k_{ax}}{B_g \mu_g (\Gamma'_p + \Gamma'_{p,ads})}$$

ou seja, trata-se da clássica equação da difusão.

Nesse caso, para uma condição inicial igual a  $p_0$ , de contorno do tipo Dirichlet, em  $x = 0$ , igual a  $p_b$  e um domínio semi-infinito, a solução analítica é (Incropera et al., 2006):

$$p(x, t) = p_b + (p_0 - p_b) \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{\alpha_p t}} \right)$$

onde erf é a função erro.

Portanto, simulações foram realizadas com os parâmetros da Tabela 4. Três valores distintos do tempo final  $t_{max}$  foram considerados (40, 400 e 4.000 dias) e utilizou-se uma malha com 161 volumes finitos.

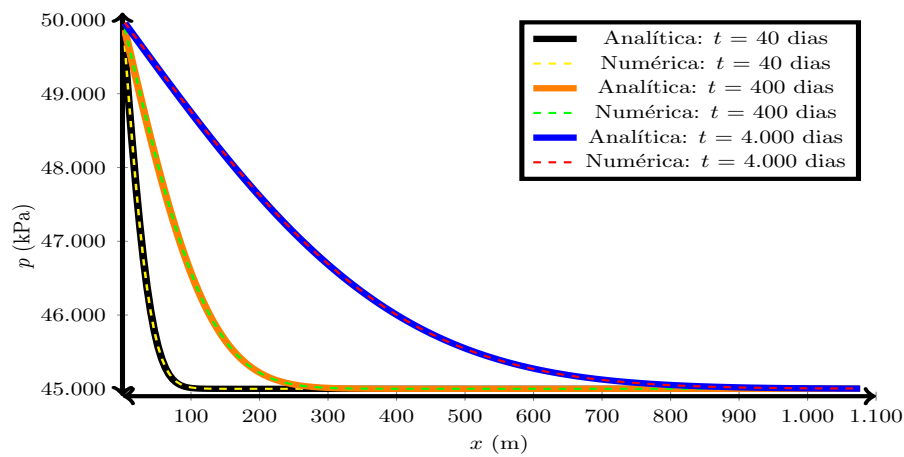
Uma comparação entre os valores teóricos e numéricos pode ser feita mediante observação da Figura 9. Claro está, para o problema escolhido e os valores da Tabela 4, que existe uma boa concordância entre eles.

Tabela 4 - Parâmetros usados solução da equação da difusão

Parâmetro	Valor	Unidade
$n_x$	161	-
$p_0$	45.000	kPa
$p_b$	50.000	kPa
$k_x$	$5,0 \times 10^{-18}$	$m^2$
$L_x$	1080,0	m
$\alpha_p$	12,2	$m^2/d$

Fonte: O autor, 2023.

Figura 9 - Comparação da solução numérica com a analítica para perfis de pressão ao longo de  $x$  com avanço do tempo



Fonte: O autor, 2023.

Em função do foco deste trabalho considerar um problema de escoamento, pensou-se em um novo problema teste abordando a resolução da equação de advecção-difusão. Fazendo as devidas simplificações, reescreve-se a Eq. (16), para o caso unidimensional na direção  $x$ , na forma

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \kappa_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{u B_g}{\phi} (\rho_g c_{p,g} \phi T_g) \right] = 0$$

onde  $u$  é a componente em  $x$  do vetor velocidade  $\mathbf{v}$ . Ademais, para  $\phi = B_g = 1$ , ou seja, apenas um fluido incompressível escoando, tem-se, então, que  $\rho_g c_{p,g} \phi T_g = \rho c_p T$  e, assim, obtém-se para  $u$  constante

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\kappa_x}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}.$$

Agora, seja  $x_D = x/L_x$  a posição adimensional,  $t_D = (ut)/L_x$  o tempo adimensional e  $\theta = T - T_0$  e  $\theta_b = T_b - T_0$ , onde  $T_0$  é a temperatura inicial e  $T_b$  é a prescrita em  $x = 0$ ,



de modo que a sua forma adimensional é dada por

$$\frac{\partial \theta^*}{\partial t_D} + \frac{\partial \theta^*}{\partial x_D} = \frac{1}{P_e} \frac{\partial^2 \theta^*}{\partial x_D^2},$$

onde  $\theta^* = \theta/\theta_b$  é a temperatura adimensional e

$$P_e = \frac{uL_x\rho c_p}{\kappa_x}$$

é o número de Péclet, um número adimensional que fornece a relação entre a importância dos termos de transporte por advecção e difusão.

Assim, para uma condição de contorno do tipo Dirichlet, em  $x = 0$ , um meio semi-infinito e uma condição inicial dada, a solução analítica para este problema é dada por (Lake, 1989):

$$\theta^*(x, t) = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x_D - t_D}{2\sqrt{\frac{t_D}{P_e}}} \right) + \exp(x_D P_e) \operatorname{erfc} \left( \frac{x_D + t_D}{2\sqrt{\frac{t_D}{P_e}}} \right) \right]$$

onde  $\operatorname{erfc}$  é a função erro complementar.

Para a obtenção dos resultados, resolveu-se apenas o problema da temperatura, porém, introduziu-se uma queda linear de pressão que vai de 50 MPa em  $x = 0$  m a 45 MPa em  $x = L_x$ , o que leva a uma velocidade  $u$  de aproximadamente  $7,086 \times 10^{-7}$  m/d. Os demais valores utilizados nas simulações pode ser encontrados na Tabela 5.

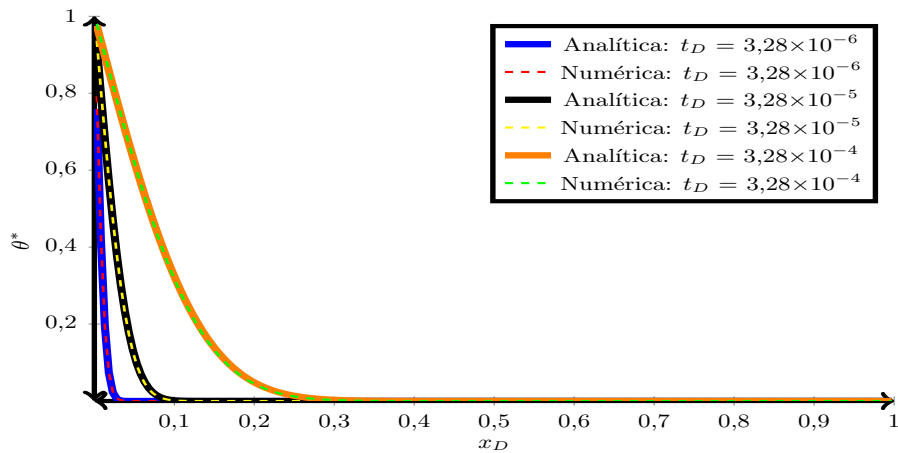
Tabela 5 - Parâmetros usados na solução da equação de advecção-difusão

Parâmetro	Valor	Unidade
$n_x$	200	-
$T_0$	400,15	K
$T_b$	420,15	K
$k_x$	$5,0 \times 10^{-20}$	m <sup>2</sup>
$\phi$	1,0	-
$L_x$	1080,0	m
$u$	$7,086 \times 10^{-7}$	m/d
$\kappa_x$	9,258	kJ/(d m K)
$\rho c_p$	527,795	kJ/(m <sup>3</sup> K)

Fonte: O autor, 2023.

Na Figura 10, contendo os valores numéricos calculados com uma malha com 200 volumes finitos, nota-se que há uma boa correspondência entre as soluções analítica e numérica à medida que se avança no tempo.

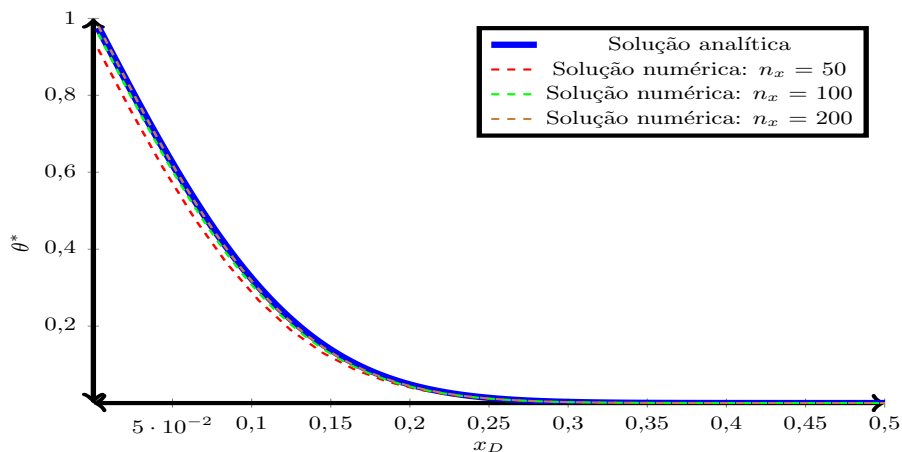
Figura 10 - Comparação da solução numérica com a analítica pelos perfis de temperatura ao longo de  $x_D$  com avanço do tempo



Fonte: O autor, 2023.

A partir da observação da Figura 11, constatou-se que os valores numéricos tendem a se aproximar dos teóricos à medida que se refina a malha espacial. Portanto, considera-se que o método numérico seja convergente.

Figura 11 - Comparação da solução numérica com a analítica pelos perfis de temperatura ao longo de  $x_D$  para  $t_D = 3,28 \times 10^{-4}$  e com diferentes malhas



Fonte: O autor, 2023.

### 3.2.2 Convergência numérica

As informações referentes ao número de volumes finitos, utilizados no estudo de refinamento de malha, podem ser vistas na Tabela 6. Considera-se, agora, o caso padrão

de referência para as simulações.

Tabela 6 - Malhas computacionais

Malha	$n_x = n_y$
1	47
2	93
3	185
4	369
5	737

Fonte: O autor, 2023.

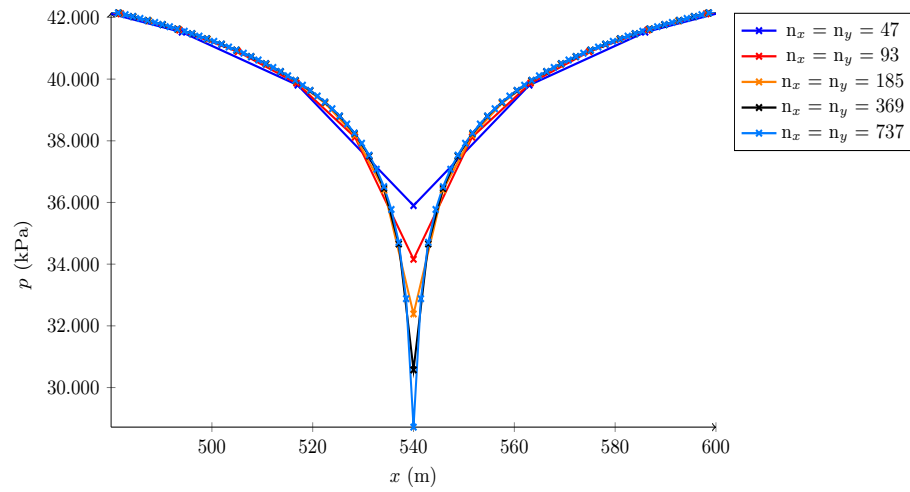
Na Figura 12a, apresentam-se os valores da pressão ao longo do eixo  $x$  e incorporando a região do poço produtor  $y = L_y/2$ . Todos os resultados correspondem aos obtidos para um tempo máximo de produção igual a 1.464 dias (4 anos e 3 dias), os parâmetros de simulação estabelecidos para o caso padrão e utilizando as quatro malhas da Tabela 6.

Da figura, é possível observar as regiões nas quais os valores tendem a se aproximar uns dos outros à medida que as malhas são refinadas, mostrando evidências de que o método é convergente. Por outro lado, isso não acontece na região aonde está localizado o poço, na qual tem-se uma singularidade devido à forma como é definido o termo fonte (quando se refina a malha, a mesma massa é retirada de um volume cada vez menor). Desta forma, para essa região do domínio de solução, essa forma de análise não é aconselhável e deveria ser conduzida de outra maneira, como usando modelos de acoplamento poço-reservatório (Peaceman, 1978; Souza, 2013a; Rosário et al., 2016).

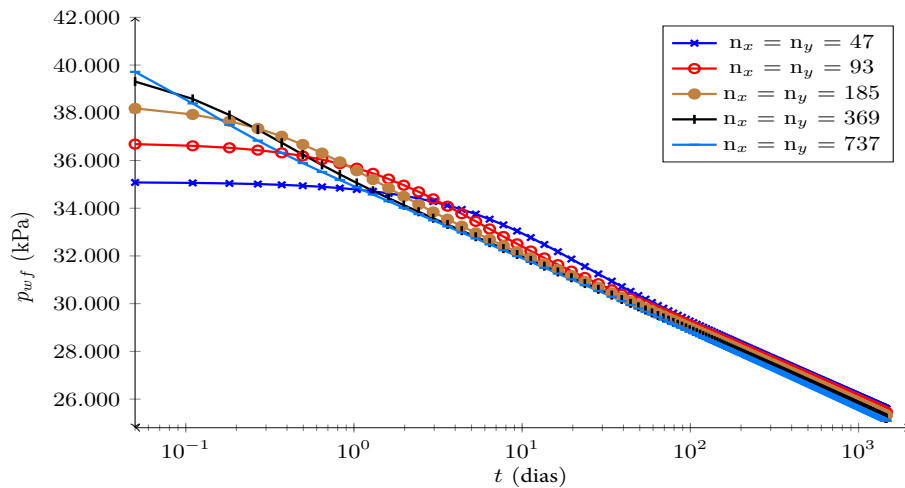
A convergência numérica também pode ser analisada na Figura 12b, onde são apresentados os valores da pressão no poço produtor ( $p_{wf}$ ) em escala semi-logarítmica, conforme comumente feito, na literatura, na área de análise de testes de pressão (Lee; Wattenbarger, 1996). As estimativas da pressão no poço foram obtidas por meio da técnica de acoplamento poço-reservatório, proposta por Peaceman (1978), Peaceman (1983). Aqui foi usado um passo de tempo inicial de 0,05 dia, de forma a melhor se capturar os resultados nos instantes iniciais.

Destaca-se a presença do artefato numérico nos estágios iniciais, comumente referido como a estocagem numérica (denominação que remete ao efeito qualitativamente semelhante à estocagem física no poço, notável em gráficos empregados em testes de pressão (Souza, 2013b)). Esse fenômeno é ocasionado pela adoção da hipótese do escoamento em regime permanente, na técnica de acoplamento preconizada por Peaceman (1978). A duração dele diminui à medida que as malhas são refinadas, conforme evidenciado na Figura 12b. Além disso, sua extensão é influenciada pelos valores da permeabilidade absoluta, resultando em uma duração significativa devido aos baixos valores empregados neste estudo.

Figura 12 - Resultados para diferentes malhas



(a)



(b)

Legenda: Campos de pressão: (a) pressão no reservatório ao longo do eixo  $x$  e (b) pressão no poço ao longo do tempo.

Fonte: O autor, 2023.

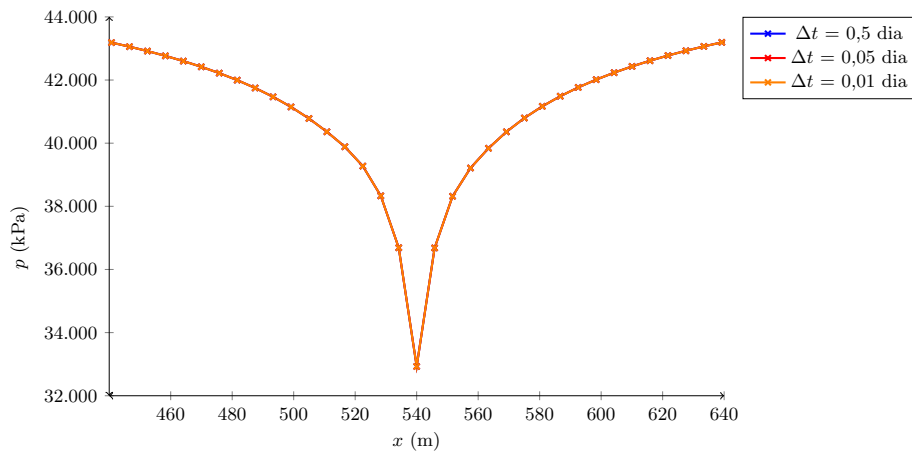
Em função dos resultados, a Malha 3 será estabelecida como a padrão para os demais testes, assumindo que a partir de aproximadamente 1 dia o impacto do artefato numérico será baixo para as análises posteriores. Portanto, elas serão conduzidas com foco nos tempos de produção superiores a 1 dia, a menos que seja especificamente indicado o contrário.

Um refinamento dos incrementos de tempo iniciais é utilizado, de forma a se capturar detalhadamente os efeitos do começo da produção. Nesse contexto, a Figura 13a mostra um estudo realizado para três diferentes valores do passo de tempo inicial, mantendo  $F_{\Delta t}$

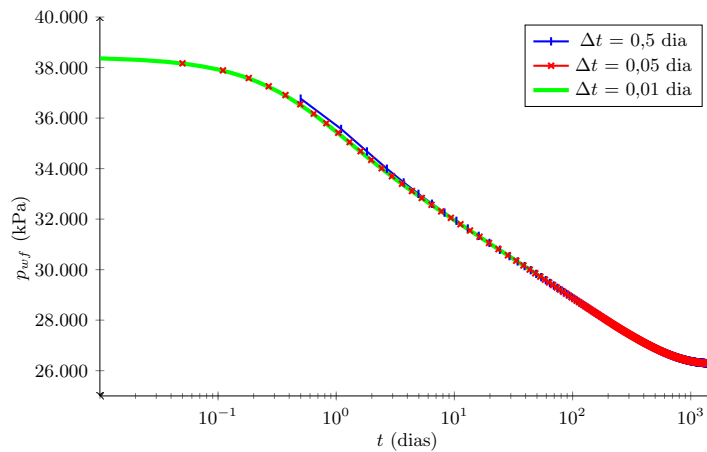
igual a 1,2.

Os resultados deste tipo de avaliação também são apresentados em um gráfico para a pressão no poço em função do tempo, vide a Figura 13b. Como se pode ver, não foram detectadas diferenças significativas entre as curvas, além do fato de as curvas começarem em instantes de tempo diferentes. É possível notar uma ligeira diferença nos tempos iniciais para  $\Delta t = 0,5$  dia.

Figura 13 - Resultados para diferentes valores do  $\Delta t$  inicial



(a)



(b)

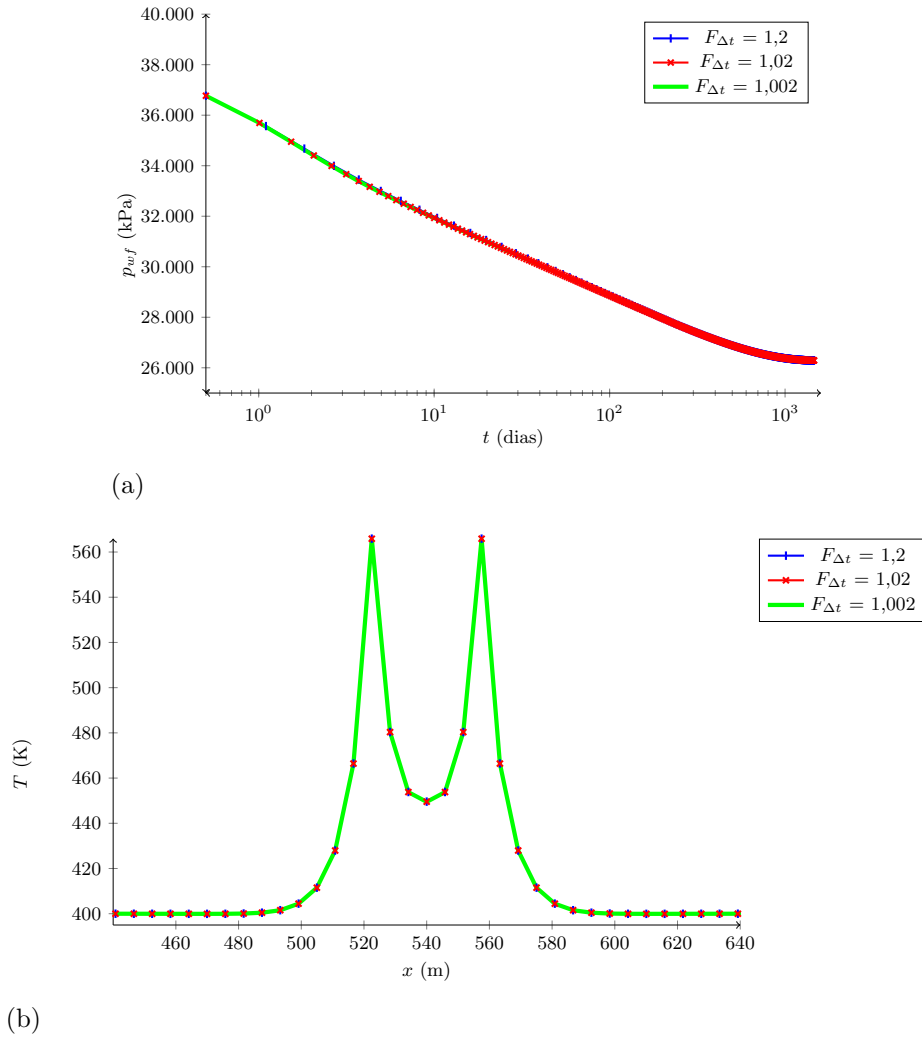
Legenda: Campos de pressão: (a) pressão no reservatório e (b) pressão no poço.

Fonte: O autor, 2023.

No que diz respeito à diminuição da razão de crescimento do passo de tempo, os resultados da Figura 14a mostram que não há diferenças, para os valores testados, que justifiquem o uso de pequenos incrementos de tempo além dos instantes iniciais, o que indica que o uso de uma razão de crescimento de 1,2 foi uma boa estratégia para a obtenção dos resultados com um menor esforço computacional. O mesmo pode ser dito em relação

às curvas da temperatura média, como pode ser visto na Figura 14b.

Figura 14 - Resultados para diferentes valores do  $F_{\Delta t}$



Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço e (b) temperatura no reservatório.

Fonte: O autor, 2023.

### 3.2.3 Análise de sensibilidade

Passa-se, em seguida, ao estudo de sensibilidade dos resultados, a partir da variação de alguns dos parâmetros físicos. A Tabela 7 apresenta os diferentes valores empregados nos casos Padrão, 1 e 2.

Tabela 7 - Parâmetros para testes de sensibilidade

Propriedade	Padrão	Caso 1	Caso 2	Unidade
$k_x = k_y = k$	$5 \times 10^{-18}$	$6 \times 10^{-18}$	$7 \times 10^{-18}$	$m^2$
$\gamma$	0,60	0,65	0,70	-
$\phi$	0,08	0,13	0,18	-
$\kappa_r$	3,5	4,5	5,5	W/(m K)
$\kappa_g$	0,075	0,095	0,115	W/(m K)
$t_{max}$	1.464	2.924	5.844	dia
$q_{sc}$	-2.500	-3.000	-3.500	std $m^3$ /dia
$h_{pos}$	20	60	100	m
$q_H$	50	60	70	kW

Fonte: O autor, 2023.

As Figuras 15a-23c são usadas na apresentação dos resultados determinados a partir da variação de alguns dos parâmetros físicos, de modo a conduzir mais um tipo de verificação do simulador numérico, alterando os valores da permeabilidade absoluta; da porosidade; da densidade do gás; da condutividade térmica da rocha; do tempo de simulação; da vazão no poço produtor; do posicionamento dos aquecedores na jazida; e da potência dos aquecedores estáticos.

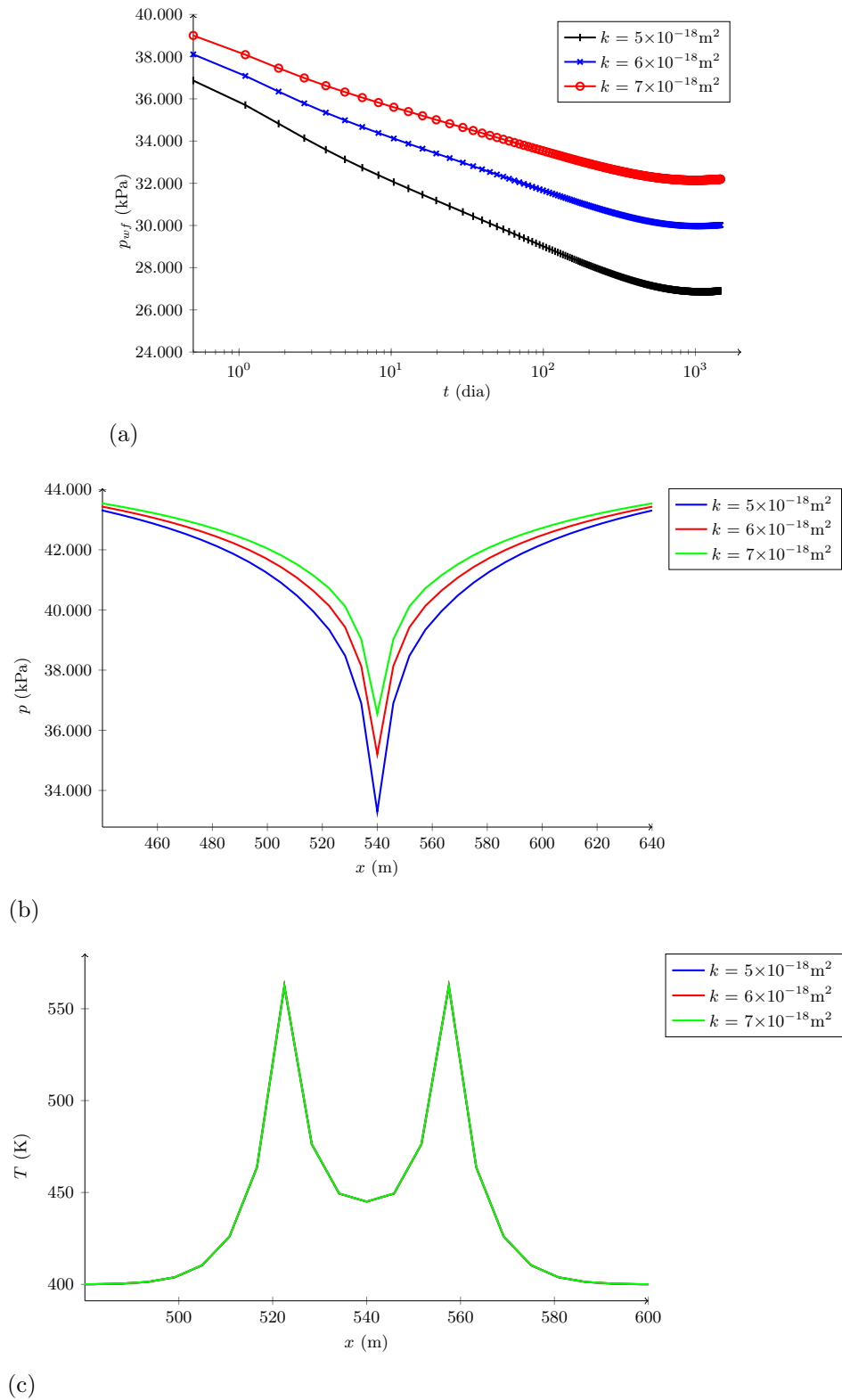
Primeiramente, em relação à permeabilidade, observou-se que o seu aumento resultou em uma manutenção mais significativa da pressão no poço produtor e do perfil de pressão no reservatório, enquanto que a temperatura não apresentou variações consideráveis (Figuras 15a, 15b e 15c).

Conforme o esperado, o uso da Lei de Darcy modificada, ao invés da clássica, altera os valores da permeabilidade aparente e as menores quedas de pressão corresponderam às maiores magnitudes das permeabilidades absolutas. Entretanto, deve-se ressaltar que pode existir uma contraposição de efeitos decorrente da variação da permeabilidade aparente em função do número de Knudsen.

A mudança da densidade do gás também foi avaliada, e verificou-se que os maiores acarretaram quedas de pressão mais acentuadas, sem impacto significativo nos valores da temperatura (Figuras 16a, 16b e 16c). Tendo em vista que há dependência da densidade no cálculo da viscosidade e do fator-volume-formação, por exemplo, é natural também encontrar diferenças quando da variação de  $\gamma$ , a partir da qual se calcula diferentes propriedades de fluido.

A porosidade, por sua vez, apresentou o efeito esperado, com quedas de pressão levemente menores e temperaturas mais elevadas em cenários com uma maior porosidade, como pode ser observado nos resultados presentes nas Figuras 17a, 17b e 17c.

Figura 15 - Resultados para diferentes valores da permeabilidade

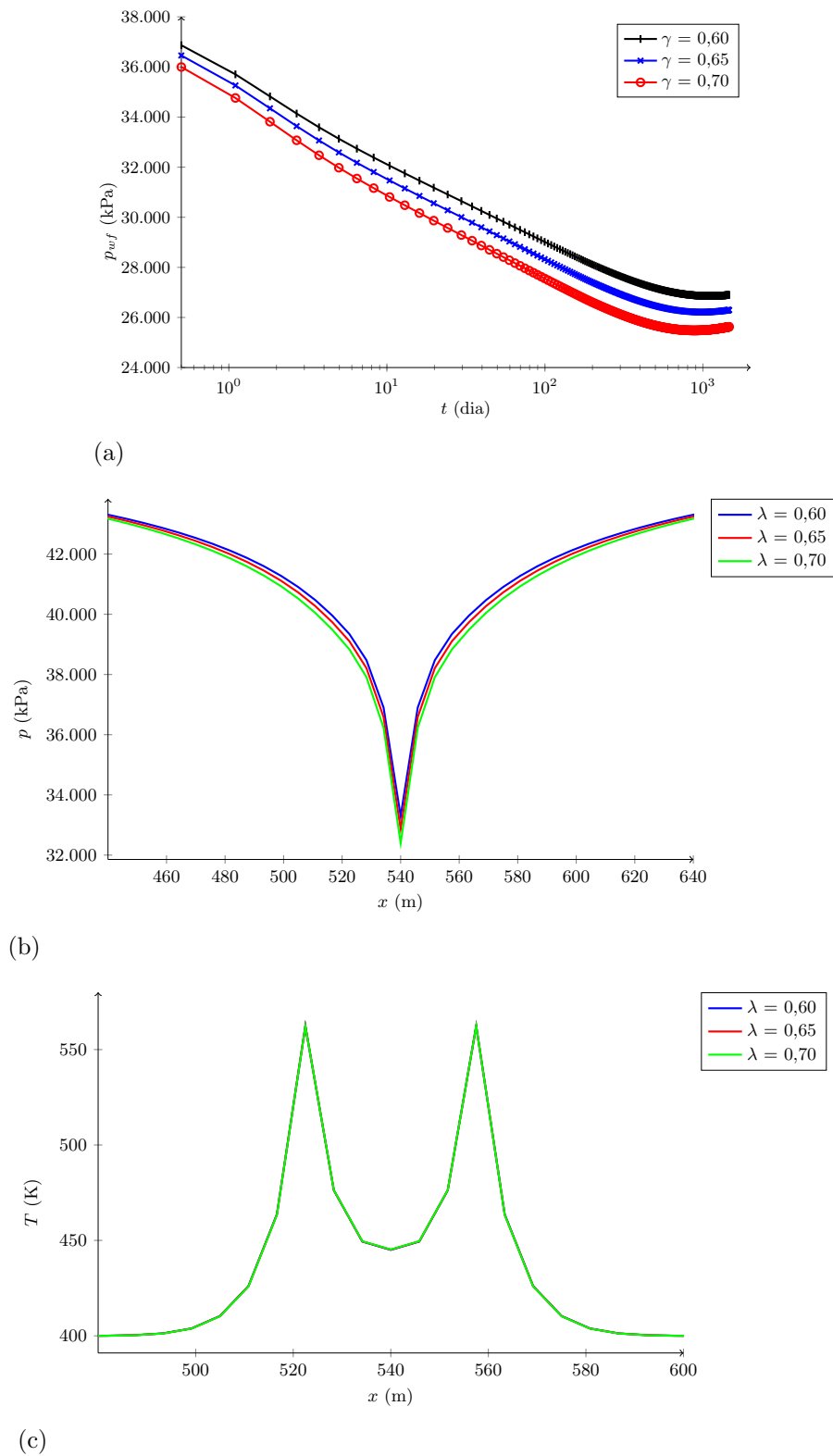


Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço, (b) pressão no reservatório e (c) temperatura no reservatório.

Fonte: O autor, 2023.



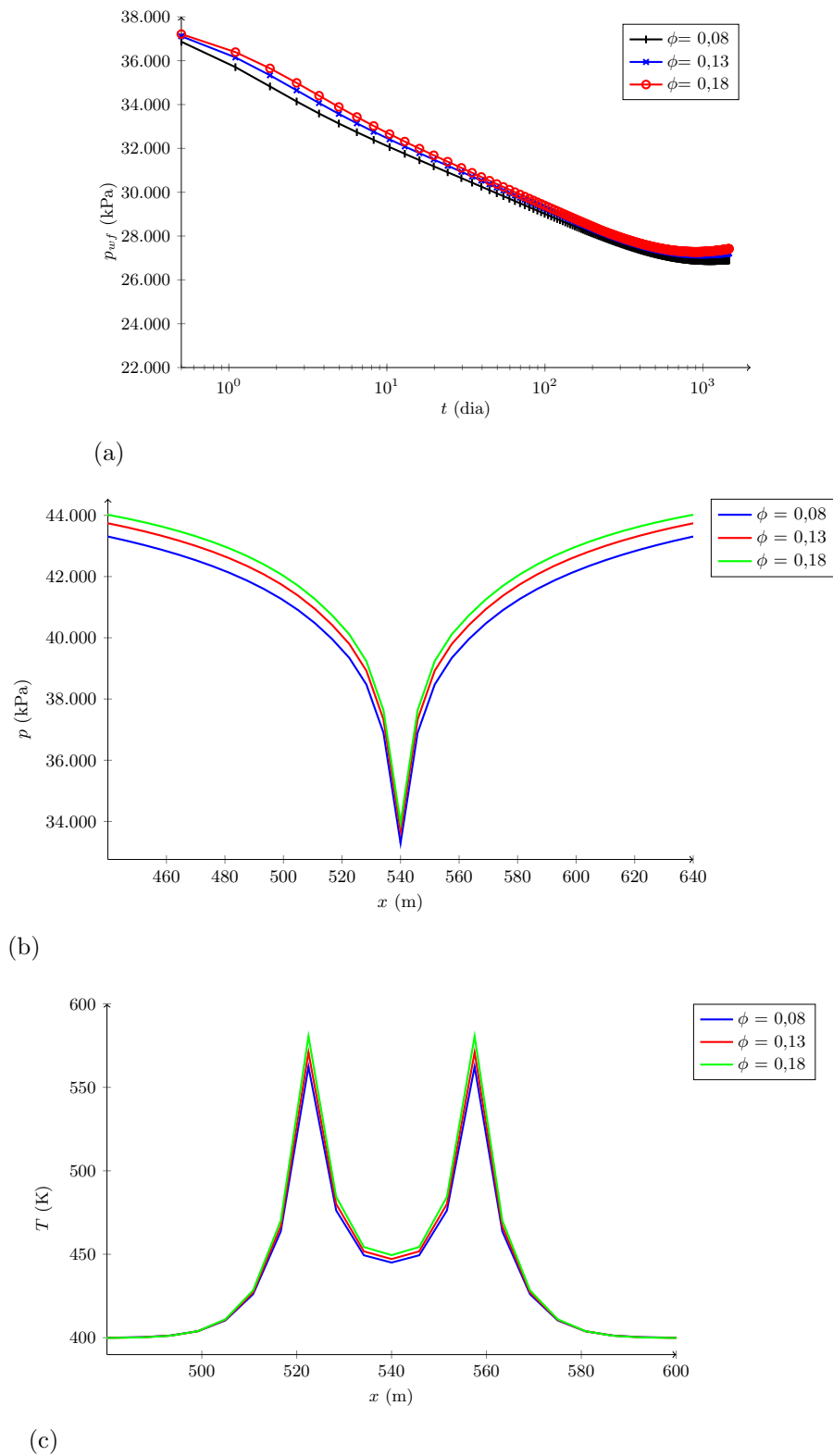
Figura 16 - Resultados para diferentes valores da densidade do gás



Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço, (b) pressão no reservatório e (c) temperatura no reservatório.

Fonte: O autor, 2023.

Figura 17 - Resultados para diferentes valores da porosidade



Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço, (b) pressão no reservatório e (c) temperatura no reservatório.

Fonte: O autor, 2023.

A condutividade térmica da rocha mostrou influenciar sutilmente os valores da pressão e da temperatura, com quedas de pressão levemente atenuadas e temperaturas mais elevadas em rochas apresentando uma menor condutividade térmica, como é possível atestar mediante observação das Figuras 18a, 18b e 18c.

Já a condutividade térmica do gás não levou a grandes variações dos valores da temperatura, o que já deveria ser esperado devido às baixas porosidade e condutividade térmica do gás natural na condição de referência (vide as Figuras 19a, 19b e 19c).

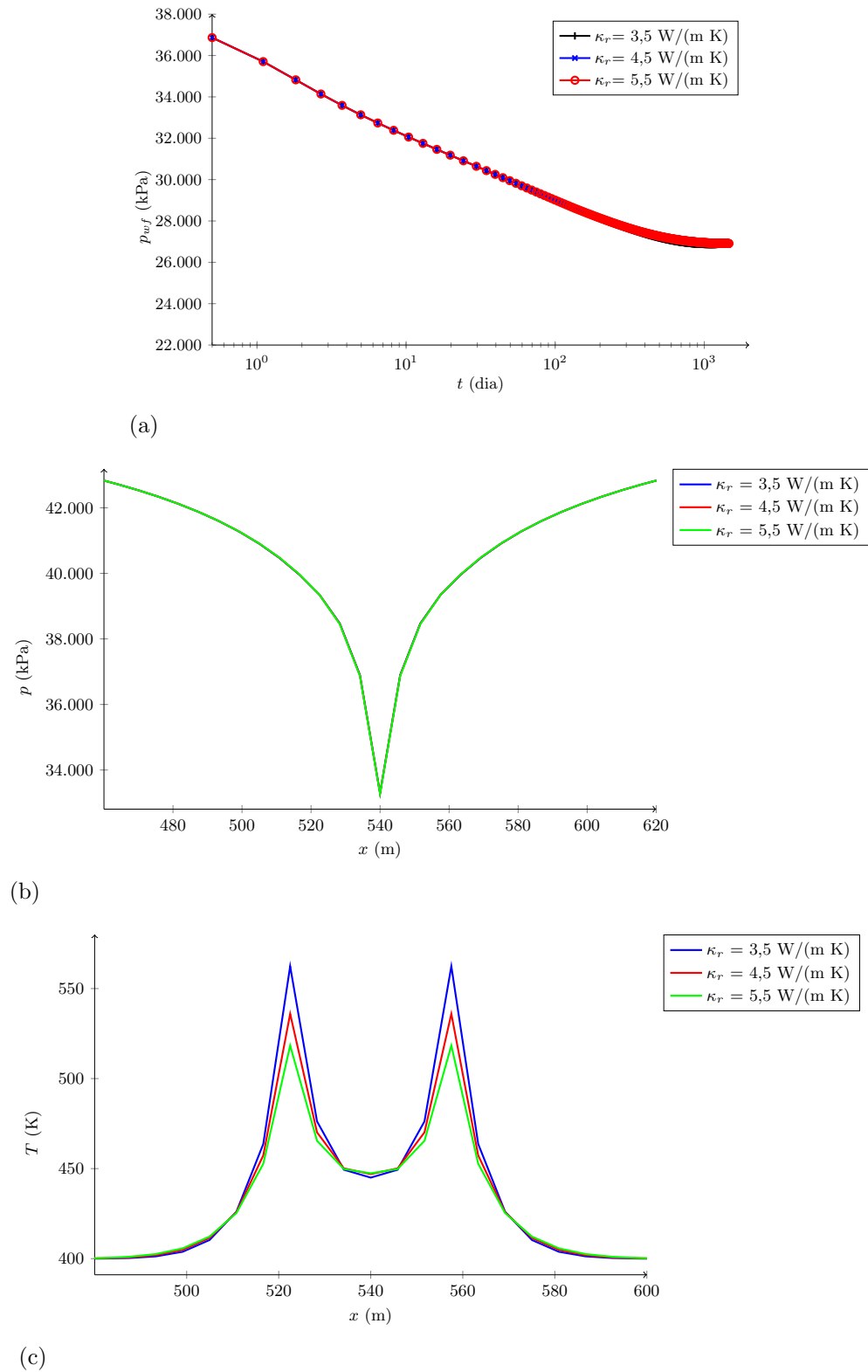
Na sequência, as Figuras 20a, 20b e 20c contêm os resultados para as pressões no reservatório e no poço e para a temperatura em função do tempo de produção. Nota-se que à medida que ele é aumentado, percebe-se uma influência tanto nos valores da pressão quanto da temperatura, com uma notável mudança na pressão após aproximadamente 2.000 dias. Ademais, observa-se o seu aumento subsequente, devido à influência dos aquecedores estáticos.

Às maiores vazões no poço produtor correspondem às quedas mais acentuadas de pressão, enquanto que a temperatura permaneceu relativamente inalterada, conforme pode ser visto nas Figuras 21a, 21b e 21c. Na Figura 21c, não se observou nenhuma mudança no comportamento da temperatura para os diferentes valores das vazões, para o período de tempo de produção simulado, o que reforça a ideia da baixa influência dos termos advectivos na obtenção da temperatura média.

Uma outra questão importante diz respeito ao posicionamento dos poços aquecedores estáticos. Em função do posicionamento dos mesmos na jazida, o aumento de temperatura foi sentido no poço produtor apenas para o caso dno qual  $h_{pos} = 20$  m, para a tempo de produção estipulado, como pode ser observado na Figura 22c. O que explica a menor queda de pressão também nesse caso, como visto nas Figuras 22a e 22b. Tal comportamento já era esperado, uma vez que que nesta região houve um aumento do valor da permeabilidade absoluta, de acordo com a correlação de [Chapiro e Bruining \(2015\)](#).

Por último, checou-se a influência das potências dos aquecedores estáticos. Verificou-se que ela também impactou nos valores das pressões, incorrendo em menores quedas à medida que a potência aumentou, enquanto as temperaturas nas proximidades dos aquecedores foram substancialmente maiores, conforme o esperado (vide as Figuras 23a, 23b e 23c).

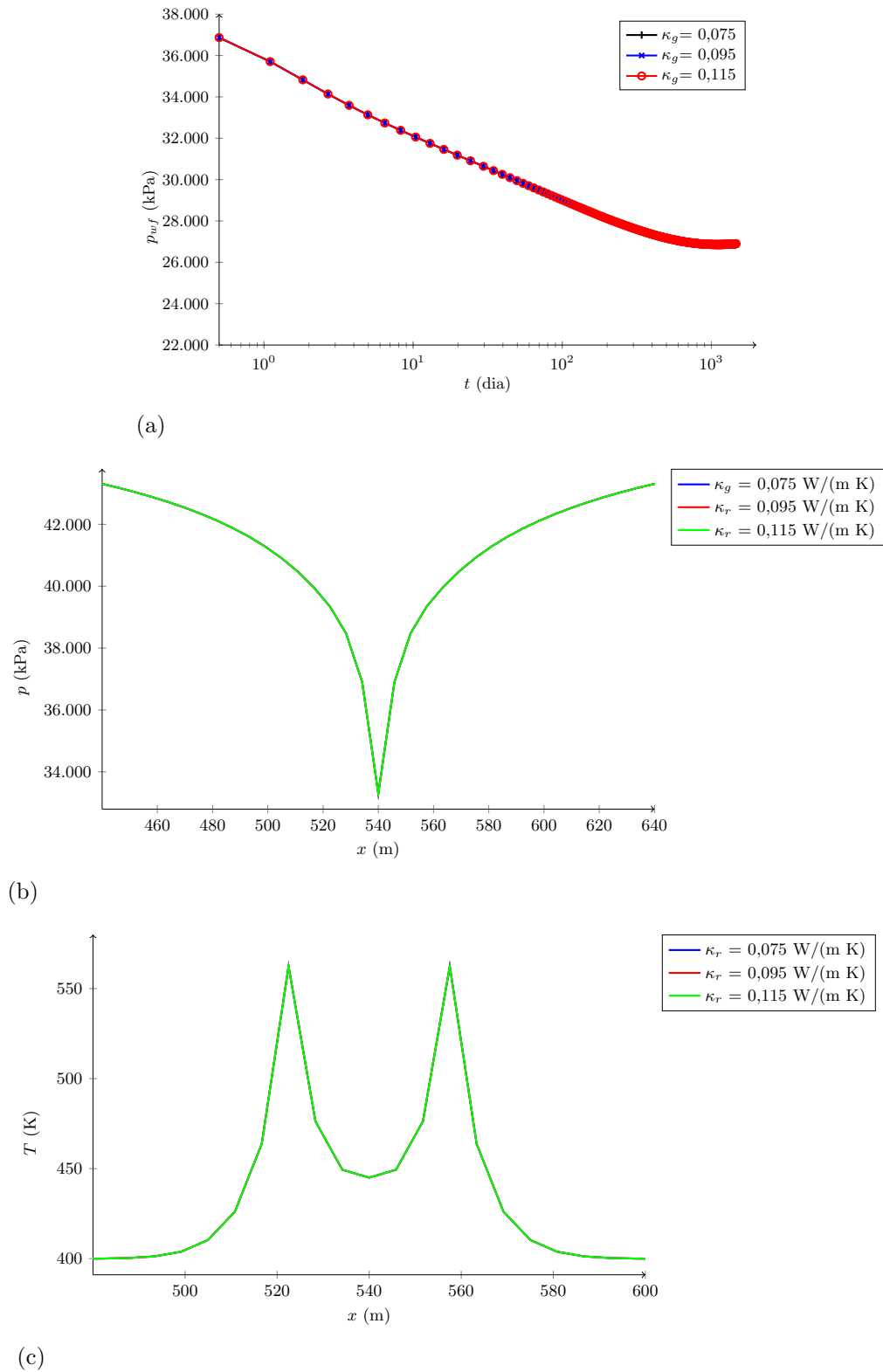
Em resumo, entende-se que a análise da sensibilidade realizada neste estudo indicou que todas as variações observadas estão em conformidade com o comportamento físico esperado do fenômeno estudado, de acordo com a experiência prévia do grupo e dos resultados encontrados na literatura.

Figura 18 - Resultados para diferentes valores de  $\kappa_r$ 

Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço, (b) pressão no reservatório e (c) temperatura no reservatório.

Fonte: O autor, 2023.

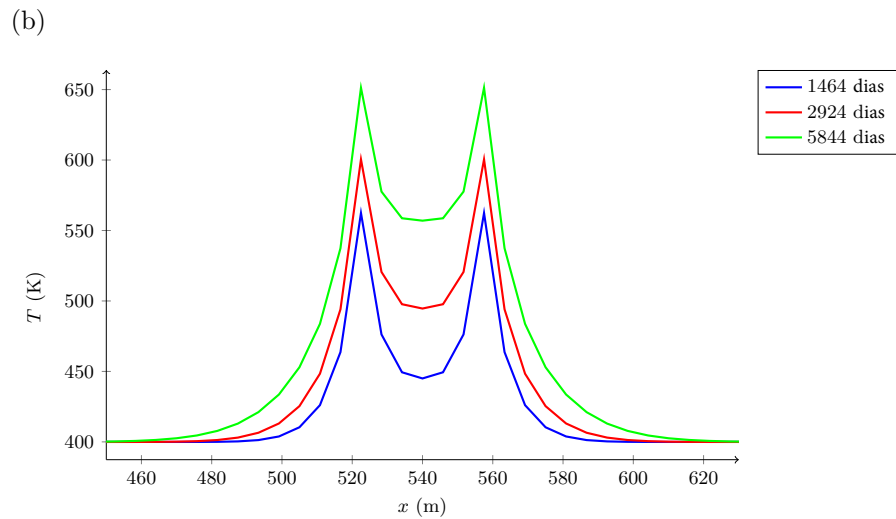
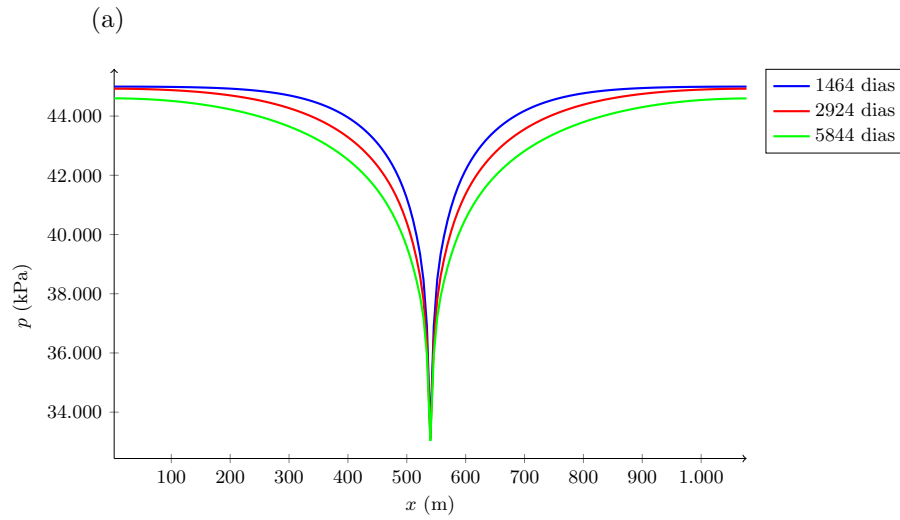
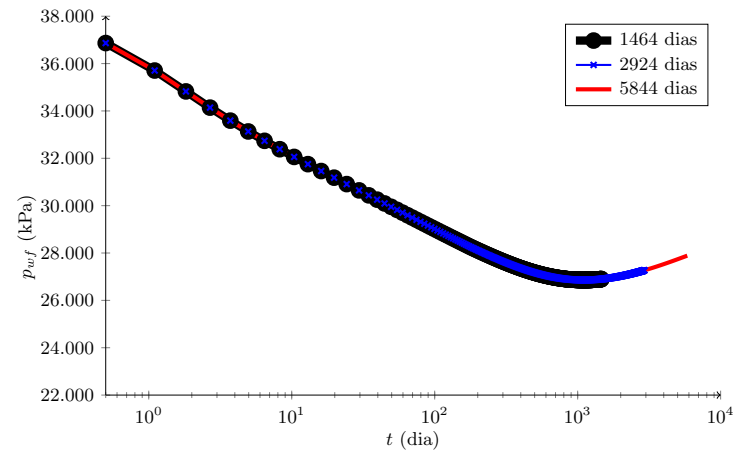
Figura 19 - Resultados para diferentes valores de  $\kappa_g$



Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço, (b) pressão no reservatório e (c) temperatura no reservatório.

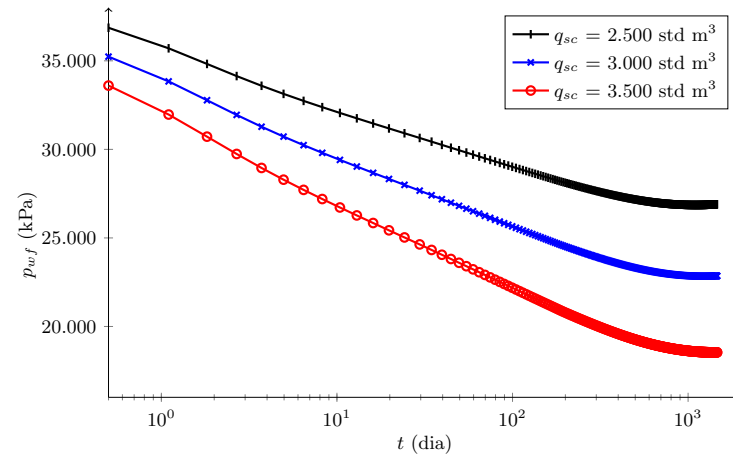
Fonte: O autor, 2023.

Figura 20 - Resultados para diferentes valores de  $t_{max}$

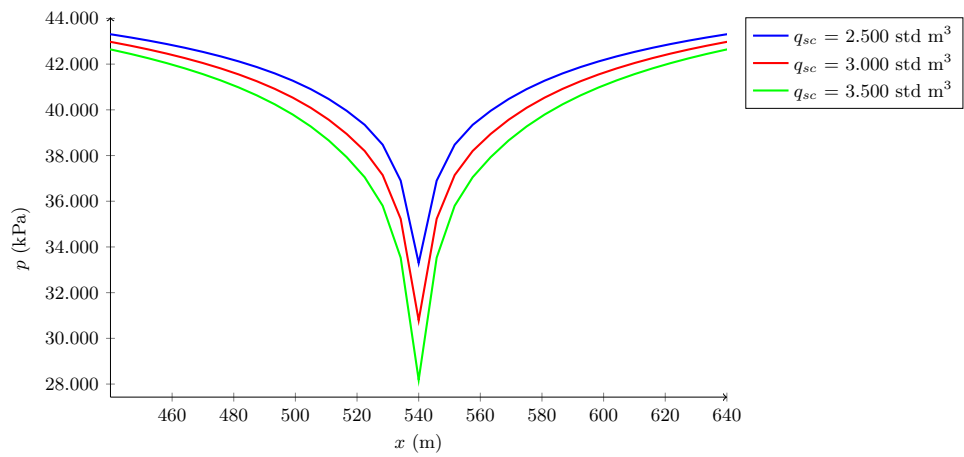


Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço, (b) pressão no reservatório e (c) temperatura no reservatório.

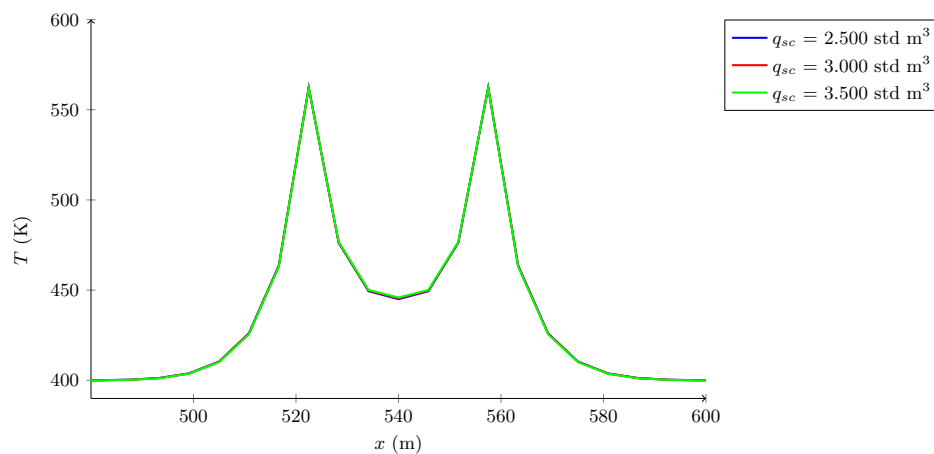
Fonte: O autor, 2023.

Figura 21 - Resultados para diferentes valores de  $q_{sc}$ 

(a)



(b)

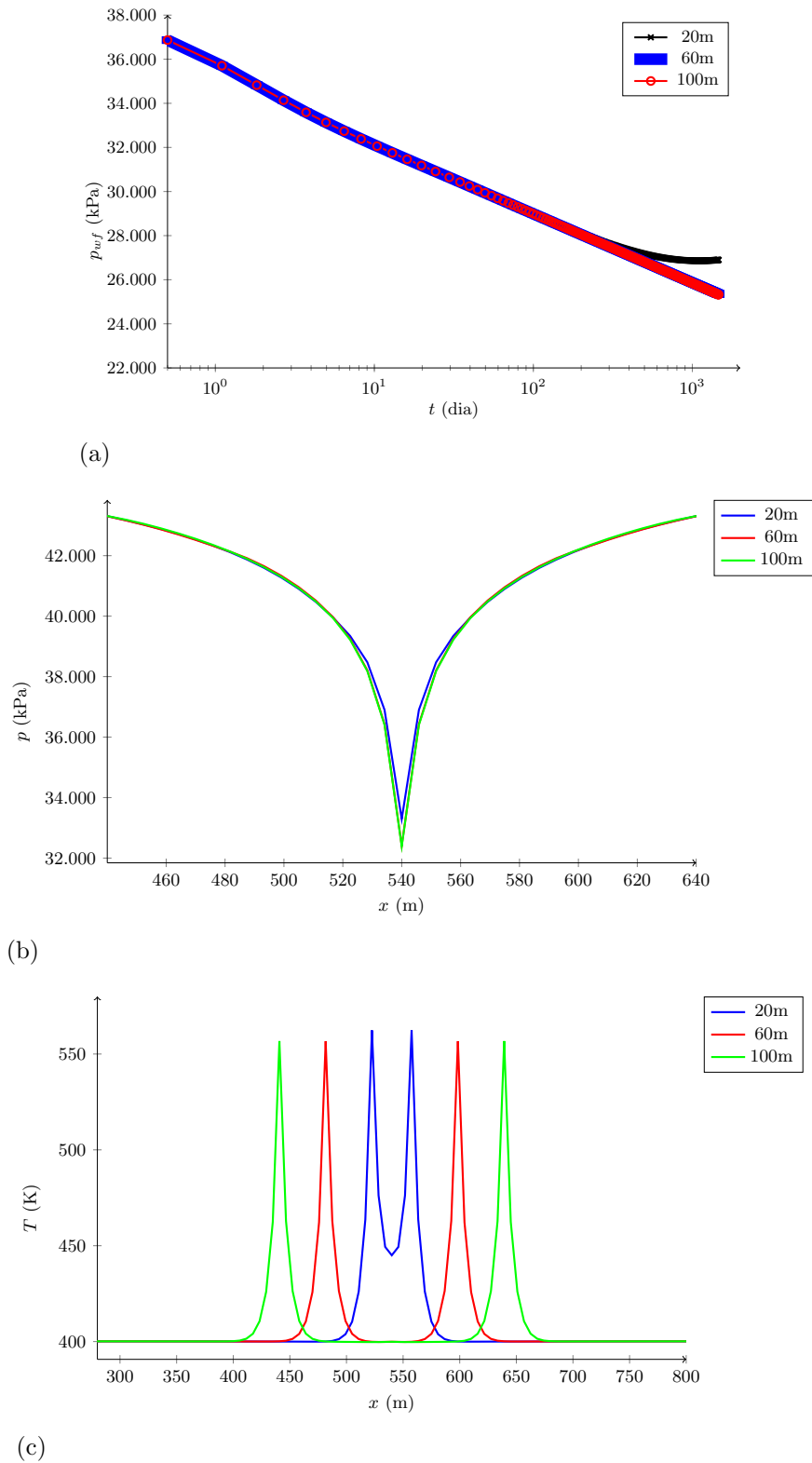


(c)

Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço, (b) pressão no reservatório e (c) temperatura no reservatório.

Fonte: O autor, 2023.

Figura 22 - Resultados para diferentes valores de  $h_{pos}$

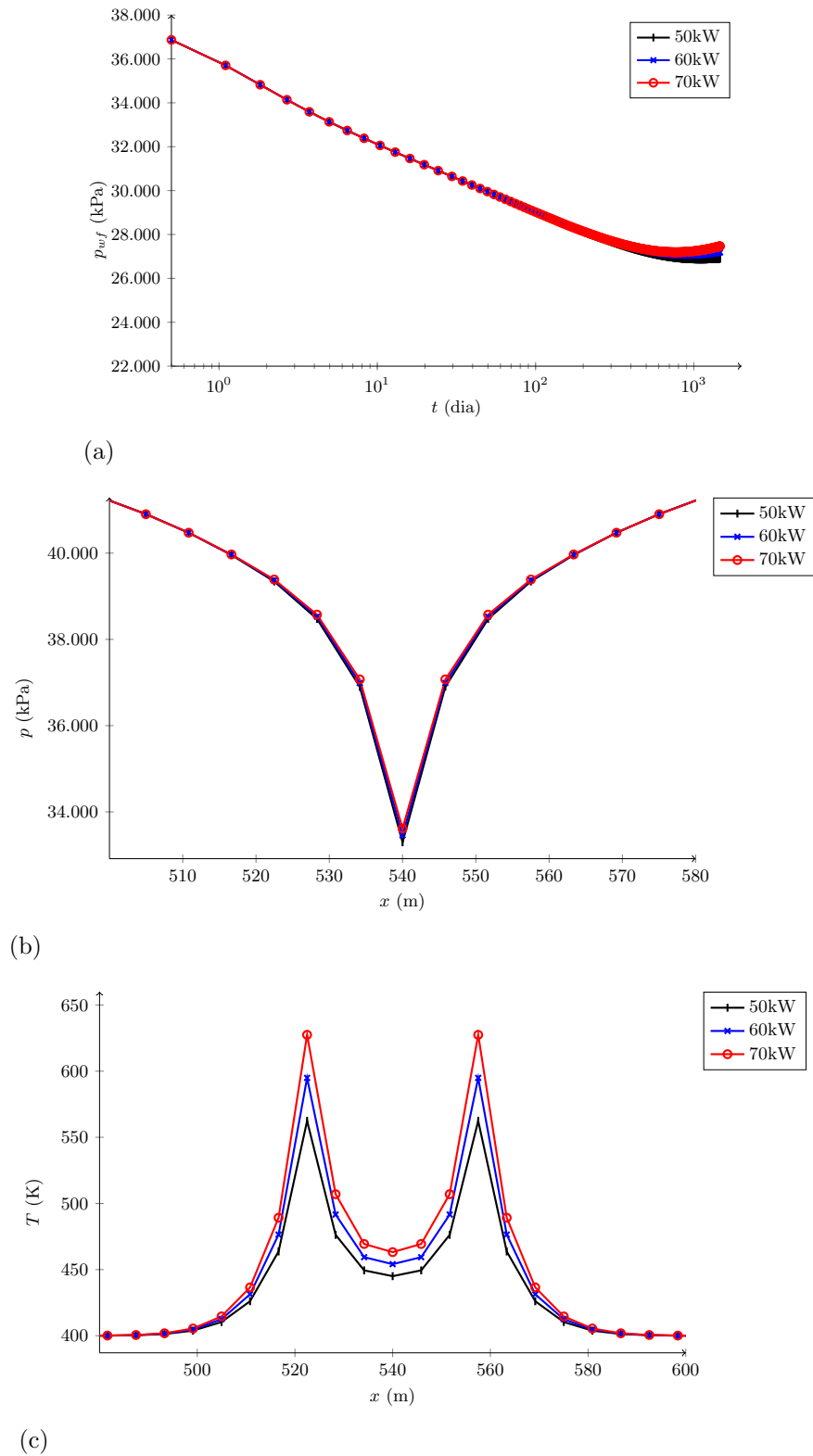


Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço, (b) pressão no reservatório e (c) temperatura no reservatório.

Fonte: O autor, 2023.



Figura 23 - Resultados para diferentes valores de  $q_H$

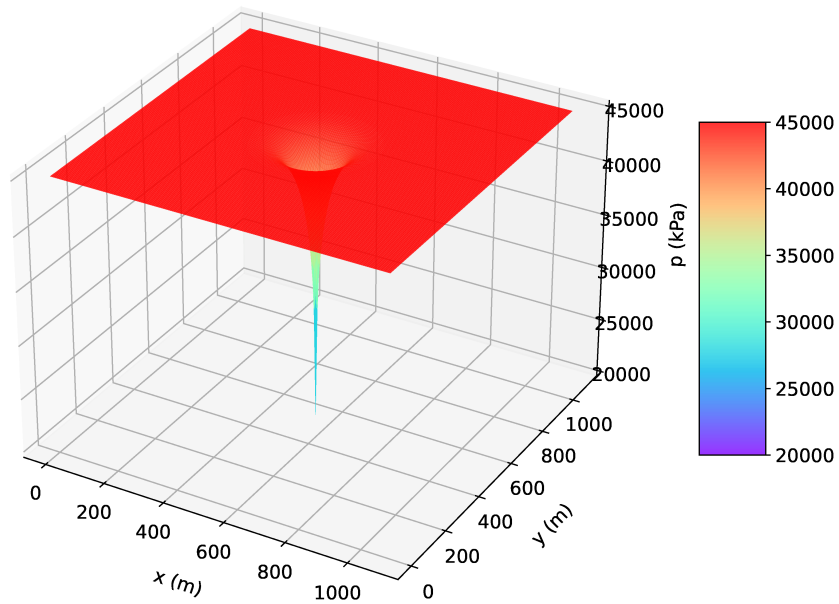


Legenda: Campos de pressão e temperatura: (a) pressão no poço, (b) pressão no reservatório e (c) temperatura no reservatório.

Fonte: O autor, 2023.

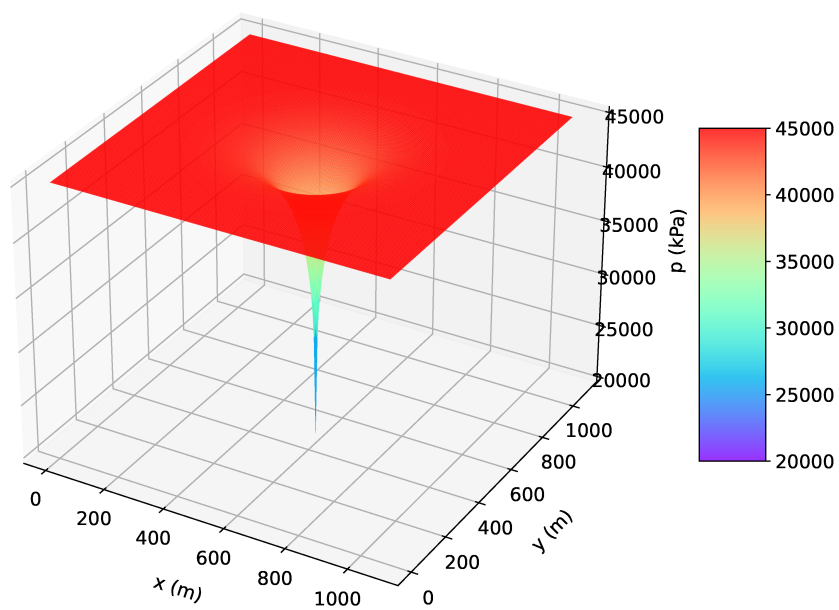
As Figuras 24 até a 31 ilustram o comportamento da pressão e da temperatura em duas dimensões.

Figura 24 - Distribuição espacial da pressão em  $t = 365$  dias

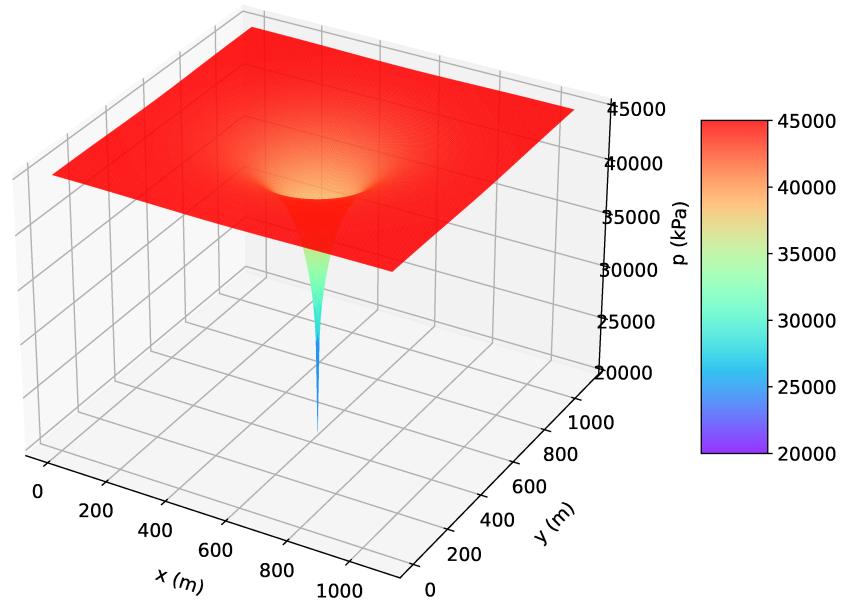


Fonte: O autor, 2023.

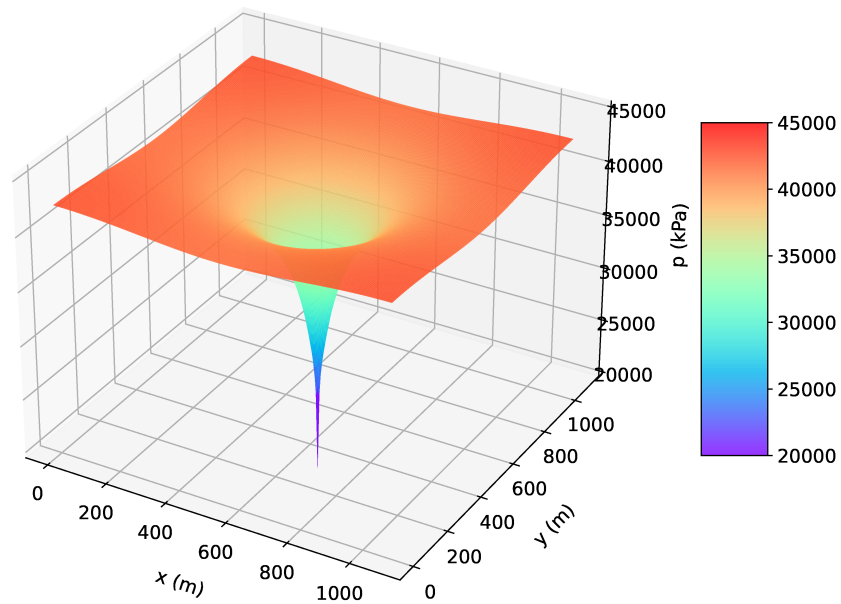
Figura 25 - Distribuição espacial da pressão em  $t = 1.461$  dias



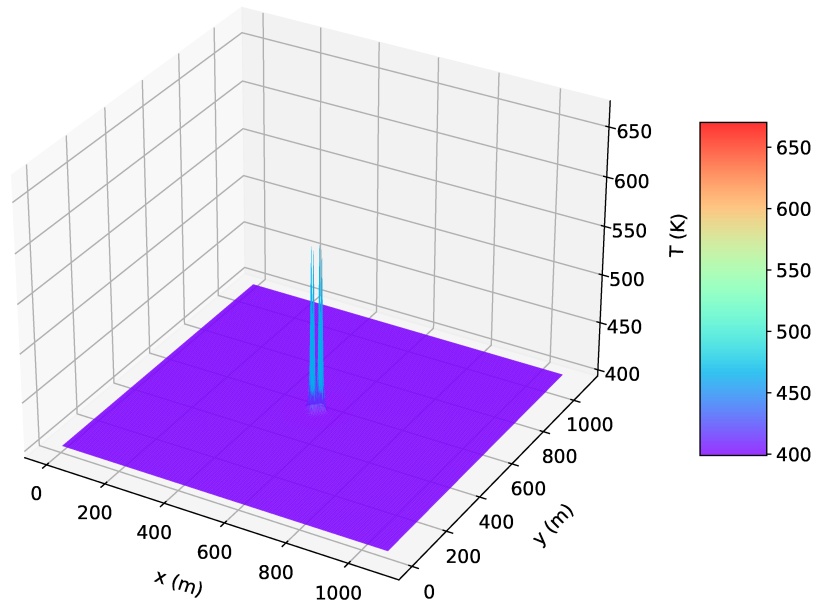
Fonte: O autor, 2023.

Figura 26 - Distribuição espacial da pressão em  $t = 2.922$  dias

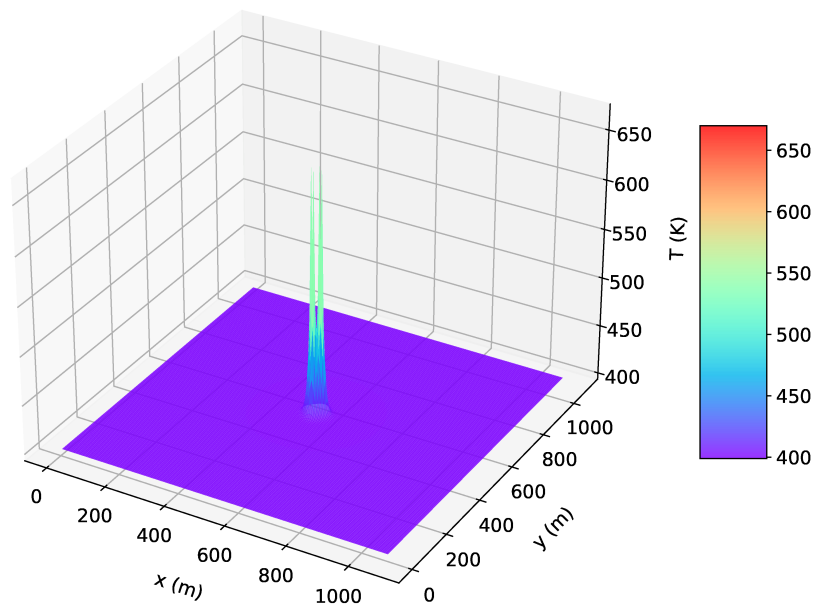
Fonte: O autor, 2023.

Figura 27 - Distribuição espacial da pressão em  $t = 14.610$  dias

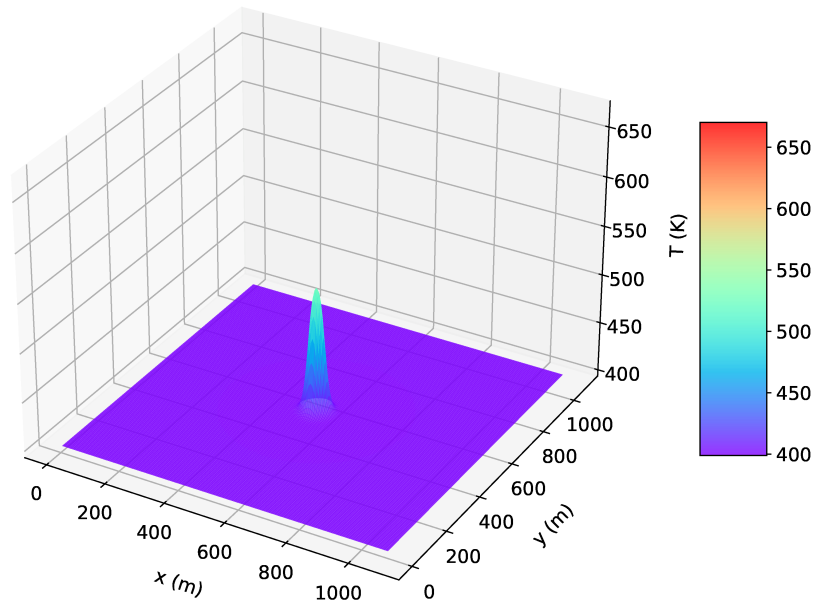
Fonte: O autor, 2023.

Figura 28 - Distribuição espacial da temperatura em  $t = 365$  dias

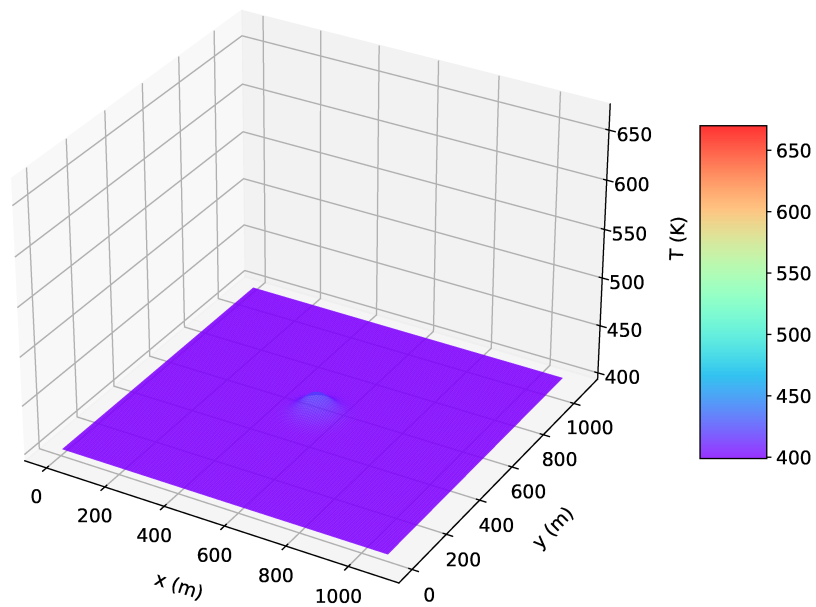
Fonte: O autor, 2023.

Figura 29 - Distribuição espacial da temperatura em  $t = 1.461$  dias

Fonte: O autor, 2023.

Figura 30 - Distribuição espacial da temperatura em  $t = 2.922$  dias

Fonte: O autor, 2023.

Figura 31 - Distribuição espacial da temperatura em  $t = 14.610$  dias

Fonte: O autor, 2023.

### 3.3 Desempenho do método de recuperação aprimorada

Concluindo as simulações, nesta seção analisa-se a performance do uso de aquecedores estáticos considerando alguns cenários de produção do *shale gas*. Para tanto, foi mantida fixa a pressão no poço produtor em  $p_{wf} = 300$  kPa (simulando uma limitação operacional) e usou-se a relação de Peaceman (1978) para o cálculo da vazão e da produção, a cada instante de tempo, ou seja,  $q_{sc} = J_w (\bar{p} - p_{wf})$ .

Em todos os cenários, adotou-se como limite máximo permitido para a temperatura média, de uma célula, o valor de 680 K. Entende-se que para valores superiores poderia haver a combustão do gás (Chapiro; Bruining, 2015). Uma vez atingido esse valor limite, os aquecedores são desligados. Nos casos simulados, Figura 32a, após o desligamento dos aquecedores e uma vez que a temperatura máxima diminua até atingir 670 K, eles são acionados novamente, repetindo-se, assim, o processo de aquecimento de forma cíclica. Uma abordagem de prescrever a temperatura na célula do aquecedor não seria uma boa abordagem, pois não seria realista do ponto de vista físico, devido à geometria do modelo e da falta de um modelo de acoplamento aquecedor-reservatório.

A Figura 32a mostra os resultados com os aquecedores posicionados a 20 m do poço produtor e avalia-se o efeito na produção de gás quando do uso de 4 ou 8 aquecedores e, também, sem nenhum aquecimento. Ao se comparar as diferentes configurações de produção, para prazos mais longos, observa-se que o aumento do número de aquecedores estáticos leva a uma significativa atenuação do declínio na vazão, chegando, em alguns casos, a revertê-lo. Esse comportamento está diretamente relacionado ao aumento da permeabilidade absoluta na região aquecida e à dessorção do gás, impulsionada pelo aumento da temperatura.

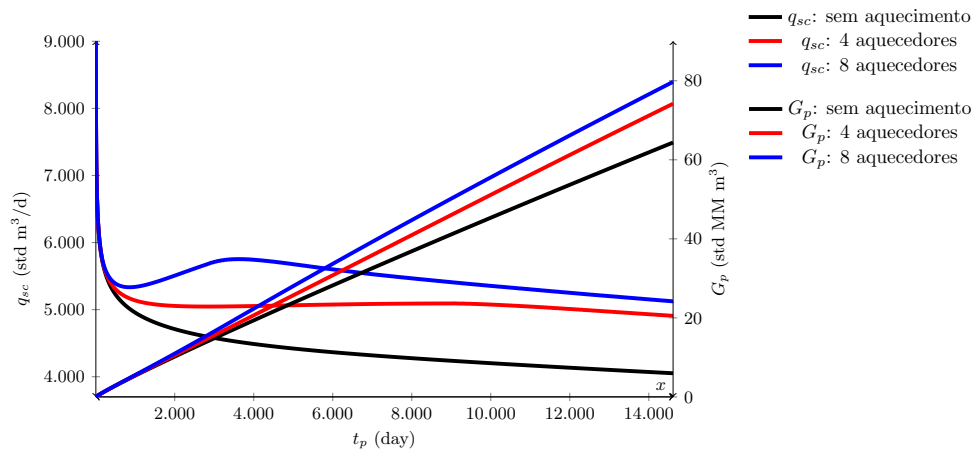
A análise de longo prazo revela um impacto considerável no aumento da produção acumulada de gás de folhelho devido ao aquecimento da jazida, conforme ilustrado na Figura 32a. A curva de produção acumulada mostra ganhos substanciais com o aumento do número de aquecedores estáticos, sendo que os valores quantitativos mostrados na Tabela 8. A recuperação usando 4 e 8 aquecedores superam substancialmente a produção não empregando o método de recuperação térmica. Destaca-se, também, o efeito positivo do aumento da temperatura na produção de gás de folhelho.

Tabela 8 - Aumento de produção variando número de aquecedores

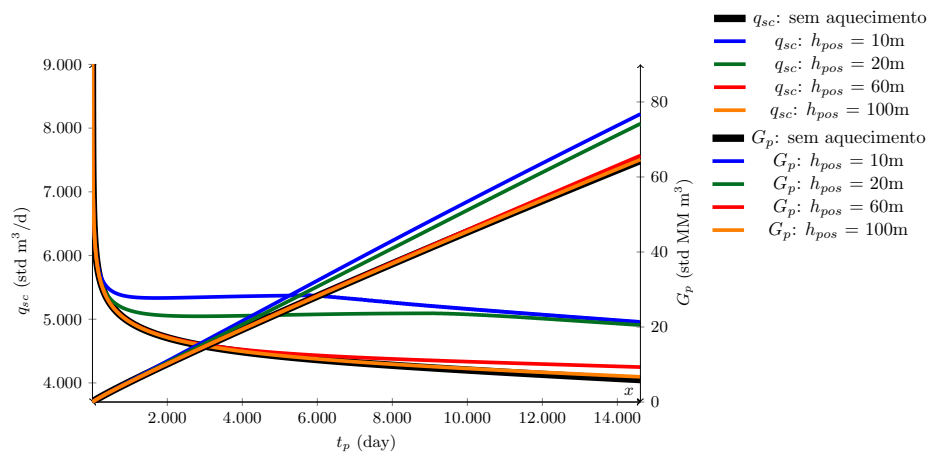
Caso	$G_p$ (std MM m <sup>3</sup> )	Aumento na produção
Sem aquecimento	64,38	0%
4 aquecedores	74,19	15%
8 aquecedores	79,73	24%

Fonte: O autor, 2023.

Figura 32 - Produção acumulada e taxa de produção



(a)



(b)

Legenda: (a) variação do número de aquecedores e (b) proximidade dos aquecedores.

Fonte: O autor, 2023.

Embora o efeito de escorregamento tenha sido atenuado em função da adoção do modelo proposto por Florence et al. (2007), os resultados indicam que os ganhos relacionados ao aumento da temperatura suplantam qualquer redução, resultando em um aumento geral na produção do *shale gas*. Porém, pode-se perceber da curva de produção acumulada,  $G_p$ , que pode se levar um tempo significativo para se ter algum ganho real associado ao uso do método de recuperação, visto que as curvas começam a se separar após transcorridos mais de 2.000 dias de produção.

Por sua vez, os resultados contidos na Figura 32b mostram que há uma vantagem em se posicionar os aquecedores o mais próximo possível do poço produtor. Como já era possível antecipar, para as maiores distâncias, o efeito do aquecimento térmico passa a ser desprezível.

Atentando-se para os resultados contidos nas Figuras 33a, 33b, 34a e 34b, compreende-se melhor a importância dos aquecedores na variação dos valores das permeabilidades absoluta e aparente. Enquanto o aumento da temperatura se traduz no da permeabilidade absoluta (Chapiro; Bruining, 2015), o mesmo é responsável pela diminuição do  $K_n$  e, por consequência, da permeabilidade aparente, quando o efeito de escorregamento é levado em conta (Florence et al., 2007). Por outro lado, a diminuição da pressão acarreta o aumento do  $K_n$  e quando os aquecedores estão próximos o suficiente do poço produtor, o seu valor não é impactado significativamente, como pode ser atestado na Figura 34b.

Passando-se agora para um outro cenário, cujos resultados são mostrados na Figura 35a, onde SD significa *shut down*, estuda-se o efeito do não religamento dos aquecedores uma vez atingida a temperatura limite estipulada de 680 K. Nota-se, momentos após o desligamento, que a curva da taxa de produção se “descola” de forma abrupta, revelando uma situação que caracteriza um aumento na produção a partir desse instante.

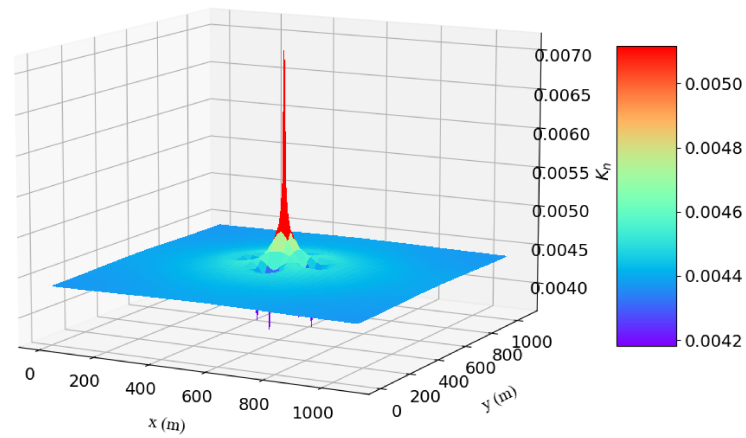
Esse ganho na taxa de produção pode ser explicado pela combinação da diminuição da pressão e da temperatura ao longo do tempo, uma vez que a redução da pressão favorece o escorregamento do gás que, por sua vez, é atenuado pelo acréscimo da temperatura. Conforme mostrado na Figura 35b, para uma taxa de aquecimento de 50 kW, com quatro aquecedores a 20 m do poço produtor, o desligamento ocorreu somente após decorridos 9.039 dias de operação, ocasionando uma injeção total de energia total de 43,39 GWh no reservatório, enquanto que a uma taxa de 80 kW de aquecimento ela foi de 7,86 GWh e em apenas 1.024 dias de produção.

Além disso, considerando-se o saldo da diferença entre os cenários com e sem aquecimento, é preciso contabilizar se houve ganhos com o uso do método de recuperação. Sendo assim, tendo em vista que 1 m<sup>3</sup> de gás natural equivale a 36.303 BTU (*British Thermal Unit*), calculou-se os saldos, convertidos em energia medida em MMBTU (10<sup>6</sup> BTU), e os resultados são apresentados nas Figuras 36a e 36b. Foi considerada uma eficiência de 70% na operação de injeção de energia térmica.

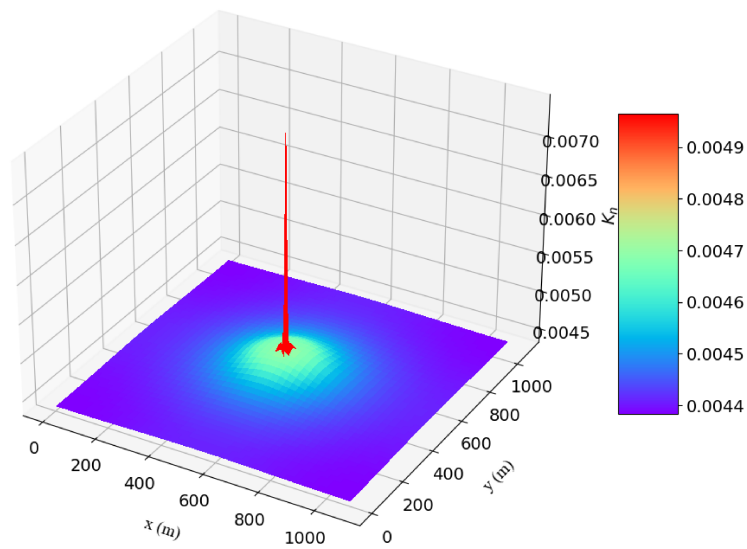
A curva para 100 kW mostrou que um ajuste é essencial para a escolha da taxa de injeção de energia no sistema, visto que ela se mostrou, de longe, o pior caso, apesar de se ter aumentado a taxa de aquecimento. No mais, analisando as Figuras 36a e 36b, verifica-se que a partir de aproximadamente 1.900 dias (mais de 5 anos), no cenário de aquecimento a 80 kW, passou-se a se ter um saldo positivo de energia. Esse aumento se estendeu ao longo dos 40 anos de operação, resultando em ganhos superiores a 30% ao final desse período. Em contraste, os demais cenários não apresentaram a mesma vantagem. A análise revelou que a utilização do método de injeção de energia térmica, com aquecimento de 80 kW até atingir a temperatura alvo, se mostrou a mais favorável em comparação às outras configurações avaliadas.



Figura 33 - Valores do número de Knudsen



(a)

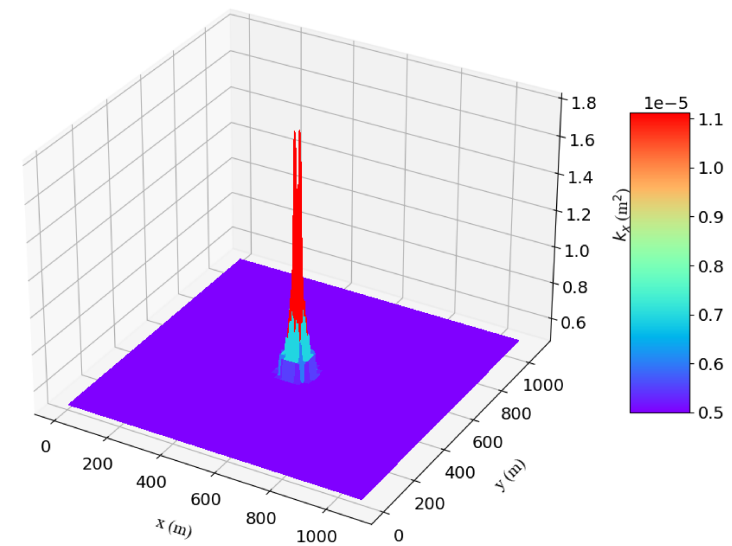
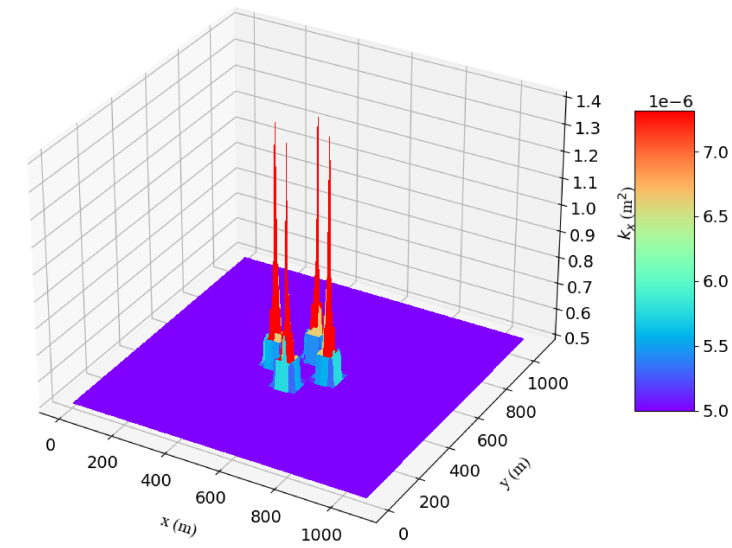


(b)

Legenda: Posicionamento dos poços aquecedores: (a) a 100 m do poço produtor e (b) a 10 m do poço produtor.

Fonte: O autor, 2023.

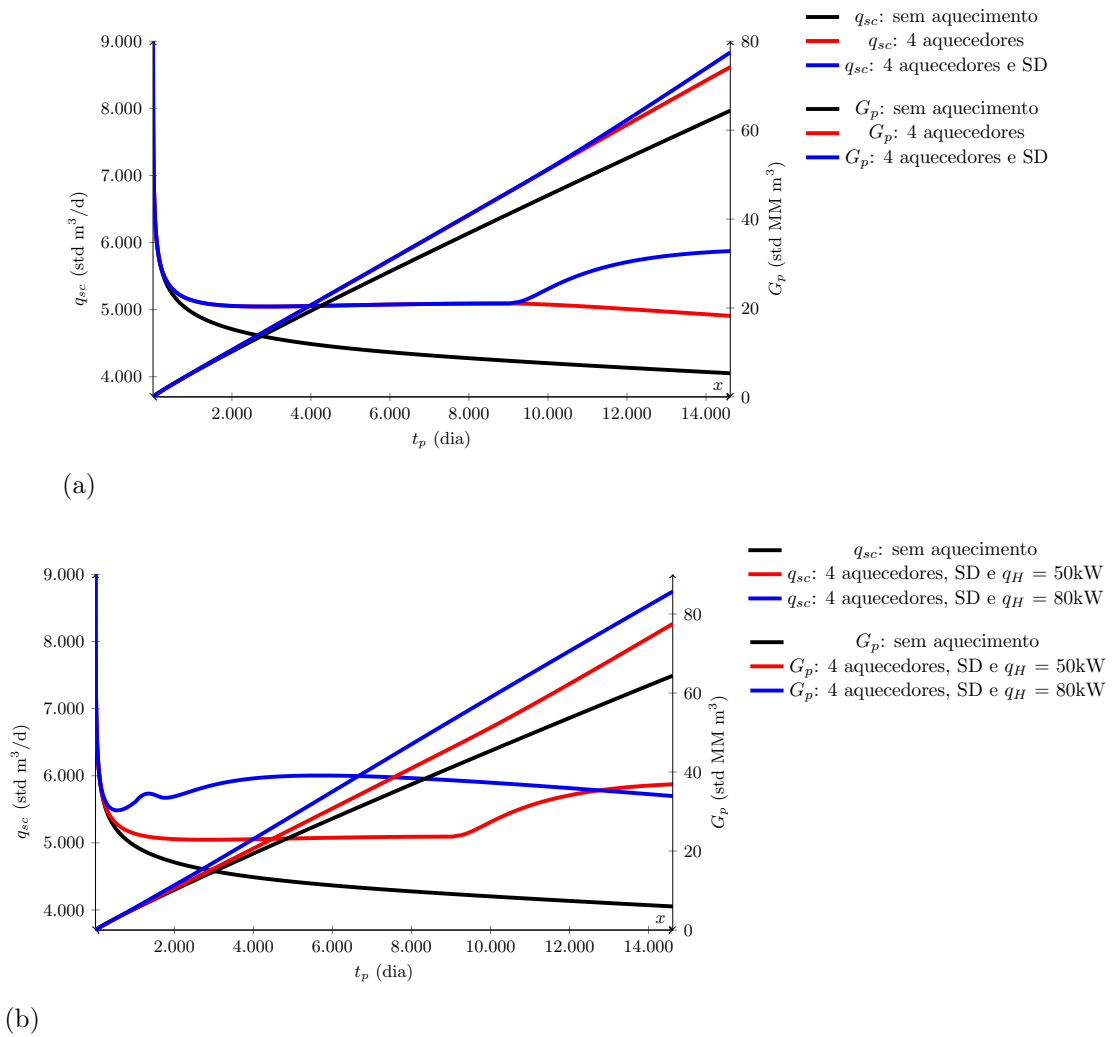
Figura 34 - Valores da permeabilidade absoluta



Legenda: Posicionamento dos poços aquecedores: (a) a 100 m do poço produtor e (b) a 10 m do poço produtor.

Fonte: O autor, 2023.

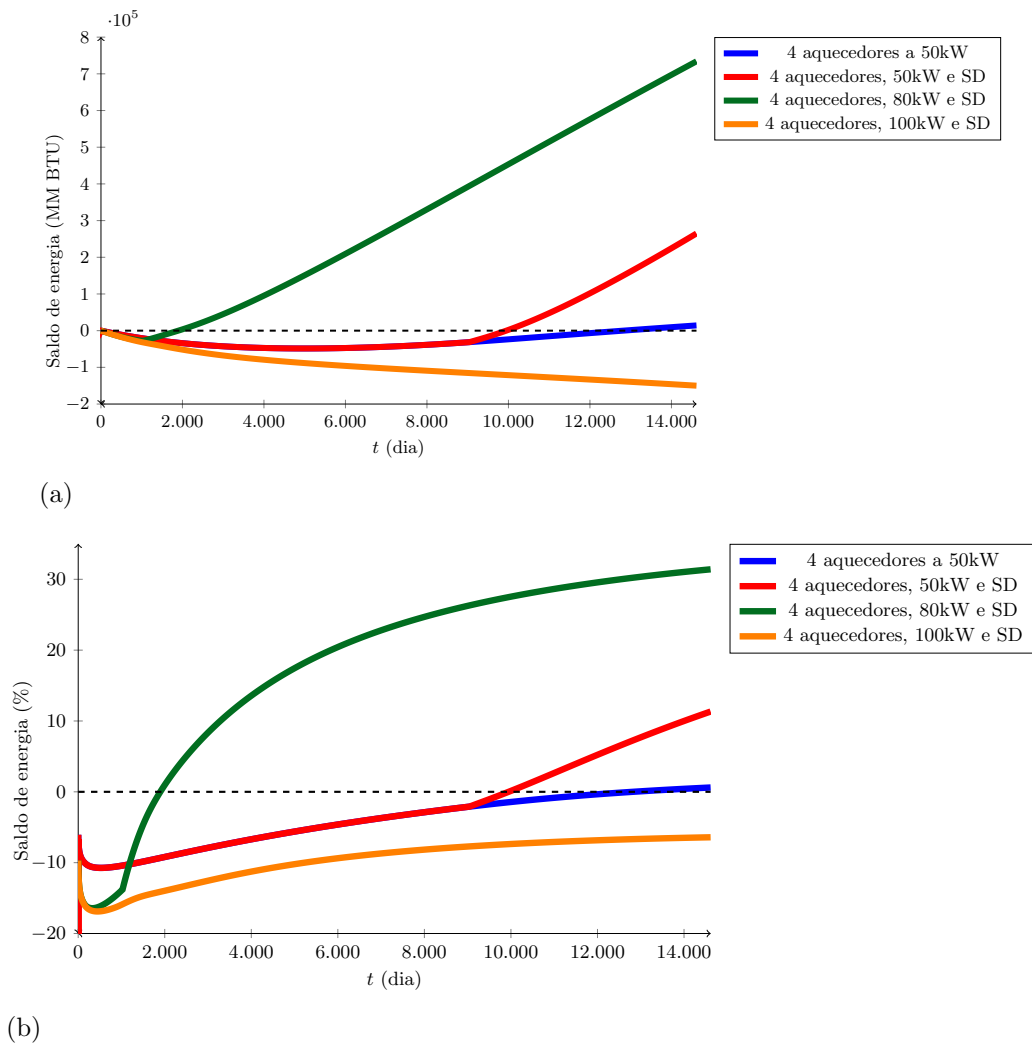
Figura 35 - Produção acumulada e taxa de produção



Legenda: (a) aquecimento contínuo e (b) aquecedores desligados.

Fonte: O autor, 2023.

Figura 36 - Saldo de energia



Legenda: (a) medido em BTU e (b) medido em percentual.

Fonte: O autor, 2023.

## CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste trabalho, desenvolveu-se um simulador numérico voltado para o estudo da produção de *shale gas*, contemplando a aplicação de um método térmico de recuperação, a partir de simuladores anteriores (Lopes, 2016; Pessanha et al., 2020; Lima, 2021). Implementou-se modelos recentes (Florence et al., 2007; Chapiro; Bruining, 2015; Xue et al., 2019) para estudar sua combinação de efeitos e, então, foi feita a validação do código desenvolvido e, então, uma investigação do desempenho da técnica de recuperação no que diz respeito ao aumento da produção sob diversos cenários. Na sequência, apresenta-se as principais conclusões e as perspectivas futuras.

### Conclusões

A crescente importância das simulações numéricas na indústria de óleo & gás, especialmente aquelas voltadas para as fontes não-convencionais de gás natural, um combustível de transição fundamental em um cenário de crescente demanda energética, justificou a realização deste estudo. O entendimento da dinâmica do escoamento não-isotérmico de *shale gas* contribuiu para a aquisição de uma compreensão mais ampla, em um contexto englobando o aproveitamento das reservas de hidrocarbonetos. Portanto, baseando-se nos resultados atingidos neste trabalho, são feitas algumas considerações finais.

### Validação do simulador

A validação do simulador desempenhou um papel relevante na avaliação da confiabilidade e acurácia dos resultados numéricos. O processo foi realizado considerando as três seguintes abordagens:

1. Comparação entre as soluções analíticas e numéricas para alguns problemas simplificados;
2. Convergência numérica; e
3. Testes de sensibilidade dos resultados em função da variação de alguns parâmetros físicos.

## Comparação com as soluções analíticas

Através da comparação dos resultados com as soluções analíticas conhecidas, os valores aproximados apresentaram uma boa concordância com os seus correspondentes teóricos. Portanto, constatou-se que para os casos tratados a abordagem adotada foi validada.

Em se tratando da pressão, a validação foi realizada a partir da solução analítica de um problema de difusão transiente. Por outro lado, no caso da temperatura média, utilizou-se a solução teórica de um problema adimensional de advecção-difusão em regime transiente.

## Refinamento de malha

Os testes de refinamento de malha mostraram que, à medida que as malhas foram refinadas, as diferenças entre os resultados diminuíram significativamente e indicaram que eles estavam convergindo para a única solução do problema. Tal fato é uma indicação de que o método numérico é capaz de fornecer resultados acurados quanto mais refinada for a malha usada.

## Testes de sensibilidade dos parâmetros físicos

No que diz respeito à análise do comportamento dos campos de pressão e temperatura, quando do testes de sensibilidade, pôde-se estabelecer que:

1. A permeabilidade do reservatório exerce uma influência substancial na pressão de fundo de poço e nos perfis de temperatura. Aumentos na permeabilidade resultaram na manutenção da pressão e num maior aquecimento do reservatório, o que pode ser explorado visando à otimização da produção de *shale gas*.
2. A densidade do gás natural mostrou ter um impacto nos valores da pressão de fundo de poço e, conseqüentemente, na produção. O seu aumento levou a quedas mais acentuadas da pressão.
3. A porosidade do reservatório afetou significativamente os perfis de pressão e temperatura. Maiores valores da porosidade provocaram quedas de pressão mais suaves e temperaturas mais elevadas.
4. A redução da condutividade térmica da rocha acarretou em temperaturas mais altas nas regiões próximas aos aquecedores, em função do menor transporte de energia

para uma região mais ampla da jazida.

5. A condutividade térmica do gás teve um efeito limitado nas mudanças nos perfis de temperatura, devido às baixas 1) porosidade (levando a um menor volume de fluido) e 2) condutividade térmica do gás natural, fatores que levam a um menor peso da condutividade térmica na condutividade efetiva.
6. O tempo de simulação resultou em variações significativas da pressão de fundo de poço e dos perfis de temperatura. O seu aumento provocou quedas acentuadas na pressão e no aumento da temperatura, enfatizando a importância do monitoramento e controle nas operações de longo prazo.
7. O valor da vazão no poço produtor mostrou-se, como esperado, essencial na definição da estratégia de produção. O seu gerenciamento adequado pode ser valioso para se prolongar a vida útil do reservatório.
8. A posição dos aquecedores na jazida influenciaram sobremaneira nos resultados, acentuando o aumento de temperatura, na região de convergência das linhas de corrente em direção ao poço, assim como na manutenção da pressão ao redor dele.
9. A taxa de aquecimento dos aquecedores estáticos teve um impacto notável na mudança de temperatura no reservatório, com as maiores taxas de aquecimento resultando em temperaturas mais elevadas nas proximidades dos aquecedores. Esse efeito é consistente com as expectativas físicas e destaca a importância do controle da taxa de aquecimento.

O simulador, uma vez verificado, se tornou uma ferramenta capaz de auxiliar no estudo do desempenho da melhoria da recuperação do *shale gas* via o método de recuperação térmica.

#### Desempenho da melhoria da recuperação de *shale gas*

Os resultados indicaram que o aumento da temperatura da jazida, como forma de estímulo à região próxima do poço, aumentando a permeabilidade absoluta na área aquecida, pode beneficiar a produção de gás de folhelho a longo prazo, especialmente quando os aquecedores encontram-se próximos do poço produtor. A taxa de aquecimento também afeta sensivelmente a eficiência do processo de recuperação, a tal ponto que a simulação de diversos cenários de produção torna-se fundamental para se obter ganhos reais. No entanto, é crucial considerar que as possíveis melhorias substanciais, oriundas do método de recuperação, podem levar anos até que sejam percebidas. Além disso, a viabilidade econômica dos projetos de aquecimento de jazidas de *shale gas* requer uma

análise detalhada que leve em conta múltiplos fatores, incluindo os custos operacionais e de instalação. Essa análise é fundamental para embasar as decisões na indústria de produção de *shale gas*.

## Perspectivas Futuras

Após finalizadas as fases de modelagem, codificação, análise e discussão, diversas oportunidades e novos caminhos se delineiam para a realização de investigações futuras. Portanto, algumas perspectivas voltadas para o aprimoramento do modelo desenvolvido incluem:

1. Utilizar um *Transient Well Index* (TWI) (Rosário et al., 2016), ou seja, um modelo de acoplamento poço-reservatório com um índice de produtividade que considera efeitos transientes e reduz (ou mesmo elimina) o artefato numérico nos estágios iniciais das simulações (Peaceman, 1983).
2. Simular o escoamento do *shale gas* na presença da injeção de CO<sub>2</sub>, seja como um método de recuperação melhorada ou visando ao sequestro de gás carbônico em folhelhos depletados (Singh; Goerke; Kolditz, 2011; Singh et al., 2011).
3. Expandir o estudo de modo a contemplar os escoamentos bifásicos, trifásicos e/ou miscíveis em folhelhos.
4. Implementar modelos que possibilitem a inclusão de fraturas naturais e/ou hidráulicas, assim como poços produtores/injetores horizontais (Souza; Freitas; Souto, 2015).
5. Utilizar malhas não-estruturadas a fim de se considerar geometrias mais realísticas para os reservatórios, viabilizando uma comparação entre os casos simulados e aqueles provenientes de *benchmarks*, disponíveis na literatura.
6. Considerar a possibilidade do emprego de um modelo de duas equações para a transferência de calor, permitindo que sejam determinadas as temperaturas da rocha e do fluido separadamente (Heringer, 2018).
7. Considerar e contabilizar o trabalho resultante da expansão do fluido no balanço de energia (Singh et al., 2011; Onur; Çinar, 2016).

Do ponto de vista do desenvolvimento do simulador:

1. Usar as tecnologias disponíveis para permitir a criação de versões do código destinadas ao processamento em paralelo, utilizando o OpenMP, o OpenACC e a CUDA, dentre outras (Dutra et al., 2021; Almeida et al., 2021; Souza, 2023).



2. Aprimorar a interface e produzir um aplicativo multiplataforma visando a facilitar o uso do simulador.
3. Implementar ferramentas de pós-processamento.

Do aprimoramento do modelo matemático, destacam-se os itens 1, 3, 6 e 7 como potenciais linhas de pesquisa que podem servir como base para futuros trabalhos de doutorado. Quanto ao desenvolvimento do simulador, o item 1 emerge como uma possibilidade de pesquisa original com potencial para se tornar uma tese de doutorado.

## REFERÊNCIAS

- ADEWALE, K. L.; JAMES, O. Specific heat capacity of natural gas; expressed as a function of its specific gravity and temperature. In: SPE. *SPE Nigeria Annual International Conference and Exhibition*. [S.l.], 2011. p. SPE–150808.
- ADMINISTRATION, U. Energy Information. *Annual Energy Outlook 2020*. [S.l.], 2020.
- ADMINISTRATION, U. Energy Information. *Natural Gas*. [S.l.], 2021.
- AHMED, T. *Reservoir engineering handbook*. [S.l.]: Gulf professional publishing, 2018.
- ALMEIDA, R. A. B. S. et al. Solução numérica do escoamento não-isotérmico em reservatórios de óleo pesado empregando computação paralela. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2021.
- AMINZADEH, F. Hydraulic fracturing, an overview. *Journal of Sustainable Energy Engineering*, Sciendo, v. 6, n. 3, p. 204–228, 2018.
- AZIZ, M.; SETTARI, A. *Petroleum Reservoir Simulation*. New York, USA: Elsevier Applied Science, 1979.
- BERGMAN, T. L. et al. *Fundamentals of heat and mass transfer*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011.
- BRANCO, P. M. *Gás do "Xisto"*. 2014. Disponível em: <https://www.sgb.gov.br/publique/SGB-Divulga/Canal-Escola/Gas-do-Xisto-2618.html>. Acesso em: 11 mar. 2023.
- BROWN, G. G. et al. *Natural Gasoline and the Volatile Hydrocarbons*. Tulsa, Oklahoma, USA: Natural Gas Association of America, 1948.
- CARVALHO, L. T. M. et al. Uma implementação paralelizada via a API OpenMP para a simulação numérica de reservatórios de gás natural. *Revista Brasileira de Computação Aplicada*, v. 12, p. 103–121, 2020.
- CENGEL, Y. A.; BOLES, M. A.; KANOĞLU, M. *Thermodynamics: an engineering approach*. [S.l.]: McGraw-hill New York, 2011. v. 5.
- CHAPIRO, G.; BRUINING, J. Combustion enhance recovery of shale gas. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 127, p. 179–189, 2015.
- CIVAN, F. Effective correlation of apparent gas permeability in tight porous media. *Transport in porous media*, Springer, v. 82, p. 375–384, 2010.
- CIVAN, F.; RAI, C. S.; SONDERGELD, C. H. Shale-gas permeability and diffusivity inferred by improved formulation of relevant retention and transport mechanisms. *Transport in porous media*, Springer, v. 86, p. 925–944, 2011.

- Computer Modelling Group. *IMEX, Advanced Oil/Gas Reservoir Simulator*. [S.l.], 2009.
- CUNHA, M. C. *Métodos numéricos*. [S.l.]: Editora da UNICAMP, 2000.
- DARCY, H. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon. Exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau*. [S.l.]: Victor Dalmont, 1856.
- DUTRA, B. L. et al. *Simulação numérica do escoamento em reserva reservatórios do tipo shale gas utilizando o OpenMP*. [S.l.], 2021.
- EPA, U. E. P. A. *Natural Gas*. 2021. Disponível em: <https://www.epa.gov/energy/natural-gas>. Acesso em: 19 ago. 2023.
- ERTEKIN, T.; ABOU-KASSEM, J. H.; KING, G. R. *Basic Applied Reservoir Simulation*. Richardson, USA: Society of Petroleum Engineers, 2001.
- EUZEN, T. Shale gas—an overview. *Ifp Technologies Canada Inc., Calgary. Technical Report*, 2011.
- EZEKWE, N. *Petroleum Reservoir Engineering Practice*. Westford, USA: Prentice Hall, 2010.
- FLORENCE, F. A. et al. Improved permeability prediction relations for low permeability sands. In: *Society of Petroleum Engineers Rock Mountain Oil & Gas Technology Symposium*. Denver, Colorado, USA: [s.n.], 2007.
- HADAMARD, J. Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique. *Princeton university bulletin*, p. 49–52, 1902.
- HARVEY, A. H.; ARNOLD, M.; EL-FEKY, S. A. Selective electric reservoir heating. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, OnePetro, v. 18, n. 03, 1979.
- HERINGER, J. D. S. *Simulação numérica de escoamento tridimensional não-isotérmico em reservatórios de petróleo*. Dissertação (Mestrado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2018.
- HOLDITCH, S. A. Shale gas - the next energy revolution. *Journal of Petroleum Technology*, v. 59, n. 6, p. 34–37, 2007.
- INCROPERA, F. P. et al. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. Philadelphia, USA: Society of Industrial and Applied Mathematics, 2006.
- ISO-13443. 13443-2007. *Natural gas-Standard reference conditions*. SAI Global, 2007.
- INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. *Natural Gas 2019*. 2019.
- JAHN, F.; COOK, M.; GRAHAM, M. *Hydrocarbon exploration and production*. [S.l.]: Elsevier, 2008.
- JAMALUDDIN, A. K. M. et al. Application of heat treatment to enhance permeability in tight gas reservoirs. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, PETSOC, v. 39, n. 11, 2000.

- KING, G. E. et al. Advances in reservoir simulation for tight oil and shale gas reservoirs. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 29, p. 11–21, 2016.
- KLINKENBERG, L. J. The permeability of porous media to liquids and gases. *Drilling and Production Practice, American Petroleum Inst.*, p. 200–213, 1941.
- LAKE, W. L. *Enhanced Oil Recovery*. Englewood Cliffs, USA: Prentice-Hall, 1989.
- LEE, A. L.; GONZALEZ, M. H.; EAKIN, B. E. The viscosity of natural gas. *Trans. AIME*, v. 237, p. 997–1000, 1966.
- LEE, J.; WATTENBARGER, R. A. *Gas Reservoir Engineering*. Richardson, USA: Society of Petroleum Engineers, 1996. v. 5.
- LEVEQUE, R. J. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. United Kingdom: Cambridge University Press, 2002.
- LI, D. et al. Effect of adsorption and permeability correction on transient pressures in organic rich gas reservoirs: Vertical and hydraulically fractured horizontal wells. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, Elsevier, v. 31, p. 214–225, 2016.
- LI, M. et al. In-situ combustion for gas recovery in shale gas reservoirs: A numerical study. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 59, p. 186–195, 2018.
- LIMA, L. B. *Simulação numérica de escoamento não-isotérmico em reservatórios de gás natural incorporando efeito de escorregamento*. [S.l.], 2021.
- LIU, H. et al. Combustion enhanced recovery of shale gas. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 187, p. 106994, 2020.
- LIU, J. et al. Numerical investigation on microwave-thermal recovery of shale gas based on a fully coupled electromagnetic, heat transfer, and multiphase flow model. *Energy*, Elsevier, v. 263, p. 126090, 2023.
- LOPES, R. B. *Simulação numérica de escoamento não-isotérmico em reservatórios de óleo*. [S.l.], 2016.
- LU, M. et al. A coupled, non-isothermal gas shale flow model: Application to evaluation of gas-in-place in shale with core samples. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 158, p. 361–379, 2017.
- MORAN, M. J. et al. *Fundamentals of engineering thermodynamics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2010.
- MOYNE, C. et al. Thermal dispersion in porous media: one-equation model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 43, n. 20, p. 3853–3867, 2000.
- ONUR, M.; ÇINAR, M. Temperature transient analysis of slightly compressible, single-phase reservoirs. In: SPE-180074-MS. *SPE Europec featured at EAGE Conference and Exhibition*. [S.l.], 2016.
- PEACEMAN, D. W. Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation. *Society of Petroleum Engineers Journal*, v. 18, n. 3, p. 183–194, 1978.

PEACEMAN, D. W. Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability. *Society of Petroleum Engineers Journal*, v. 23, n. 3, p. 531–543, 1983.

PESSANHA, M. L. O. *Estudo comparativo de modelos não-Darcy para shale gas*. [S.l.], 2018.

PESSANHA, M. L. O. et al. Comparative study and sensitivity analysis in simulation of non-darcy flow in shale gas reservoirs. *International Journal of Advanced Engineering Research and Science*, v. 7, n. 11, p. 109–121, 2020.

PetroWiki. *Wellbore Flow Performance*. Disponível em: [https://petrowiki.spe.org/Wellbore\\_flow\\_performance](https://petrowiki.spe.org/Wellbore_flow_performance). Acesso em: 22 jun. 2023.

QUINTARD, M.; WHITAKER, S. Local thermal equilibrium for transient heat conduction: theory and comparison with numerical experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 38, n. 15, p. 2779–2796, 1995.

ROSA, A. J.; CARVALHO, R. S.; XAVIER, J. A. D. *Engenharia de Reservatórios de Petróleo*. Rio de Janeiro, Brasil: Interciência, 2006.

ROSÁRIO, R. C. D. et al. Simulação numérica de reservatórios de óleo incorporando efeitos transientes no índice de produtividade. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2016.

ROSS, D. J. et al. Recent developments in hydraulic fracturing and its application to shale gas. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 131, p. 2–13, 2015.

ROUSSET, M. *Reduced-order modeling for thermal simulation*. Dissertação (Mestrado) — University of Stanford, Stanford, USA, 2010.

RUPPEL, S. C. Shale gas: the promise and the challenges. *Environmental Science & Technology*, v. 46, n. 4, p. 1402–1409, 2012.

SAAD, Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. 2. ed. Philadelphia: SIAM, 2003.

SANDLER, S. I. *Chemical, biochemical, and engineering thermodynamics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2017.

SANJARI, E.; LAY, E. N. An accurate empirical correlation for predicting natural gas compressibility factors. *Journal of Natural Gas Chemistry*, Elsevier, v. 21, n. 2, p. 184–188, 2012.

SINGH, A. K. et al. Non-isothermal compositional gas flow during carbon dioxide storage and enhanced gas recovery. In: CIMNE. *COUPLED IV: proceedings of the IV International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering*. [S.l.], 2011. p. 206–217.

SINGH, A. K.; GOERKE, U. J.; KOLDITZ, O. Numerical simulation of non-isothermal compositional gas flow: application to carbon dioxide injection into gas reservoirs. *Energy*, v. 36, p. 3446–3458, 2011.

- SMITH, J. M. *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. [S.l.]: ACS Publications, 1950.
- SOUZA, G. *Acoplamento Poço-reservatório na Simulação Numérica de Reservatórios de Gás*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual do Norte Fluminense, Macaé, Brasil, 2013.
- SOUZA, G. *Acoplamento poço-reservatório na simulação numérica de reservatórios de gás*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual do Norte Fluminense, 2013.
- SOUZA, G.; FREITAS, M. M. de; SOUTO, H. P. A. Numerical simulation of non-darcy oil flow in naturally fractured reservoirs: Horizontal well. In: *23rd ABCM International Congress of Mechanical Engineering*. Rio de Janeiro: [s.n.], 2015.
- SOUZA, R. S. Um estudo de aplicação de CUDA na solução de sistemas de equações algébricas. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2023.
- STANDING, M. B.; KATZ, D. L. Density of natural gases. *Trans. AIME*, v. 146, p. 140–149, 1942.
- STRICKLAND, R.; PURVIS, D.; BLASINGAME, T. Practical aspects of reserve determinations for shale gas. In: SPE. *SPE Unconventional Resources Conference/Gas Technology Symposium*. [S.l.], 2011. p. SPE–144357.
- SUTTON, R. P. Compressibility factors for high-molecular-weight reservoir gases. In: SOCIETY OF PETROLEUM ENGINEERS. *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. [S.l.], 1985.
- TASKINSOY, J. Economic & ecological implications of hydraulic fracturing. *West East Journal of Social Sciences-April*, 2013.
- United Nations. *World Urbanization Prospects*. [S.l.], 2021.
- United Nations. *World Population Prospects 2022. Summary of Results*. [S.l.], 2022.
- Van der Waals, J. D. Over de continuïteit van de gas-en vloeistofoestand leiden. *University, The Netherlands*, 1873.
- VENNEMO, S. B. *Multiscale Simulation of Thermal Flow in Porous Media*. Dissertação (Mestrado) — Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway, 2016.
- WHITSON, C. H. et al. Shale reserve forecasting-model consistency and uncertainty. In: SPE. *SPE Europec featured at EAGE Conference and Exhibition*. [S.l.], 2016. p. SPE–180140.
- XUE, L. et al. Analysis of thermal stimulation to enhance shale gas recovery through a novel conceptual model. *Geofluids*, Hindawi, v. 2019, 2019.
- YUAN, J.-Y. et al. *Wet electric heating process*. [S.l.]: Google Patents, 2003. US Patent 6,631,761.
- ZHANG, C. et al. Investigation of k-t effect in shale matrix and fractures during thermal recovery of shale gas. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 185, p. 106618, 2020.

## APÊNDICE A – Determinação das propriedades físicas

São apresentados aqui os modelos físico-matemáticos que foram usados para calcular as propriedades físicas do gás natural, da formação de folhelho e demais fenômenos rocha-fluido que não foram citados anteriormente.

### A.1 Gás Natural

O petróleo bruto é constituído por fluidos que exibem uma ampla variedade de características e aparências, desde gases até líquidos de baixa viscosidade e aspecto transparente, assemelhando-se a combustíveis mais leves, até líquidos quase sólidos de coloração opaca e alta viscosidade. Em termos da composição média em percentagem dos elementos químicos, o carbono varia de 84% a 87%, o hidrogênio de 11% a 14%, e outros elementos normalmente compõem menos de 1% (Jahn; Cook; Graham, 2008). Essa notável diversidade nos hidrocarbonetos resulta da variabilidade na concatenação dos átomos de carbono, desde moléculas com apenas um átomo até cadeias lineares com centenas de átomos ligados em uma única molécula.

Neste contexto, pressupõe-se que o fluido que flui no meio poroso seja gás natural, uma mistura de hidrocarbonetos cuja composição se mantém constante ao longo do tempo e independente da posição espacial. Assim, as propriedades relevantes do gás para o estudo do escoamento incluem a densidade  $\gamma$ , a massa específica  $\rho_g$ , a viscosidade  $\mu_g$ , o fator de formação de volume  $B = \rho_{sc}/\rho_g$  (onde "sc" denota condições padrão), o fator de compressibilidade  $Z$ , e a condutividade térmica  $\kappa_g$ . Essas propriedades são, em geral, funções da temperatura  $T_g$ , pressão  $p$ , e composição, especificamente a massa molar  $M$ .

#### A.1.1 Densidade do gás

A densidade do gás,  $\gamma$ , é definida como sendo uma função da composição do fluido (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001)

$$\gamma = \frac{M}{M_{ar}} = \frac{M}{28,96},$$

onde  $M_{ar} \approx 28,96$  kg/kmol é a massa molar do ar. Na literatura, usualmente as demais propriedades do gás são dadas em função de  $\gamma$ , ou seja, da composição do gás, razão pela qual optou-se por apresentar esta definição primeiro.

### A.1.2 Fator de compressibilidade

O fator de compressibilidade do gás  $Z$  pode ser definido como a razão entre o volume que uma certa massa de gás real ocupa, a uma dada temperatura e pressão, e o volume que a mesma massa de gás ideal ocupa nas mesmas condições (Lee; Wattenbarger, 1996), isto é,

$$Z = \frac{V_{real}}{V_{ideal}},$$

sendo sua definição formal, a partir da equação de Estado dos Gases Reais, dada por

$$Z = \frac{pV_f}{nRT_g}.$$

Como visto na Figura 37,  $Z$  varia em função da composição, da temperatura e da pressão do fluido ( $Z = Z(M, T_g, p)$ ) (Lee; Wattenbarger, 1996). A estratégia utilizada na sua determinação é descrita a seguir.

Para se estimar valores de  $Z$  é necessário se recorrer a correlações empíricas baseadas em aproximações das curvas da carta elaborada por Standing e Katz (1942), a partir de dados experimentais.

Como pode ser visto na Figura 37, os valores de  $Z$  dependem da temperatura e da pressão pseudo reduzidas da mistura gasosa,  $T_{pr}$  e  $p_{pr}$ , respectivamente. Por outro lado, essas quantidades são calculadas conhecidas as pressão e temperatura do gás e as suas respectivas coordenadas pseudo-críticas (Lee; Wattenbarger, 1996):

$$p_{pr} = \frac{p}{p_{pc}}; \quad T_{pr} = \frac{T_g}{T_{pc}};$$

onde  $p_{pc}$  e  $T_{pc}$  são a pressão e a temperatura pseudo-críticas, respectivamente, que podem ser calculadas a partir das frações molares dos componentes da mistura, seguindo a *lei dos Estados Correspondentes* (Van der Waals, 1873), ou seja,

$$p_{pc} = \sum_{i=1}^n y_i p_{ci} \tag{22}$$

e

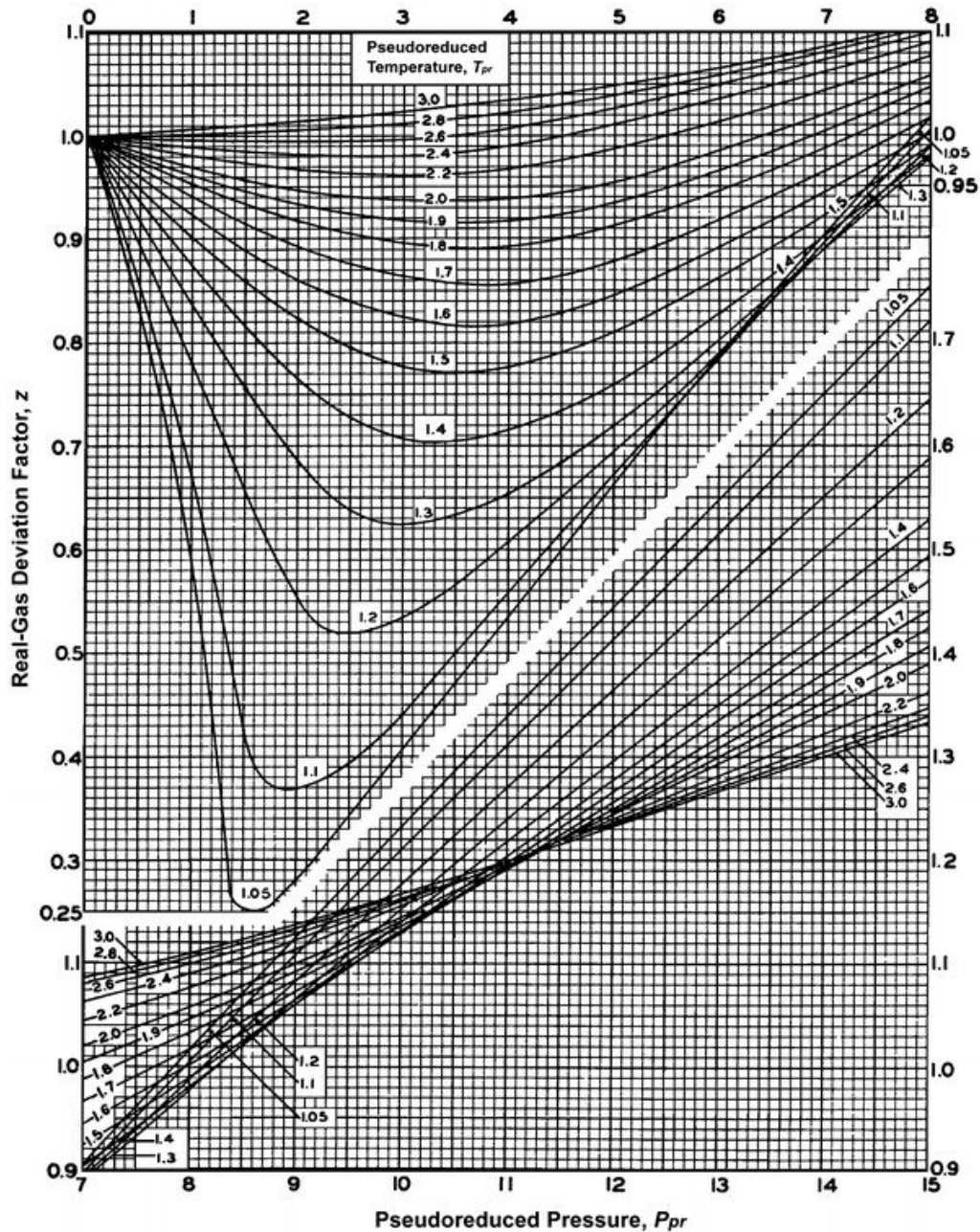
$$T_{pc} = \sum_{i=1}^n y_i T_{ci}, \tag{23}$$

onde  $T_{ci}$  e  $p_{ci}$  são a temperatura e a pressão críticas do componente  $i$  da mistura, respectivamente,  $y_i$  é a sua fração molar e  $n$  é o número de componentes da solução. As Equações (22) e (23) fornecem uma aproximação acurada para as aplicações de engenharia



(com erros da ordem de 2 a 3%) para os casos em que há similaridade na natureza química e na massa molecular dos componentes, como é o caso do gás natural (Rosa; Carvalho; Xavier, 2006).

Figura 37 - Carta para o fator de compressibilidade  $Z$



Fonte: Brown et al., 1948.

Idealmente, as propriedades do gás são determinadas em laboratórios replicando as condições de pressão, temperatura e volume de interesse. Porém, é bastante comum se deparar com situações onde não há dados experimentais disponíveis e, nesse caso, é preciso

recorrer a relações matemáticas para se determinar propriedades como as coordenadas pseudo-críticas. Sutton (1985) desenvolveu um par de correlações para a determinação de  $T_{pc}$  (R) e  $p_{pc}$  (psia), respectivamente, baseadas em dados de 264 experimentos com gás natural,

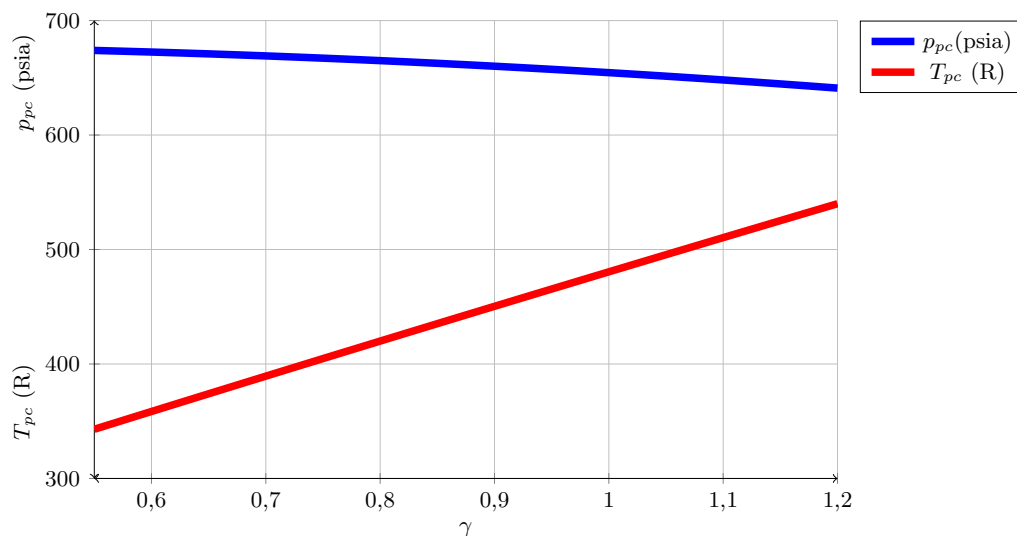
$$p_{pc} = 756,8 - 131,0\gamma - 3,6\gamma^2$$

e

$$T_{pc} = 169,2 + 349,5\gamma - 74,0\gamma^2.$$

Exemplos dos resultados obtidos pelo uso destas relações estão apresentados na Figura 38.

Figura 38 - Curvas de temperatura e pressão pseudocríticas segundo as correlações de Sutton (1985)



Fonte: O autor, 2023.

A partir dos dados obtidos em 5.844 experimentos com misturas de gás natural, Sanjari e Lay (2012) apresentaram uma correlação empírica para o cálculo do fator de desvio  $Z$  em função das coordenadas pseudo-reduzidas, obtida através de múltiplas regressões lineares e baseada na *Equação de Estado Virial*,

$$Z = 1 + A_1 p_{pr} + A_2 p_{pr}^2 + \frac{A_3 p_{pr}^{A_4}}{T_{pr}^{A_5}} + \frac{A_6 p_{pr}^{A_4+1}}{T_{pr}^{A_7}} + \frac{A_8 p_{pr}^{A_4+2}}{T_{pr}^{A_7+1}}, \quad (24)$$

onde  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$ ,  $A_4$ ,  $A_5$ ,  $A_6$ ,  $A_7$  e  $A_8$  são coeficientes fornecidos em função da faixa de pressão, como mostrado na Tabela 9. O valor obtido com a Eq. (24) apresenta uma boa aproximação para a faixa de trabalho de  $1,01 \leq T_{pr} \leq 3,0$  e  $0,01 \leq p_{pr} \leq 15,0$  (erro menor

que 1% para 84% dos dados utilizados e maior que 4% apenas para menos do que 3,5% deles) (Sanjari; Lay, 2012).

Tabela 9 - Coeficientes para cálculo de  $Z$

Coeficiente	$0,01 < p_{pr} \leq 3,0$	$3,0 < p_{pr} \leq 15,0$
$A_1$	0,007698	0,015642
$A_2$	0,003839	0,000701
$A_3$	-0,467212	2,341511
$A_4$	1,018801	-0,657903
$A_5$	3,805723	8,902112
$A_6$	-0,087361	-1,136000
$A_7$	7,138305	3,543614
$A_8$	0,08344	0,134041

Fonte: O autor, 2023

### A.1.3 Massa específica

A massa específica de uma substância é definida pela razão entre uma determinada massa e o volume por ela ocupado. Assim, para o gás escreve-se:

$$\rho_g = \frac{m_g}{V_g}, \quad (25)$$

onde  $m_g$  é a massa e  $V_g$  é o volume;

Pode-se, a partir da equação de estado (26), escrever que

$$pV_f = ZnRT_g = Z \frac{m}{M} RT_g \quad (26)$$

onde  $R$  é a constante universal dos gases ( $R = 8,3145$  kJ/kmol K) e  $n$  é a quantidade de moléculas em kmol ( $n = m/M$ ). Explicitando-se, agora,  $m_g/V_g$  nessa equação e substituindo-se (25) na nova correlação (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001)

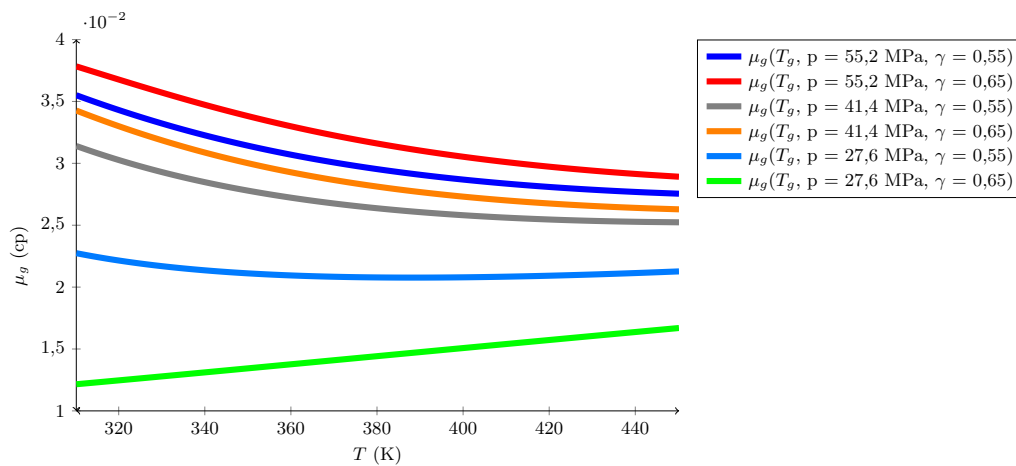
$$\rho_g = \frac{pM}{ZRT_g} = \frac{p\gamma}{ZR_{ar}T_g},$$

onde  $R_{ar} = R/M_{ar} \approx 0,287$  kJ/kg K. Dessa forma, tem-se uma correlação que permite calcular-se a massa específica em função do fator de compressibilidade, da composição e da temperatura e pressão do fluido.

### A.1.4 Viscosidade

A viscosidade expressa uma medida da resistência que um fluido apresenta ao escoamento quando uma tensão cisalhante é aplicada nele, ela é geralmente medida em centipoise (*cp*). No caso do gás natural, conforme pode ser visto na Figura 39, o seu valor é bastante sensível a variações de temperatura, pressão e composição. Para elevados valores de pressão, a sua viscosidade se comporta como a dos líquidos, aumentando à medida que se eleva a pressão e diminuindo com o aumento de temperatura (Rosa; Carvalho; Xavier, 2006). A viscosidade de gases ideais (para baixas pressões) aumenta com a elevação da temperatura.

Figura 39 - Curvas de viscosidade para diferentes composições de gás natural pela correlação de Lee, Gonzalez e Eakin (1966).



Fonte: O autor, 2023.

Lee, Gonzalez e Eakin (1966) propuseram uma correlação empírica baseada nos testes realizados com quatro misturas de gás natural, para as faixas de aplicação de 100 a 340°F (o que equivale a cerca de 310 a 444 K) e pressão de 100 a 8.000 psia, ou seja, variando de 0,69 a 55 MPa (Lee; Gonzalez; Eakin, 1966):

$$\mu = K_{\mu} 10^{-4} \exp(X \rho_g^Y)$$

onde  $\mu_g$  é a magnitude da viscosidade medida em *cp* e

$$K_{\mu} = \frac{(9,379 + 0,01607M) T_g^{1,5}}{(209,2 + 19,26M) + T_g},$$

$$X = 3,448 + \frac{986,4}{T_g} + 0,01009M,$$

$$Y = 2,447 - 0,2224X,$$

sendo  $T_g$  medida em R,  $\rho_g$  em g/cm<sup>3</sup> e  $M$  em g/mol.

### A.1.5 Condutividade térmica do gás

A condutividade térmica fornece uma medida de quão bem um material é capaz de transferir energia através da *condução de calor*, ou seja, por intermédio das interações moleculares (Bergman et al., 2011). O fluxo de calor pode ser determinado graças à Lei de Fourier, que estipula que o fluxo de energia térmica é proporcional ao gradiente de temperatura

$$\mathbf{q}_{cond} = -\bar{\bar{\kappa}}\nabla T$$

onde  $\bar{\bar{\kappa}}$  representa o tensor de condutividade térmica. Portanto, considerando que o processo é anisotrópico e que considera-se o problema dos escoamento bidimensional, assume-se que o tensor é diagonal:

$$\bar{\bar{\kappa}}_g = \begin{bmatrix} \kappa_{gx} & 0 \\ 0 & \kappa_{gy} \end{bmatrix}$$

onde  $\kappa_{gx}$  e  $\kappa_{gy}$  representam as condutividades térmicas do fluido nas direções dos eixos  $x$  e  $y$ , respectivamente.

### A.1.6 Fator-Volume-Formação

O Fator Volume Formação (FVF) do gás,  $B_g$ , é definido como sendo a razão entre o volume real ocupado pelo gás em condições específicas de temperatura e pressão e o volume ocupado pela mesma quantidade de gás em condições padrão (Ahmed, 2018).

$$B_g = \frac{V_f}{V_{sc}} = \frac{\rho_{sc}}{\rho_g} = \frac{p_{sc}M}{Z_{sc}RT_{sc}} \frac{ZRT_g}{pM} = \frac{p_{sc}ZT_g}{T_{sc}p}$$

Segundo a ISO-13443 (2007),  $T_{sc}=288,15$  K e  $p_{sc}=101,325$  kPa, sendo que nessas condições  $Z \approx 1$ .

### A.1.7 Entalpia específica do gás natural

A entalpia específica ( $h_g$ ) de um gás é uma propriedade termodinâmica crucial que descreve seu conteúdo de energia por unidade de massa. No campo da engenharia e simulação de reservatórios, o cálculo preciso de  $h_g$  é essencial para modelar o comportamento do gás natural em formações rochosas porosas. Uma correlação comumente usada para estimar  $h_g$  é baseada em diversas simplificações:

1. Comportamento do gás ideal: Esta correlação assume que o gás natural se comporta como um gás ideal. Um gás ideal é um conceito hipotético onde as moléculas de gás não têm volume e não existem forças intermoleculares entre elas (Moran et al., 2010). Na realidade, os gases reais desviam-se do comportamento ideal, especialmente a altas pressões e baixas temperaturas.
2. Calor específico constante: Assume que a capacidade de calor específico ( $c_{p,g}$ ) do gás permanece constante ao longo da faixa de temperatura de interesse (Smith, 1950). Na realidade, a capacidade térmica específica de um gás pode variar com a temperatura e a pressão, particularmente em condições extremas.
3. Temperatura de referência no zero absoluto: A correlação usa a temperatura do zero absoluto (0 Kelvin ou  $-273,15^\circ\text{C}$ ) como ponto de referência. Esta simplificação baseia-se na ideia de que a entalpia específica pode ser definida em relação ao zero absoluto. Na prática, os gases não estão no zero absoluto e as propriedades reais dos gases dependem das condições de temperatura e pressão do sistema.
4. Sem mudanças de fase: Assume que não há mudanças de fase (por exemplo, sem condensação ou vaporização) ocorrendo no gás (Cengel; Boles; Kanoglu, 2011). Na realidade, as mudanças de fase podem afetar significativamente a entalpia específica, especialmente quando se trata de sistemas multifásicos.
5. Composição Constante: A correlação assume que a composição do gás natural permanece constante. Não considera alterações na composição do gás que podem ocorrer durante diversos processos, o que pode levar a variações na entalpia específica.
6. Sem reações químicas: Presume-se que não há reações químicas ocorrendo no gás. As reações químicas podem liberar ou absorver calor, afetando a entalpia específica (Sandler, 2017).

Embora a correlação  $h_g = c_{p,g}T_g$  seja direta e muitas vezes suficiente para muitas aplicações de engenharia, é importante reconhecer suas limitações. Em simulações mais precisas e complexas, pode ser necessário considerar o comportamento real do gás, as variações na capacidade térmica específica e as mudanças de fase. Engenheiros e cientistas

costumam usar equações de estado e modelos termodinâmicos mais detalhados para explicar esses fatores quando resultados precisos são necessários.

#### A.1.7.1 Calor específico do gás natural à pressão constante

O calor específico à pressão constante  $c_{p,g}$  mede a quantidade de calor necessária para elevar a temperatura de uma unidade de massa do gás em uma unidade de temperatura sob pressão constante.

[Adewale e James \(2011\)](#) propuseram a seguinte correlação para o calor específico do gás natural, medido em kJ/kg K,

$$c_{p,g} = \frac{1}{M} (a + bT_g + cT_g^2 + dT_g^3)$$

onde

$$a = 59.55\gamma^2 - 97.86\gamma + 56.46;$$

$$b = -0.17084\gamma^2 + 0.46755\gamma - 0.15883;$$

$$c = 1.52903 \times 10^{-4}\gamma^2 - 3.57387 \times 10^{-4}\gamma + 1.65604 \times 10^{-4}; \text{ e}$$

$$d = -4.5789 \times 10^{-8}\gamma^2 + 9.8468 \times 10^{-8}\gamma - 5.2019 \times 10^{-8}.$$

De acordo com [Adewale e James \(2011\)](#), a correlação para determinar o calor específico do gás natural à pressão constante considerou amostras coletadas de diversos campos, como Bell, Sabine, Bacon lime e paradox formation. Essa correlação é robusta, levando em consideração a composição do gás, sua densidade e temperatura para calcular o calor específico do gás.

A correlação apresentou resultados com uma precisão de 98,3% em comparação com o método do coeficiente isotérmico a 1500°F. O erro médio observado foi de 0,3% em uma faixa de temperaturas que varia de 491R a 2740R.

Sendo assim, essa correlação se mostra adequada para a faixa de aplicação com  $0,55 \leq \gamma \leq 1$  e  $60^\circ\text{F} \leq T_g \leq 2000^\circ\text{F}$ , apresentando um erro inferior a 5%, conforme apontado por [Adewale e James \(2011\)](#).

Dessa forma, o calor específico do gás natural à pressão constante pode ser calculado com precisão significativa utilizando essa correlação, o que é essencial em estudos e análises relacionados a processos que envolvem o gás natural.

## A.2 Rocha

As rochas reservatórios são comumente formadas por argila, sílica e calcário (Ahmed, 2018). Conhecer as propriedades físicas da rocha e como ela interage com os hidrocarbonetos é essencial para a simulação de reservatórios, a fim de que se possa prever o comportamento futuro da sua produção.

### A.2.1 Porosidade e massa específica

Na engenharia de reservatórios, a porosidade é certamente uma propriedade que merece destaque, uma vez que ela fornece uma medida da capacidade de armazenamento de fluidos da jazida (Rosa; Carvalho; Xavier, 2006)

$$\phi = \frac{V_p}{V_b},$$

onde  $V_p$  é o *volume poroso* e  $V_b$  o volume total de seção de rocha reservatório. Neste trabalho, admite-se que a rocha encontra-se saturada pelo fluido, o que significa que  $V_p = V_f$  caso todos os poros estejam interconectados, ou seja, o fluido pode escoar através deles. Via de regra, trabalha-se aqui com a *porosidade efetiva*, que considera o volume dos poros que estão efetivamente interconectados, em contraposição com a *porosidade absoluta*, que considera o volume total ocupado pelo fluido.

Uma vez que se considera o cenário no qual ocorre variação da temperatura da rocha, a porosidade é calculada como sendo uma função da compressibilidade da rocha, do coeficiente de expansão térmica, da pressão e da temperatura (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001):

$$\phi = \phi^0 [1 + c_\phi(p - p^0) - c_{\phi,T}(T - T^0)].$$

onde  $\phi^0$ ,  $p^0$  e  $T^0$  são os valores da porosidade, pressão e temperatura nas condições de referência e  $c_\phi$  e  $c_{\phi,T}$  representam os coeficientes de compressibilidade e de expansão térmica da rocha, respectivamente.

A massa específica da formação  $\rho_s$  (o subscrito *s* vem de *shale*) é tratada de maneira semelhante à porosidade, levando em conta a compressibilidade por variação de pressão e a expansividade térmica:

$$\rho_s = \rho_s^0 [1 + c_\rho(p - p^0) - c_{\rho,T}(T - T^0)],$$

onde  $\rho_s^0$  é a massa específica de referência da formação,  $c_\rho$  é o coeficiente de compressibilidade por variação de pressão e  $c_{\rho,T}$  é o coeficiente de expansividade térmica.



### A.2.2 Condutividade térmica da rocha

Assim como o fluido conduz uma certa quantidade de energia por condução de calor, o mesmo acontece em relação à rocha reservatório. Então, o tensor de condutividade térmica da rocha é dado por:

$$\bar{\bar{\kappa}}_r = \begin{bmatrix} \kappa_{r,x} & 0 \\ 0 & \kappa_{r,y} \end{bmatrix}.$$

onde, de modo similar, as componentes do tensor diagonal correspondem às condutividades térmicas da rocha.