

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

Milane Aguiar do Amaral

Simulação numérica do escoamento bicomponente em reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás

Nova Friburgo 2024

Milane Aguiar do Amaral

Simulação numérica do escoamento bicomponente em reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás



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

> Nova Friburgo 2024

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

A485	 Amaral, Milane Aguiar do. Simulação numérica do escoamento bicomponente em reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás / Milane Aguiar do Amaral - 2024. 83 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. Engenharia de reservatórios – Métodos de simulação - Teses. 3. Escoamento em meios porosos – Métodos de simulação – Teses. 4. Gás natural – Teses. I. Souto, Helio Pedro Amaral. II. Souza, Grazione de. III. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV. Título.
	CDU 622.691:519.872

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

Milane Aguiar do Amaral

Simulação numérica do escoamento bicomponente em reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás

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

Aprovada em 29 de janeiro de 2024. Banca Examinadora:

> Prof. Dr. Helio Pedro Amaral Souto Instituto Politécnico - UERJ

Prof. Dr. Grazione de Souza Instituto Politécnico - UERJ

Prof. Dr. Adolfo Puime Pires Laboratório de Engenharia e Exploração de Petróleo - UENF

Prof. Dr. Luiz Alberto da Silva Abreu Instituto Politécnico - UERJ

> Nova Friburgo 2024

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar a Deus, fonte de toda sabedoria e força, por me guiar ao longo desta jornada acadêmica. Sua graça e orientação foram fundamentais para superar desafios e alcançar este momento.

À minha família, em especial aos meus pais, Gilberto Thomé e Mirian Fraga, expresso minha gratidão infinita. Seu amor incondicional, apoio constante e sacrifícios foram alicerces essenciais para meu crescimento pessoal e acadêmico. Vocês são minha fonte inesgotável de inspiração.

Aos amigos que compartilharam risos, desafios e vitórias, meu sincero agradecimento. Suas amizades foram o refúgio nos momentos difíceis e a celebração nos momentos de alegria. Agradeço especialmente à Daise Soares, ao meu irmão Guilherme Amaral e ao meu primo Johannes Mißbach. Juntos construímos memórias que levarei para toda a vida. E também agradeço imensamente o apoio e compartilhamento de ideias de meus amigos Lucas Barros e Matheus Barreira.

À memória eterna do meu querido namorado Adriano Pereira, que infelizmente não pôde estar fisicamente presente para compartilhar este momento. Sua influência positiva, amor e apoio foram fundamentais para minha jornada. Sua presença, mesmo em memória, ilumina meu caminho.

Aos meus dedicados orientadores, Grazione de Souza e Helio Pedro Amaral Souto, expresso minha gratidão pela paciência, orientação e expertise que compartilharam. Suas contribuições foram essenciais no desenvolvimento desta dissertação, e agradeço por terem acreditado em mim.

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil(CAPES) - Código de financiamento 001

RESUMO

AMARAL, M. A. Simulação numérica do escoamento bicomponente em reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás. 2024. 84 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

Nas últimas décadas, tem aumentado o interesse, da comunidade científico-tecnológica dedicada à área de energia, com relação à produção e à utilização do gás natural. Em particular, esforços têm sido realizados visando à recuperação de hidrocarbonetos a partir de reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás natural. Nesse contexto, empregase a simulação numérica, do escoamento monofásico bicomponente em reservatórios de baixa permeabilidade, com o objetivo de se estudar a injeção de dióxido de carbono em formações contendo metano, utilizando-se formulações numéricas totalmente implícitas, uma linearização e uma decomposição de operadores. O efeito do escorregamento do gás no escoamento, que pode ocorrer nesses tipos de reservatórios, também é levado em consideração mediante a introdução de uma permeabilidade aparente, que varia em função do número de Knudsen. Os resultados são apresentados para escoamentos em geometrias do tipo *slab* e um quarto de *five-spot*. Uma análise da influência da variação de alguns dos parâmetros numéricos, das propriedades físicas do fluido e da rocha, e das condições de operação foi realizada e concluiu-se que os métodos numéricos foram capazes de fornecer resultados compatíveis com a dinâmica do escoamento.

Palavras-chave: simulação numérica de reservatórios; gás natural; escorregamento; escoamento bicomponente; injeção de CO₂.

ABSTRACT

AMARAL, M. A. Numerical simulation of two-component flow in low-permeability gas reservoirs. 2024. 84 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

In recent decades, the interest of the scientific-technological community dedicated to the energy area has increased concerning the production and use of natural gas. In particular, have been made efforts to recover hydrocarbons from low-permeability reservoirs containing natural gas. In this context, we use numerical simulation of two-component single-phase flow in low permeability reservoirs to study the injection of carbon dioxide into formations containing methane, using fully implicit numerical formulations, a linearization, and a decomposition of operators. The effect of gas slippage on the flow, which can occur in these reservoirs, is also considered by introducing an apparent permeability, which varies as a function of the Knudsen number. We presented the results for flows in geometries of the type slab and a quarter of five-spot. We carried out an analysis of the influence of the variation of some of the numerical parameters, the physical properties of the fluid and the rock, and the operating conditions, and we concluded that the numerical methods provided results compatible with the flow dynamics.

Keywords: numerical reservoir simulation; natural gas; slippage; two-component flow;

 CO_2 injection.

LISTA DE FIGURAS

Figura	1 - Maiores produtores de gás no mundo em 2022 \ldots \ldots \ldots \ldots	11
Figura	2 - Produção de gás natural no mundo entre 1990 e 2022	12
Figura	3 - Malha unidimensional	39
Figura	4 - Representação de um domínio tridimensional discretizado	39
Figura	5 - Identificação das células na malha	40
Figura	6 - Faces do bloco centrado	40
Figura	7 - Fluxograma para um passo de tempo de cálculo do simulador $\ .\ .\ .$.	47
Figura	8 - Pressão em função da posição x - refinamento de malha	52
Figura	9 - Fração molar em função da posição x - refinamento de malha $\ .\ .\ .$.	53
Figura	10 - Pressão em função da posição x - efeito do escorregamento \hdots	54
Figura	11 - Fração molar em função da posição x - efeito do escorregamento	54
Figura	12 - Número de Knudsen para uma determinada amostra de pressões	55
Figura	13 - Pressão em função da posição x - efeito do tempo de produção	56
Figura	14 - Fração molar em função da posição x - efeito do tempo de produção	57
Figura	15 - Pressão em função da posição x - variação do Δt $\ .$ $\ .$ $\ .$ $\ .$ $\ .$ $\ .$	58
Figura	16 - Fração molar em função da posição x - variação do Δt $\ .$ $\ .$ $\ .$ $\ .$ $\ .$	58
Figura	17 - Pressão em função da posição x - variação da permeabilidade $\ .$	59
Figura	18 - Fração molar em função da posição x - variação da permeabilidade $~$	60
Figura	19 - Pressão em função da posição x - variação da porosidade	61
Figura	20 - Fração molar em função da posição x - variação da porosidade	61
Figura	21 - Modelo do reservatório	62
Figura	22 - Pressão em função da posição x - refinamento de malha	63
Figura	23 - Fração molar em função da posição x - refinamento de malha $\ \ldots$.	64
Figura	24 - Perfis de pressão, variação do tempo de operação	65
Figura	25 - Perfis de fração molar, variação do tempo de operação $\ldots \ldots \ldots$	66
Figura	26 - Perfis de pressão, variação do passo de tempo	67
Figura	27 - Perfis de fração molar, variação do passo de tempo	67
Figura	28 - Pressão em função da posição x - variação da permeabilidade $\ \ldots\ \ldots\ \ldots$	68
Figura	29 - Fração molar em função da posição x - variação da permeabilidade $~$	68
Figura	30 - Pressão em função da posição x - variação da porosidade	69
Figura	31 - Fração molar em função da posição x - variação da porosidade	70
Figura	32 - Pressão em função da posição x - variação da vazão de injeção	71
Figura	33 - Fração molar em função da posição x - variação da vazão de injeção	71
Figura	34 - Domínio bidimensional contendo as fraturas ortogonais $\ . \ . \ . \ .$	73
Figura	35 - Superfícies de fração molar na presença de fraturas - sem escorregamento	73
Figura	36 - Superfícies de fração molar na presença de fraturas - com escorregamento	74

Figura	37 - Fração molar em função da posição x - efeitos do escorregamento $\ . \ .$	75
Figura	38 - Superfícies de pressão na presença de fraturas - sem escorregamento	75
Figura	39 - Superfícies de pressão na presença de fraturas - com escorregamento	76
Figura	40 - Pressão em função da posição x - efeitos do escorregamento $\ . \ . \ .$.	76

LISTA DE TABELAS

Tabela	1 - Produção e consumo de CO_2 para injeção $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	17	
Tabela	2 - Parâmetros para o caso padrão	50	
Tabela	3 - Propriedades dos componentes	50	
Tabela	4 - Refinamento de malha para a geometria slab	51	
Tabela	la 5 - Parâmetros comuns para o caso padrão na geometria um quarto de		
	five-spot	62	
Tabela	6 - Refinamento de malha para a geometria <i>five-spot</i>	63	
Tabela	7 - Parâmetros das fraturas	72	

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO
1	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA
1.1	Efeito do escorregamento do gás
1.2	Estrutura rochosa e heterogeneidades
1.3	Injeção de CO_2
2	ESCOAMENTO BICOMPONENTE
2.1	Equação de estado cúbica
2.2	Solução da equação de estado de Peng-Robinson
2.3	Determinação da viscosidade do gás
2.4	Propriedades de rocha 31
2.5	Equações de balanço
2.6	Equações governantes
2.7	Condições inicial e de contorno
3	METODOLOGIA DE RESOLUÇÃO NUMÉRICA 38
3.1	Discretização
3.2	Discretização da equação governante - pressão 40
3.3	Discretização da equação governante - fração molar 42
3.4	Decomposição de operadores e linearização
3.5	Condições auxiliares
4	RESULTADOS 49
4.1	Características gerais das simulações
4.2	Escoamento em um meio homogêneo e geometria do tipo slab 51
4.2.1	<u>Refinamento de malha</u>
4.2.2	Efeito do escorregamento do gás
4.2.3	Variação do tempo de injeção e do passo de tempo
4.2.4	Variação das propriedades físicas
4.3	Escoamento em um meio homogêneo e geometria do tipo um
	quarto de five-spot $\dots \dots \dots$
4.3.1	$\underline{\text{Refinamento de malha}}$
4.3.2	Variação do tempo de injeção e do passo de tempo
4.3.3	$\underline{\text{Análise de sensibilidade}} \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $
4.4	Escoamento em um meio heterogêneo e geometria do tipo um
	quarto de five-spot \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots $.$
	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS
	REFERÊNCIAS

INTRODUÇÃO

As aplicações do escoamento de fluidos em meios porosos estão presentes em diversas áreas do conhecimento científico e tecnológico. Como exemplos, é possível citar a indústria química, o meio ambiente, a geologia, a engenharia mecânica, a medicina, a indústria de óleo e gás, dentre outros (Schulz, 2009). Nesse contexto, devido aos avanços tecnológicos, os reservatórios denominados não convencionais têm despertado grande interesse na indústria do petróleo. No entanto, mesmo com o conhecimento e as tecnologias mais recentes, a explotação desses reservatórios ainda apresenta desafios quando se visa ao aumento das taxas de recuperação de gás (Halsey, 2016). Eles apresentam, por exemplo, um grande potencial quando se trata do armazenamento geológico de gás carbônico. Assim sendo, a simulação numérica do escoamento monofásico em reservatórios *tight gas e shale gas* é um tópico de grande importância para o setor de energia em escala mundial e, por isso, é o tema desta dissertação.

Gás natural

O gás natural é um combustível fóssil que se tornou, nos últimos anos, uma fonte de energia cada vez mais importante. Consistindo principalmente de metano, é utilizado para diversos fins, incluindo aquecimento, cozimento, geração de eletricidade e como combustível para veículos automotores. Ele é amplamente considerado como uma alternativa mais limpa e ecológica em comparação com outros combustíveis fósseis, tais como o carvão e o óleo (Prates et al., 2006). Também é uma fonte de energia que desempenha um papel mundial fundamental em diversas indústrias e aplicações. Sua versatilidade, eficiência energética e menor emissão de poluentes, quando comparadas a outras fontes fósseis, contribuem para seu uso crescente. Destaca-se que uma das suas principais características, quanto à sua classificação, é o tipo de reservatório no qual é encontrado. Ele é normalmente achado em formações rochosas subterrâneas contendo arenito, calcário, dolomita ou do tipo folhelho, e esses reservatórios apresentam diversas características que os tornam adequados para a produção de gás natural.

A primeira característica a ser observada em um reservatório de gás natural é a porosidade, que quantifica o espaço físico dentro da formação rochosa que está disponível para armazenar fluido. Então, ela deve ser porosa o suficiente para permitir a acumulação de gás que leve a uma viabilidade econômica do projeto de recuperação de hidrocarbonetos. Outra propriedade importante é a permeabilidade absoluta, que se refere à resistência imposta ao escoamento de um único fluido ao escoar através da formação rochosa (Chen; Huan; Li, 2004). Ademais, o gás natural deve se encontrar aprisionado, na formação

rochosa, por uma camada impermeável ou rocha capeadora. Essa rocha de cobertura atua como uma barreira que impede que o gás escoe para fora do reservatório.

Portanto, as características do reservatório de gás natural e das formações rochosas circundantes são fatores importantes que determinam o potencial de produção de um campo. Compreendê-las é essencial para o sucesso da sua exploração e produção. Com a crescente demanda por fontes de energia mais limpas e ecológicas, o gás natural provavelmente desempenhará, nos próximos anos, um papel cada vez mais importante no atendimento às necessidades energéticas mundiais. De fato, o mercado de gás natural no Brasil e no mundo tem aumentado muito nos últimos anos. A Rússia é o país com as maiores reservas comprovadas e possui vastas reservas na região da Sibéria, incluindo o campo de gás de Urengoy, o maior do mundo. Outros países como o Irã, o Catar, os Estados Unidos, a Austrália e o Canadá também possuem destaque no que diz respeito às reservas (IEA, 2022). Na Figura 1, pode-se ver, em ordem decrescente, a produção mundial dos principais países.



Figura 1 - Maiores produtores de gás no mundo em 2022

Fonte: Adaptada de IBP, 2022.

O aumento constante da demanda global por energia tem sido o motor do crescimento da indústria petrolífera. De acordo com projeções feitas pela Agência Internacional de Energia IEA (2022), a dependência mundial de combustíveis fósseis deve continuar até pelo menos 2040. Nessa época, apesar de uma ligeira redução, a previsão é a de que os combustíveis fósseis ainda devam representar cerca de 74% da matriz energética global, em comparação com os atuais 80%. O gás natural desempenha um papel significativo, contribuindo com mais da metade desse percentual (Figura 2). Além disso, os recursos provenientes de hidrocarbonetos não convencionais têm demonstrado um potencial crescente na produção de energia, em comparação com a explotação de reservatórios convencionais, especialmente nos Estados Unidos, na Rússia, na Argentina e na China.



Figura 2 - Produção de gás natural no mundo entre 1990 e 2022

Legenda: em bilhões de metros cúbicos. Fonte: Adaptada de IBP, 2022.

Especificamente, é importante mencionar os reservatórios não convencionais de gás de baixa permeabilidade, *tight gas*, ou os de baixíssima permeabilidade, ou seja, os de gás de folhelho (*shale gas*). O folhelho é uma rocha sedimentar de granulação fina que é tipicamente composta de argila, silte e matéria orgânica. Ao contrário dos reservatórios convencionais, os reservatórios de gás em folhelhos têm baixa porosidade e permeabilidade, o que torna mais difícil a explotação comercial do gás. Por exemplo, em se tratando da baixa permeabilidade, tem-se as formações do tipo arenito.

Normalmente, para se extrair o gás dos folhelhos é usado um processo chamado de fraturamento hidráulico (*fracking*). Ele envolve a injeção de uma mistura de água, areia e produtos químicos na formação para criar fraturas, que permitem que o gás flua mais facilmente. Esse método de extração é diferente dos métodos tradicionais de produção de gás natural, como o de perfurar um poço e permitir que o gás escoe para a superfície, o que pode não ser eficaz para reservatórios de gás do tipo *shale* (Boudet, 2014).

Reservatórios de gás natural

Os reservatórios de gás natural do tipo *shale* (compostos por rochas sedimentares argilosas) ganharam destaque devido ao avanço tecnológico na exploração e produção de hidrocarbonetos. Esta seção explora as características dos reservatórios de gás natural e do tipo *shale*, bem como as suas propriedades únicas, produção mundial e fatores econômicos.

Os reservatórios de gás natural do tipo *shale* possuem permeabilidade absoluta notavelmente baixa em comparação com reservatórios convencionais, frequentemente na faixa de micro a nano-darcies. Ela é resultante da natureza argilosa do *shale*, tornando a migração do gás mais difícil no seu interior. A porosidade é geralmente baixa e o gás pode ser encontrado em microfraturas na rocha, o que torna a sua extração complexa (Wang et al., 2017a). Para liberar o gás, o processo de *fracking* é constantemente necessário.

A confirmação, nos Estados Unidos, de que os reservatórios não convencionais podem ser economicamente viáveis ressaltou a oportunidade existente para se expandir o conhecimento técnico e econômico em relação a eles no mundo, incluindo as bacias sedimentares brasileiras. O Brasil abriga diversas delas, que apresentam um grande potencial para a descoberta de novas reservas de hidrocarbonetos. Elas estão localizadas tanto em áreas remotas, Solimões, Parecis e Parnaíba, quanto em regiões mais urbanizadas, Paraná e Recôncavo Baiano. As suas dimensões variam de pequenas, Recôncavo Baiano com 12.000 km², ou gigantescas, Bacia do Paraná com seus 1.500.000 km², e elas abrangem eras geológicas que vão desde o Pré-Cambriano até o Mesozóico (Energia, 2019).

A limitada disponibilidade de publicações científicas, sobre o potencial de exploração de folhelhos com óleo/gás no Brasil, ressalta a necessidade de se conduzir estudos a fim de se contribuir para uma possível explotação desses recursos. A ANP, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (2019), em 2013, calculou as reservas recuperáveis e estimou como sendo um volume de aproximadamente 414 Tcf (11,7 Tm³), na soma das principais bacias sedimentares: Paraná, Recôncavo Baiano, Parnaíba, Parecis e São Francisco. Isso evidencia o alto potencial do gás não convencional na indústria petrolífera brasileira e justifica uma avaliação mais aprofundada desses reservatórios nas formações geológicas das principais bacias terrestres do Brasil.

Há também diversos fatores econômicos e críticos a serem considerados no contexto do *shale gas*. Os custos de extração, por exemplo, podem ser mais elevados devido às despesas associadas ao *fracking*, que envolvem a utilização de diversos equipamentos e a gestão da água. Além disso, o preço de mercado desempenha um papel crucial, uma vez que as flutuações significativas nos preços globais influenciam a rentabilidade do setor. Por outro lado, é importante destacar os impactos positivos na economia regional, tais como a criação de empregos e o aumento da receita fiscal, que impulsionam o crescimento econômico nas áreas produtoras.

Na conjuntura da produção de gás natural em reservatórios fraturados, é possível

observar características distintivas que merecem atenção. As rochas constituintes dos reservatórios de petróleo são submetidas a uma variedade de tensões, provenientes de diversas fontes. Dependendo das condições de soterramento, diagênese e composição mineralógica da rocha, estas tensões podem resultar em um fraturamento da rocha, gerando heterogeneidades em diferentes escalas. Embora seja comum encontrar fraturas em praticamente todos os reservatórios de petróleo, é o impacto delas no comportamento do reservatório que determina a sua classificação como *naturalmente fraturado*.

De acordo com Nelson (2001), um reservatório naturalmente fraturado é aquele no qual as fraturas, que ocorrem de causas naturais, têm um efeito substancial no escoamento dos fluidos, seja aumentando a permeabilidade e/ou porosidade, ou criando uma anisotropia no campo de permeabilidades. As fraturas servem de canais preferenciais para o escoamento do gás, de forma que a permeabilidade nos reservatórios fraturados depende do tamanho, do formato e da conectividade delas. Esses reservatórios, geralmente, requerem menos fraturamento hidráulico devido à existência das fraturas naturais.

As mudanças nas condições de pressão e temperatura exercem um impacto considerável sobre o estado do gás e a sua capacidade de movimentação através das fraturas (Chung et al., 2015). Soma-se a isso a notável heterogeneidade dos reservatórios, tornando a tarefa da caracterização do sistema poço-reservatório um desafio complexo. Quando aborda-se a modelagem computacional, simular o escoamento em um meio intrinsecamente heterogêneo adiciona uma dificuldade considerável ao processo, muitas vezes exigindo o uso de simplificações.

A simulação de reservatórios fraturados de gás natural envolve vários desafios computacionais distintos. Primeiramente, a modelagem acurada das fraturas naturais requer a implementação de modelos que devem contemplar a distribuição tridimensional das fraturas, levando em consideração as suas orientações, os seus tamanhos e as suas distribuições no espaço. Além disso, a heterogeneidade presente nesses reservatórios exige o uso de malhas não-uniformes e não-estruturadas, que tipicamente elevam os custos computacionais.

Em várias regiões do mundo é possível encontrar reservatórios fraturados como, por exemplo, a bacia do Bakken, localizada em Dakota do Norte, nos Estados Unidos, e Saskatchewan, no Canadá (IEA, 2022), as quais são áreas ricas em gás natural. Já no Brasil, pode-se citar a bacia de Santos, reconhecida por suas vastas reservas de gás natural em rochas fraturadas. A China também tem importantes reservatórios do tipo na Bacia de Sichuan, que contribuíram para o crescimento da sua produção. Sendo assim, nota-se que esses reservatórios desempenham um papel significativo na produção global de gás natural. Em muitos casos, eles contribuem com uma parcela substancial da sua produção total em seus respectivos países e regiões.

Captura e injeção de gás carbônico

O gás carbônico (CO_2) puro tem características do tipo: é incolor, inodoro, inerte e não combustível. As principais propriedades desse elemento e seus valores são (Corcoana, 1992): a temperatura crítica de -31,05 °C; a pressão crítica de 73,9 bar e o peso molecular (em condições padrão de temperatura e pressão) de 44,01 g/mol. Normalmente, as temperaturas dos reservatórios de petróleo ultrapassam os 30,7 °C, tornando a sua injeção viável na condição de fluido supercrítico (Lake, 1989). Nesse estado, ele comporta-se como um líquido em relação à densidade e como um gás em relação à viscosidade (AMARNATH, 1999). Em condições supercríticas, esse gás apresenta densidade maior que a do ar, reduzindo a sua suscetibilidade à segregação gravitacional durante o deslocamento do ar (Lake, 1989). Embora a viscosidade nas condições supercríticas seja inferior à da água ou a dos hidrocarbonetos líquidos, o seu uso como um gás miscível supera o de outros gases devido à sua viscosidade, que é cerca de duas vezes e meia maior que a dos concorrentes.

A captura do dióxido de carbono é uma estratégia crucial para mitigar as suas emissões e combater as mudanças climáticas. Este processo envolve a coleta da sua emissão diretamente das instalações industriais ou da atmosfera, seguido do seu armazenamento ou utilização. Eles se referem a uma variedade de aplicações por meio das quais o CO_2 é retido e utilizado, seja diretamente (não alterado quimicamente) ou indiretamente (transformado) em vários produtos. Atualmente, ele é utilizado principalmente na indústria de fertilizantes e na recuperação avançada de petróleo. Novos usos, tais como a produção de combustíveis sintéticos, produtos químicos e agregados para a construção estão ganhando força (IEA, 2022).

Muitos projetos destinados à sua captura estão sendo implementados em instalações industriais, como nas usinas de energia a carvão e nas fábricas. Algumas unidades de geração de energia também empregam tecnologias de retenção do gás carbônico a fim de reduzir as suas emissões (IPEA, 2023). Adicionalmente, em alguns lugares, o CO_2 é aprisionado e armazenado em formações geológicas profundas, como aquíferos salinos, reservatórios depletados de óleo e gás ou depósitos de basalto. A impermeabilidade e a estabilidade dessas formações contribuem significativamente para minimizar o risco de vazamentos.

Outra alternativa de armazenamento é a oceânica, conhecida como o sequestro oceânico de carbono. Essa opção implica a injeção de CO_2 em águas profundas, onde pode ocorrer a sua dissolução ou formação de minerais. Ela considera que as vastas profundezas dos oceanos são um reservatório natural para o dióxido de carbono. Por fim, o armazenamento mineral é uma abordagem na qual ele é fixado em minerais, por meio de um processo denominado mineralização. Nesse cenário, o gás reage com os minerais, resultando na formação de carbonatos. Assim, essa transformação contribui para a longevidade e a segurança da sua acumulação, convertendo-o em formas sólidas que são estáveis na natureza.

Quanto à sua utilização após captura, elas são diversas. Na produção de combustíveis sintéticos, ele pode ser empregado na criação de metano sintético ou até mesmo de combustíveis líquidos. Nele, tipicamente utiliza-se energia renovável para converter o CO_2 em hidrocarbonetos.

No setor da construção, ele pode ser transformado em carbonatos, os quais são empregados na fabricação de materiais de construção como o concreto, oferecendo então uma alternativa ao cimento convencional. Além disso, desempenha um papel crucial na produção de produtos químicos como, por exemplo, ácidos, polímeros e solventes. Processos químicos específicos, que incluem a utilização de catálise, permitem a sua transformação em compostos úteis.

Na agricultura, o gás carbônico retido pode ser utilizado para estimular o crescimento de plantas em estufas ou ambientes agrícolas, contribuindo para o aumento da produtividade. Outra aplicação notável é a carbonatação mineral de resíduos industriais, transformando-os em materiais não degradáveis.

Também pode ser usado na recuperação avançada de petróleo, mediante a sua injeção nos reservatórios. Na literatura, evidencia-se que a viscosidade do CO_2 depende dos valores da pressão e da temperatura, aumentando consideravelmente com a pressão para uma dada temperatura (Mathiassen, 2003). Dessa forma, o seu emprego oferece vantagens quando do processo de recuperação avançada de óleo e gás. Em se tratando dos reservatórios de gás natural, ela tem se tornado uma prática relevante para aumentar a recuperação de hidrocarbonetos e mitigar as emissões desse gás na atmosfera.

O processo de injeção ajuda a reduzir a viscosidade do óleo residual, facilitando a sua fluidez, ou seja, a sua migração através dos poros em direção aos poços produtores. Além disso, o dióxido de carbono, ao entrar em contato com o óleo, causa uma expansão e o consequente aumento da pressão no reservatório, o que auxilia na sua mobilização e deslocamento para a superfície. Existe também um efeito de deslocamento miscível, onde o CO₂ atua como um agente de varredura, empurrando o óleo para fora do reservatório. Ademais, a interação química do dióxido de carbono com o óleo e os minerais presentes no reservatório, pode resultar na liberação de mais óleo residual, aumentando assim a eficiência da recuperação. Os dados apresentados na Tabela 1 referem-se ao processo de injeção do dióxido de carbono em reservatórios de gás natural.

Ano	Produção	Consumo
2000	100	90
2010	150	130
2020	200	180

Tabela 1 - Produção e consumo de CO₂ para injeção

Legenda: em milhões de toneladas. Fonte: IPCC, 2022.

Simulação numérica de reservatórios

A simulação numérica de reservatórios envolve a resolução das equações que governam o escoamento de fluidos, no seu interior, usando métodos numéricos. Ela é amplamente utilizada na indústria de óleo & gás para antever o comportamento do fluxo através dos reservatórios sob diversos cenários de produção (Islam et al., 2010). Os modelos usados na simulação numérica podem levar em consideração, e.g., as propriedades, a pressão e a temperatura do fluido escoando; os efeitos provenientes do ambiente circundante; além de outros fatores que podem influenciar o seu deslocamento (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001). Ao proporcionar uma representação acurada do comportamento dos fluidos, a simulação auxilia as empresas do setor a tomarem decisões embasadas para o desenvolvimento e a operação de seus reservatórios, instalações de produção e sistemas de transporte. Em adição, ela também permite que a indústria teste e avalie novas tecnologias e procedimentos antes de implementá-los, minimizando o risco de cometerem erros dispendiosos (Islam et al., 2010).

O processo de simulação numérica empregado envolve algumas etapas principais, tais como (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001)

- 1. Representação do reservatório: inclui a criação de um modelo tridimensional dele, levando em consideração as suas propriedades geológicas e físicas;
- Determinação das propriedades dos fluidos: são consideradas as características dos fluidos presentes no reservatório, tais como a massa específica, a viscosidade e o seu estado termodinâmico;
- Proposição das equações governantes: são aquelas que descrevem o fluxo dos fluidos e o transporte de componentes no reservatório;
- 4. Simulação: o simulador é executado para prever o comportamento do escoamento no reservatório, ao longo do tempo, mediante a resolução numérica das equações

governantes.

Dentre os desafios encontrados na simulação numérica, incluem-se a representação espacial do reservatório: é necessária uma representação precisa das camadas geológicas, das fraturas e das heterogeneidades, o que pode ser desafiador. Pode-se citar também o grande volume de dados, pois a obtenção de resultados acurados é frequentemente custosa e demorada. O alto custo computacional decorre da resolução das equações governantes, em modelos tridimensionais, que requer grande poder de processamento e torna a simulação computacionalmente intensiva (Huang; Guo; Chen, 2015). Por último, é natural que as incertezas associadas às características do reservatório e aos parâmetros físicos possam impactar as previsões oriundas da simulação. No entanto, mesmo diante das simplificações e das representações, que não são perfeitamente fiéis à realidade, elas têm demonstrado, ao longo dos últimos anos, serem confiáveis.

As simulações numéricas em reservatórios de óleo e gás vêm sendo utilizadas desde meados da década de 1950. Desde então, elas evoluíram significativamente, acompanhando os avanços na computação e na engenharia de reservatórios. A pesquisa e o desenvolvimento contínuos nessa área levaram ao aprimoramento dos modelos físico-matemáticos, dos *softwares* especializados e das técnicas de simulação. Isso permitiu que as empresas da indústria de petróleo e gás realizassem simulações cada vez mais acuradas e complexas a fim de otimizar a produção, tomar decisões preventivas e gerenciar seus ativos de maneira mais eficaz (Islam et al., 2010).

Objetivo

Este trabalho tem como propósito principal simular numericamente o escoamento monofásico em reservatórios de gás natural de baixa permeabilidade, quando da injeção de CO_2 , considerando o efeito do escorregamento do gás, em geometrias do tipo *slab* e um quarto de *five-spot*.

Organização do trabalho

A estrutura deste trabalho abrange, conforme visto, um relato sobre a indústria do petróleo, explorando seu crescimento, perspectivas futuras e o seu papel crucial no atendimento à demanda energética mundial, com foco nos reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás.

Em seguida, no Capítulo 1, é realizada um revisão bibliográfica com foco nas publicações recentes dedicadas aos reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás e, principalmente, à modelagem e à simulação numérica. No Capítulo 2, conduz-se uma breve revisão sobre a determinação das principais propriedades de rocha e fluido, essenciais nos modelos de transporte envolvendo uma mistura de componentes. Destaca-se, também, a equação de estado adotada e sua aplicação específica no contexto do escoamento abordado nesta dissertação. Ademais, concentra-se na introdução das equações de conservação de massa e quantidade de movimento. Ao combinálas, obtém-se as equações de transporte do fluido e para cada componente. Adicionalmente, aborda-se o fenômeno do escorregamento, comumente presente em reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás.

As equações diferenciais parciais não-lineares, expressas em termos das variáveis dependentes pressão do gás e fração molar de um dos componentes, são resolvidas numericamente utilizando a metodologia detalhada no Capítulo 3. Nele, portanto, revisa-se o método numérico *Control Volume-Finite Difference* (CVFD) e apresenta-se as técnicas de decomposição de operadores e linearização utilizadas.

Os resultados numéricos obtidos são apresentados e discutidos no Capítulo 4. Destaca-se os estudos de sensibilidade em relação à variação de alguns dos parâmetros relacionados às simulações.

Finalmente, as conclusões e as perspectivas para trabalhos futuros são apresentados, como de praxe, no último capítulo.

1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nos últimos anos, têm-se intensificado as investigações dedicadas aos reservatórios de baixa e de baixíssima permeabilidade portadores de gás natural. Dentre os temas explorados, é possível destacar os estudos: dos mecanismos do escoamento em reservatórios do tipo *shale gas* (Zhao; Zhang; Shan, 2018; Sheng; Javadpour; Su, 2018); das correlações para a permeabilidade absoluta como função da pressão (Shi et al., 2014; Moghaddam; Jamiolahmady, 2016; Afagwu et al., 2020); dos poços horizontais fraturados em reservatórios do tipo *shale gas* (Miao et al., 2018); sobre os reservatórios naturalmente fraturados (Li et al., 2020); do escoamento bifásico incluindo o escorregamento do gás e a produção através de poços horizontais fraturados (Wang et al., 2017b; Fu et al., 2022; Zhang; Jin; Yang, 2022); e dos efeitos da heterogeneidade e não-Darcy em reservatórios do tipo *tight gas* (Song et al., 2015). Portanto, neste capítulo, é realizada uma revisão bibliográfica acerca dos trabalhos publicados nos últimos anos focados, principalmente, na modelagem e na simulação de escoamentos em reservatórios de baixa e baixíssima permeabilidade contendo gás natural.

1.1 Efeito do escorregamento do gás

O efeito do deslizamento (escorregamento) do gás, sobre a superfície porosa, pode ser significativo quando a pressão é baixa e/ou o diâmetro dos poros é pequeno. O aumento da pressão reduz o efeito do deslizamento. No entanto, nem sempre é possível obter uma pressão elevada em condições de laboratório ou medi-la em campo. Além disso, a medição da permeabilidade durante o escoamento de gás, em um meio poroso, também pode ser impactada pelo processo de adsorção. Nestas circunstâncias, Wang, Yu e Yuan (2019) desenvolveram um método experimental para determinar a permeabilidade de meios porosos de baixa permeabilidade. Os autores mensuraram os seus valores em regime permanente, para estudar o escoamento de metano sob diferentes pressões em reservatórios do tipo *tight gas* e *shale gas*. Assim, foram calculadas as permeabilidades aparente e absoluta e, utilizando os parâmetros medidos, foi derivado um modelo matemático para determinação da permeabilidade intrínseca, sendo a sua viabilidade testada a partir de resultados experimentais.

Já Zhang et al. (2020) estudaram o escoamento de gás em reservatórios de baixa permeabilidade, levando em consideração as variações reais de temperatura e pressão do reservatório, além do tamanho caraterístico da garganta dos poros na formação produtora. O fluxo mássico de gás foi simulado mediante o emprego do método lattice Boltzmann. Os autores consideraram a influência dos efeitos na microescala, do deslizamento e de outros fatores, sendo que os resultados obtidos foram comparados com soluções analíticas e numéricas disponíveis na literatura. Dentre outras coisas, eles observaram que quando a pressão se situava no intervalo de 3 a 70 MPa e a temperatura no intervalo de 293,15 a 373,15 K, o número adimensional de Knudsen (Kn) sempre foi inferior a 0,1 e o escoamento apresentou regimes do tipo escorregamento ou de fluxo contínuo (menos presente). Também, segundo os autores, o efeito do comprimento caraterístico no seu valor é maior do que o associado à mudança de pressão. Além disso, quando a relação entre as dimensões do poro e da garganta dos poros é constante, o valor do Kn aumenta lentamente ao longo da garganta. A tendência de crescimento torna-se mais acentuada com o aumento da razão entre as dimensões do poro e da garganta.

O efeito do deslizamento afeta também o escoamento de gás em minas de carvão. Por exemplo, Meng, Li e Lai (2021) analisaram a variação da permeabilidade em vários tipos de carvão, sob a influência das tensões efetivas. Os resultados indicaram que com a redução da pressão nos poros, a permeabilidade aparente do gás e o efeito do deslizamento no carvão aumentam, seguindo o comportamento previsto pelo modelo de Klinkenberg para o escorregamento. Segundo os autores, o deslizamento do gás em vários tipos de carvão é controlado pela tensão efetiva, com a relação entre a permeabilidade aparente e a tensão efetiva modelada por um decaimento exponencial. Por outro lado, com o aumento da tensão efetiva, o escorregamento cresce exponencialmente. Neste âmbito, eles propuseram um novo método de avaliação do efeito do deslizamento de gás.

Os efeitos do comportamento não ideal do gás e do deslizamento, quando da medição da permeabilidade em meios porosos, foram abordados por Guria (2023). Equações de estado cúbicas, em particular as equações de estado de van der Waals, Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson, foram utilizadas para reproduzir o comportamento não ideal dos gases, incluindo hidrocarbonetos ou não. O pesquisador propôs um modelo matemático abrangente para a avaliação da permeabilidade aparente, dependente da pressão e da temperatura, em meios porosos quando do escoamento de gases reais.

Rubin et al. (2019) realizaram experimentos em folhelhos da formação Marcellus e mostraram que os efeitos do deslizamento do gás e da compactação da matriz são significativos quando da avaliação da produção de gás, devido à depleção substancial da pressão do reservatório, especialmente durante o período final de produção. No entanto, o impacto deles na quantificação da recuperação do gás e no projeto do fraturamento hidráulico ainda não foi claramente compreendido e sistematicamente investigado. De acordo com os autores, os resultados mostraram que ignorar os dois efeitos, na simulação do escoamento no reservatório, leva a uma estimativa incorreta da produção de gás.

Já no trabalho de Ding et al. (2014), foram realizados experimentos a fim de compreender o comportamento não linear do escoamento em reservatórios do tipo tight gas, incluindo os efeitos do escorregamento e inerciais/turbulentos. Eles atestaram que os métodos experimentais aplicáveis em reservatórios convencionais conduzem a erros

significativos quando aplicados nesses reservatórios não convencionais.

Além disso, Fu et al. (2022) propuseram um novo modelo para o índice de produtividade para poços horizontais fraturados, em escoamentos bifásicos, incluindo o efeito do escorregamento. Segundo os autores, o escoamento de água pode inibir o fluxo de gás em um reservatório de baixa permeabilidade, sendo esse efeito mais significativo quando da ocorrência de maiores diferenças de pressão no escoamento.

De fato, a avaliação da viabilidade econômica de reservatórios de gás não convencionais tem sido um desafio devido às dificuldades inerentes em se quantificar acuradamente as permeabilidades absolutas na escala micro/nano-darcy (Feng et al., 2019). Trata-se de uma propriedade que influencia sobremaneira no comportamento do transporte da massa de gás em meios porosos com baixa permeabilidade. No entanto, medir corretamente a permeabilidade de meios porosos desse tipo é uma tarefa árdua. O escoamento de gás difere do que ocorre com líquidos, por exemplo, em decorrência da sua elevada compressibilidade, do efeito do deslizamento e, por vezes, da adsorção (Wang; Yu; Yuan, 2019).

1.2 Estrutura rochosa e heterogeneidades

Os reservatórios de *shale gas* vêm sendo explotados na última década, produzindo comercialmente gás natural, e tornaram-se uma importante fonte de energia no mundo atual (Taghavinejad et al., 2020). Devido à sua crescente importância, a descrição e a caraterização desses reservatórios são assuntos frequentemente abordados nas comunidades científica e tecnológica ligadas à área de óleo & gás, incluindo a modelagem físico-matemática do escoamento.

Em 2015, Sheng et al. (2015) afirmaram que os reservatórios do tipo folhelho estavam para se tornarem cada vez mais importantes, devido à utilização de poços horizontais multi-fraturados. Os folhelhos possuem, em geral, querogênio abundante e poros cuja dimensão encontra-se na nanoescala, e tal fato deve ser levado em consideração quando da modelagem do escoamento de gás nesses reservatórios. Assim, a lei de Darcy pode não descrever corretamente o escoamento nesses casos, uma vez que os folhelhos portadores de gás são compostos por estruturas com múltiplos tamanhos de poros (incluindo o querogênio, a matriz inorgânica e as fraturas naturais). Então, é necessário se considerar os efeitos combinados do escoamento viscoso, do deslizamento e da adsorção gasosa.

Prosseguindo, Sheng et al. (2015) consideraram as equações da continuidade e de Darcy modificada (utilizando uma permeabilidade aparente) para descrever o escoamento através de poros de múltiplas dimensões em folhelhos portadores de gás, levando em conta o conteúdo de querogênio, a matriz inorgânica e as fraturas naturais. Eles contemplaram, também, a produção mediante o uso de poços horizontais multi-fraturados, sendo apresentado um modelo analítico para meios com porosidade múltipla, para descrever o fluxo de gás do querogênio para as fraturas hidráulicas. Soluções foram obtidas utilizando a transformada de Laplace e os resultados mostraram que os efeitos específicos, inerentes ao escoamento em reservatórios do tipo *shale gas*, influenciam significativamente a produção e não devem ser negligenciados nos modelos físico-matemáticos.

O estudo de Luo et al. (2019) objetivou analisar a variação de temperatura e diagnosticar quantitativamente a produção de água, em poços horizontais multi-fraturados, para escoamentos bifásicos em reservatórios do tipo *tight gas*. O estudo levou ao desenvolvimento de um modelo para a determinação da temperatura levando em consideração efeitos tais como, por exemplo, o Joule-Thomson e a expansão térmica. Eles simularam casos sintéticos para ilustrar o comportamento da temperatura. A análise de sensibilidade realizada indicou que o deslizamento da fase gasosa foi responsável pela redução da temperatura do poço. Concluíram, ainda, que a temperatura do poço foi significativamente impactada em função dos valores da permeabilidade do reservatório e do comprimento das fraturas. Posteriormente, o modelo proposto foi aplicado a um caso de campo e a comparação mostrou uma boa concordância entre os resultados.

Em Liu et al. (2022), foi examinado experimentalmente o efeito da estrutura porogarganta no comportamento do escoamento gás-água, em uma formação composta por arenito de baixa permeabilidade portador de gás natural. Mais especificamente, foram realizados ensaios de injeção de mercúrio, sob pressão controlada, para medir a pressão capilar e identificar as características de uma estrutura poro-garganta, assim como a sua conetividade e distribuição dos diâmetros dos poros. Ulteriormente, as especificidades do escoamento, incluindo a variação da saturação do fluido móvel, a permeabilidade relativa e o grau de bloqueio da água, foram quantificadas utilizando experimentos de deslocamento e a técnica de ressonância magnética nuclear. A estrutura poro-garganta, especialmente a sua conectividade, foi estimada como sendo o fator dominante na distribuição da saturação do fluido móvel e nas características de infiltração das duas fases em um reservatório do tipo *tight gas* composto por arenito. Esse estudo permitiu compreender melhor a forma como a estrutura da garganta dos poros influencia o comportamento do escoamento gás-água em um reservatório de gás de baixa permeabilidade, enfatizando a sua importância para que os padrões de escoamento sejam identificados e classificados adequadamente.

O reservatório de gás no campo de Kelasu, na bacia de Tarim (China), é do tipo *tight gas*, ultra-profundo e com fraturas existentes em várias escalas dentro da matriz, incluindo a presença de falhas. O escoamento no seu interior foi estudado por Sun et al. (2023), via simulações numéricas do tipo teste de pressão, em poços verticais, considerando a matriz porosa, as fraturas e as falhas, combinando a geração aleatória de redes de fraturas naturais com o uso de fraturas discretas não-estruturadas. A metodologia numérica utilizou o método dos elementos finitos mistos e foram obtidas curvas típicas, levando em conta diferentes redes de fratura aleatórias. Com base nos resultados observados, a distribuição da rede de fraturas, dos reservatórios do tipo arenito de baixa permeabilidade fraturados,

foi classificada em categorias e foi discutida a influência da geração aleatória de redes de fraturas nos testes de poço.

Um método para descrever o escoamento bifásico água-gás, considerando um poço horizontal multi-fraturado em uma formação do tipo *shale gas*, foi desenvolvido e validado por Zhang e Yang (2023). No que diz respeito ao subsistema formado pelas fraturas, um coeficiente apropriado para o escoamento não-Darcy, devido à ocorrência de efeitos inerciais/turbulentos, e um fator de deslizamento foram definidos e incorporados na equação governante do escoamento. Ademais, um método iterativo foi aplicado para a determinação das saturações, em cada segmento de fratura dentro de redes de fraturas discretas, em um estudo de simulação numérica. Um termo de adsorção/dessorção também foi introduzido na equação de difusão, levando em conta o gás adsorvido na nanoescala, para calcular acuradamente a produção do *shale gas*. Conforme as conclusões, em comparação com as taxas de produção de gás/água observadas em aplicações de campo, as soluções obtidas eram compatíveis e confirmaram a confiabilidade do modelo.

Akilu, Padmanabhan e Sun (2021) classificaram o transporte de gás em reservatórios não convencionais como complexo, diferindo daquele dos reservatórios convencionais de baixas porosidade e permeabilidade. Uma peculiaridade marcante da matriz do folhelho são as estruturas de poros que ocorrem, principalmente, em tamanhos que variam de alguns a centenas de nanômetros. Certas interações, que ocorrem na interface fluido-poro, acarretam mudanças drásticas nas propriedades físicas do fluido, influenciando assim diferentes mecanismos de transferência de massa, que podem ser modelados usando uma permeabilidade aparente. Na literatura, são aplicadas três abordagens principais para estimá-la: as experimentais, as numéricas e as analíticas. Ainda nesse trabalho, os autores revisaram sistematicamente os modelos analíticos, com especial atenção aos mecanismos fundamentais de escoamento em reservatórios do tipo *shale gas*.

A simulação numérica foi utilizada por Yu et al. (2020) para avaliar o escoamento de gás em camadas de carvão sendo que, devido à heterogeneidade das microestruturas consideradas, o simulador foi concebido prevendo o emprego de uma malha adaptativa. A acurácia dos resultados foi comprovada tendo em vista o regime de deslizamento, cujo efeito resulta no aumento do fluxo de massa.

Por fim, de acordo com estudos recentes, o fluxo mássico de gás em folhelhos é tido como um processo complexo, desde a nanoescala até à macroescala, e inclui a difusão de moléculas de gás dissolvidas no volume de querogênio, a dessorção nas paredes dos poros, o escorregamento e o escoamento em rede de fraturas naturais (Huang; Guo; Chen, 2015).

1.3 Injeção de CO_2

Nesta revisão, viu-se que os reservatórios *tight gas* e *shale gas* têm-se tornado cada vez mais importantes dentro da classe das reservas não convencionais. Dentre as aplicações envolvendo-os, destaca-se a injeção de dióxido de carbono, visando ao sequestro de carbono e à recuperação de gás natural. Por exemplo, devido à adsorção competitiva existente entre o gás carbônico e o metano (CH₄), a captura e a retenção de carbono nos reservatórios do tipo *shale gas* constituem, também, uma oportunidade para se melhorar a recuperação de gás. Além do mais, as operações envolvendo a injeção de CO₂ também são utilizadas na recuperação de óleo.

Almejando avaliar o processo de captura do dióxido de carbono e a recuperação melhorada de gás (CO_2 -Enhanced Gas Recovery, CO_2 -EGR), Tang et al. (2023) propuseram um modelo que leva em conta os principais mecanismos que contribuem para a dinâmica do escoamento em um reservatório shale gas, incluindo o deslizamento do gás e a adsorção competitiva dos diferentes componentes. O problema abordado era um sistema constituído de dois poços de injeção de CO_2 e um poço de produção. A viabilidade da retenção do gás injetado e da recuperação melhorada de gás foi estudada, empregando simulações numéricas, e as respostas para um escoamento em um reservatório shale gas no que diz respeito à pressão do reservatório, temperatura e permeabilidade foram analisadas. Os resultados mostraram que a temperatura da formação, o tamanho médio dos poros e a taxa de injeção foram os fatores mais importantes no projeto de recuperação.

O método Huff and Puff (HNP) de CO₂ é um dos métodos mais eficazes para se melhorar a recuperação de óleo de baixa densidade após o processo de recuperação primária. Ele consiste na injeção do gás no poço (etapa Huff), seguida pelo fechamento do poço, que faz com que esse gás migre para o reservatório permitindo a saída do óleo em contracorrente impulsionado pela gravidade. Após, o poço é reaberto e posto para produzir (etapa Puff). Os mecanismos de escoamento do CO₂ e do óleo bruto em meios porosos são complexos durante o processo HNP. Luo et al. (2022) estudaram esse mecanismo (HNP) em um reservatório de óleo de baixa permeabilidade, Chang-7, na Bacia de Ordos, China, empregando a tecnologia de ressonância magnética nuclear, observações microscópicas e a simulação numérica. Eles puderam verificar que a injeção de dióxido de carbono pôde, efetivamente, auxiliar no deslocamento do óleo bruto na região impactada pela varredura.

O potencial da injeção de gás e água alternadamente (*Water alternating gas*, WAG), no armazenamento de CO_2 , foi explorado usando métodos experimental e de simulação numérica no trabalho de Li et al. (2022). Mediante a comparação dos resultados de experimentos com injeção do tipo WAG e contínua de dióxido de carbono, os autores observaram que os efeitos da injeção WAG foram superiores aos utilizando somente água ou CO_2 . Ainda, para se alcançar o armazenamento máximo de gás carbônico, foi aplicada uma técnica de otimização a fim de se ajustar os parâmetros do modelo de escoamento.

2 ESCOAMENTO BICOMPONENTE

Neste trabalho, como aborda-se a simulação do escoamento monofásico bicomponente em um meio poroso, são fundamentais os balanços de massa para os componentes, a conservação da quantidade de movimento para a fase gás e as equações para a determinação das propriedades de fluido e de rocha. Elas são imprescindíveis quando da obtenção das duas equações diferenciais parciais não lineares, que fornecerão a distribuição do campo de pressão da fase gás e a fração molar de um dos componentes. Aqui, são descritos os conceitos básicos, necessários para a construção do modelo físico-matemático adotado. Fundamentalmente, discorre-se sobre a equação de estado, as propriedades de fluido e de rocha, as equações de balanço e as equações diferenciais parciais não lineares escritas em termos da pressão da fase gás e da fração molar do CO_2 .

2.1 Equação de estado cúbica

Considerando-se que a fase gás seja formada por N_c componentes, o número total de mols na mistura é

$$n = \sum_{m=1}^{N_c} n_m,$$

onde n_m é o número de mols do *m*-ésimo componente. Normalizando-se o número de mols de cada componente obtém-se a fração molar,

$$x_m = \frac{n_m}{n}, \quad m = 1, 2, \dots, N_c,$$

e, então,

$$\sum_{m=1}^{N_c} x_m = 1.$$

Por outro lado, a densidade molar de cada componente é definida como

$$\xi_m = \frac{n_m}{v_m}, \quad m = 1, 2, \dots, N_c,$$

sendo v_m o volume molar do componente m.

A densidade molar da mistura ideal é dada por

$$\xi = \sum_{m=1}^{N_c} \xi_m,$$

e escreve-se a massa específica da fase como

$$\rho = \xi \sum_{m=1}^{N_c} x_m W_m,\tag{1}$$

onde W_m é a massa molar do *m*-ésimo componente.

A densidade molar, ξ , é uma função que depende da pressão, da temperatura e das frações molares de cada componente. Ela pode ser determinada mediante o uso de equações de estado, e.g., a de Peng-Robinson (Ahmed, 2018)

$$p = \frac{RT}{v_m - b} - \frac{a\alpha_m}{v_m^2 + 2bv_m - b^2},$$
(2)

onde p é a pressão, R é a constante universal dos gases, T é a temperatura e α_m , $a \in b$ são variáveis a serem apresentados na sequência.

Neste contexto, introduz-se a_m e b_m , que são parâmetros da equação de estado para uma substância pura m, dados por (Chen, 2007)

$$a_m = \alpha_m \Omega_{ma} \left(\frac{R^2 T_{cm}^2}{p_{cm}} \right)$$

е

$$b_m = \Omega_{mb} \left(\frac{RT_{cm}}{p_{cm}} \right),$$

onde T_{cm} e p_{cm} são a temperatura e a pressão críticas do *m*-ésimo componente, respectivamente. Ω_{ma} e Ω_{mb} são constantes e assumem os valores

$$\Omega_{ma} = 0,45724, \qquad \Omega_{mb} = 0,077796,$$

e α_m é determinado por

$$\alpha_m = \left[1 + \lambda_m \left(1 - \sqrt{T/T_{cm}}\right)\right]^2,$$

onde

$$\lambda_m = \begin{cases} 0,37464 + 1,5423\omega_m - 0,26992\omega_m^2 & \text{se} \quad \omega_m < 0,5 \\\\ 0,3796 + 1,485\omega_m - 0,1644\omega_m^2 + 0,01667\omega_m^3 & \text{se} \quad \omega_m \ge 0,5. \end{cases}$$

e ω_m é o fator acêntrico, que representa o desvio do formato das moléculas com relação ao formato de uma esfera.

Para uma mistura de N_c componentes, define-se as novas variáveis

$$a = \sum_{m=1}^{N_c} \sum_{v=1}^{N_c} x_m x_v \left(1 - k_{mv}\right) \sqrt{a_m a_v}$$

е

$$b = \sum_{m=1}^{N_c} x_m b_m,$$

onde x_m e x_v são as frações molares dos componentes m e v. Já k_{mv} é um parâmetro de interação binário entre os componentes m e v, função da diferença entre os tamanhos moleculares dos componentes.

Por último, introduz-se o fator de compressibilidade

$$Z = \frac{pV}{RT},$$

além de

$$A = \frac{ap}{R^2 T^2}, \qquad B = \frac{bp}{RT},$$

onde V é o volume, de modo que a equação de estado pode ser posta na forma de um polinômio cúbico, partindo-se da sua forma original dada pela Equação (2),

$$Z^{3} - (1 - B)Z^{2} + (A - 2B - 3B^{2})Z - (AB - B^{2} - B^{3}) = 0,$$

Então, a densidade molar pode ser calculada uma vez conhecido Z (Ahmed, 2018),

$$\xi = \frac{p}{RTZ},$$

sendo possível determinar a massa específica utilizando-se a Equação (1).

2.2 Solução da equação de estado de Peng-Robinson

Agora, é importante se discutir como resolver a equação de estado cúbica escrita como

$$\mathcal{L}^3 + \mathcal{E}\mathcal{L}^2 + c\mathcal{L} + d = 0,$$

onde, segundo Chen (2007),

$$\mathfrak{X} = \mathfrak{X} - \frac{\mathfrak{b}}{3}$$

De forma que pode-se reescrever a equação cúbica na forma

$$\mathfrak{X}^3 + \mathfrak{P}\mathfrak{X} + \mathfrak{Q} = 0, \tag{3}$$

onde

$$\mathscr{P} = -rac{\mathscr{b}^2}{3} + c, \qquad \mathbb{Q} = rac{2\mathscr{b}^3}{27} - rac{\mathscr{b}\cdot c}{3} + d,$$

e define-se a nova variável

$$\Delta = \left(\frac{Q}{2}\right)^2 + \left(\frac{\mathcal{P}}{3}\right)^3.$$

As três raízes da Equação (3) podem ser computadas pelo método de Cardano (Chen, 2007):

$$\mathfrak{X}_1 = \sqrt[3]{-\frac{\mathfrak{Q}}{2} + \sqrt{\Delta}} + \sqrt[3]{-\frac{\mathfrak{Q}}{2} - \sqrt{\Delta}},$$

$$\mathfrak{X}_2 = \varpi \sqrt[3]{-\frac{\mathfrak{Q}}{2} + \sqrt{\Delta}} + \varpi^2 \sqrt[3]{-\frac{\mathfrak{Q}}{2} - \sqrt{\Delta}},$$

$$\mathfrak{X}_3 = \varpi^2 \sqrt[3]{-\frac{\mathfrak{Q}}{2} + \sqrt{\Delta}} + \varpi \sqrt[3]{-\frac{\mathfrak{Q}}{2} - \sqrt{\Delta}},$$

nas quais

$$\varpi = \frac{-1 + i\sqrt{3}}{2}, \qquad \varpi^2 = \frac{-1 - i\sqrt{3}}{2},$$

com $i = \sqrt{-1}$ sendo o número imaginário.

Entretanto, o método não é capaz de fornecer as raízes da equação cúbica sem a

inserção de números complexos, mesmo quando a equação possui três raízes reais. Contudo, para $\Delta > 0$, a Equação (3) possui apenas uma raiz real \mathfrak{X}_1 e, quando $\Delta \leq 0$, existem três raízes reais (Chen; Huan; Ma, 2006):

 $\mathfrak{X}_1 = 2\sqrt[3]{\mathfrak{R}} \cos\theta,$

$$\mathfrak{X}_2 = 2\sqrt[3]{\mathfrak{R}} \cos\left(\frac{2\pi}{3} + \theta\right),$$

$$\mathfrak{X}_3 = 2\sqrt[3]{\mathfrak{R}} \cos\left(\frac{4\pi}{3} + \theta\right),$$

nas quais

$$\Re = \sqrt{-\left(\frac{\mathscr{P}}{3}\right)^3}$$
 e $\theta = \frac{1}{3}\cos^{-1}\left(-\frac{\mathfrak{Q}}{2\mathfrak{R}}\right).$

Finalmente, as raízes do polinômio, fornecidas em termos de \mathfrak{X} , são

$$\mathfrak{X}_1 = \mathfrak{X}_1 - \frac{\mathfrak{b}}{3}, \qquad \mathfrak{X}_2 = \mathfrak{X}_2 - \frac{\mathfrak{b}}{3} \qquad \mathrm{e} \qquad \mathfrak{X}_3 = \mathfrak{X}_3 - \frac{\mathfrak{b}}{3}.$$

Quando a solução da equação de estado provê apenas uma raiz real (as outras duas complexas), ela é a escolhida. Por outro lado, existindo três raízes reais, a seleção do valor correto depende do fluido estudado: opta-se pela maior raiz caso o fluido seja um gás e, no caso do óleo, pela menor raiz positiva, isto é válido para o caso de uma região bifásica. (Chen; Huan; Ma, 2006).

2.3 Determinação da viscosidade do gás

Tendo-se em vista a determinação da viscosidade, emprega-se a correlação de Lohrenz (Chen, 2007). Para cada componente ou pseudocomponente necessita-se conhecer a pressão crítica, p_{cm} , a temperatura crítica, T_{cm} , o volume crítico, V_{cm} e o peso molecular é W_m , m = 1, 2, ..., N_c . Ademais, sabe-se que a temperatura reduzida para o componente m é $T_{r_m} = T/T_{c_m}$, onde $m = 1, 2, ..., N_c$.

Em se tratando do cálculo da viscosidade de um componente à baixa pressão,

$$\mu_m^* = \begin{cases} \frac{34 \times 10^{-5} T_{rm}^{0.94}}{\eta_m} & \text{se } T_{rm} < 1, 5, \\ \frac{17, 78 \times 10^{-5} (4, 58T_{rm} - 1, 67)^{5/8}}{\eta_m} & \text{se } T_{rm} \ge 1, 5, \end{cases}$$

onde as unidades estão em centipoise (cp) para a viscosidade, Kelvin para a temperatura e atm para a pressão. Além disso,

$$\eta_m = \frac{T_{c_m}^{1/6}}{W_m^{1/2} p_{cm}^{2/3}}.$$

Por outro lado, na determinação da viscosidade do fluido (cp) à baixa pressão,

$$\mu^* = \frac{\sum_{m=1}^{N_c} x_m \mu_m^* W_m^{1/2}}{\sum_{m=1}^{N_c} x_m W_m^{1/2}}$$

e, para a massa específica reduzida,

$$\xi_r = \frac{\xi}{\xi_c},$$

sendo que

$$\xi_c = \frac{1}{\sum_{m=1}^{N_c} x_m V_{cm}}.$$

Por fim, para o cálculo da viscosidade da fase gás (cp),

$$\left[(\mu - \mu^*)\eta + 10^{-4}\right]^{1/4} = 0,1023 + 0,023364\xi_r + 0,058533\xi_r^2 - 0,40758\xi_r^3 + 0,0093324\xi_r^4,$$

na qual

$$\eta = \frac{(\sum_{m=1}^{N_c} x_m T_{cm})^{1/6}}{(\sum_{m=1}^{N_c} x_m W_m)^{1/2} (\sum_{m=1}^{N_c} x_m p_{cm})^{2/3}}.$$

2.4 Propriedades de rocha

A porosidade (ϕ) indica a capacidade de armazenamento de hidrocarbonetos no reservatório e é definida como sendo a relação entre o volume de poros de um sólido e o seu volume total (Islam et al., 2010), ou seja,

$$\phi = \frac{V_v}{V_t},$$

onde $V_v \in V_t$ são o volume poroso e o volume total, respectivamente. A porosidade varia, em geral, espacialmente e, então, o meio poroso é considerado heterogêneo em relação à propriedade (Ezekwe, 2010). Como assume-se nesta dissertação que o escoamento é isotérmico, a porosidade varia somente em função da pressão.

A compressibilidade da rocha é dada por (Ezekwe, 2010)

$$c_{\phi} = \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dp},$$

que após integração e simplificações (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001), para uma compressibilidade pequena e constante, resulta em:

$$\phi = \phi^0 \left[1 + c_\phi (p - p^0) \right],$$

onde p^0 é uma pressão de referência, na qual a porosidade é ϕ^0 .

A permeabilidade absoluta é uma medida da capacidade do fluido escoar pelos poros interconectados do meio poroso, e é representada tipicamente pelo tensor permeabilidade absoluta \mathbf{k} (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001). Em se tratando de um meio anisotrópico e considerando que o tensor seja diagonal

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_x & 0 & 0\\ 0 & k_y & 0\\ 0 & 0 & k_z \end{pmatrix},$$

onde k_x , $k_y \in k_z$ são as permeabilidades absolutas nas direções espaciais dos eixos $x, y \in z$.

Por fim, a tortuosidade, τ , quantifica o desvio entre o caminho percorrido entre dois pontos, no meio poroso, com relação à distância do deslocamento entre eles em linha reta (Chen; Huan; Ma, 2006).

2.5 Equações de balanço

Segundo Chen (2007), para um escoamento monofásico de gás em meio poroso, da conservação da massa obtém-se a equação da continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \xi \right) = -\nabla \cdot \left(\xi \mathbf{v} \right) + q,\tag{4}$$

onde \mathbf{v} é a velocidade superficial do escoamento e q é um termo de fonte/sorvedouro.

Para a conservação de massa de cada componente, considerando a fração molar x_m e N_c componentes, escreve-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi x_m \xi \right) = -\nabla \cdot \left(x_m \xi \mathbf{v} + \mathbf{J}_m \right) + q_m \qquad m = 1, 2, \cdots, N_c, \tag{5}$$

onde q_m é o termo fonte/sorvedouro relativo ao *m*-ésimo componente e \mathbf{J}_m representa o fluxo de massa por difusão associado ao componente *m*.

Neste trabalho, a equação que expressa o balanço da quantidade de movimento para o escoamento em um meio poroso é a lei de Darcy modificada (RosÁrio, 2020), tendo-se em vista a incorporação do efeito de escorregamento,

$$\mathbf{v} = -\frac{\mathbf{k}_a}{\mu} \left(\nabla p - \gamma \nabla D \right),\tag{6}$$

onde \mathbf{k}_a é o tensor permeabilidade aparente, γ é o peso específico do gás (produto da massa específica pela magnitude da aceleração da gravidade) e D é a profundidade. Se $\mathbf{k}_a = \mathbf{k}$ recupera-se a lei de Darcy clássica e, nesse caso, não se considera o efeito do deslizamento.

Conforme visto, o escorregamento é um efeito que pode ocorrer em reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás e é classificado como *não-Darcy*. Ele também é denominado de efeito Klinkenberg (Aziz; Settari, 1979) e ocorre quando o livre caminho médio das moléculas do gás possui uma escala comparável à da dimensão dos poros (Florence et al., 2007). Segundo Klinkenberg (1941), a permeabilidade aparente é dada por

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

onde b é o parâmetro de Klinkenberg.

Entretanto, um modelo mais recente considera a sua variação em função do número de Knudsen, Kn, razão entre o livre caminho médio das moléculas (λ) e um comprimento característico do meio poroso (R_h) (Florence et al., 2007).

Em função dos valores do número de Knudsen tem-se diferentes regimes de escoamento: contínuo, se $K_n \leq 10^{-3}$; escorregamento, se $10^{-3} < K_n < 0, 1$; transição, quando $0, 1 \leq K_n \leq 10$; e molecular livre, para $K_n \geq 10$ (Civan, 2010).

No caso monocomponente (Florence et al., 2007),

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

onde

$$\lambda = \frac{\mu}{p} \sqrt{\frac{\pi Z R T}{2M}}$$

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

е

onde k_m é a média geométrica das permeabilidades absolutas nas direções principais, tensor permeabilidade absoluta diagonal, e M é a massa molecular do gás.

Para o caso multicomponente, os valores são adaptados usando as regras conhecidas na literatura. Neste trabalho, foi utilizada a forma sugerida por Wang, Lukyanov e Wu (2019)

$$\lambda_M = \sum_{m=1}^{N_c} x_m \lambda_m$$

onde λ_M é uma média ponderada do livre caminho médio contemplando as influências dos diferentes componentes na mistura, sendo λ_m o livre caminho médio determinado para o m-ésimo componente. Desta forma, utiliza-se

$$Kn_M = \frac{\lambda_M}{R_h},$$

onde Kn_M é o número de Knudsen incorporando a influência da presença dos componentes na mistura gasosa.

Assim, a permeabilidade aparente pode ser calculada em função do número de Knudsen na seguinte forma (Civan; Rai; Sondergeld, 2011)

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

sendo $\alpha \in b'$ coeficientes do modelo de escoamento.

Considerando as condições para o regime de escorregamento, o coeficiente de rarefação α é zero e, em geral, b = -1 (Florence et al., 2007). Então,

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

Por outro lado, uma extensão da lei de Fick (Chen; Huan; Ma, 2006), para escoamentos em meios porosos, é usada para expressar o fluxo de massa em função do gradiente de concentração

$$\mathbf{J}_m = -\phi \xi \mathbf{D}_m \nabla x_m, \qquad m = 1, 2, \cdots, N_c,$$

onde \mathbf{D}_m é o tensor efetivo de dispersão do componente mna mistura composta por N_c
componentes distintos, sendo esse tensor definido como (Chen; Huan; Ma, 2006)

$$\mathbf{D}_{m}\left(\mathbf{v}\right) = \mathfrak{D}_{m}\mathbf{I} + \left|\mathbf{v}\right| \left(\mathfrak{D}_{ml}\mathbf{E}\left(\mathbf{v}\right) + \mathfrak{D}_{mt}\mathbf{E}^{\perp}\left(\mathbf{v}\right)\right),\tag{7}$$

onde \mathfrak{D}_m é o coeficiente de difusão molecular, \mathfrak{D}_{ml} e \mathfrak{D}_{mt} são, respectivamente, os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal, $|\mathbf{v}|$ a magnitude do vetor velocidade

$$|\mathbf{v}| = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + v_3^2},$$

 $\mathbf{E}\left(\mathbf{v}\right)$ é o tensor projeção ortogonal do vetor velocidade

$$\mathbf{E}(\mathbf{v}) = \frac{1}{|\mathbf{v}|^2} \begin{pmatrix} v_1^2 & v_1 v_2 & v_1 v_3 \\ v_2 v_1 & v_2^2 & v_2 v_3 \\ v_3 v_1 & v_3 v_2 & v_3^2 \end{pmatrix}$$

e $\mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{v}) = \mathbf{I} - \mathbf{E}(\mathbf{v})$, onde \mathbf{I} é o tensor identidade.

Sabe-se que o valor do coeficiente de dispersão longitudinal aumenta em função da escala do domínio físico (Gelhar; Welty; Rehfeldt, 1992). Logo, quanto maior for o reservatório, maior será o valor do coeficiente de dispersão. Por exemplo, uma correlação para a dispersividade, baseada na escala do problema, é dada por (Xu; Eckstein, 1995)

$$\mathfrak{D}_{ml} = 0,83 \left(\log_{10} L \right)^{2,414},$$

na qual L é um comprimento característico na escala de campo.

2.6 Equações governantes

Substituindo-se \mathbf{v} , Equação (6), nas Equações (4) e (5), e o vetor fluxo difusivo \mathbf{J}_m na Equação (5), obtém-se as equações de transporte para a fase gasosa e para cada componente. Por conseguinte, a solução delas determina a distribuição, no espaço e no tempo, da pressão da fase gasosa e da fração molar de cada componente (Chen, 2007).

Tem-se, então, para a pressão da fase gasosa

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \xi \right) = \nabla \cdot \left[\frac{\xi}{\mu} \mathbf{k}_a \left(\nabla p - \gamma \nabla D \right) \right] + q, \tag{8}$$

enquanto que, para a fração molar do *m*-ésimo componente,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi x_m \xi \right) = \nabla \cdot \left[\frac{x_m \xi}{\mu} \mathbf{k}_a \left(\nabla p - \gamma \nabla D \right) + \phi \xi \mathbf{D}_m \nabla x_m \right] + q_m \qquad m = 1, 2, \dots, N_c, \tag{9}$$

$$\mathbf{D}_m = \begin{pmatrix} D_{mx} & 0 & 0\\ 0 & D_{my} & 0\\ 0 & 0 & D_{mz} \end{pmatrix}.$$

Da Equação (8), aplicando-se as regras do produto e da cadeia, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \xi \right) = \phi \left(\frac{\partial \xi}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{m=1}^{N_c} \frac{\partial \xi}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial t} \right) + \xi \frac{d\phi}{dp} \frac{\partial p}{\partial t}.$$

que, em seguida, a partir do coeficiente c(p)

$$c\left(p\right) = \phi \frac{\partial \xi}{\partial p} + \xi \frac{d\phi}{dp}$$

e de

$$\psi = \phi \sum_{m=1}^{N_c} \frac{\partial \xi}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial t}$$

pode ser reescrita como

$$c(p)\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\frac{\xi}{\mu}\mathbf{k}_a\left(\nabla p - \gamma\nabla D\right)\right] - \psi + q.$$
(10)

Portanto, almeja-se resolver numericamente as Eqs. (9) e (10). Assim sendo, ainda deve-se fornecer as condições auxiliares apropriadas, ou seja, as suas condições iniciais e de contorno, em função do caso a ser resolvido. Quanto aos componentes, serão considerados o metano (CH₄) e o dióxido de carbono (CO₂), sendo determinadas numericamente a pressão da fase gás e a fração molar do CO₂.

2.7 Condições inicial e de contorno

O modelo físico-matemático fica completamente definido quando as condições iniciais e de contorno são especificadas. A condição inicial é caracterizada pelo instante de tempo $t_o = 0$. E para ambas as variáveis para todo domínio, isso implica:

$$p(x, y, z, t_o) = p_o(x, y, z, t_o)$$

 $x_m(x, y, z, t_o) = x_{mo}(x, y, z, t_o)$

Quanto às pressões nas fronteiras, impõe-se pressões prescritas, descritas no Capítulo de resultados de acordo com cada caso estudado. Para o problema envolvendo a variável fração molar, as condições são similares, com a diferença de que a especificação de um gradiente deixa de implicar na determinação de uma velocidade de escoamento, e passa a prescrever um fluxo de massa proveniente de uma difusão física. Portanto, para a fração molar, adota-se uma fração molar prescrita em x = 0 e a sua derivada em relação a x nula em $x = L_x$, onde L_x é o comprimento longitudinal onde se avalia o caso estudado.

3 METODOLOGIA DE RESOLUÇÃO NUMÉRICA

As equações diferenciais parciais fundamentais, delineadas no Capítulo 2, são intrinsecamente não lineares e, na sua forma geral e não simplificada, frequentemente carecem de soluções analíticas. Como resultado, a busca por soluções para essas equações requer o uso de métodos numéricos. O enfoque metodológico adotado está baseado na conversão de um problema contínuo em um discreto, viabilizando a obtenção da solução via métodos computacionais. O domínio físico é, então, dividido em regiões discretas chamadas de células, blocos, elementos finitos ou volumes finitos (Chen; Huan; Ma, 2006). Esse processo permite a determinação dos valores médios da pressão e da fração molar nestas regiões. Neste contexto, o objetivo deste capítulo é o de explorar os principais aspectos das etapas de discretização, linearização, decomposição de operadores e resolução dos sistemas de equações algébricas. Especificamente, concentra-se na obtenção das soluções numérica das equações governantes.

3.1 Discretização

A discretização é a conversão das equações diferenciais em equações algébricas, com o respectivo particionamento do domínio de solução no espaço e no tempo e a introdução dos pontos nodais nos quais as soluções são determinadas numericamente. Dentre as técnicas de discretização mais conhecidas é possível citar os Métodos das Diferenças Finitas, dos Volumes Finitos e dos Elementos Finitos. Neste trabalho, tendo em vista a sua ampla utilização pela comunidade ligada à simulação de reservatórios de petróleo, incluindo simuladores usados pela indústria, optou-se pelo *Control Volume - Finite Difference* (CVFD) (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001; Abou-Kassem; Ali; Islam, 2006; Islam et al., 2010). De fato, ele apresenta uma combinação das características dos métodos das Diferenças Finitas e dos Volumes Finitos.

Para obtenção das formas discretas via o método CVFD, o ponto de partida é a construção da malha, na qual as células (blocos ou volumes finitos) são criados e se sobrepõem a todo o domínio. O número e o tamanho dos blocos depende do tipo de problema. Optando-se por uma malha do tipo blocos centrados (Islam et al., 2010), o domínio espacial é subdividido em um conjunto de volumes finitos e as variáveis dependentes, a pressão da fase gasosa e a fração molar do dióxido de carbono, são determinadas nos centros dos mesmos e são representativas dos seus valores médios. Portanto, eles são admitidos como sendo constantes no interior dos volumes finitos. A Figura 3 representa esquematicamente um domínio unidimensional dividido em n_x volumes e possuindo um comprimento L_x , ou seja, o do reservatório na direção x. A célula i tem como centro x_i e fronteiras posicionadas em $x_{i-1/2}$ e $x_{i+1/2}$.

Figura 3 - Malha unidimensional



Fonte: Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001.

Utiliza-se uma malha estruturada, regular e tridimensional. Logo, o domínio será dividido em n_x células na direção x, n_y na direção y e n_z na direção z, e as dimensões delas são Δx , Δy e Δz , respectivamente nas direções x, y e z (vide a Figura 4). Então, deve-se verificar as relações

$$\sum_{i=1}^{n_x} \Delta x_i = L_x , \quad \sum_{j=1}^{n_y} \Delta y_j = L_y \quad e \quad \sum_{k=1}^{n_z} \Delta z_k = L_z.$$

Figura 4 - Representação de um domínio tridimensional discretizado



Fonte: Adaptada de Souza, 2013.

A Figura 5 apresenta uma ilustração da malha computacional, onde é possível notar que foi estabelecida uma nomenclatura para a localização de cada bloco em relação aos seus vizinhos. Os blocos centrais são referenciados por P = (i, j, k), sendo os seus vizinhos, e.g., A = (i, j, k + 1) (above) superior e B = (i, j, k - 1) (below) inferior, na direção z. Além disso, lateralmente, na direção x, tem-se W = (i - 1, j, k) (west) oeste e E = (i + 1, j, k) (east) leste, enquanto que na direção y, N = (i, j - 1, k) (north) norte e E = (i, j + 1, k) (south) sul.

Figura 5 - Identificação das células na malha



Fonte: Adaptada de Souza, 2013.

Com o auxílio da Figura 6, é possível observar também a nomenclatura empregada para designar as faces do bloco centrado. Bem entendido, que é através delas que os fluxos mássicos entram ou saem do bloco.

Figura 6 - Faces do bloco centrado



Fonte: Adaptada de Souza, 2013.

3.2 Discretização da equação governante - pressão

Para o problema do escoamento tridimensional, a equação discretizada, cuja variável dependente é a pressão, é obtida empregando-se aproximações centradas a três pontos no espaço (Dehkordi et al., 2014), utilizando como referência a célula (i, j, k) e o nível de

tempo n + 1, no qual as variáveis dependentes são desconhecidas. Portanto, admitindo-se que o tensor permeabilidade aparente é diagonal (Chen; Huan; Ma, 2006), a sua forma discreta é dada por

$$\left(\Gamma \frac{\partial p}{\partial t} V_b\right)_{i,j,k}^{n+1} + \left[\left(\frac{\xi k_{a_x} A_x}{\mu}\right) \frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i+1/2,j,k}^{n+1} - \left[\left(\frac{\xi k_{a_x} A_x}{\mu}\right) \frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i-1/2,j,k}^{n+1} \\ + \left[\left(\frac{\xi k_{a_y} A_y}{\mu}\right) \frac{\partial p}{\partial y} \right]_{i,j+1/2,k}^{n+1} - \left[\left(\frac{\xi k_{a_y} A_y}{\mu}\right) \frac{\partial p}{\partial y} \right]_{i,j-1/2,k}^{n+1} \\ + \left[\left(\frac{\xi k_{a_z} A_z}{\mu}\right) \frac{\partial p}{\partial z} \right]_{i,j,k+1/2}^{n+1} - \left[\left(\frac{\xi k_{a_z} A_z}{\mu}\right) \frac{\partial p}{\partial z} \right]_{i,j,k-1/2}^{n+1} \\ + \left[\left(\frac{\xi k_{a_z} A_z \gamma}{\mu}\right) \frac{\partial D}{\partial z} \right]_{i,j,k+1/2}^{n+1} - \left[\left(\frac{\xi k_{a_z} A_z \gamma}{\mu}\right) \frac{\partial D}{\partial z} \right]_{i,j,k-1/2}^{n+1} \\ = (q_{sc})_{i,j,k}^{n+1} - \psi_{i,j,k}^{n+1}$$

onde $(V_b)_{i,j,k} = (\Delta x \Delta y \Delta z)_{i,j,k}$ é o volume da célula. Em seguida, utiliza-se novamente uma aproximação por diferenças centradas (3 pontos) para as derivadas parciais espaciais de primeira ordem,

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \cong \frac{p_{i+1,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2},j,k}}$$

е

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \cong \frac{p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x_{i-\frac{1}{2},j,k}}$$

sabendo-se que um procedimento análogo é utilizado no caso das outras duas direções espaciais.

Prosseguindo, introduz-se as novas variáveis

$$\mathbb{T}_{x,i\pm\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \equiv \left(\frac{\xi k_{a_x} A_x}{\mu \Delta x}\right)_{i\pm\frac{1}{2},j,k}^{n+1},$$
$$\mathbb{T}_{y,i,j\pm\frac{1}{2},k}^{n+1} \equiv \left(\frac{\xi k_{a_y} A_y}{\mu \Delta y}\right)_{i,j\pm\frac{1}{2},k}^{n+1},$$
$$\mathbb{T}_{z,i,j,k\pm\frac{1}{2}}^{n+1} \equiv \left(\frac{\xi k_{a_z} A_z}{\mu \Delta z}\right)_{i,j,k\pm\frac{1}{2}}^{n+1},$$

onde \mathbb{T} é a transmissibilidade, que inclui propriedades de fluido, de rocha e geométrica.

Para a discretização no tempo, adotou-se uma aproximação de Euler recuada,

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t}\right)_{i,j,k}^{n+1} \cong \frac{p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^n}{\Delta t},$$

onde o sobrescrito n indica o nível de tempo no qual as variáveis dependentes são conhecidas.

Feitas todas as substituições, obtém-se a equação discretizada final, totalmente implícita no tempo,

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{x,i+1/2,j,k}^{n+1} \left(p_{i+1,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1} \right) - \mathbb{T}_{x,i-1/2,j,k}^{n+1} \left(p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i-1,j,k}^{n+1} \right) + \mathbb{T}_{y,i,j+1/2,k}^{n+1} \left(p_{i,j+1,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1} \right) \\ - \mathbb{T}_{y,i,j-1/2,k}^{n+1} \left(p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j-1,k}^{n+1} \right) + \mathbb{T}_{z,i,j,k+1/2}^{n+1} \left(p_{i,j,k+1}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1} \right) - \mathbb{T}_{z,i,j,k-1/2}^{n+1} \left(p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k-1}^{n+1} \right) \\ - \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{x,i+1/2,j,k}^{n+1} \left(z_{i+1,j,k} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{x,i-1/2,j,k}^{n+1} \left(z_{i,j,k} - z_{i-1,j,k} \right) \\ - \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{y,i,j+1/2,k}^{n+1} \left(z_{i,j+1,k} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{y,i,j-1/2,k}^{n+1} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j-1,k} \right) \\ - \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{z,i,j,k+1/2}^{n+1} \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{z,i,j,k-1/2}^{n+1} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j,k-1} \right) \\ + q_{i,j,k}^{n+1} - \psi_{i,j,k}^{n+1} = \left[V_{b}c \left(p^{n+1} \right) \frac{p^{n+1} - p^{n}}{\Delta t} \right]_{i,j,k}. \end{aligned}$$

$$(11)$$

O coeficiente c(p), avaliado para $p = p^{n+1}$, é calculado utilizando-se

$$c(p^{n+1}) = \phi^n \frac{\partial \xi}{\partial p} + \xi^{n+1} \phi^0 c_\phi \tag{12}$$

onde

$$\frac{\partial \xi}{\partial p} = \frac{1}{RTZ} - \frac{p}{RTZ^2} \frac{\partial Z}{\partial p},$$

sendo que a Equação (12) foi obtida a partir de uma expansão conservativa (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001) e considera-se que c_{ϕ} é uma constante.

3.3 Discretização da equação governante - fração molar

A equação governante, para o transporte da fração molar, é discretizada seguindo as mesmas etapas e procedimentos que os utilizados no caso da equação da pressão. Então,

$$\begin{aligned} \text{considerando-se que o tensor efetivo de dispersão } \mathbf{D}_{m} \acute{\text{e}} \textit{ diagonal e que } \mathbb{T}_{m} = x_{m} \mathbb{T}, \\ \mathbb{D}_{x,i+1/2,j,k}^{n+1} \left(x_{m,i+1,j,k}^{n+1} - x_{m,i,j,k}^{n+1} \right) - \mathbb{D}_{x,i-1/2,j,k}^{n+1} \left(x_{m,i,j,k}^{n+1} - x_{m,i-1,j,k}^{n+1} \right) \\ + \mathbb{D}_{y,i,j+1/2,k}^{n+1} \left(x_{m,i,j+1,k}^{n+1} - x_{m,i,j,k}^{n+1} \right) - \mathbb{D}_{y,i,j-1/2,k}^{n+1} \left(x_{m,i,j,k}^{n+1} - x_{m,i,j-1,k}^{n+1} \right) \\ + \mathbb{D}_{z,i,j,k+1/2}^{n+1} \left(x_{m,i,j,k+1}^{n+1} - x_{m,i,j,k}^{n+1} \right) - \mathbb{D}_{z,i,j,k-1/2}^{n+1} \left(x_{m,i,j,k}^{n+1} - x_{m,i,j,k}^{n+1} \right) \\ + \left(x_{m} \mathbb{T} \right)_{x,i+1/2,j,k}^{n+1} \left(p_{i+1,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1} \right) - \left(x_{m} \mathbb{T} \right)_{x,i-1/2,j,k}^{n+1} \left(p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1} \right) \\ + \left(x_{m} \mathbb{T} \right)_{x,i+1/2,k}^{n+1} \left(p_{i,j+1,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1} \right) - \left(x_{m} \mathbb{T} \right)_{x,i-1/2,k}^{n+1} \left(p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1} \right) \\ + \left(x_{m} \mathbb{T} \right)_{x,i+1/2,j,k}^{n+1} \left(z_{i,j,k+1} - p_{i,j,k}^{n+1} \right) - \left(x_{m} \mathbb{T} \right)_{x,i-1/2,j,k}^{n+1} \left(p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1} \right) \\ - \left(\mathbb{T}_{m} \gamma \right)_{x,i+1/2,j,k}^{n+1} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}_{m} \gamma \right)_{x,i-1/2,j,k}^{n+1} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j-1,k} \right) \\ - \left(\mathbb{T}_{m} \gamma \right)_{x,i,j,k+1/2}^{n+1} \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}_{m} \gamma \right)_{x,i,j-1/2,k}^{n+1} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j-1,k} \right) \\ - \left(\mathbb{T}_{m} \gamma \right)_{x,i,j,k+1/2}^{n+1} \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}_{m} \gamma \right)_{x,i,j-1/2,k}^{n+1} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j-1,k} \right) \\ - \left(\mathbb{T}_{m} \gamma \right)_{x,i,j,k+1/2}^{n+1} \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}_{m} \gamma \right)_{x,i,j,k-1/2}^{n+1} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j-1,k} \right) \\ + \left(P_{m,i,j,k}^{n+1} - \left(p_{k,j,k}^{n+1} - (p_{k,m,k}^{n+1} \right) \right)_{i,j,k}^{n+1} \right)_{i,j,k}^{n+1} \right)_{i,j,k}^{n+1} \\ + \left(z_{m,i,j,k}^{n+1} - \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) + \left(z_{m} \gamma \right)_{x,i,j,k-1/2}^{n+1} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j,k-1} \right) \right)_{i,j,k}^{n+1} \right)_{i,j,k}^{n+1} \\ + \left(z_{m,i,j,k}^{n+1} - \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) \right)_{i,j,k}^{n+1} \right)_{i,j,k}^{n+1} \\ + \left(z_{m,i,j,k}^{n+1} - \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) \right)_{i,j,k}^{n+1} \right)_{i,j,k}^{n$$

Na Equação (13), $m = 1, 2, ..., N_c - 1$, $Q_{m,i,j,k} = (V_b)_{i,j,k} q_{m,i,j,k}$ e busca-se determinar a nova fração molar x_m^{n+1} . O coeficiente de difusão \mathbb{D} é definido, para as três direções espaciais, como (Chen; Huan; Ma, 2006)

$$\mathbb{D}_{x,i\pm 1/2,j,k} \equiv \left(\frac{A_x \phi \xi D_{mx}}{\Delta x}\right)_{i\pm 1/2,j,k},$$
$$\mathbb{D}_{y,i,j\pm 1/2,k} \equiv \left(\frac{A_y \phi \xi D_{my}}{\Delta y}\right)_{i,j\pm 1/2,k},$$
e

$$\mathbb{D}_{z,i,j,k\pm 1/2} \equiv \left(\frac{A_z \phi \xi D_{mz}}{\Delta z}\right)_{i,j,k\pm 1/2}.$$

Cabe destacar que as transmissibilidades e as componentes do tensor de dispersão são avaliadas nas fronteiras entre as células, enquanto que as pressões e as frações molares são determinadas nos seus centros. Seguindo as orientações de Chen (2007), a média harmônica é utilizada no cálculo das propriedades da rocha (porosidade e permeabilidade) nas interfaces. Por outro lado, a média aritmética é aplicada quando do cômputo das propriedades do fluido, tais como a massa específica e a viscosidade nas faces dos blocos. Por fim, aproximações do tipo *upwind* de primeira ordem são utilizadas no cálculo das transmissibilidades \mathbb{T}_m e das componentes de \mathbb{D} .

3.4 Decomposição de operadores e linearização

As equações discretas formam sistemas de equações algébricas não-lineares. Portanto, a fim de se viabilizar a resolução das mesmas usando métodos voltados para os sistemas lineares, primeiro deve-se providenciar a linearização dos mesmos. Além disso, como a velocidade é uma função da pressão, a fração molar também dependerá da pressão que, por sua vez, também irá variar em função da fração molar (Debossam, 2018; Debossam et al., 2023). Por outro lado, como agravante, a solução desses sistemas, usando malhas computacionais tridimensionais com milhares de células, demanda o uso intensivo de memória e de processamento (Werneck, 2016).

Além da linearização, que leva a um sistema linear acoplado para a pressão e a fração molar, também foi utilizada uma técnica de decomposição de operadores (Vennemo, 2016; Debossam et al., 2019; Heringer et al., 2019), de modo que as equações pudessem ser resolvidas separadamente, ou seja, dois sub-sistemas para a determinação da pressão da fase gasosa e da fração molar do CO_2 . Um dos seus propósitos é a redução do custo computacional, quando comparado à solução de um único sistema acoplado para a obtenção simultânea da pressão e da fração molar.

Conforme discutido por Vennemo (2016), as técnicas de decomposição de operadores têm sido empregadas na resolução de vários problemas, englobando desde a modelagem da poluição atmosférica até as simulações do escoamento não-isotérmico de óleo em reservatórios de subsuperfície. Contudo, separar as equações leva a uma fonte adicional de erro. Assim, estudos têm se dedicado ao problema da convergência e da acurácia para esta classe de métodos (Maes et al., 2015). Por exemplo, para manter a acurácia dos resultados, é recomendado controlar os valores dos passos de tempo (Debossam, 2018).

Neste trabalho, escolheu-se o Método dos Gradientes Conjugados (*Conjugate Gradient*, CG) para se determinar os valores da pressão, visto que a matriz dos coeficientes associada ao respectivo sub-sistema é simétrica e positiva definida. Já para resolver o subsistema que resulta nos valores da fração molar, cuja matriz dos coeficientes é assimétrica, optou-se pelo Método do Gradiente Biconjugado Estabilizado (*Stabilized Biconjugate* *Gradient*, BiCG-Stab) (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001; Saad, 2003). Seguiu-se, assim, as estratégias utilizadas em simulador previamente desenvolvido, cujos resultados foram apresentados em Debossam et al. (2023), considerando a incorporação dos efeitos inerciais no escoamento bicomponente. Deixa-se claro que ele foi aqui empregado como base para criação do presente simulador.

As seguintes etapas são executadas para se computar as incógnitas no nível temporal n + 1 (Debossam et al., 2019; Debossam et al., 2023):

- 1. Avalia-se as propriedades do fluido, considerando a pressão p e a fração molar x_m conhecidas, a partir da equação de estado de Peng-Robinson;
- 2. Obtém-se os novos valores da pressão resolvendo-se a Equação (11) via o método CG;
- 3. Emprega-se o método BiCG-Stab para se solucionar a Equação (13) e se obter as novas frações molares;
- 4. Testa-se a convergência numérica tendo-se em vista o método de Picard (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001).

Quanto ao método de Picard, ele é usado quando da atualização dos coeficientes do termos não-lineares. Aqueles que devem ser aproximados no tempo n + 1 são avaliados em uma iteração designada como v, durante a determinação da pressão e da fração molar em n + 1, v + 1,

$$\begin{split} \mathbb{T}_{x,i+1/2,j,k}^{n+1,v} \left(p_{i+1,j,k}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k}^{n+1,v+1} \right) &= \mathbb{T}_{x,i-1/2,j,k}^{n+1,v} \left(p_{i,j,k}^{n+1,v+1} - p_{i-1,j,k}^{n+1,v+1} \right) \\ &+ \mathbb{T}_{y,i,j+1/2,k}^{n+1,v} \left(p_{i,j+1,k}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k}^{n+1,v+1} \right) - \mathbb{T}_{y,i,j-1/2,k}^{n+1,v} \left(p_{i,j,k}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k-1}^{n+1,v+1} \right) \\ &+ \mathbb{T}_{z,i,j,k+1/2}^{n+1,v} \left(p_{i,j,k+1}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k}^{n+1,v+1} \right) - \mathbb{T}_{z,i,j,k-1/2}^{n+1,v} \left(p_{i,j,k}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k-1}^{n+1,v+1} \right) \\ &- \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{x,i+1/2,j,k}^{n+1,v} \left(z_{i+1,j,k} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{x,i-1/2,j,k}^{n+1,v} \left(z_{i,j,k} - z_{i-1,j,k} \right) \\ &- \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{y,i,j+1/2,k}^{n+1,v} \left(z_{i,j+1,k} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{y,i,j-1/2,k}^{n+1,v} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j-1,k} \right) \\ &- \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{z,i,j,k+1/2}^{n+1,v} \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}\gamma \right)_{z,i,j,k-1/2}^{n+1,v} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j,k-1} \right) \\ &+ q_{i,j,k}^{n+1,v} - \psi_{i,j,k}^{n+1,v} = \left[V_b c \left(p^{n+1,v} \right) \frac{p^{n+1,v+1} - p^n}{\Delta t} \right]_{i,j,k}, \end{split}$$

$$\begin{split} & \mathbb{D}_{x,i+1/2,j,k}^{n+1,v+1} \left(x_{m,i+1,j,k}^{n+1,v+1} - x_{m,i,j,k}^{n+1,v+1} \right) - \mathbb{D}_{x,i-1/2,j,k}^{n+1,v} \left(x_{m,i,j,k}^{n+1,v+1} - x_{m,i-1,j,k}^{n+1,v+1} \right) \\ & + \mathbb{D}_{y,i,j+1/2,k}^{n+1,v} \left(x_{m,i,j,k+1}^{n+1,v+1} - x_{m,i,j,k}^{n+1,v+1} \right) - \mathbb{D}_{y,i,j-1/2,k}^{n+1,v} \left(x_{m,i,j,k}^{n+1,v+1} - x_{m,i,j,k}^{n+1,v+1} \right) \\ & + \mathbb{D}_{z,i,j,k+1/2}^{n+1,v} \left(x_{m,i,j,k+1}^{n+1,v+1} - x_{m,i,j,k}^{n+1,v+1} \right) - \mathbb{D}_{z,i,j,k-1/2}^{n+1,v} \left(x_{m,i,j,k}^{n+1,v+1} - x_{m,i,j,k-1}^{n+1,v+1} \right) \\ & + \left(x_m \mathbb{T} \right)_{x,i+1/2,j,k}^{n+1,v+1} \left(p_{i+1,j,k}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k}^{n+1,v+1} \right) - \left(x_m \mathbb{T} \right)_{x,i-1/2,j,k}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k-1}^{n+1,v+1} \right) \\ & + \left(x_m \mathbb{T} \right)_{y,i,j+1/2,k}^{n+1,v} \left(p_{i,j,k+1}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k}^{n+1,v+1} \right) - \left(x_m \mathbb{T} \right)_{y,i,j-1/2,k}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k-1}^{n+1,v+1} \right) \\ & + \left(x_m \mathbb{T} \right)_{z,i,j,k+1/2}^{n+1,v} \left(p_{i,j,k+1}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k}^{n+1,v+1} \right) - \left(x_m \mathbb{T} \right)_{z,i,j-1/2,k}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k-1}^{n+1,v+1} \right) \\ & - \left(\mathbb{T}_m \gamma \right)_{y,i,j+1/2,k}^{n+1,v} \left(z_{i,j+1,k} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}_m \gamma \right)_{y,i,j-1/2,k}^{n+1,v} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j-1,k} \right) \\ & - \left(\mathbb{T}_m \gamma \right)_{z,i,j,k+1/2}^{n+1,v} \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}_m \gamma \right)_{z,i,j,k-1/2}^{n+1,v} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j-1,k} \right) \\ & - \left(\mathbb{T}_m \gamma \right)_{z,i,j,k+1/2}^{n+1,v} \left(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k} \right) + \left(\mathbb{T}_m \gamma \right)_{z,i,j,k-1/2}^{n+1,v} \left(z_{i,j,k} - z_{i,j,k-1} \right) \\ & + Q_{m,i,j,k}^{n+1,v} \left[V_b \frac{\left(\phi x_m \xi \right)^{n+1,v+1} - \left(\phi x_m \xi \right)^n}{\Delta t} \right]_{i,i,k}^{n+1,v} \right]_{i,i,k}^{n+1,v+1} \\ \end{array}$$

 Δt

O uso desse método também viabiliza a adoção de diferentes intervalos de tempo para resolver os problemas de pressão e concentração (Wang et al., 2017b; Liu; Tafti; Li, 2014). Enquanto o intervalo de tempo para lidar com o problema da pressão pode ser ampliado, o mesmo não se aplica ao da concentração (ABREU, 2007), devido ao seu caráter advectivo de transporte, suscetível a instabilidades numéricas e, consequentemente, impondo restrições ao tamanho do intervalo de tempo (Zhao; Zhang; Shan, 2018). De acordo com Douglas Jr., Pereira e Yeh (2000), o intervalo de tempo para a pressão costuma ser de dez a vinte vezes maior do que o da concentração.

 $\Big]_{i,j,k}$

Além disso, estabeleceu-se como critério de convergência, que a diferença absoluta da variação das variáveis dependentes (pressão ou fração molar), entre as iterações, seja menor do que as tolerâncias pré-estabelecidas: tol_p para a pressão e tol_{xm} para a fração molar. As mesmas verificações são empregadas tanto nas iterações internas (métodos dos Gradientes Conjugados ou Gradiente Biconjugado Estabilizado) quanto nas externas (método de Picard).

Na Figura 7, é fornecido o fluxograma mostrando os passos executados para a obtenção numérica dos valores da pressão e da fração molar, já levando em conta a decomposição de operadores, a linearização e o uso dos métodos iterativos de resolução dos sub-sistemas de equações algébricas.

Figura 7 - Fluxograma para um passo de tempo



Fonte: A autora, 2024.

3.5 Condições auxiliares

Por fim, conforme aludido no Capítulo 2, é essencial, para que o problema governado pelas equações diferenciais parciais seja bem-posto, mediante a proposição das condições

auxiliares apropriadas, ou seja, iniciais e de contorno (Islam et al., 2010). O mesmo se aplica quando da resolução das equações discretas.

A condição inicial é estabelecida para garantir que todos os valores de pressão e frações molares sejam conhecidos, em todas as células da malha computacional, no instante inicial, t_0 , que marca o início da simulação.

No que diz respeito às condições de contorno, para as condições do primeiro tipo (Dirichlet), onde a pressão ou a fração molar são prescritas, em uma malha de blocos centrados, o valor no contorno pode ser assumido como sendo o da célula adjacente à fronteira. Alternativamente, pode-se utilizar uma extrapolação linear a partir dos valores conhecidos nos dois blocos mais próximos ao contorno (Chen; Huan; Ma, 2006; Chen, 2007).

Para uma condição de contorno do segundo tipo (Neumann), onde um gradiente (ou derivada) é conhecido na fronteira, utiliza-se uma técnica de aproximação de segunda ordem para se calcular e impor os seus valores (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001).

4 RESULTADOS

Neste capítulo, apresenta-se e analisa-se os resultados numéricos das simulações do escoamento monofásico contendo dois componentes, em reservatórios de baixa permeabilidade portadores de gás. Estabelece-se um conjunto padrão de dados para todas as simulações, além de se discorrer sobre algumas características gerais das mesmas. Também é realizada uma investigação do refinamento de malha e a verificação da convergência numérica, empregando um total de 4 malhas computacionais distintas. Adicionalmente, foram conduzidos testes alterando o tempo de produção e variando algumas propriedades físicas, em um estudo de sensibilidade.

4.1 Características gerais das simulações

Nas simulações numéricas, um conjunto padrão de parâmetros foi estabelecido. Estes valores são mantidos constantes, exceto quando especificamente mencionado que foram modificados. Cada seção apresenta uma análise distinta, comparando o fluxo considerando a lei de Darcy com aquele contemplando os efeitos do escorregamento, por exemplo.

Os resultados são primeiramente apresentados para o caso da geometria *slab*, frequentemente adotada para se estudar escoamentos bidimensionais, onde a terceira dimensão é consideravelmente menor em relação às outras duas.

Em seguida, são discutidos os casos para uma geometria de um quarto de *five-spot*. Essa configuração é amplamente empregada na injeção de fluidos em reservatórios de petróleo. Ela possui uma geometria em forma de um paralelepípedo, contendo poços injetores e produtores. Aqui, simulou-se o caso dela contendo um poço injetor, no canto inferior esquerdo (tendo como referência a vista superior do modelo), e um poço produtor, no canto superior direito.

A taxa de produção e os demais parâmetros usados no caso base (padrão) podem ser encontrados na Tabela 2. Como mencionado anteriormente, o componente escolhido para a injeção foi o CO_2 (dióxido de carbono) e o reservatório está inicialmente preenchido com o CH_4 (metano). Portanto, as propriedades usadas no simulador, referentes a esses componentes, podem ser vistas na Tabela 3.

As simulações foram realizadas com um coeficiente de difusão igual a $1,213 \times 10^{-5}$ m2/s, consistente com a física do problema em se tratando de hidrocarbonetos na fase gasosa (Böttcher et al., 2012). A dispersão hidrodinâmica foi calculada utilizando-se a Eq. (7) e um comprimento característico igual à maior dimensão do reservatório. E os efeitos da tortuosidade do meio poroso foram considerados constantes aproximadamente

Parâmetro	Valor	Unidade
$k_x = k_y = k$	$2,0 \times 10^{-6}$	$\mu { m m}^2$
L_x	200	m
$L_z = L_y$	50	m
$p_{inic} = p_0$	15000	kPa
$p_W = p_{inj}$	35000	kPa
$p_E = p_{prod}$	9000	kPa
$x_{1,W}$	$1,\!0$	—
x_1^0	0,0	—
t_{max}	2000	dia
tol_p	1×10^{-6}	kPa
tol_{xm}	1×10^{-5}	mol/mol
T	397	Κ
Δt	$1,\!0$	dia
$\phi_{ini} = \phi_0$	$0,\!125$	

Tabela 2 - Parâmetros para o caso padrão

Fonte: A autora, 2024.

Tabela 3 - Propriedades dos componentes

Propriedade	$\rm CO_2$	CH_4
p_c (kPa)	7380,0	4610,0
T_c (K)	304,1	$190,\! 6$
ω	0,239	0,01155
$W \; (kg/mol)$	0,044010	0,01604

Fonte: A autora, 2024.

Nas simulações de reservatórios, muitas vezes utiliza-se um passo de tempo (Δt) variável para uma melhor captura dos efeitos que se desenrolam nos instantes iniciais da produção. Contudo, neste trabalho, optou-se por mantê-lo constante, exceto quando da análise sensibilidade. A simulação transcorre até que o tempo máximo de produção, t_{max} , seja atingido. Além disso, destaca-se que a temperatura T do reservatório se mantém constante durante todo o escoamento.

No que diz respeito ao simulador, ele foi desenvolvido usando a linguagem de programação C padrão. Os gráficos apresentados foram gerados utilizando o *pgfplots*, que é um pacote do código aberto LaTeX, e as simulações foram realizadas em um computador com as seguintes especificações:

- 1. Modelo: Aspire A515-54;
- 2. Processador: Intel(R) Core(TM) i5-10210U;

- 3. Memória: 8 Gb;
- 4. Instruction Set: 64 bit;
- 5. Capacidade de armazenamento: 0,5 TB;
- 6. Número de núcleos: 4;
- 7. Número de threads: 8;
- 8. Sistema operacional: Microsoft Windows 10.

Todas as curvas de pressão e fração molar foram obtidas considerando o valor do tempo máximo de produção da Tabela 2, à exceção daquelas onde variou-se os valores de t_{max} nas análises de sensibilidade (conforme indicado nas legendas).

4.2 Escoamento em um meio homogêneo e geometria do tipo slab

Inicia-se com a discussão e apresentação dos resultados obtidos para o escoamento tridimensional bicomponente, em um meio homogêneo para um reservatório com geometria do tipo *slab*.

A Tabela 4 exibe a quantidade de células $(n_x, n_y \in n_z)$ das diferentes malhas computacionais utilizadas na investigação do refinamento de malha. Como já mencionado, a seleção da malha computacional desempenha um papel crucial na obtenção de soluções numéricas acuradas.

Malha	n_x	n_y	n_z
1	20	03	03
2	40	05	05
3	80	11	11
4	160	17	17

Tabela 4 - Refinamento de malha para a geometria slab

Fonte: A autora, 2024.

Devido à inserção de uma difusão numérica, em função do uso do esquema *upwind* de primeira ordem, a escolha de uma malha apropriada torna-se ainda mais importante, uma vez que a difusão numérica diminui com o refinamento da malha.

4.2.1 Refinamento de malha

Neste estudo, quatro malhas diferentes foram empregadas de modo a se determinar a mais adequada. As malhas utilizadas foram refinadas na direção x mantendo-se fixo os seus respectivos valores nas demais duas direções espaciais, assegurando sempre a presença de uma camada intermediária central.

Os resultados são apresentados para os perfis de pressão da fase gás e da fração molar de CO_2 em função da variação deles ao longo da direção x. Na Tabela 2, o parâmetro p_W corresponde à pressão na face oeste da célula da fronteira esquerda e p_E àquela na face leste do último bloco à direita, ou seja, representam as condições de contorno para a pressão nos limites do domínio de solução na direção x. A fração molar do componente $x_{1,W}$ possui um valor unitário, que é imposto na face oeste da primeira célula, enquanto x_1^0 é a fração molar inicial de CO_2 no interior do domínio de solução. Na face leste da célula fronteiriça, impõe-se que a derivada primeira espacial, da fração molar de CO_2 , em relação a x é nula. As demais fronteiras possuem condições de contorno do tipo fluxo nulo.

A Figura 8 contém os resultados para a pressão determinados empregando-se os quatro conjuntos vistos na Tabela 4. Todas as simulações consideraram os efeitos do escorregamento do gás. É possível se observar que a pressão é mais alta próximo à fronteira esquerda, devido às condições de contorno impostas e, posteriormente, ela vai decaindo. Embora não perceptível visualmente, foi possível constatar que as curvas encontram-se cada vez mais próximas à medida que as malhas são refinadas.



Figura 8 - Pressão em função da posição \boldsymbol{x}

Legenda: Para as quatro diferentes malhas. Fonte: A autora, 2024.

Já na Figura 9, fica evidente o efeito da difusão numérica nos perfis de fração

molar (do componente injetado). Constata-se que à medida que se aumenta o número de células a difusão numérica é reduzida. É sabido que o esquema *upwind* de primeira ordem pode introduzir uma difusão numérica expressiva, aumentando artificialmente a difusão ao longo da direção principal do transporte. Assim sendo, pode acarretar em resultados não acurados, especialmente nas regiões de alta variação ou contendo descontinuidades abruptas na solução. É possível observar, também, que conforme a pressão no poço vai decaindo, as curvas se sobrepõem ainda mais.

Figura 9 - Fração molar em função da posição x



Legenda: Para as quatro diferentes malhas. Fonte: A autora, 2024.

4.2.2 Efeito do escorregamento do gás

Portanto, para se obter valores mais acurados, decidiu-se adotar a malha mais refinada, a Malha 4, como sendo a padrão. Assim sendo, ela foi utilizada a fim de se comparar os fluxos como e sem a inclusão do fenômeno de escorregamento. Além da escolha da malha, é importante ressaltar que o t_{max} permanece em 2000 dias. As Figuras 10 e 11 mostram os perfis de pressão e fração molar, em função da posição ao longo do eixo x, contabilizando ou não esse efeito.

Já era esperado que as pressões obtidas sem o escorregamento fossem mais baixas. Isso ocorre porque a lei de Darcy clássica não leva em conta as interações que levam a uma permeabilidade aparente que é maior do que a absoluta, em reservatórios de baixa permeabilidade. Aqui, quanto maior a permeabilidade aparente, mais rapidamente as pressões aumentam no reservatório. Nas extremidades, as pressões são as mesmas tendo em vista as condições de contorno prescritas. Além disso, é válido ressaltar que para os perfis de fração molar, as curvas se diferenciam principalmente na zona de mistura entre os componentes, tendo em vista a influência da permeabilidade aparente, tanto na equação para o cálculo da pressão quanto na para a fração molar. Assim, verifica-se que o CO_2 avança mais rapidamente sob o efeito do escorregamento.





Legenda: Com e sem o escorregamento do gás. Fonte: A autora, 2024.

Figura 11 - Fração molar em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Com e sem o escorregamento do gás. Fonte: A autora, 2024.

Também foi realizada uma validação dos resultados em relação ao número de Knudsen. Nosso modelo capturou o efeito do escorregamento (Yu et al., 2020) através da análise de uma série de valores de pressão e de seus respectivos resultados para o número de Knudsen, visto na Figura 12. Em condições de número de Knudsen mais elevado (regime transitório), as moléculas colidem com a parede com mais frequência, e o comportamento dos gases pode não mais ser descrito pela relação viscosidade-força de cisalhamento (Shi et al., 2014). À medida que o número de Knudsen se torna menor, indica pressões mais elevadas, confirmando a física por trás da equação em que se calcula o número de Knudsen.

Figura 12 - Número de Knudsen para uma determinada amostra de pressões



Legenda: Pressão normalizada pelo maior valor Fonte: A autora, 2024.

4.2.3 Variação do tempo de injeção e do passo de tempo

Em reservatórios com baixas permeabilidades, leva mais tempo para que respostas ocorram quando das mudanças na injeção. Isso se deve ao fato do escoamento dos fluidos ser mais lento no interior da matriz rochosa. O tempo de injeção é importante quando do planejamento operacional, sendo o parâmetro que pode ser controlado pelos engenheiros, diretamente associado aos volumes produzidos, e é um dos fatores presente na discussão das estratégias voltadas para maximizar a recuperação de hidrocarbonetos.

No próximo caso, t_{max} assumiu os valores de 2000, 4000 e 6000 dias. Por causa das baixas condições de permeabilidade e porosidade, fez-se necessária a utilização de longos períodos de produção (ainda que baixos para escalas realísticas de operação, que pode durar décadas). No entanto, devido ao tempo de execução do simulador, não foi possível estendê-los ainda mais. As Figuras 13 e 14 contêm os resultados das curvas de pressão e fração molar, respectivamente. Esses testes foram realizados utilizando os demais valores da Tabela 2 e a Malha 4.

Na Figura 13, fica evidente que as simulações correspondentes a 4000 dias e 6000 dias exibem valores mais próximos, diferentemente do caso com 2000 dias. Também é observado, na Figura 14, conforme o esperado, que o componente injetado percorre uma distância maior, no interior do reservatório, para os maiores tempos de produção, embora ela não varie linearmente. É possível notar que a posição da frente de avanço está relacionada a uma mudança no perfil das curvas de pressão, o que corrobora o fato do acoplamento das equações governantes.



Figura 13 - Pressão em função da posição \boldsymbol{x}

Legenda: Diferentes períodos de produção. Fonte: A autora, 2024.

Figura 14 - Fração molar em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Diferentes períodos de produção. Fonte: A autora, 2024.

Outra análise importante passa pela variação do passo de tempo. É fundamental selecionar um incremente de tempo que represente um compromisso entre a acurácia da solução e a eficiência computacional. Isso geralmente envolve, quando do uso de formulações totalmente implícitas (incondicionalmente estáveis numericamente), a realização de testes envolvendo passos de tempo diferentes, de modo a se determinar a influência deles nos valores da solução e selecionar um que satisfaça a condição de convergência numérica. Para tanto, foram novamente utilizados os parâmetros da Tabela 2, a Malha 4 e $\Delta t = 1,0, 2,0, 4,0$ e 8,0 dias. Os respectivos resultados para os perfis de pressão e fração molar são apresentados nas Figuras 15 e 16.

Um passo de tempo muito grande pode resultar em uma solução menos acurada, especialmente em regiões onde há mudanças rápidas ou grandes variações nos valores da solução, em função da aproximação de primeira ordem usada na discretização da derivada primeira em relação ao tempo. De acordo com os resultados, pôde-se observar, na Figura 15, que as curvas encontram-se praticamente sobrepostas. Então, para a pressão, esses valores não comprometeram a acurácia. Lembrando-se que uma escolha apropriada é essencial para se garantir a convergência numérica do ponto de vista da decomposição de operadores (Vennemo, 2016). No caso da fração molar, diferentemente do caso anterior, percebe-se que há uma diferença entre os valores para $\Delta t = 8, 0$, embora ela seja sutil para os demais casos. Como consequência, decidiu-se pela utilização de um incremento de tempo igual a 1,0 dia para o restante das simulações.



Figura 15 - Pressão em função da posição x

Legenda: Diferentes incrementos de tempo. Fonte: A autora, 2024.

Figura 16 - Comparação dos perfis de fração molar para a variação
 Δt



Legenda: Diferentes incrementos de tempo. Fonte: A autora, 2024.

4.2.4 Variação das propriedades físicas

Uma análise de sensibilidade considerando a permeabilidade é fundamental em simulações de reservatórios, pois ela é um dos parâmetros mais significativos que afetam o

fluxo de fluidos no subsolo. A sua alteração atinge diretamente a resistência do reservatório ao escoamento de fluidos, ou seja, impacta na produção e na recuperação de gás ou óleo. Como mostrado no Capítulo 2, influi diretamente na distribuição, velocidade e direção do fluxo. Neste teste, usou-se a mesma configuração de referência e variou-se a permeabilidade: $1, 0 \times 10^{-6}, 2, 0 \times 10^{-6}$ e $3, 0 \times 10^{-6} \ \mu m^2$.

É perceptível, na Figura 17, que uma permeabilidade mais baixa resulta (velocidades superficiais muito reduzidas) em mudanças que ocorrem mais lentamente no reservatório. À medida que a permeabilidade aumenta, as pressões também aumentam, o que é condizente com a análise das equações governantes e tendo-se em vista as condições de contorno impostas. Existe um comportamento diferenciado para a menor permeabilidade, quando comparado ao dos valores mais elevados, principalmente na região próxima da fronteira direita.

Na Figura 18, vê-se que o aumento da permeabilidade favorece o transporte do componente pois aumenta-se a sua velocidade. Lembrando-se que ela também impacta no valor do Kn_M e, em consequência, no efeito do escorregamento.

Figura 17 - Pressão em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Diferentes permeabilidades. Fonte: A autora, 2024.

Figura 18 - Fração molar em função da posição x



Legenda: Diferentes permeabilidades. Fonte: A autora, 2024.

A porosidade está diretamente ligada à capacidade do reservatório em armazenar fluidos. Um aumento seu pode elevar esse potencial e permitir uma maior produção nos poços, por exemplo. Ela também altera o número de Knudsen (Kn_M) . Em geral, valores maiores levam a maiores permeabilidades aparentes, facilitando o deslocamento do fluido através do reservatório, podendo ter um impacto na vazão e na distribuição do fluido no meio, estando essas propriedades relacionadas. Agora, as simulações foram realizadas para os seguintes valores da porosidade: 0,1, 0,125 e 0,15. Eles são pequenos e condizentes com a faixa de interesse do caso estudado. No entanto, eles podem variar significativamente dependendo da formação específica, *tight* ou *shale*, e também das formações geológicas. As as curvas de pressão e de fração molar resultantes, respectivamente, podem ser vista nas Figuras 19 e 20.

Na Figura 19, é possível observar um efeito distinto, decorrente da variação da porosidade, quando comparado ao da permeabilidade. Isso está em acordo com a física do escoamento, devido ao fato do fluido demorar mais a se mover quando há uma maior espaço poroso onde ele pode ser armazenado. Além disso, quanto menor é o valor da porosidade, menor é o número de Knudsen, resultando em uma redução na correção da permeabilidade aparente em função do efeito do escorregamento.

Por outro lado, na Figura 20 encontram-se os perfis de fração molar para diferentes valores da porosidade. Ela representa a proporção de cada componente (metano e gás carbônico) presente nas diferentes regiões do reservatório ao longo do tempo. Como resultado, a redução da porosidade leva a uma distribuição diferenciada dos componentes e potencialmente altera os processos de injeção/produção, além do componente injetado

avançar mais rapidamente.

Figura 19 - Pressão em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Diferentes porosidades. Fonte: A autora, 2024.

Figura 20 - Fração molar em função da posição \boldsymbol{x}





4.3 Escoamento em um meio homogêneo e geometria do tipo um quarto de *five-spot*

Ver-se-á, agora, os efeitos dos diferentes mecanismos de transporte e dos parâmetros sobre a injeção do CO_2 em uma geometria do tipo um quarto de *five-spot*. Ela consiste em um poço injetor, localizado no canto inferior esquerdo, onde é injetado o CO_2 , e um poço produtor, posicionado no canto superior direito do modelo estudado. A Figura 21 representa esquematicamente o reservatório utilizado nos testes.

Figura 21 - Modelo do reservatório



Fonte: A autora, 2024.

Assim, estabelecido o novo modelo de injeção e produção para o reservatório, na Tabela 5 encontram-se os novos parâmetros de referência que serão empregados nas simulações.

Parâmetro	Valor	Unidade
	7.0×10^{-7}	kPa ⁻¹
$k_{x} = k_{y} = k$	2.0×10^{-6}	μm^2
$L_x = L_y$	100	m
L_z^x y	20	m
$\tilde{p}_{inic} = p_0$	15000,0	kPa
q_{sc}	-300	std m^3/dia
t_{max}	4000	dia
$T_i = T_0$	397	K
Δt_i	1,0	dia
$\phi_i = \phi_0$	$0,\!125$	_

Tabela 5 - Parâmetros comuns para o caso padrão na geometria um quarto de *five-spot*

Fonte: A autora, 2024.

4.3.1 Refinamento de malha

Para o novo estudo do refinamento de malha, diferentes valores para o número de células foram adotados, vide a Tabela 6. As simulações foram realizadas empregando-se os valores de referência (Tabela 5). Bem entendido, que com o refinamento de malha almeja-se mostrar que a convergência numérica é alcançada.

Tabela 6 - Refinamento de malha para a geometria five-spot

Malha	n_x	n_y	n_z
1	10	10	03
2	20	20	05
3	40	40	09
4	80	80	11

Fonte: A autora, 2024.

As curvas de pressão e fração molar, em função da posição x, calculadas via o uso das quatro malhas da Tabela 6 podem ser vistas nas Figuras 22 e 23.

Figura 22 - Pressão em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Para as quatro diferentes malhas. Fonte: A autora, 2024.



Figura 23 - Fração molar em função da posição \boldsymbol{x}

Legenda: Para as quatro diferentes malhas. Fonte: A autora, 2024.

Na Figura 22, tem-se as curvas de pressão obtidas com as quatro malhas consideradas e para y fixado na segunda célula do eixo y. É interessante verificar o aumento de pressão na injeção, no lado esquerdo, com o seu maior valor sendo obtido com a malha mais refinada. Tal fato se dá porque a malha mais refinada possui os centros das suas células mais próximos da região de injeção, tendo em vista o corte escolhido para a visualização dos resultados.

Identifica-se uma situação semelhante, na Figura 23, uma vez que a malha mais refinada permite representar com maior acurácia a solução na região próxima à injeção. Em áreas onde diferentes componentes se misturam ou interagem, como é o caso do ponto mais elevado nas 4 curvas, a malha mais refinada permite uma representação mais acurada dessas zonas de mistura. A partir dessas observações, assumiu-se que os valores estão convergindo à medida que os incrementos espaciais são reduzidos. Então, as próximas simulações serão realizadas com a Malha 4, definida como sendo a de referência.

4.3.2 Variação do tempo de injeção e do passo de tempo

Em um reservatório de baixa permeabilidade, como o avanço do componente injetado ocorre mais lentamente, o tempo para que se observe diferenças significativas, em grande parte do domínio, pode exigir um custo computacional elevado em termos de tempo de processamento. Deve-se levar em conta que os processos de injeção de componentes podem exigir, devido aos fenômenos dinâmicos ocorrendo, tais como as variações abruptas de pressão ou as interações entre os diferentes componentes. Portanto, foram selecionados tempos de injeção abrangendo períodos de 2000, 4000 e 6000 dias. Em função das restrições impostas pelos valores da permeabilidade e da porosidade, períodos de simulação mais curtos não seriam suficientes para se capturar mudanças perceptíveis em uma região significativa do reservatório.

Na Figura 24, a linha verde (6000 dias de produção) atinge um pico de pressão mais elevado e exibe um declínio mais gradual. Nota-se, que neste cenário específico fica evidente a importância de se utilizar intervalos de tempo mais longos nas simulações, de forma a que seja possível identificar diferenças mais expressivas. O decaimento das outras curvas é um pouco menos suave e possuem maiores quedas de pressão.

Já um comportamento interessante aparece quando analisa-se as curvas contidas na Figura 25. A frente de avanço com o maior deslocamento corresponde àquela do maior tempo de produção, t_{max} =6000 dias, o que não é uma surpresa. Assim, o componente injetado ocupa um maior volume na região de injeção. Em se tratando das outras curvas, obviamente que o tempo transcorrido não foi suficiente para que o CO₂ preenchesse uma região semelhante próxima a da injeção.





Fonte: A autora, 2024.





Fonte: A autora, 2024.

A avaliação da influência do tamanho do passo de tempo nos resultados numéricos já foi vista como sendo uma abordagem eficaz para se avaliar a sua qualidade. Dessa forma, foram considerados os seguintes valores distintos para o incremento de tempo: 1,0, 2,0, 4,0 e 8,0 dias. Como dito anteriormente, é utilizada a Malha 4 $(n_x=n_y=80)$. Neste caso, dado que o reservatório apresenta um poço injetor e um produtor, espera-se que a pressão diminua na região vizinha ao poço produtor e aumente naquela próxima ao poço injetor. Na prática, os diferentes passos de tempo avaliados não levaram a nenhuma mudança significativa nos resultados e tanto as curvas da Figura 26 quanto da Figura 27 estão praticamente sobrepostas. Tal fato demonstra uma certa estabilidade para os distintos valores de passo de tempo utilizados. Por conseguinte, para os testes subsequentes, a decisão foi a de manter o passo de tempo em 1 dia, visando a garantir a confiabilidade dos resultados.

4.3.3 Análise de sensibilidade

Novamente, é realizada uma análise de sensibilidade no intuito de se verificar o efeito da variação de alguns dos principais parâmetros utilizados. Inicia-se procedendo-se com o aumento e a redução dos valores da permeabilidade do reservatório, agora para uma geometria um quarto de *five-spot*. Utiliza-se os valores de referência da Tabela 5 e a Malha 4.

Neste teste, é relevante destacar que a permeabilidade com o menor valor absoluto exibe a maior variação de pressão. Assim, é importante ressaltar que essa análise foi conduzida para a pressão variando ao longo da direção x e avaliada em y = 1.



Figura 26 - Perfis de pressão, variação do passo de tempo

Fonte: A autora, 2024.

Figura 27 - Perfis de fração molar, variação do passo de tempo



Fonte: A autora, 2024.

Os resultados da Figura 28 são para a variação de pressão em função da posição x e três valores distintos da permeabilidade. Devido à maior correção provocada pelo maior número de Knudsen, para a permeabilidade mais baixa tem-se o maior efeito do deslizamento em consequência do aumento na permeabilidade aparente.

Na Figura 29, as curvas estão bastante próximas, quase sobrepostas. No entanto, a curva associada à maior permeabilidade ainda confirma as previsões da Lei de Darcy, que prevê que um aumento na permeabilidade resulta em uma elevação na velocidade superficial, favorecendo o transporte advectivo. Além disso, à medida que a permeabilidade aumenta, a correção devida ao escorregamento diminui gradualmente. Ainda assim, apesar da difícil visualização, na Figura 29 a curva verde $(k = 3, 0 \times 10^{-6} \ \mu m^2)$ está um pouco acima das demais.



Figura 28 - Pressão em função da posição \boldsymbol{x}

Legenda: Diferentes permeabilidades. Fonte: A autora, 2024.

Figura 29 - Fração molar em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Diferentes permeabilidades. Fonte: A autora, 2024.

A próxima propriedade a ser considerada é a porosidade. Mantendo a mesma configuração e malha utilizadas no caso anterior, foram empregados os valores 0,1, 0,125 e

0,15 para a porosidade. É importante destacar que estão sendo consideradas condições de reservatório do tipo *tight* e *shale*, justificando a escolha desses números. Como já avançado, a porosidade tem influência na capacidade de armazenamento dos fluidos no reservatório. Então, as suas variações podem levar a mudanças na estrutura do meio poroso influenciando, assim, a forma como o fluido se move através dele.

A Figura 30 mostra as consequências da variação da porosidade nos perfis de pressão. Nota-se que houve pouca mudança entre as curvas. Com o aumento da porosidade a variação de pressão também aumenta na região do poço injetor, pois existe uma maior quantidade de fluido injetado naquele espaço, ou seja, maior quantidade de fluido armazenado. Ressalta-se que o número de Knudsen também depende da porosidade. No entanto, nesse caso, o maior valor de porosidade reduz o efeito do deslizamento e a permeabilidade aparente.

Nos perfis de fração molar representados na Figura 31, as curvas permanecem próximas e semelhantes, destacando-se o padrão consistente para o menor valor da porosidade. Isso mostra que o aumento/redução da velocidade, acarretado pelo aumento/redução da diferença de pressão, não foi suficiente para que houvesse uma alteração da magnitude da velocidade. No cenário em que a porosidade é menor, a injeção de CO_2 consegue penetrar na região inicial do meio poroso e atingir os maiores valores de fração molar.





Legenda: Diferentes porosidades. Fonte: A autora, 2024.

Figura 31 - Fração molar em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Diferentes porosidades. Fonte: A autora, 2024.

Outro teste explorado foi o da variação da vazão de injeção. Considerando as limitações físicas de pressão e permeabilidade, é inviável empregar valores extremamente elevados para a vazão de injeção/produção (devido à capacidade de transporte no meio poroso). Portanto, baseando-se na vazão de referência adotada, $q_{sc}=300 \text{ m}^3/\text{dia}$, decidiu-se aumentá-la para 500 m³/dia visando a se avaliar as consequentes variações nos perfis de pressão e fração molar. Uma vez mais, os mesmos parâmetros de referência foram utilizados, incluindo a Malha 4 e um tempo de produção de 4000 dias, Figuras 32 e 33.

Com o aumento da vazão, uma maior quantidade de fluido penetra no reservatório durante um mesmo período de tempo. Ao se analisar a Figura 32, é possível observar o efeito da mudança na vazão nas curvas de pressão.

Agora, as curvas de fração molar para as diferentes vazões são mostradas na Figura 33. A diferença entre as mesmas acontece exatamente na zona de mistura, onde a de maior vazão acarreta um maior impulso para o deslocamento e penetração do componente no meio poroso.
Figura 32 - Pressão em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Diferentes vazões de injeção. Fonte: A autora, 2024.

Figura 33 - Fração molar em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Diferentes vazões de injeção. Fonte: A autora, 2024.

4.4 Escoamento em um meio heterogêneo e geometria do tipo um quarto de *five-spot*

Nesta seção, são apresentados os resultados para o escoamento de gás em um reservatório fraturado. As simulações foram conduzidas incorporando as heterogeneidades no domínio de solução via o método da fratura discreta (Sun et al., 2023). Abordar o escoamento em um meio fraturado é de extrema importância para a validação do modelo, uma vez que ele representa de maneira mais realista a dinâmica do fluxo de gás em reservatórios heterogêneos. Assim, viabiliza-se uma análise das condições operacionais, tendo em vista a influência significativa que as fraturas têm na permeabilidade equivalente do sistema e na sua produtividade.

Tratou-se do caso de um reservatório, com um arranjo do tipo um quarto de *five-spot*, contendo duas fraturas, ortogonais entre si, dispostas ao longo das direções x e y e que se cruzam no no centro do domínio. Optou-se por utilizar a malha mais refinada, ou seja, em função das fraturas, com $n_x = n_y = 81$. Os parâmetros relativos às fraturas são apresentados na Tabela 7. Os sobrescritos 1 e 2 indicam as fraturas posicionadas nas direções horizontal e vertical, respectivamente, e o subscrito f dizem respeito às propriedades físicas das fraturas. Para proporcionar uma representação visual mais clara do esquema de fraturas neste teste, a Figura 34 exibe a disposição bidimensional das fraturas dentro do domínio analisado, cujas dimensões são $L_x = L_y = 40$ m.

Parâmetro	Valor	Unidade
$k_f^1 = k_f^2$	0,05	$\mu { m m}^2$
L_x^1	20	m
L_y^1	0,04	m
L_x^2	0,04	m
L_y^2	20	m
$L^1_z = L^2_z$	5	m
$\phi_f^1=\phi_f^2$	0,6	_

Tabela 7 - Parâmetros das fraturas

Fonte: A autora, 2024

Em relação aos parâmetros relacionados à matriz porosa, são empregados os dados listados na Tabela 2. O foco da análise consiste na variação do tempo de produção (t_{max}) , utilizando períodos de 2000, 2500, 3000, 3500, 4000 e 4500 dias. Os primeiros resultados, Figuras 35 e 36, contêm as superfícies de fração molar relativas correspondentes aos diferentes períodos de produção. Na primeira figura, não são considerados os efeitos do escorregamento, enquanto que na segunda sim.



Figura 34 - Domínio bidimensional contendo as fraturas ortogonais

Fonte: A autora, 2024.





Legenda: Diferentes tempos de produção e sem os efeitos do escorregamento. Fonte: A autora, 2024.



Figura 36 - Superfícies de fração molar na presença de fraturas

Legenda: Diferentes tempos de produção e com os efeitos do escorregamento. Fonte: A autora, 2024.

Neste cenário, a correção por meio do número de *Knudsen* na permeabilidade aparente foi de um valor médio de 15%. Entretanto, observou-se que para os perfis de fração molar não foram registradas alterações pronunciadas. Por meio do gráfico da Figura 37 pode-se constatar que o efeito não provocou alterações perceptíveis no gradiente da fração molar.

Dando continuidade, examina-se a variação das superfícies de pressão ao se empregar os mesmos parâmetros e sob as mesmas condições. Dado que as alterações de pressão se dão numa escala de tempo diferente das da fração molar, decidiu-se incorporar um incremento mais significativo com intervalos de 500, 2500 e 4500 dias. Os resultados para os casos sem e com incorporação do efeito de escorregamento são apresentados, nesta ordem, nas Figuras 38 e 39.

Tendo em vista os resultados, é possível notar uma diferença um pouco mais significativa, para o gradiente de pressão, com e sem a incorporação do efeito de escorregamento. Percebe-se que, na região de injeção, os efeitos de escorregamento levam a um aumento de pressão.

Figura 37 - Fração molar em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Com e sem os efeitos do escorregamento. Fonte: A autora, 2024.



Figura 38 - Superfícies de pressão na presença de fraturas

Legenda: Diferentes tempos de produção e sem os efeitos do escorregamento. Fonte: A autora, 2024.



Figura 39 - Superfícies de pressão na presença de fraturas

Legenda: Diferentes tempos de produção e com os efeitos do escorregamento. Fonte: A autora, 2024.

Por fim, no gráfico da Figura 40, compara-se os resultados para as curvas de pressão com e sem os efeitos do escorregamento. Nela, verifica-se as diferenças nos perfis de pressão ocasionados pelo escorregamento do gás.

Figura 40 - Pressão em função da posição \boldsymbol{x}



Legenda: Com e sem os efeitos do escorregamento. Fonte: A autora, 2024.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Este estudo teve como principal objetivo simular o escoamento monofásico bicomponente, isotérmico, em reservatórios de gás de baixa permeabilidade, incluindo o efeito do escorregamento do gás. Durante o curso desta dissertação, foram exploradas algumas abordagens, considerando a ampla gama de variáveis e propriedades relevantes, visando a caracterizar o comportamento do fluxo de gás quando da injeção de CO_2 no reservatório.

Conclusões

A implementação bem-sucedida do simulador numérico contribuiu para o estudo do escoamento em reservatórios de gás. Ele pôde ser utilizado como uma ferramenta valiosa para prever a dinâmica do escoamento, incluindo a injeção de um componente, permitindo uma melhor compreensão dos processos físicos envolvidos e auxiliando no planejamento e otimização das operações em reservatórios de gás.

Realizou-se uma série de testes para o aprimoramento do simulador numérico, por meio da variação de parâmetros numéricos como, por exemplo, as dimensões dos incrementos espaciais e do passo de tempo. Assim, foi possível se observar como estas variáveis impactaram os resultados.

A análise de sensibilidade desempenhou um papel fundamental ao explorar a influência de parâmetros-chave, e.g., a permeabilidade absoluta e a porosidade, sobre os resultados obtidos com o simulador. Alterações nestes parâmetros revelaram como as propriedades do reservatório afetam a dinâmica do escoamento de gás.

Ao se usar diferentes geometrias para o reservatório, *slab* e um quarto de *five-spot*, foram evidenciadas as variações nos padrões de fluxo e a distribuição de pressão dentro do reservatório. Eles permitiram, ainda, uma avaliação abrangente da capacidade do simulador em lidar com diferentes configurações e condições de reservatório, contribuindo para uma compreensão mais completa do escoamento de gás. Ressalta-se que os resultados determinados para as duas geometrias foram condizentes com a física do escoamento considerado.

Os resultados obtidos a partir destes testes ofereceram uma visão mais ampla do desempenho do simulador, demonstrando sua capacidade de capturar algumas nuances do escoamento em reservatórios de gás. As análises realizadas servirão como base para melhorias futuras no modelo, englobando melhorias adicionais e incorporando cenários mais complexos, a fim de se aprimorar a confiabilidade do simulador. Espera-se, também, que os resultados aqui obtidos possam contribuir de forma significativa para o avanço contínuo na área. Por último, observou-se o impacto do efeito do deslizamento nos perfis de pressão e de fração molar. Ele deve ser levado em consideração quando da injeção de dióxido de carbono em reservatórios de gás natural, tendo em vista a otimização dos processos de recuperação de gás e do sequestro de carbono.

Perspectivas

Ao longo deste trabalho foram identificadas algumas questões que podem ser abordadas em futuras pesquisas. Portanto, melhorias no modelo e a inclusão de fenômenos adicionais podem estender o escopo de utilização do simulador. Tendo em vista esse contexto, seguem algumas sugestões de propostas adicionais de aprimoramento considerando os casos:

- incluindo a adsorção do gás (Wang; Yu; Yuan, 2019);
- adicionando os efeitos inerciais/turbulentos (Barree; Conway, 2004);
- utilizando técnicas de acoplamento poço-reservatório contemplando os efeitos transientes na determinação do índice produtividade (RosÁrio, 2020);
- focando no escoamento não-isotérmico (Singh; Goerke; Kolditz, 2011); e
- implementando poços produtores horizontais (Zhao; Zhang; Shan, 2018).

REFERÊNCIAS

ABOU-KASSEM, J. H.; ALI, S. M.; ISLAM, M. R. Petroleum Reservoir Simulation, A Basic Approach. Houston, USA: Gulf Publishing Company, 2006.

AFAGWU, C. et al. Pressure-transient analysis in shale gas reservoirs: A review. *Journal* of Natural Gas Science and Engineering, v. 78, p. 103319, 2020.

AHMED, T. Reservoir engineering handbook. [S.l.]: Gulf professional publishing, 2018.

AKILU, S.; PADMANABHAN, E.; SUN, Z. A review of transport mechanisms and models for unconventional tight shale gas reservoir systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 175, p. 121125, 2021.

AMARNATH, A. Enhanced Oil Recovery Scoping Study. [S.I.]: EPRI, 1999.

ANP, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. *Natural gas.* 2019. Disponível em: https://www.gov.br/anp/pt-br. Acesso em: 20 jun. 2022.

AZIZ, M.; SETTARI, A. *Petroleum Reservoir Simulation*. New York, USA: Elsevier Applied Science, 1979.

BARREE, R. D.; CONWAY, M. W. Beyond Beta factors: A complete model for Forchheimer and trans-Forchheimer in porous media. In: *SPE ANNUAL TECHNICAL CONFERENCE AND EXHIBITION*. HOUSTON, TEXAS, USA: [s.n.], 2004.

BÖTTCHER, N. et al. Non-isothermal, compressible gas flow for the simulation of an enhanced gas recovery application. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 236, p. 4933–4943, 2012.

BOUDET, H. e. a. Fracking controversy and communication: Using national survey data to understand public perceptions of hydraulic fracturing. *Energy Policy*, v. 65, 2014.

CHEN, Z. Reservoir Simulation: Mathematical Techniques in Oil Recovery. [S.I.]: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007.

CHEN, Z.; HUAN, G.; LI, B. An improved IMPES method for two-phase flow in porous media. *Transport in Porous Media*, v. 54, n. 3, p. 361–376, 2004.

CHEN, Z.; HUAN, G.; MA, Y. Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media. Philadelphia, USA: Society of Industrial and Applied Mathematics, 2006.

CHUNG, C. L. et al. Numerical reservoir simulation of shale gas in the slip flow regime. In: *IBERO-LATIN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING*, 36., 2015, Rio de Janeiro. Anais do XXXVI Ibero-Latin American Congress on Computational Methods in Engineering. Rio de Janeiro: [s.n.], 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.

CORCOANA, A. Applied Enhanced Oil Recovery. United States: Prentice Hall, 1992.

DEBOSSAM, J. G. S. Simulação Numérica do Escoamento Monofásico Bicomponente em Reservatórios de Petróleo. Dissertação (Mestrado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, Brasil, 2018.

DEBOSSAM, J. G. S. et al. Numerical simulation of single-phase flow in naturally fractured oil reservoirs. *Coupled Systems Mechanics*, v. 8, n. 2, p. 129–146, 2019.

DEBOSSAM, J. G. S. et al. Numerical simulation of single-phase two-components non-darcy flow in naturally fractured reservoirs for enhanced gas recovery and carbon dioxide storage. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, p. 1–23, 2023.

DEHKORDI, M. M. et al. A general finite volume based numerical algorithm for hydrocarbon reservoir simulation using blackoil model. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, v. 24, n. 8, p. 1831–1863, 2014.

DING, J. et al. Dynamic threshold pressure gradient in tight gas reservoir. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 20, p. 155–160, 2014.

ENERGIA, E. B. *Cenários gás.* 2019. Disponível em: https://cenariosgas.editorabrasilenergia.com.br/o-shale-gas-a-espreita-no-brasil. Acesso em: 03 nov. 2023.

ERTEKIN, T.; ABOU-KASSEM, J. H.; KING, G. R. *Basic Applied Reservoir Simulation*. Richardson, USA: Society of Petroleum Engineers, 2001.

EZEKWE, N. *Petroleum Reservoir Engineering Practice*. Westford, USA: Prentice Hall, 2010.

FENG, R. et al. Stress-dependent permeability measurement techniques for unconventional gas reservoirs: Review, evaluation, and application. *Fuel*, v. 256, p. 115987, 2019.

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.

FU, J. et al. Productivity model with mechanisms of multiple seepage in tight gas reservoir. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 209, p. 109825, 2022.

GELHAR, L. W.; WELTY, C.; REHFELDT, K. R. A critical review of data of field-scale dispersion in aquifers. *Water Resources Research*, v. 28, n. 7, p. 1955–1974, 1992.

GURIA, C. Pressure- and temperature-dependent Klinkenberg slippage effect in porous media to non-ideal gases. *Geoenergy Science and Engineering*, v. 224, p. 211629, 2023.

HALSEY, T. C. Computational sciences in the upstream oil and gas industry. *Philosophical Transactions of Royal Society*, v. 374, p. 1–12, 2016.

HERINGER, J. D. S. et al. Numerical simulation of non-isothermal flow in oil reservoirs using two-equation model. *Coupled Systems Mechanics*, v. 8, n. 2, p. 147–168, 2019.

HUANG, T.; GUO, X.; CHEN, F. Modeling transient flow behavior of a multiscale triple porosity model for shale gas reservoirs. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 23, p. 33–46, 2015.

IBP, I. B. de Petróleo e G. *Maiores produtores de gás natural no mundo*. 2022. Disponível em: https://www.ibp.org.br/observatorio-do-setor/snapshots/maiores-produtores-mundias-de-gas-natural-em-2020. Acesso em: 31 de out. 2023.

IEA, A. internacional de E. *Maiores reservas.* 2022. Disponível em: https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2023. Acesso em: 15 set. 2022.

IPCC. The Intergovernmental Panel on Climate Change - CO_2 Injection. 2022. Disponível em: $\langle https://www.ipcc.ch \rangle$. Acesso em: 20 jul. 2022.

IPEA, I. de P. E. A. Turbinas eólicas podem ajudar a capturar CO₂ enquanto produzem energia. 2023. Disponível em: https://www.ipea.gov.br/cts/pt/central-de-conteudo/noticias/noticias/358-turbinas-eolicas-podem-ajudar-a-capturar-co2-enquanto-produzem-energia. Acesso em: 08 nov. 2023.

ISLAM, M. R. et al. *Advanced Petroleum Reservoir Simulation*. Trondheim, Norway: Wiley, 2010.

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.

LI, B. et al. Experimental investigation and theoretical modeling of stress-dependent permeability in naturally fractured tight gas reservoir. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 188, p. 106949, 2020.

LI, Z. et al. Evaluation of CO_2 storage of water alternating gas flooding using experimental and numerical simulation methods. *Fuel*, v. 311, p. 122489, 2022.

LIU, G. et al. Effect of pore-throat structure on gas-water seepage behaviour in a tight sandstone gas reservoir. *Fuel*, v. 310, p. 121901, 2022.

LIU, H.; TAFTI, D. K.; LI, T. Hybrid parallelism in MFIX CFD-DEM using OpenMP. *Powder Technology*, Elsevier, v. 259, p. 22–29, 2014.

LUO, H. et al. Modeling temperature behavior of multistage fractured horizontal well with two-phase flow in low-permeability gas reservoirs. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 173, p. 1187–1209, 2019.

LUO, Y. et al. Identification of distinctions of immiscible CO₂ huff and puff performance in Chang-7 tight sandstone oil reservoir by applying NMR, microscope and reservoir simulation. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 209, p. 109719, 2022.

MAES, J. et al. Modelling in-situ upgrading of heavy oil using operator splitting method. *Computational Geoscience*, v. 18, n. 3, p. 183–194, 2015.

MATHIASSEN, O. M. CO_2 as injection gas for enhanced oil recovery and estimation of the potential on the Norwegian continental shelf. Norwegian University of Science and Technology, 2003.

MENG, Y.; LI, Z.; LAI, F. Influence of effective stress on gas slippage effect of different rank coals. *Fuel*, v. 285, p. 119207, 2021.

MIAO, Y. et al. A new rate-transient analysis model for shale gas reservoirs coupled the effect of slip flow and surface diffusion. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 124, p. 1–10, 2018.

MOGHADDAM, R. N.; JAMIOLAHMADY, M. Fluid transport in shale gas reservoirs: Simultaneous effects of stress and slippage on matrix permeability. *International Journal* of Coal Geology, v. 163, p. 87–99, 2016.

PRATES, C. P. T. et al. Evolução da oferta e da demanda de gás natural no brasil. In: SETORIAL RIO DE JANEIRO, n. B. (Ed.). [S.l.: s.n.], 2006.

ROSÁRIO, R. C. D. Determinação de pressão em poços horizontais na simulação numérica de reservatórios de gás natural incorporando os efeitos de escorregamento e de adsorção. Tese (Doutorado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2020.

RUBIN, C. et al. Investigation of gas slippage effect and matrix compaction effect on shale gas production evaluation and hydraulic fracturing design based on experiment and reservoir simulation. *Fuel*, v. 241, p. 12–24, 2019.

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

SCHULZ, J. A. T. Simulação numérica do escoamento bifásico em meios porosos heterogêneos empregando uma formulação semi-implícita, limitadores de fluxo e o método dos volumes finitos. Tese (Doutorado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2009.

SHENG, G.; JAVADPOUR, F.; SU, Y. Effect of microscale compressibility on apparent porosity and permeability in shale gas reservoirs. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 120, p. 56–65, 2018.

SHENG, G. et al. A multiple porosity media model for multi-fractured horizontal wells in shale gas reservoirs. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 27, p. 1562–1573, 2015.

SHI, J. et al. Gas permeability model considering rock deformation and slippage in low permeability water-bearing gas reservoirs. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 120, p. 61–72, 2014.

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.

SONG, H. et al. Impact of permeability heterogeneity on production characteristics in water-bearing tight gas reservoirs with threshold pressure gradient. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 22, p. 172–181, 2015.

SOUZA, G. Acoplamento poço-reservatório na simulação numérica de reservatórios de gás. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual do Norte Fluminense, 2013.

SUN, H. et al. A new numerical well test method of multi-scale discrete fractured tight sandstone gas reservoirs and its application in the Kelasu gas field of the Tarim Basin. *Natural Gas Industry B*, v. 10, n. 2, p. 103–113, 2023.

TAGHAVINEJAD, A. et al. Flow modeling in shale gas reservoirs: A comprehensive review. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 83, p. 103535, 2020.

TANG, C. et al. Numerical simulation of co_2 sequestration in shale gas reservoirs at reservoir scale coupled with enhanced gas recovery. *Energy*, v. 277, p. 127657, 2023.

VENNEMO, S. B. *Multiscale Simulation of Thermal Flow in Porous Media*. Dissertação (Mestrado) — Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway, 2016.

WANG, J.; YU, L.; YUAN, Q. Experimental study on permeability in tight porous media considering gas adsorption and slippage effect. *Fuel*, v. 253, p. 561–570, 2019.

WANG, L. et al. Advances in improved/enhanced oil recovery technologies for tight and shale reservoirs. *Fuel*, v. 210, p. 425–445, 2017.

WANG, L. et al. Review of multi-scale and multi-physical simulation technologies for shale and tight gas reservoirs. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 37, p. 560–578, 2017.

WANG, S.; LUKYANOV, A. A.; WU, Y.-S. Second-order gas slippage model for the klinkenberg effect of multicomponent gas at finite knudsen numbers up to 1. *Fuel*, v. 235, p. 1275–1286, 2019.

WERNECK, L. F. Implementação paralelizada de métodos de resolução de sistemas algébricos na simulação de reservatórios de gás. Dissertação (Mestrado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2016.

XU, M.; ECKSTEIN, Y. Use of weighted least-squares method in evaluation of the relationship between dispersivity and field scale. *Ground Water*, v. 33, n. 6, p. 905–908, 1995.

YU, X. et al. Modeling the effects of gas slippage, cleat network topology and scale dependence of gas transport in coal seam gas reservoirs. *Fuel*, v. 264, p. 116715, 2020.

ZHANG, L. et al. Effect of pore throat structure on micro-scale seepage characteristics of tight gas reservoirs. *Natural Gas Industry B*, v. 7, n. 2, p. 160–167, 2020.

ZHANG, Y.; JIN, Y.; YANG, D. Semi-analytical modeling of transient pressure behaviour for a multifractured horizontal well in a gas reservoir with a complex fracture network by considering effects of slippage, stress-sensitivity, and gas adsorption/desorption. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 214, p. 110504, 2022.

ZHANG, Y.; YANG, D. Modeling two-phase flow behaviour in a shale gas reservoir with complex fracture networks and flow dynamics. *Gas Science and Engineering*, v. 119, p. 205112, 2023.

ZHAO, Y.; ZHANG, L.; SHAN, B. Mathematical model of fractured horizontal well in shale gas reservoir with rectangular stimulated reservoir volume. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 59, p. 67–79, 2018.