PROGRAMA EQ-ANP

Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria do Petróleo e Gás Natural

Simulação Numérica de *Viscous Fingering* em Escoamentos em Meios Porosos Utilizando OpenFOAM.

Julliana de Oliveira Guimarães

Dissertação de Mestrado

Orientadores

Prof. Krishnaswamy Rajagopal, Ph.D.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Abril de 2014

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE *VISCOUS FINGERING* EM ESCOAMENTOS EM MEIOS POROSOS UTILIZANDO OPENFOAM.

Julliana de Oliveira Guimarães

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Orientada por:

K. Rajagopal

Krishnaswamy Rajagopal, Ph.D.

Luiz Fernando Lopes R. S. h.

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Aprovada por:

João Felipe Mitre de Araujo

João Felipe Mitre de Araujo, D.Sc.

Luiz Otávio Schmall dos Santos, Ph.D.

Medronho

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Abril de 2014

Guimarães, Julliana de Oliveira.

Simulação Numérica de *Viscous Fingering* em Escoamentos em Meios Porosos Utilizando OpenFOAM. / Julliana de Oliveira. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2014.

xiii, 85p.;il

(Dissertação) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2014.

Orientadores: Krishnaswamy Rajagopal e Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva.

1. OpenFOAM. 2. *Viscous Fingering*. 3. Meios Porosos. 4. Tese. (Mestrado – UFRJ/EQ). 5. Krishnaswamy Rajagopal e Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva. I. Título.

”Seja, pois, o motivo de tuas ações e dos teus pensamentos sempre o cumprimento do dever, e faze as tuas obras sem procurares recompensa, sem te preocupares com o teu sucesso ou insucesso, com teu ganho ou o teu prejuízo pessoal. Não caias, porém, em ociosidade e inação, como acontece facilmente aos que perderam a ilusão de esperar uma recompensa das suas ações...”

BAGHAVAD-GITA

“Só existem dois dias do ano que nada pode ser feito. Um se chama ontem e o outro, amanhã. Portanto, hoje é o dia certo para amar, acreditar, fazer e principalmente viver.”

Dalai Lama

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, a Deus por ter me guiado e fortalecido nessa jornada difícil que escolhi.

Agradeço à minha família por todo apoio e carinho dados a mim, mesmo em momentos de conflito. Isto inclui meus pais, minha irmã, meus avós, minha madrinha e meu afilhado Miguel, que apesar de ainda ser pequeno e não ter noção do que seja um mestrado, contribuiu por me fazer rir e me deixar leve nos dias pesados e tristes.

Aos meus amigos muito queridos que disseram que tomei "chá de sumiço", pois não os vi direito nesse período de dois anos, principalmente, na reta final, mas que sempre me quiseram bem e me apoiaram ainda que à distância: Carolina, Renata (bizu), Ívila, William, Fernanda, Débora, Renata (dupla) e Ana Caroline. Obrigada!

Ao pessoal do LTFD pelas boas conversas do café, pelo apoio mútuo e pelas sessões de terapias em grupo no laboratório, sem dúvida, importantes para aguentar e ir até o fim desta fase. Um agradecimento especial ao Jovani por ter tirado as minhas dúvidas "idiotas" e me ajudado muito nessa caminhada onde a paciência deve reinar! Também agradeço aos meus presentes de mestrado, Luciana e Nathália, duas amigas que vão ficar no coração! Obrigada pelos almoços no nosso "bandeja" e desabafos e apoios!

Ao Bruno por ter segurado o meu estresse e desespero, enxugado minhas lágrimas em momentos difíceis e de frustração, por acreditar que eu era capaz, pelo seu amor e carinho enormes depositados em mim, só tenho a agradecer!

E, finalmente, aos queridos orientadores Luiz Fernando e Rajagopal. Muito obrigada por compartilharem seus preciosos conhecimentos, pela paciência, dedicação e confiança depositada em mim e no trabalho que fiz. Sem vocês, o mesmo não teria um resultado tão bom!

Ao apoio financeiro da **Agência Nacional do Petróleo** – ANP – e da **Financiadora de Estudos e Projetos** – FINEP – por meio do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo e Gás – PRH-ANP/MCT, em particular ao **PRH 13**, da Escola de Química - Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria do Petróleo e Gás Natural e, da Petrobras por meio do projeto de P&D para Gestão Tecnológica de Gases Ácidos em Reservatórios.

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Ciências, com ênfase na área de Petróleo e Gás Natural.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE *VISCOUS FINGERING* EM ESCOAMENTOS EM MEIOS POROSOS UTILIZANDO OPENFOAM.

Julliana de Oliveira Guimarães
Abril, 2014

Orientadores: Prof. Krishnaswamy Rajagopal, Ph.D.
Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Quando um fluido é deslocado por outro em um meio poroso e estes possuem viscosidades diferentes e, portanto, mobilidades distintas, surge uma instabilidade na interface entre estes, chamada *Viscous Fingering*. Reportado no final da década de 1950, este fenômeno tem sido estudado e utilizado em diversas áreas, desde a área coloidal até a de petróleo, com sua extração e seus vazamentos de óleo.

No contexto da indústria de exploração e produção de petróleo (E&P), a existência deste fenômeno durante a recuperação de óleo (secundária ou terciária) pode causar perdas econômico-operacionais porque o fluido injetado para extrair o óleo é recuperado antes mesmo deste. Logo, torna-se muito importante entender o *viscous fingering*, os modelos que o descrevem para prever o seu comportamento durante esse processo através de simulações numéricas.

O presente trabalho tem como objetivo principal investigar a modelagem do *viscous fingering* em um deslocamento miscível no meio poroso com abordagem Fluidodinâmica Computacional (CFD), pois ainda é escasso esse tipo de estudo na literatura. O pacote CFD OpenFOAM (*software* livre e de código aberto) foi usado para implementar um modelo monofásico baseado em relações empíricas aplicados à célula de Hele-Shaw. Este modelo foi compartimentado a fim de que se pudesse avaliar onde e como o fenômeno poderia ser observado assim como a capacidade do *software* para resolução deste problema. Além disso, foram testados diferentes métodos numéricos e condições operacionais. As instabilidades foram obtidas e comparadas com as reportadas pela literatura, mostrando comportamentos característicos do efeito do *viscous fingering*.

Abstract of the Master Thesis presented to Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos - EQ/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science with emphasis on Petroleum and Natural Gas.

NUMERICAL SIMULATION OF *VISCOUS FINGERING* IN POROUS MEDIA FLOWS USING OPENFOAM.

Julliana de Oliveira Guimarães
April, 2014

Advisors: Prof. Krishnaswamy Rajagopal, Ph.D.
Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

In a porous medium, when a fluid displaces another with a higher viscosity an instability arises at the interface between them that is called viscous fingering. Reported in the late 1950s, this phenomenon has been studied and applied to various areas, from colloidal area to petroleum one, with its extraction and its oil spills.

In the context of the exploration and production petroleum industry (E&P), the existence of this phenomenon during oil recovery (secondary or tertiary) can lead to economic and operating losses since the injected fluid used to extract the oil can breakthrough and be produced before it. Therefore, it becomes very important to understand the viscous fingering, the models that describe it in order to predict its behavior during this process through numerical simulations.

The present work aims to investigate the model of viscous fingering caused in a miscible flow in porous media using a Computational Fluid Dynamics (CFD) approach, because the literature still lacks this type of study. The CFD OpenFOAM package (free and open source software) was used to implement a single-phase model based on empirical relations applied to the Hele- Shaw cell. This model was divided into parts so that one could evaluate where and how the phenomenon can be observed as well as the software's capacity on solving this problem. Besides this, different numerical methods and operational conditions were tested. The instabilities were obtained and compared with those reported in the literature, showing the characteristic behavior for the viscous fingering effects.

Sumário

Lista de Figuras **x**

Lista de Tabelas **xiii**

1 Introdução **1**
1.1 Objetivos 2
1.2 Estrutura do Trabalho 2

2 Revisão Bibliográfica **4**
2.1 Petróleo 4
2.2 Recuperação de Petróleo 5
2.2.1 Recuperação Primária 6
2.2.2 Recuperação Secundária - Métodos Convencionais 7
2.2.3 Recuperação Terciária - *Enhanced Oil Recovery* (EOR) 11
2.2.4 Eficiência de Recuperação 13
2.3 Propriedades de Rochas e Fluidos 14
2.3.1 Porosidade 14
2.3.2 Compressibilidade 15
2.3.3 Saturação de Fluidos 16
2.3.4 Permeabilidade 17
2.3.5 Capilaridade 19
2.3.6 Mobilidade 21
2.4 *Viscous Fingering* 22
2.4.1 Modelagem de Deslocamento Imiscível em Meio Poroso 24
2.4.2 Modelagem de Deslocamento Miscível em Meio Poroso 26
2.5 Fluidodinâmica Computacional (CFD) 27
2.5.1 Definição e Etapas de Solução 28
2.5.2 OpenFOAM 31

3 Estado da Arte **34**
3.1 Trabalhos Experimentais 34
3.2 Trabalhos Numéricos 37

4 Metodologia **40**
4.1 Problema Físico e Modelagem Matemática 40
4.2 Implementação CFD no OpenFOAM 43
4.2.1 Implementação de Código para Escoamento em Meio Poroso . 43
4.2.2 Inclusão do Efeito de Viscosidade - Acoplamentos 44
4.2.3 Inclusão do Termo Difusivo 45
4.2.4 Código Desenvolvido da Modelagem Completa do Problema . 46
4.2.5 Parâmetros de Simulação 50
4.3 Convergência de Malha 51

5 Resultados e Discussão **53**
5.1 Geometria e Malha 53
5.2 Validação do Código de Escoamento em Meio Poroso 56
5.3 Avaliação dos Acoplamentos pv e pvc 56
5.3.1 Variação do Número de Courant 57
5.3.2 Mecanismos de Interações Não-Lineares do *Viscous Fingering* 58
5.3.3 Métodos Numéricos 59
5.4 Avaliação dos parâmetros de operação 60
5.4.1 Análise da variação do gradiente de Pressão 60
5.4.2 Análise da Razão de Mobilidade 61
5.5 Avaliação do Termo Difusivo 64
5.5.1 Caso Isotrópico 64
5.5.2 Caso Anisotrópico 65

6 Conclusões e Propostas para Trabalhos Futuros **70**
6.1 Conclusões 70
6.2 Propostas para Trabalhos Futuros 72

Referências Bibliográficas **73**
appen 78

A Códigos Desenvolvidos **79**

Lista de Figuras

2.1 Comportamento ideal da injeção de água no reservatório. Fonte: (SANTANA, 2008 apud SANTOS et al., 2010) 9
2.2 Digitação Viscosa ou *Viscous Fingering*. Adaptado de: (SANTANA, 2008 apud SANTOS et al., 2010) 9
2.3 Canalização. Adaptado de: (SANTANA, 2008 apud SANTOS et al., 2010) 10
2.4 Esquema simplificado dos vários métodos de EOR. Adaptado de: (PWAGA et al., 2010) 13
2.5 Seção vertical de um reservatório estratificado sujeito à injeção de água. Fonte: (ROSA et al., 2006) 14
2.6 Seção transversal de uma amostra de rocha. Fonte: (ROSA et al., 2006) 15
2.7 Esquema de um meio poroso com poros interconectados e isolados, mostrando as porosidades efetiva e não-efetivas. Fonte: (GASPAR, 2003) 16
2.8 Uma rocha tem permeabilidade de 1 Darcy quando transmite um fluido de 1 cp (centipoise) de viscosidade através de uma seção de 1 cm^2 à vazão de 1 cm^3/s sob uma queda de pressão de um 1 atm. Fonte: (THOMAS, 2001) 18
2.9 Equilíbrio de forças na interface óleo-água. Fonte: (CUNHA, 2010 apud MONTALVO, 2008) 20
2.10 Molhabilidade em sistema óleo-água. Fonte: (CUNHA, 2010 apud MONTALVO, 2008) 20
2.11 Distribuição das fases molhante e não molhante no meio poroso. Fonte: (IGLESIAS, 2009) 20
2.12 Comparação entre diferentes razões de mobilidades (R). **(a)** MR > 1, existência do fenômeno do *viscous fingering*. **(b)** MR < 1, ausência de *viscous fingering*. Fonte: (CURBELO, 2006 apud GUAN et al., 2002) 22
2.13 Óleo e água presentes nos mesmos poros. Água ou óleo pode fechar alguns destes poros impedindo a passagem do outro através desses. Fonte: (BOOTH, 2008) 25

2.14 Esquema das etapas de solução de um problema por abordagem CFD. 28
2.15 Discretização nos domínios de espaço e tempo. Fonte: (RUSCHE, 2002) 29
2.16 Visão geral da estrutura do OpenFOAM. Fonte: (OPENFOAM, 2013b) 31
2.17 Estrutura de diretórios de um caso. Fonte: (OPENFOAM, 2013b) . . 33

3.1 **(a)** Diagrama esquemático da célula de Hele-Shaw retilínea. **(b)** A instabilidade de Saffman-Taylor. Fonte: (GADELHA, 2007) 35
3.2 A competição entre os *fingers* ao longo do tempo em um canal estreito **(a)**, **(b)** e **(c)**. Fonte: (GADELHA, 2007) 35
3.3 Diferentes formatos do *Viscous Fingering*: **(a)** escoamento miscível em geometria um quarto de *Five-Spot*, **(b)** escoamento imiscível em célula de Hele-Shaw retilínea com efeito gravitacional e **(c)** escoamento miscível de fluido não-Newtoniano em célula de Hele-Shaw radial. Fonte: (HOMSY, 1987) 36

4.1 Geometria da célula de Hele-Shaw retangular utilizada. 40
4.2 Esquema do *loop* de cálculo do Algoritmo 1. 44
4.3 Esquema do *loop* de cálculo do acoplamento pv. 44
4.4 Esquema do *loop* de cálculo do acoplamento pvc. 45
4.5 Esquema do *loop* de cálculo da modelagem completa, isto é, com o termo difusivo anisotrópico dependente de velocidade e de acoplamento pvc. 46
4.6 Esquema da célula de Hele-Shaw com determinados instantes de tempo selecionados com suas respectivas extensões médias dos *fingers*, representadas pelas linhas verticais. 52

5.1 Exemplo mostrando isolinhas de concentração de 0,5 para três malhas diferentes dos resultados obtidos pelo esquema pvc no tempo de 3000 s e a linha na direção y, onde foi aplicada a integral da Equação 4.13, com o contorno de concentração no fundo. 54
5.2 Convergência de Malha dos resultados obtidos pelo acoplamento pv. . 55
5.3 Convergência de Malha dos resultados obtidos pelo acoplamento pvc. 55
5.4 Representação da malha M5 com um *zoom* para melhor visualização dos seus elementos de malha retangulares. 56
5.5 Concentração sendo advectada obtida pelo *solver* inicial. 57
5.6 Desenvolvimento da Pressão obtido pelo *solver* inicial. 57
5.7 Contorno de concentração em diferentes tempos (em segundos) **(a)** *solver* 1, **(b)** *solver* 2. 58

5.8 Contorno de concentração em diferentes tempos (em segundos) dos resultados obtidos pelo método do *upwind*. 59
5.9 Contorno de concentração em diferentes tempos (em segundos) para os esquemas **(a)** TVD e **(b)** *vanLeer*. 60
5.10 Isolinhas de concentração de 0,5 em diferentes instantes de tempo (em segundos) para os valores de queda de pressão de: 5 atm (rosa), 10 atm (amarelo) e 15 atm (azul). 61
5.11 Contorno de concentração em diferentes instantes (em segundos) para as razões de mobilidade de parâmetros: R = 2 (**(a)** e **(b)**), R =3 (**(c)** e **(d)**) e R =5 (**(e)** e **(f)**). 62
5.12 Contorno de concentração em diferentes instantes (em segundos) para as razões de mobilidade de parâmetros: **(a)** R = 2, **(b)** R =3 e **(c)** R =5. 63
5.13 Contorno de concentração em diferentes intantes (em segundos) para as razões de mobilidade de parâmetros: **(a)** R = 2, **(b)** R =3 e **(c)** R =5. 63
5.14 Coeficiente de difusão constante igual a $10^{-12}m^2/s^{-1}$ em diferentes instantes. 65
5.15 Tensor difusão isotrópico com elementos de sua matriz iguais a:**(a)** $D_{ii} = 10^{-9}m^2/s^{-1}$ e **(b)** $D_{ii} = 10^{-12}m^2/s^{-1}$ em diferentes instantes. . 66
5.16 Tensor de difusão anisotrópico com os valores dos elementos da sua diagonal principal iguais a $D_{xx} = 1,43.10^{-8}m^2/s^{-1}$ e $D_{xy} = 5,65.10^{-10}m^2/s^{-1}$ em diferentes instantes. 67
5.17 Tensor de difusão anisotrópico com os valores dos elementos da sua diagonal principal iguais a $D_{xx} = 1,43.10^{-8}m^2/s^{-1}$ e $D_{xy} = 5,65.10^{-10}m^2/s^{-1}$ em diferentes instantes. 67
5.18 Gráfico que relaciona os coeficientes de difusão-dispersão com número que controla a magnitude da dispersão, ε, mantendo-se um valor constante e médio para a velocidade intersticial. 68
5.19 Gráfico que relaciona os coeficientes de difusão-dispersão com a velocidade intersticial mantendo-se um valor constante para o número que controla a magnitude da dispersão, ε. 68
5.20 Tensor de difusão-dispersão anisotrópico dependente de velocidade em diferentes instantes. 69
5.21 Tensor de difusão-dispersão anisotrópico dependente de velocidade em diferentes instantes. 69

Lista de Tabelas

2.1 Tabela de Fator de Recuperação dos Mecanismos de Produção de Reservatórios 7

4.1 Tabela com as unidades das variáveis do sistema de equações utilizado. 42
4.2 Tabela com as condições de contorno do problema. 42
4.3 Tabela com valores dos parâmetros do meio poroso análogo (da célula de Hele-Shaw). 43
4.4 Tabela dos métodos numéricos utilizados no arquivo `fvSchemes`. . . . 50

5.1 Tamanho das malhas confeccionadas. 54
5.2 Valores dos parâmetros das simulações. 54
5.3 Valores das razões de mobilidade (MR) avaliadas e dos parâmetros R associados às mesmas. 62
5.4 Tempo computacional gasto para cada simulação com as diferentes razões de mobilidade (MR) avaliadas. 64

Capítulo 1

Introdução

Durante o escoamento de um fluido em um meio poroso previamente preenchido com outro fluido de maior viscosidade é possível observar o aparecimento de instabilidades hidrodinâmicas, chamadas *Viscous Fingering* ou instabilidades de Saffman-Taylor. Devido à diferença entre suas viscosidades e diferentes interações com meio poroso, os fluidos possuem mobilidades distintas e as instabilidades surgem, então, na interface entre eles. O entendimento destes efeitos é muito importante em diferentes áreas, como a engenharia de petróleo, fenômenos de combustão, deposição eletroquímica e sistemas reativos-difusivos (BARONI, 2009; WITT et al., 2005; ABREU, 2007; LEMAIRE et al., 1991; ARAUJO; NETO, 2009). Na indústria de óleo e gás, os efeitos do *Viscous Fingering* podem ser observados na injeção de água em um poço de petróleo, por exemplo (ARAUJO; NETO, 2009).

A existência do *Viscous Fingering* durante a recuperação de óleo (secundária ou terciária), leva a um prejuízo para indústria petroleira, uma vez que o fluido injetado no poço é produzido antes do óleo, diminuindo, então, a eficiência de extração do mesmo (BOTELHO, 2004; MARIANO, 2008). Logo, o estudo deste fenômeno é muito importante para que, não só a eficiência do processo possa ser aumentada, mas como também possa haver uma melhora no seu próprio sistema de controle. Além disso, pode-se estender isto para outras áreas tão importantes quanto o caso de vazamento de óleo em lençóis freáticos, por exemplo (BOTELHO, 2004).

A simulação numérica permite a previsão do comportamento de diferentes fenômenos. Nesse contexto, o *Viscous Fingering* pode ser simulado para avaliar a recuperação de óleo no poço com injeção de um fluido como a água, geralmente, de forma eficiente, rápida e econômica, lembrando que deve-se buscar maneiras para melhoria destas facilidades. Existem vários trabalhos na literatura que fazem uso de simulação numérica com propostas de modelagem das instabilidades *fingering* e comparam com dados experimentais (WITT et al., 2005; ARAUJO; NETO, 2009; MARIANO, 2008; ZHANG et al., 1996). Contudo, as implementações dos procedimentos numéricos são, na grande maioria das vezes, realizadas através de códigos próprios e aplicadas a um caso específico. Logo, o OpenFOAM (OPENFOAM,

2013b), torna-se uma alternativa devido à sua facilidade de uso e implementação, além de possuir código aberto.

1.1 Objetivos

Os objetivos do presente trabalho podem ser colocados da seguinte maneira:

i) Objetivo Geral: Testar a capacidade do OpenFOAM (OPENFOAM, 2013b), através de sua abordagem de Fluidodinâmica Computacional (CFD), em simular o fenômeno do *Viscous Fingering* e, com os resultados obtidos, avaliar se os mesmos estão coerentes com a física do processo.

ii) Objetivos Específicos: Implementar a modelagem matemática de deslocamento miscível referente às instabilidades Saffman-Taylor e avaliar seus resultados frente aos obtidos na literatura por CFD, bem como os métodos numéricos utilizados para tal, fazer uma análise de sensibilidade do processo às variáveis de operação como queda de pressão e razão de mobilidade e analisar a influência e os efeitos do termo difusivo.

1.2 Estrutura do Trabalho

Este trabalho está organizado da seguinte maneira:

i) O Capítulo 1 aborda uma introdução do tema de estudo, bem como os objetivos a serem alcançados e a forma de desenvolvimento do mesmo.

ii) No Capítulo 2, há uma breve descrição sobre petróleo, os tipos de recuperação do mesmo, bem como as principais propriedades de rochas e fluidos. São incluídos também o fenômeno do *Viscous Fingering*, sua definição e modelagens matemáticas disponíveis, além da descrição e explicação sobre a CFD e o *software* OpenFOAM.

iii) O Capítulo 3 traz uma revisão e breve histórico da evolução dos trabalhos feitos sobre essas instabilidades.

iv) O Capítulo 4 discorre sobre o problema físico abordado, a modelagem matemática utilizada e a maneira como esta foi implementada no OpenFOAM e, o procedimento para avaliação da convergência de malha.

v) O Capítulo 5 apresenta os resultados obtidos pela simulações numéricas, assim como as discussões a respeito dos mesmos.

vi) O Capítulo 6 traz as principais conclusões do trabalho e as sugestões para estudos futuros.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Petróleo

Do latim *petroleum* (*petra* = pedra + *oleum* = óleo), petróleo é uma mistura natural de hidrocarbonetos que pode ser encontrada no estado líquido (óleo), sólido (betume) ou gasoso (gás natural), dependendo de sua própria composição e das condições de temperatura e pressão às quais está submetida. Pode estar em uma ou mais fases em equilíbrio. Sua mistura de hidrocarbonetos é bem complexa e composta por parafinas, naftênicos e aromáticos e, as impurezas mais comuns agregadas a esta são: água, compostos nitrogenados e de enxofre, dióxido de carbono e íons metálicos, principalmente, os de níquel e vanádio (THOMAS, 2001; ROSA et al., 2006; PORTAL PERFURADORES, 2013).

Também conhecido como ouro negro, devido à sua coloração e valor econômico, o petróleo é uma fonte de energia não renovável e de origem fóssil. Ainda que sua maior aplicação (cerca de 90%) seja para fins energéticos, como termoelétricas e combustíveis para os meios de transporte, o petróleo e seus derivados são muito importantes para a indústria química, principalmente a do setor de plásticos, que demanda maior quantidade de insumos petroquímicos, uma vez que possui uma ampla gama de produtos, desde brinquedos, material hospitalar descartável até peças de carro, por exemplo (ROSA et al., 2006; PORTAL PERFURADORES, 2013).

Em relação à sua formação, a teoria mais aceita é a de que o peso de sedimentos sobre a matéria orgânica (principalmente, microogarnismos e algas) acumulada, depositada e enterrada, há milhões de anos, no fundo de mares e lagos, teria promovido um ambiente com condições termoquímicas e interações adequadas e necessárias para uma série de transformações que deram origem ao petróleo. Depois de produzido, o petróleo tende a migrar em direção à superfície, mas se houver alguma armadilha geológica (rocha capeadora ou selante) que interrompa seu fluxo, o mesmo é armazenado e acumulado nos poros da rocha, formando uma jazida. Do contrário, chega à superfície até se perder através de exsudações, oxidação, degradação bacteriana, tranformando-se em asfalto natural (PORTAL PERFURADORES, 2013;

THOMAS, 2001).

As características físicas do petróleo (cor, densidade, viscosidade, etc.) e suas propriedades químicas estão associadas a uma infindável variedade de composições de misturas de hidrocarbonetos, que dependem do tipo de matéria orgânica original e da intensidade do processo, além do tipo e do teor de impurezas. Nesse sentido, o que diferencia uma jazida de outra é a quantidade relativa de cada grupo de hidrocarbonetos que a mesma possui. Há muitas formas de classificar o petróleo e, uma delas, é em relação aos seus constituintes (THOMAS, 2001; APETRO, 2013):

i) Petróleo naftênico (>70% de naftênicos): origina subprodutos como a gasolina de alto índice de octanagem, óleos lubrificantes com baixos resíduos de carbono, resíduos asfálticos na refinação e cadeias em formas de anel;

ii) Petróleo parafínico (>75% de parafínicos): origina subprodutos como a gasolina de baixa octanagem, querosene de alta qualidade, óleo diesel com características combustíveis muito boas, óleos de lubrificação de alta viscosidade, grande estabilidade química e alto ponto de fluidez, resíduos de refinação com grande percentagem de parafina e cadeias retilíneas;

iii) Petróleo aromático (>50% de aromáticos): é raro e sua gasolina é excelente, com altos valores de número de octano (ou índice de octanagem). Não é usado para a produção de lubrificantes;

iv) Petróleo misto: composto por misturas de hidrocarbonetos, como parafínicos-naftênicos, aromáticos-naftênicos e aromáticos-asfálticos.

2.2 Recuperação de Petróleo

O mecanismo geral de recuperação de petróleo consiste no deslocamento dos hidrocarbonetos para os poços de produção devido à diferença de pressão entre estes e o reservatório. As operações de recuperação de óleo são divididas em três categorias (PWAGA et al., 2010):

i) Recuperação Primária: produção inicial de petróleo através da energia natural existente no reservatório;

ii) Recuperação Secundária: injeção de água ou gás depois da declinação da produção primária;

iii) Recuperação Terciária: aplicada após método secundário de recuperação para extrair o óleo residual.

Essas etapas eram feitas em ordem cronológica, porém, muitas operações de produção em reservatórios não são conduzidas na ordem especificada. Um clássico exemplo que ilustra bem essa situação: produção de óleos pesados. Como o óleo, nesse caso, é bastante viscoso, a energia primária não deverá ser suficiente para deslocá-lo a uma vazão que seja rentável economicamente e, portanto, a recuperação primária não é recomendável. A próxima etapa seria a injeção de água ou gás, mas devido à alta razão de viscosidade, também não é aplicável. Resta a recuperação terciária, em que a opção mais apropriada seria a utilização de energia térmica para recuperação do óleo. Observa-se, então que, neste exemplo, um método considerado como um processo terciário, numa depleção cronológica, deve ser utilizado como o primeiro e, talvez, o único (RUIZ, 2012; ROSA et al., 2006).

Além disso, também não é necessário esperar a queda de pressão e consequente declínio da produção para implementar técnicas de recuperação avançada de petróleo (secundária e terciária). Pode e deve-se manter ou aumentar a pressão do reservatório a fim de acelerar a produção de óleo. Portanto, é recomendável a utilização dessas técnicas assim que a jazida é colocada em operação, como dita a boa prática da engenharia (SANTOS et al., 2010).

2.2.1 Recuperação Primária

As reservas de petróleo possuem uma certa quantidade de energia, chamada de *energia natural* ou *primária*, cuja grandeza depende do volume e natureza dos fluidos existentes no reservatório, assim como de suas condições de temperatura e pressão. A descompressão dos fluidos do reservatório concomitante à contração do volume poroso e o deslocamento de um fluido por outro (por exemplo, a invasão de água de um aquífero na zona de óleo) constitui o mecanismo de produção de reservatório. E a essa quantidade de óleo extraída às custas da energia natural dá-se o nome de recuperação primária (ROSA et al., 2006).

Os mecanismos de produção de reservatório são:

i) Mecanismo de Gás em Solução: quando a pressão do reservatório cai até o ponto de bolha do óleo à medida que é produzido, parte deste vaporiza. A expansão desse gás vai deslocar o líquido para fora do meio poroso.

ii) Mecanismo de Capa de Gás: quando existe equilíbrio líquido-vapor, a fase vapor (gás livre) tende a se acumular na parte mais alta do reservatório formando uma capa de gás. O funcionamento é parecido com o anterior: com a produção de óleo, a pressão do reservatório cai e isto é transmitido para a capa de gás que se expande e desloca o óleo.

iii) Mecanismo de Influxo de Água: o reservatório precisa estar em contato com um

aquífero e, ao entrar em produção, a pressão é reduzida. Como resposta a esse efeito, a água expande, invadindo a zona de óleo e deslocando o mesmo para os poços de produção.

Os dois primeiros são exclusivos de reservatório de óleo, enquanto que o terceiro pode ocorrer em reservatórios de óleo e de gás. Há ainda um mecanismo de segregação gravitacional, que na verdade, é mais um agente responsável por uma melhoria no desempenho dos outros mecanismos do que um mecanismo de produção de reservatório propriamente dito. Além disso, pode haver uma soma de efeitos desses mecanismos na produção de um reservatório, sem que um domine o outro e o resultado disso é o chamado *mecanismo combinado* (ROSA et al., 2006).

Em termos de fator de recuperação, a Tabela 2.1 ilustra a diferença entre os mecanismos citados.

Tabela 2.1: Tabela de Fator de Recuperação dos Mecanismos de Produção de Reservatórios
Fonte: (ROSA et al., 2006)

Tipo de Mecanismo	Percentual de Recuperação
Mecanismo de Gás em Solução	$< 20\%$
Mecanismo de Capa de Gás	20 - 30%
Mecanismo de Influxo de Água	30 - 40%
Mecanismo de Segregação Gravitacional	40 - 50%

2.2.2 Recuperação Secundária - Métodos Convencionais

À medida que o petróleo é produzido, há uma dissipação da energia primária causada pela descompressão dos fluidos e pelas resistências ao escoamento devido às forças viscosas e capilares presentes no meio poroso. Como o principal consumo dessa energia vem do decréscimo de pressão, com consequente perda de produção, há de se lançar mão de técnicas capazes de suplementar a energia primária. Isto é feito por meio da injeção de água ou de gás em poços escolhidos, aumentando ou mantendo a pressão no reservatório. Chama-se recuperação secundária, portanto, a quantidade adicional de óleo extraída através da energia que é transferida artificialmente para a jazida (ROSA et al., 2006).

Os métodos de recuperação secundária são chamados de métodos convencionais por serem antigos (datam do início do século XX), utilizam injeção de água ou injeção imiscível de gás e tem um fator de recuperação entre 30 e 50%, podendo ainda ser superior a 60% (ROSA et al., 2006). O fluido injetado desloca o óleo para fora dos poros da rocha e ocupa o espaço deixado por este. Entretanto, por

ser um processo puramente mecânico, isto é, não há interações químicas entre os fluidos, este não é capaz de retirar o óleo residual preso nos poros (conseqüência do efeito da capilaridade), pois os fluidos são imiscíveis entre si e não interferem na rocha-reservatório (CURBELO, 2006).

Para extrair esse óleo residual, é necessário utilizar técnicas de recuperação terciária ou EOR (*Enhanced Oil Recovery).* Porém, há de se considerar a economicidade do EOR, ou seja, se o percentual de recuperação agregado a ele será vantajoso já que seus processos são, por natureza, mais caros que os convencionais. Por isso, os métodos convencionais, que requerem baixos investimentos e custos operacionais, são amplamente utilizados na recuperação extra de óleos leves e médios (CURBELO, 2006; RUIZ, 2012).

Injeção de Água

Foi descoberta, por acidente, em 1865 na cidade de Phitole, Pensilvânia, quando uma quantidade de água proveniente de aquífero pouco profundo ou de acúmulos superficiais de água adentrou a jazida entre o poço perfurador e o produtor, incrementando a produção de óleo nos poços vizinhos. Porém, naquela época, achava-se que a função da água injetada era somente manter a pressão interna do reservatório. Demorou 42 anos, aproximadamente, para perceber o outro efeito causado pela injeção de água e aplicar a mesma como um método de recuperação de óleo. Mesmo tendo sido utilizada, pela primeira vez, em 1907 no campo de Bradford, EUA, foi a partir do ano de 1950 que ganhou notoriedade (FERRER, 2007; ROSA et al., 2006).

Embora seja o método convencional mais utilizado, a injeção de água pode não ser adequada para alguns casos como os de reservatórios heterogêneos e de pouca continuidade, uma vez que o poço produtor pode não sentir o efeito da injeção feita ou o contrário, isto é, a água injetada pode ser produzida em grandes quantidades (até 99% da produção total) pelo escoamento da mesma por fraturas e caminhos preferenciais desde o início da injeção. Vale lembrar que poços produtores podem ser convertidos para injetores e vice-versa, ao longo da vida de um reservatório, a fim de se evitarem os custos elevados de perfuração e o fechamento de poços pela produção de água em demasia (CURBELO, 2006).

A injeção de água atua expulsando o óleo, uma vez que essas substâncias não se misturam. O comportamento ideal da água em um poço é um deslocamento pistão, como mostrado na Figura 2.1 (SANTOS et al., 2010).

Entretanto, o que se observa na prática é a produção prematura da água injetada devido a fatores referentes à formação do reservatório e à própria interação entre o óleo e a água injetada, ou seja, o deslocamento que ocorre não é uniforme (pistão), e a água injetada sai no poço produtor antes do óleo. Ocorre, portanto, o fenômeno chamado de *Viscous Fingering* ou Digitação Viscosa, uma instabilidade hidrodinâ-

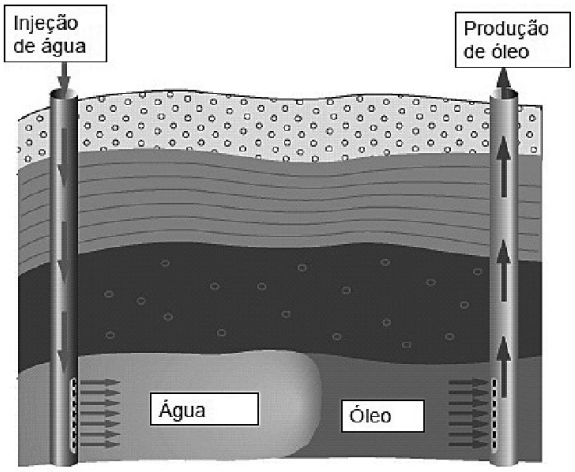

Figura 2.1: Comportamento ideal da injeção de água no reservatório. Fonte: (SANTANA, 2008 apud SANTOS et al., 2010)

mica, em que a água tende a se deslocar mais rapidamente por ser menos viscosa que o óleo, não sendo capaz de expulsar grande percentagem do óleo ali presente, como mostra a Figura 2.2. O mesmo também é observado em injeção de gás (SANTOS et al., 2010).

Outro efeito observado é o da canalização, isto é, a variação de permeabilidade das camadas de uma jazida pode retardar ou adiantar a produção de água, como mostrado na Figura 2.3. Sendo importante ressaltar que esta diferença de permeabilidade entre as camadas de um reservatório deve-se à formação geológica do mesmo (SANTOS et al., 2010).

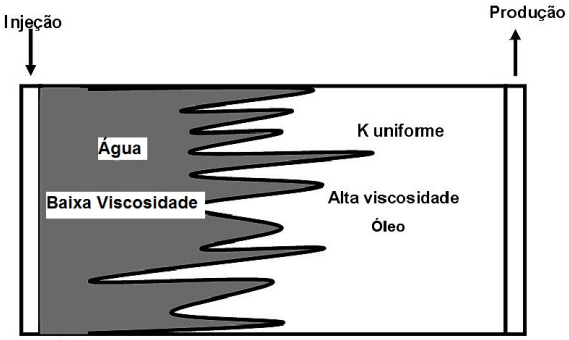

Figura 2.2: Digitação Viscosa ou *Viscous Fingering*. Adaptado de: (SANTANA, 2008 apud SANTOS et al., 2010)

A água de injeção pode vir da superfície (rios, lagos, represas e oceanos), de aquíferos por meio de captação de poços, ou pode ser do próprio poço produtor, onde a água produzida com o óleo passa por um processo de separação e pode ser reinjetada, quando mais água for necessária. Além disso, deve estar em grandes quantidades e localizada próxima ao uso, possuir fácil acesso e atender às características requisitadas pelo reservatório (CURBELO, 2006; SANTOS et al., 2010).

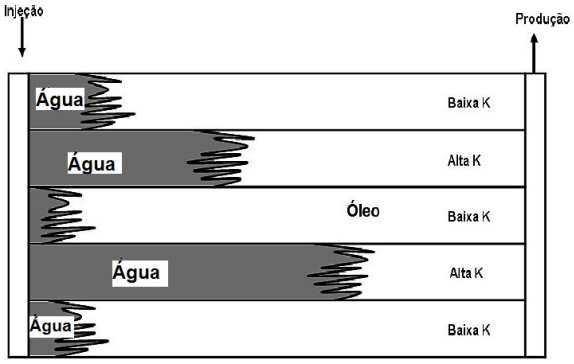

Figura 2.3: Canalização. Adaptado de: (SANTANA, 2008 apud SANTOS et al., 2010)

As principais características da água e que dependem de sua origem são: quantidade de sólidos, óleo em suspensão, presença de microorganismos e de ânions potencialmente geradores de incrustações, corrosividade associada à existência de O_2, H_2S e CO_2 , entre outras. Se a água não estiver nas especificações requeridas, haverá queda de injetividade nos poços, causada pelo tamponamento dos vazios da rocha, já que o reservatório funcionará como um filtro com o decorrer do tempo. Portanto, a qualidade da água é essencial e deve ser gerenciada todos os dias, porque um dia sem tratamento adequado já é o suficiente para danificar o poço, resultando em perda de injetividade nos poços injetores de água (SANTOS et al., 2010).

Injeção de Gás

É o processo mais antigo de injeção de fluidos, sendo o primeiro a ser sugerido e utilizado para manter a pressão do reservatório a fim de restaurar a produtividade de petróleo, poucos anos após a perfuração do poço Drake, em 1864. Assim como no caso da injeção de água, demorou um tempo considerável para que fosse aplicado como método de recuperação de petróleo e não somente um mantenedor da pressão da jazida (FERRER, 2007; PWAGA et al., 2010).

Embora possa ser um processo de deslocamento miscível ou imiscível, a depender das características do óleo e gás e das condições de temperatura e pressão do reservatório, vale lembrar que a injeção de gás como um método de recuperação secundária é somente um processo mecânico e, portanto, imiscível. O processo miscível do mesmo é classificado como um método EOR (ROSA et al., 2006; PWAGA et al., 2010; BAUTISTA, 2010). Se o gás injetado for o natural, este pode ter a mesma composição com a qual é produzido ou aquela derivada de seu processamento (THOMAS, 2001).

O gás injetado mantém alta a pressão do reservatório e sendo dissolvido no óleo ajuda a diminuir a viscosidade do mesmo, aumentando a permeabilidade relativa deste. Como conseqüência, os poços produtores podem manter a taxa de produção

a um nível mais elevado durante toda a vida produtiva do campo (FERRER, 2007). Existindo capa de gás nessa jazida, primária e/ou secundária, com baixa saturação de óleo na mesma, a injeção de gás é recomendada e deve ser feita na própria capa de gás, mantendo, assim, um gradiente de pressão relativamente alto sobre a fase óleo, fazendo com que a permeabilidade desta continue alta e o óleo seja produzido rapidamente e em maior quantidade (PWAGA et al., 2010).

Em reservatórios com alta permeabilidade e extensão vertical, a injeção de gás pode resultar em altos fatores de recuperação por causa da segregação gravitacional. Reservatórios contendo óleo volátil podem ter uma resposta similar: alta recuperação do petróleo. Em outras palavras, se o reservatório tem uma boa permeabilidade vertical ou tempo suficiente para a segregação gravitacional ser eficaz, então, a injeção de gás deve ser uma solução favorável e ideal (PWAGA et al., 2010).

Quando comparado com o método de injeção de água, apresenta duas desvantagens (PWAGA et al., 2010):

i) eficiência em recuperação de óleo é menor, uma vez que sua razão de mobilidade é maior;

ii) necessidade de um controle mais rigoroso sobre o processo de injeção, quando aplicado a reservatórios carbonáticos, devido a alta razão de mobilidade e grande variação de permeabilidade.

No entanto, ainda há vantagens econômicas e benefícios ao utilizá-lo. Por exemplo, quando o governo não permite queima de gás, torna-se recomendável, então, injetá-lo e armazená-lo em uma jazida para futuros mercados. Havendo a disponibilidade desse gás em algumas áreas de produção, seja do mesmo reservatório explorado ou de outras fontes, e pelo fato de o fluido não ser reativo com as rochas, pode-se injetá-lo sem grandes dificuldades (FERRER, 2007).

2.2.3 Recuperação Terciária - *Enhanced Oil Recovery* (EOR)

O óleo extraído pelos processos primário e secundário gira em torno de 20 a 50% do óleo original provado (OOIP), dependendo das propriedades do óleo e do reservatório. Na prática, observa-se que a média desse fator de recuperação varia entre 30 - 35% (BRESSAN, 2008; CURBELO, 2006; PWAGA et al., 2010). A recuperação terciária ou *Enhanced Oil Recovery* (EOR) têm como objetivo, então, atuar sobre os outros 70 - 65% do OOIP remanescentes, referentes ao óleo residual e/ou ao não varrido pelos métodos anteriores. Usualmente, a maior parte do óleo deixado costuma ser residual (em forma de gotas microscópicas) e representa de 60 a 90% de

todo o óleo remanescente depois da injeção de água, por exemplo. Os outros 40 a 10% correspondem ao óleo que não foi deslocado pelo fluido injetado (ROSA et al., 2006; PWAGA et al., 2010).

O EOR visa reduzir a saturação de óleo residual e melhorar a eficiência de molhamento em todas as direções do reservatório, mudando as propriedades dos fluidos desse reservatório para que consiga aumentar o gradiente de pressão entre os poços produtores e o reservatório e/ou diminuir a viscosidade do óleo, aumentando, assim sua mobilidade e reduzindo sua tensão interfacial com o fluido deslocante (PWAGA et al., 2010). Lembrando que sem a presença de uma interface, não há forças capilares e a gota de óleo que estava presa no poro, pode ser desalojada, então, pelas forças viscosas ou dinâmicas (ROSA et al., 2006).

Os métodos especiais de recuperação ou EOR incrementam em até 12% o fator de recuperação de óleo do processo secundário. E por serem muito custosos, deve-se determinar com cautela o tipo de EOR que deverá ser utilizado e realizar um estudo em escala de laboratório, em planta piloto e de simulações para avaliar a economicidade da implantação do método de EOR escolhido (ROSA et al., 2006).

Os métodos EOR dividem-se em (CUNHA, 2010; BAUTISTA, 2010; ROSA et al., 2006):

i) Métodos Químicos: injeção de polímeros, tensoativos e produtos alcalinos, em que o fluido injetado deve se difundir mais no meio poroso, evitando caminhos preferenciais.

ii) Métodos Térmicos: injeção de vapor, água quente, combustão *in situ*, em que o calor tem a função básica de reduzir a viscosidade do óleo.

iii) Métodos Miscíveis: envolvem injeção de hidrocarboneto miscível, CO_2 miscível e gás de combustão miscível, atuando na redução das forças capilares e interfaciais, pela ausência de interface entre o óleo e os fluidos deslocantes.

iv) Outros: São métodos que não se classificam em nenhuma outra categoria e ainda estão em intensa fase de pesquisa e não têm tido grande aplicação a nível mundial. Exemplos: MEOR (*Microbial Enhanced Oil Recovery*) e métodos eletromagnéticos.

A Figura 2.4 mostra os diversos métodos de EOR esquematizados. A literatura aborda o assunto de forma mais detalhada (CUNHA, 2010; BAUTISTA, 2010; ROSA et al., 2006; PWAGA et al., 2010; BRESSAN, 2008; FERRER, 2007; CURBELO, 2006).

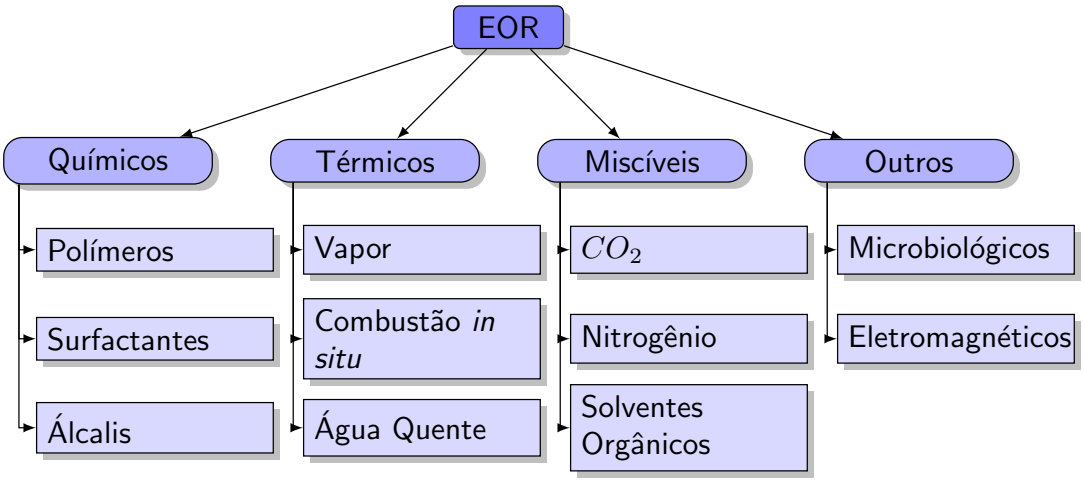

Figura 2.4: Esquema simplificado dos vários métodos de EOR. Adaptado de: (PWAGA et al., 2010)

2.2.4 Eficiência de Recuperação

Em um projeto de injeção de fluidos para a produção de hidrocarbonetos, há como se avaliar numericamente a eficiência total de recuperação do óleo através do produto das eficiências volumétrica (macroscópica) e de deslocamento (microscópica). Sendo a primeira constituída pelo produto das eficiências de varrido horizontal e vertical (CRAFT; HAWKINS, 1991).

A eficiência de varrido horizontal é definida como a razão entre a área em planta do reservatório invadida pelo fluido injetado e a área total em planta do meio poroso até um determinado instante (ROSA et al., 2006; CURBELO, 2006). Já a eficiência de varrido vertical é a razão da área da seção vertical do reservatório invadida pelo fluido injetado sobre a área vertical total desta seção. Ambas eficiências dependem do volume de fluido injetado e da razão de mobilidade entre os fluidos injetado e deslocado. Além disso, a primeira depende ainda da variação da geometria de injeção (a distribuição dos poços de injeção e produção), enquanto que a segunda depende da variação vertical da permeabilidade dos reservatórios estratificados (Figura 2.5), da razão de mobilidade e do volume injetado (ROSA et al., 2006; PAULINO, 2007). Portanto, a eficiência volumétrica, é a razão entre o volume do reservatório invadido pelo fluido injetado e o volume total do reservatório (THOMAS, 2001).

Como a eficiência volumétrica não é suficiente para se determinar a quantidade de óleo deslocado, pois ainda que o fluido penetre uma extensão muito grande do reservatório, sua capacidade de retirar o óleo do interior dos poros é muito pequena. E o parâmetro que mede isto é microscópico e, portanto, o deslocamento de óleo nos poros é a eficiência de deslocamento. Esta é definida como a fração do óleo

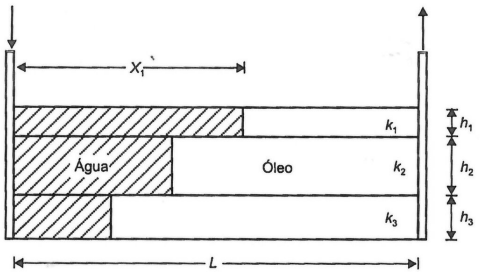

Figura 2.5: Seção vertical de um reservatório estratificado sujeito à injeção de água. Fonte: (ROSA et al., 2006)

deslocado na zona varrida, variando de zero a um (ínicio da injeção e um tempo infinito, quando todos os volumes porosos são injetados, respectivamente). Depende das tensões interfaciais entre o fluido injetado, a rocha e os fluidos do reservatório, do volume de fluido injetado, da viscosidade dos fluidos e da permeabilidade relativa (CRAFT; HAWKINS, 1991; PAULINO, 2007; CURBELO, 2006).

O ideal é que todas as eficiências sejam altas para se obtenha boas recuperações de óleo. No caso de baixa eficiência de varrido, o fluido injetado encontra caminhos preferenciais, se dirigindo rapidamente para os poços de produção, deixando, então, significativas porções do reservatório intactas. E quando se tem baixa eficiência de deslocamento, o fluido injetado não consegue deslocar o óleo, de forma adequada, para fora da região invadida, mesmo que haja alta eficiência de varrido (CURBELO, 2006; PAULINO, 2007).

2.3 Propriedades de Rochas e Fluidos

O conhecimento das propriedades das rochas e dos fluidos é essencial para se entender o comportamento dos reservatórios de petróleo, que por sua vez, é de suma importância para tomada de decisão a respeito de como serão implementados os processos exploratórios do mesmo. De forma sucinta, esta seção aborda, então, as principais propriedades de rochas-reservatórios e fluidos que por ela permeiam.

2.3.1 Porosidade

Genericamente, a rocha é composta por grãos envolvidos por um material cimentado, que estão dispostos em outro material mais fino, chamado de matriz, como mostra a Figura 2.6. A soma do volume dos materiais sólidos (grãos, cimento e matriz) e do volume dos espaços vazios (ou poros) existentes entre eles compoẽm o volume total ocupado por uma rocha reservatório (CURBELO, 2006 apud ALLEN; ROBERTS, 1993). A capacidade de armazenar fluidos nesses poros ou espaços vazios,

faz da porosidade uma das propriedades mais importantes das rochas em termos de engenharia de reservatórios (ROSA et al., 2006).

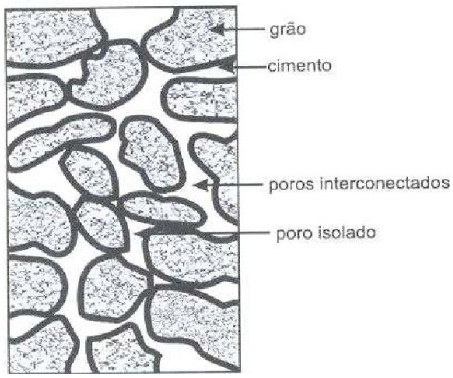

Figura 2.6: Seção transversal de uma amostra de rocha. Fonte: (ROSA et al., 2006)

Segundo Rosa et al. (2006), a porosidade absoluta pode ser definida como a razão entre o volume de vazios ou volume poroso da rocha e o volume total da mesma:

$$\phi_a = \frac{V_p}{V_p + V_s} = \frac{V_p}{V_t} \tag{2.1}$$

onde ϕ_a é a porosidade absoluta, V_p o volume poroso, V_s o volume de sólidos e V_t o volume total. Como o cálculo não leva em consideração a interconectividade dos poros, ou seja, os mesmos podem estar isolados e não conectados aos canais porosos, como apresentado pela Figura 2.7, esse não é útil para caracterização dos reservatórios. Torna-se necessário, portanto, uma equação que, dos espaços vazios, considere somente os interconectados, já que os fluidos contidos nestes é que podem se deslocar e serem extraídos da rocha (CURBELO, 2006 apud MOHAGHEGH et al., 1996). Surge, então, a porosidade efetiva:

$$\phi_e = \frac{V_{pi}}{V_t} \tag{2.2}$$

onde ϕ_e é a porosidade efetiva, V_{pi} o volume de poros interconectados e V_t o volume total.

2.3.2 Compressibilidade

A compressibilidade influencia diretamente na porosidade das rochas sedimentares, pois esta depende do grau de compactação das mesmas cuja força varia com a profundidade em que se encontram, ou seja, quanto mais profundo está enterrado o sedimento, menor é a sua porosidade e vice-versa. São três os tipos de compressibilidade existentes que ocorrem com a variação unitária da pressão (ROSA et al., 2006):

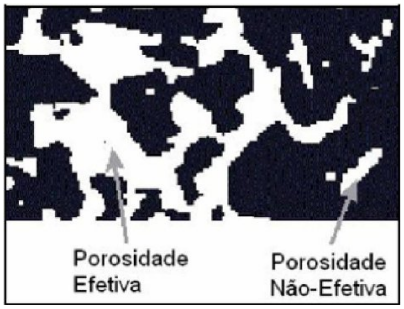

Figura 2.7: Esquema de um meio poroso com poros interconectados e isolados, mostrando as porosidades efetiva e não-efetivas. Fonte: (GASPAR, 2003)

i) Compressibilidade da rocha matriz: variação fracional em volume do material sólido da rocha;

ii) Compressibilidade total da rocha: variação fracional do volume total da rocha;

iii) Compressibilidade dos poros: variação fracional do volume poroso da rocha.

É importante salientar que com a produção de óleo/gás contidos na jazida, há o esgotamento dos mesmos nos espaços intersticiais, provocando uma variação da pressão interna da rocha, deixando-a sujeita a diferentes tensões resultantes. Essa alteração de tensões induz modificações nos grãos, nos poros e até mesmo no volume total da rocha (ROSA et al., 2006).

2.3.3 Saturação de Fluidos

Os espaços intersticiais de um reservatório estão preenchidos por líquidos (hidrocarbonetos e água) e/ou gás (gás natural). É importante, então, saber a quantidade dos diferentes fluidos contidos na jazida porque isso é que vai definir o valor econômico da mesma. O conhecimento do volume poroso é insuficiente para saber o quanto de óleo/gás está contido nas formações. Para estimar a quantidade desses fluidos, lança-se mão da saturação, que estabalece o quanto do volume poroso é ocupado por determinado fluido (ROSA et al., 2006; CURBELO, 2006):

$$S_f = \frac{V_f}{V_p} \tag{2.3}$$

onde S_f é a saturação do fluido. As saturações de óleo, água e gás formam o percentual do volume poroso (V_p) ocupado, respectivamente, por cada uma destas fases (V_o, V_w e V_g), isto é (PAULINO, 2007):

Saturação de óleo:

$$S_o = \frac{V_o}{V_p} \tag{2.4}$$

Saturação de água:

$$S_w = \frac{V_w}{V_p} \tag{2.5}$$

Saturação de gás:

$$S_g = \frac{V_g}{V_p} \tag{2.6}$$

$$S_o + S_w + S_g = 1 \tag{2.7}$$

Lembrando que a saturação de água existente no reservatório no ínicio da sua descoberta é dita saturação de água inicial ou conata (ROSA et al., 2006).

2.3.4 Permeabilidade

A permeabilidade é a propriedade que um meio poroso tem de permitir a passagem de fluidos através dele sem se deformar estruturalmente, ou seja, está relacionada com a interconectividade dos poros, por onde os fluidos escoam. Ainda que uma rocha tenha muitos poros e uma significativa quantidade de hidrocarbonetos armazenados neles, não há garantias de que os mesmos possam ser extraídos se os canais porosos estiverem isolados, estreitos, tortuosos e cheios de estrangulamentos. Por outro lado, o inverso é válido, isto é, quanto mais conectados forem os espaços intersticiais e maiores os poros, menor é a resistência ao fluxo desses fluidos e, portanto, maiores quantidades podem ser retiradas da jazida (CURBELO, 2006), (PAULINO, 2007 apud PETRUCCI, 1998).

De acordo com seus experimentos, em 1856, Darcy concluiu que a vazão (q) de um fluido incompressível escoando através de um meio poroso é proporcional à queda de pressão (P_1 - P_2) e inversamente proporcional à distância percorrida (L) e à viscosidade do fluido (μ), como mostra a Figura 2.8 (BEAR; BACHMAT, 1990). A permeabilidade, que mede a capacidade da rocha permitir o fluxo de fluidos, expressa pela Lei de Darcy, é uma constante de proporcionalidade característica do meio poroso (CURBELO, 2006).

Se apenas um fluido satura o meio poroso, esta propriedade é chamada de *permeabilidade absoluta* ou, simplesmente, *permeabilidade do meio*. Por outro lado, se dois ou mais fluidos estão presentes, torna-se necessário levar em consideração a facilidade com que cada um desses se move no meio poroso e, para isso, lança-se mão de conceitos como a *permeabilidade relativa* e *efetiva* (ROSA et al., 2006).

A permeabilidade efetiva mede, então, a facilidade com que cada fluido presente na rocha se move e depende da saturação de cada um, isto é, existe um valor de permeabilidade efetiva para cada valor de saturação de um fluido. Pode-se estender a lei de Darcy para um fluxo multifásico, em um sistema linear e horizontal em regime permanente incompressível. Por exemplo, para uma rocha em que estão presentes

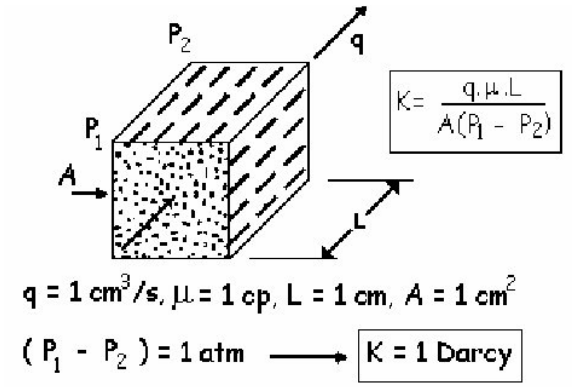

Figura 2.8: Uma rocha tem permeabilidade de 1 Darcy quando transmite um fluido de 1 cp (centipoise) de viscosidade através de uma seção de 1 cm^2 à vazão de 1 cm^3/s sob uma queda de pressão de um 1 atm. Fonte: (THOMAS, 2001)

água, gás e óleo, as permeabilidades efetivas de cada fase (k_w, k_g, k_o) podem ser escritas, respectivamente, da seguinte forma (CURBELO, 2006; ROSA et al., 2006):

$$k_w = \frac{q_w \mu_w L}{A \Delta P} \tag{2.8}$$

$$k_g = \frac{q_g \mu_g L}{A \Delta P} \tag{2.9}$$

$$k_o = \frac{q_o \mu_o L}{A \Delta P} \tag{2.10}$$

onde μ_w, μ_g, μ_o são as viscosidade da água, do gás e do óleo; q_w, q_g, q_o são as vazões de água, gás e óleo; L é o comprimento do meio poroso; A é a área da seção transversal; ΔP é a diferença de pressão. Lembrando que a permeabilidade efetiva de um fluido varia de zero (inexistência de fluxo) a k (meio poroso 100% saturado com o fluido) (ROSA et al., 2006).

No entanto, é mais comum utilizar a permeabilidade relativa nos estudos de reservatórios. Esta consiste na normalização das permeabilidades efetivas por uma permeabilidade base, geralmente, a absoluta. Para o exemplo da rocha contendo, água, gás e óleo, temos as permeabilidades relativas (k_{rw}, k_{rg}, k_{ro}):

$$k_{rw} = \frac{k_w}{k} \tag{2.11}$$

$$k_{rg} = \frac{k_g}{k} \tag{2.12}$$

$$k_{ro} = \frac{k_o}{k} \tag{2.13}$$

em que k é a permeabilidade absoluta. A permeabilidade relativa é, simplesmente, a permeabilidade efetiva tornada adimensional e varia de zero (inexistência de fluxo)

a 1 (meio poroso 100% saturado) (CURBELO, 2006).

2.3.5 Capilaridade

Observa-se o fenômeno da capilaridade no contato dos líquidos com um sólido, em um tubo capilar, por exemplo, onde por forças de adesão e coesão, estes podem subir ou descer, conforme molhem ou não a parede. E à tendência desse movimento dos líquidos, dá-se o nome de *capilaridade* ou *força capilar*, que é uma conseqüência da tensão superficial (PARANHOS et al., 2007).

A *tensão superficial* ou *interfacial* ocorre entre um fluido e um sólido e entre dois fluidos imiscíveis, respectivamente. No caso dos reservatórios de petróleo, estruturas porosas, este fenômeno acontece entre água e óleo, por exemplo e há, então uma descontinuidade na pressão através da interface que separa ambos os fluidos. Essa diferença de pressão através da interface é chamada de pressão capilar (P_c) (CUNHA, 2010):

$$P_c = P_o - P_w \tag{2.14}$$

onde P_o e P_w são as pressões das fases não-molhante (óleo) e molhante (água). A pressão capilar pode auxiliar ou dificultar o deslocamento de fluidos no meio poroso. Como o óleo é a fase não molhante e a que interessa, deve-se manter a pressão do mesmo maior que a da fase molhante ou água (IGLESIAS, 2009).

A pressão capilar depende da geometria poros do reservatório, bem como da distribuição de seus tamanhos, do ângulo de contato (θ) entre os líquidos e o sólido e do grau de saturação do meio (BEAR, 1975).

Molhabilidade

Outra característica importante que se observa no contato entre líquidos e sólidos é a molhabilidade, também conseqüência da tensão interfacial, cuja definição consiste na tendência que um fluido tem de aderir à superfície de um sólido, quando outros fluidos imiscíveis estão presentes (IGLESIAS, 2009). Segundo Agbalaka et al. (2008), para o contexto de engenharia de petróleo, especificamente, molhabilidade é "a tendência da rocha reservatório estar preferencialmente em contato com um determinado fluido em um sistema bifásico ou multifásico ". Quantitativamente, é explicada pelo balanço de forças existentes entre as duas fases imiscíveis, na interface entre os dois fluidos (água e óleo), esquematizado na Figura 2.9, onde σ_{ao} é a tensão interfacial entre a água e o óleo, σ_{ar} a tensão superficial entre o sólido (rocha) e a água e σ_{or} tensão superficial entre o sólido e o óleo (CUNHA, 2010).

De acordo com a magnitude dessas tensões, uma fase pode ser mais atraída pelo sólido que a outra. Esta é denominada fase molhante (tende a formar filme) e a

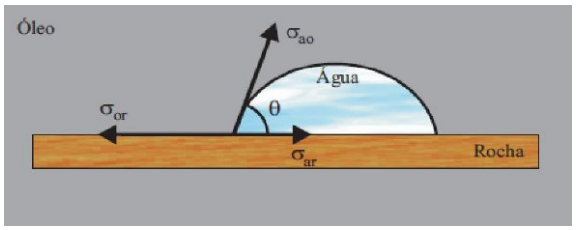

Figura 2.9: Equilíbrio de forças na interface óleo-água. Fonte: (CUNHA, 2010 apud MONTALVO, 2008)

outra como não-molhante (tende a formar uma gota) (CURBELO, 2006). A forma mais conveniente de se medir essas tendências é através do ângulo de contato (θ) (IGLESIAS, 2009). Por definição, este é medido no líquido mais denso e varia entre 0 e 180°. Se $\theta < 90°$, o líquido mais denso molha, preferencialmente, o sólido, caso contrário $\theta > 90°$, o menos denso é que molha, como mostra a Figura 2.10 (CUNHA, 2010).

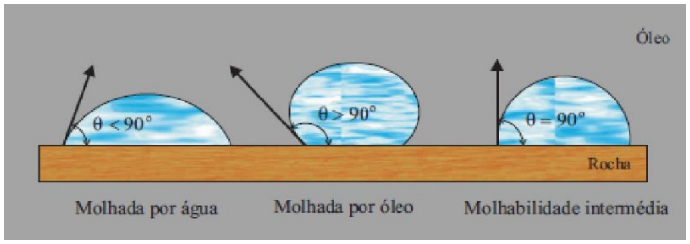

Figura 2.10: Molhabilidade em sistema óleo-água. Fonte: (CUNHA, 2010 apud MONTALVO, 2008)

Devido às forças atrativas, a fase molhante tende a ocupar os poros menores, diferentemente da não molhante, que ocupa os maiores, com canais mais abertos, como mostra a Figura 2.11 (IGLESIAS, 2009).

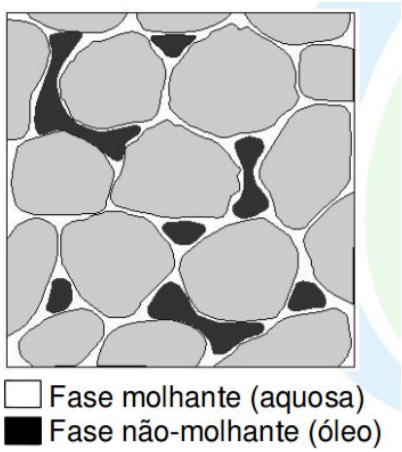

Figura 2.11: Distribuição das fases molhante e não molhante no meio poroso. Fonte: (IGLESIAS, 2009)

A molhabilidade é uma função complexa das propriedades do sólido e do fluido,

determinando a distribuição dos mesmos dentro do reservatório. Ainda é um fenômeno não completamente compreendido na indústria de óleo e gás, embora seja de extrema importância, pois determina a eficiência da produção de hidrocarbonetos (CURBELO, 2006; IGLESIAS, 2009). Uma jazida molhável a água favorece muito a produção de óleo (CURBELO, 2006 apud MAITLAND, 2000). Alterando a molhabilidade, pode-se aumentar a eficiência de recuperação de óleo.

Vale ressaltar que a molhabilidade não descreve o estado de saturação da rocha, mas sim a preferência do sólido ser molhado por certo fluido, isto é, as rochas preferencialmente molháveis ao óleo podem estar molhadas pela água e vice-versa (CUNHA, 2010).

2.3.6 Mobilidade

No estudo do deslocamento imiscível de um fluido por outro, são definidos dois parâmetros: *mobilidades dos fluidos* e *razão de mobilidade*, pois estes influenciam no desempenho de injeção de fluidos no processo exploratório de hidrocarbonetos (ROSA et al., 2006).

A mobilidade de um fluido (λ) é uma medida quantitativa de sua habilidade de escoar pelos canais. É definida como sendo a razão entre a sua permeabilidade ao meio poroso (k) e a sua viscosidade (μ) (PWAGA et al., 2010; ROSA et al., 2006), como escrito na Equação 2.15. Depende da saturação de fluidos, pois é função da permeabilidade efetiva, que por sua vez, também o é (CURBELO, 2006; ROSA et al., 2006).

$$\lambda = \frac{k}{\mu} \tag{2.15}$$

A razão de mobilidade (RM) é a relação entre as mobilidades dos fluidos deslocante e deslocado. Por exemplo, no caso da água estar deslocando o óleo, tem-se que:

$$RM = \frac{\lambda_w}{\lambda_o} = \frac{k_w/\mu_w}{k_o/\mu_o} \tag{2.16}$$

onde k_w e k_o são as permeabilidades efetivas e μ_w e μ_o as viscosidades da água e do óleo, respectivamente (ROSA et al., 2006). Como a água tem uma mobilidade maior que a do óleo, a razão de mobilidade resultante será maior que a unidade e, portanto, o fluido injetado tenderá a penetrar o banco de óleo, desenvolvendo os chamados *viscous fingering*, como mostra a Figura 2.12, e reduzindo, assim, a eficiência de recuperação do mesmo. Se, por outro lado, a razão de mobilidade for menor que a unidade, o deslocamento de óleo pelo fluido deslocante injetado assemelhar-se-á próximo de um deslocamento do tipo pistão e é dito um processo

controlado (PWAGA et al., 2010 apud DONALDSON et al., 1989), (CURBELO, 2006 apud LAKE, 1989).

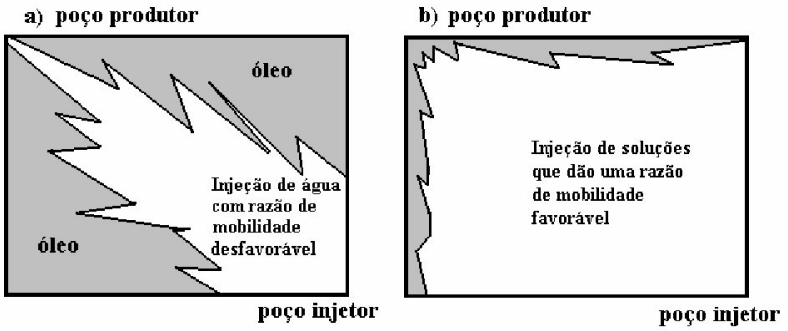

Figura 2.12: Comparação entre diferentes razões de mobilidades (R). **(a)** MR > 1, existência do fenômeno do *viscous fingering*. **(b)** MR < 1, ausência de *viscous fingering*. Fonte: (CURBELO, 2006 apud GUAN et al., 2002)

Quanto maior for a razão de mobilidade, menor será a eficiência de deslocamento de óleo. Portanto, para o aumento da recuperação do mesmo, deve-se reduzir a razão de mobilidade aumentando a viscosidade da fase deslocante ou diminuindo a do óleo. Injeção de soluções de polímeros e injeção de vapor são exemplos de medidas para tal (CURBELO, 2006 apud LAKE, 1989).

2.4 *Viscous Fingering*

Em deslocamentos de fluidos em meios porosos, ocorre uma instabilidade hidrodinâmica chamada *viscous fingering* ou digitação viscosa, como ilustrado nas Figuras 2.12a e 2.2, geralmente, associada às diferenças de viscosidade entre fases ou dentro de uma fase contendo um soluto e, à heterogeneidade do meio. Esta gera pequenos *fingers* e se o escoamento, miscível ou imiscível, é instável, as perturbações interfaciais crescem ao longo do tempo e dominam o deslocamento (MOISSIS, 1988; SARMA H., 1986). Se este for vertical, a diferença de densidade também deverá ser levada em consideração, e, portanto, o referido efeito poderá ser observado quando o líquido mais denso se deslocar abaixo de um menos denso em um meio poroso (GUSTAFSSON; VASIL'EV, 2004 apud MARIANO, 2008). Este fenômeno é muito importante e se aplica em uma grande variedade de áreas: extração de petróleo, crescimento de superfícies, agregação de partículas coloidais e vazamentos de óleo e contaminação de lençóis freáticos, por exemplo (GADELHA, 2007; KUEPER; FRIND, 1988).

O crescimento ou dissipação dos *fingers* depende de muitos fatores relacionados à estrutura do meio poroso e às propriedades dos fluidos e do escoamento, tais como: permeabilidade, porosidade, gravidade, dispersão anisotrópica e ainda, capilaridade, molhabilidade e tensão superficial nos casos de deslocamentos imiscíveis, entre ou-

tros. Muito embora, seja a razão de mobilidade o parâmetro que, essencialmente, rege essas instabilidades (MOISSIS, 1988; SESINI et al., 2010).

Além disso, os *fingers* interagem entre si através de mecanismos não lineares dentre os quais há os clássicos e os complexos. Os primeiros compreendem (SESINI et al., 2010; ZIMMERMAN; HOMSY, 1991):

i) blindagem: processo pelo qual um *finger*, por algum acaso, cresce a frente de seu vizinho, bloqueando o crescimento deste;

ii) coalescência: processo caracterizado pelo ligamento e fusão da ponta de um *finger* ao corpo de seu vizinho que o esteja blindando;

iii) pareamento: mecanismo de pareamento atua nos *fingers* microscópicos fazendo com que se fundam;

iv) dissipação das instabilidades (*finger fading*): a taxa de propagação do *finger* decresce, isto é, a concentração do mesmo é dissipada;

v) separação de pontas (*tip-splitting*): a ponta do *finger* se alarga o suficiente para permitir que haja uma divisão e posterior crescimento de duas instabilidades, a parte mais larga se espalha e sofre outra separação de pontas e o processo continua.

Os segundos são classificados, basicamente, em duas categorias: a de coalescência e a de separação de ramos ou pontas. Dentro da primeira, encontram-se (SESINI et al., 2010):

i) coalescência dupla: processo pelo qual dois *fingers* pequenos adjacentes na base de um *finger* dominante fundem-se a ele;

ii) coalescência gradual: processo pelo qual um *finger* levemente inclinado se funde gradualmente no *finger* mais próximo e continua se desenvolvendo dentro deste;

iii) coalescência esticada, entre outros.

A segunda categoria compreende (SESINI et al., 2010; AZAIEZ; MOHAMAD, 2004):

i) *Fingering* diagonal: separação de pontas é assimétrica e orientada diagonalmente;

ii) Ramificação de um lado só: no *finger* dominante, surgem ramificações apenas em um lado do mesmo;

iii) Fusão de ramos: um vizinho se funde no corpo do *finger* dominante ramificado;

iv) Separação de uma ponta só (*single-sided tip-splitting*), entre outros.

Para mais detalhes e informações, deve-se consultar a literatura (AZAIEZ; MOHAMAD, 2004; SESINI et al., 2010; ISLAM; AZAIEZ, 2005).

O estudo do *viscous fingering* pode ser dividido em duas grandes categorias: macro e microscópica. Dentro da primeira, as forças viscosas são consideradas dominantes e as equações macroscópicas do escoamento, governadas por Navier-Stokes, podem ser resolvidas por métodos como: diferenças finitas, volumes finitos, método pseudo-espectral, entre outros (MOISSIS, 1988; SESINI et al., 2010; WITT et al., 2005; MARIANO, 2008; ISLAM; AZAIEZ, 2005). Já na segunda categoria, a escala em questão é meso ou microscópica (fractal) e efeitos como os de tensão interfacial (para fluidos imiscíveis) e difusão-dispersão (para fluidos miscíveis) tornam-se significativos. Para tanto, as abordagens mais usadas são LBM (*Lattice-Boltzmann-Method*) e Percolação para os deslocamentos imiscíveis e DLA (*Diffusion-Limited-Aggregation*) paras os imiscíveis e miscíveis (SWERNATH et al., 2010; CHEN; DOOLEN, 1998; DONG et al., 2010; DONG et al., 2011; KUEPER; FRIND, 1988).

Como o presente trabalho visa a primeira categoria, somente esta terá a modelagem apronfundada, bem como o método dos volumes finitos, que é usado pela abordagem de Fluidodinâmica Computational (CFD), explicada na próxima seção. Para mais informações sobre outros métodos macro e as abordagens LBM, DLA e Percolação, deve-se consultar a literatura (SWERNATH et al., 2010; CHEN; DOOLEN, 1998; DONG et al., 2010; DONG et al., 2011; KUEPER; FRIND, 1988).

2.4.1 Modelagem de Deslocamento Imiscível em Meio Poroso

Em um escoamento em meio poroso, os poros são ocupados por uma ou mais fases. Se dois fluidos são imiscíveis, estes dificilmente se misturarão em nível molecular e terão uma interface bem definida entre as duas fases. Porém, isto não é impeditivo para que possam coexistir dentro de um mesmo poro. Dessa forma, uma fase pode fechar alguns poros, bloqueando o deslocamento da outra, como mostra Figura 2.13 (BUSTAMANTE et al., 2012; BEAR; BACHMAT, 1990; BOOTH, 2008). Além disso, os fluidos não necessariamente são completamente miscíveis ou imiscíveis. Depende da saturação da concentração dos fluidos e da temperatura e pressão a que estão submetidos (BOOTH, 2008).

Um meio poroso natural, como o de reservatórios de petróleo, tem a distribuição de poros irregulares quanto à forma e tamanho, apresentando estruturas de diversas escalas. Como mencionado na seção anterior, dois parâmetros que são importantes para caracterizar o meio poroso são a porosidade e a permeabilidade. Lembrando que

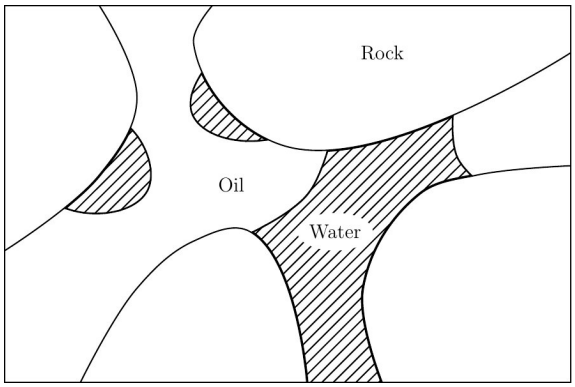

Figura 2.13: Óleo e água presentes nos mesmos poros. Água ou óleo pode fechar alguns destes poros impedindo a passagem do outro através desses. Fonte: (BOOTH, 2008)

esta é um tensor que varia com a posição no espaço (heterogeneidade) e a direção (anisotropia) e que se os eixos principais coincidem com a direção do sistema de coordenadas, o tensor de permeabilidade torna-se diagonal e, se os coeficientes da mesma forem iguais (Kx=Ky=Kz=K), o meio poroso é classificado como isotrópico (BRAILOVSKI et al., 2006).

A modelagem deste tipo de escoamento incompressível compreende as Equações de quantidade de *momentum*, conservação de massa e equação de estado. Para tal, estende-se a Lei de Darcy para cada uma das fases - água (w) e óleo (o) - negligenciando a gravidade (ABREU, 2007; BOOTH, 2008):

$$\mathbf{v_w} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu_w}.\nabla p_w \tag{2.17}$$

$$\mathbf{v_o} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu_o}.\nabla p_o \tag{2.18}$$

onde $\mathbf{v_w}$ e $\mathbf{v_o}$ são as velocidades superficiais da água e do óleo, $\mathbf{K}$ é o tensor permeabilidade do meio poroso, μ_w e μ_o as viscosidades da água e do óleo, p_w e p_o as pressões das fases água e óleo, respectivamente.

Como o deslocamento de cada fase dentro do meio poroso é afetado pela presença de outra, em escoamentos multifásicos, esse efeito pode ser contabilizado ao substiuir-se a permeabilidade absoluta do meio poroso nas Equações 2.17 e 2.18, pelas permeabilidades relativas da água (k_{rw}) e do óleo (k_{ro}) (BOOTH, 2008):

$$\mathbf{v_w} = -\frac{k_{rw}}{\mu_w}.\mathbf{K}.\nabla p_w \tag{2.19}$$

$$\mathbf{v_o} = -\frac{k_{ro}}{\mu_o}.\mathbf{K}.\nabla p_o \tag{2.20}$$

Aplica-se a conservação de massa para cada uma das fases em termos das satu-

rações de água (S_w) e óleo (S_o) (BOOTH, 2008):

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla . \mathbf{v_w} = 0 \tag{2.21}$$

$$\phi \frac{\partial S_o}{\partial t} + \nabla . \mathbf{v_o} = 0 \tag{2.22}$$

onde ϕ é a porosidade do meio. Vale ressaltar que assumiu-se como hipótese que não há transferência de massa entre as fases e que todo o meio poroso está sempre saturado, levando, então, a condição da Equação 2.23 (ABREU, 2007):

$$S_w + S_o = 1 \tag{2.23}$$

Ainda resta associar as pressões das fases para poder fechar o sistema de equações. Isto é conseguido pela pressão capilar (p_c):

$$p_c(S_w) = p_o - p_w \tag{2.24}$$

Como já também foi explicado na Seção 2.3.5, a pressão capilar é uma consequência da tensão interfacial e é uma função monótona decrescente da saturação da fase molhante (água, neste caso). Para um poro individual preenchido por água, pode-se determinar a p_c (BOOTH, 2008; ABREU, 2007):

$$p_c = \frac{2\gamma cos\theta}{r(S_w)} \tag{2.25}$$

onde γ é o coeficiente de tensão interfacial, θ é o ângulo de molhabilidade onde água, óleo e rocha se encontram e $r(S_w)$ é o raio típico para um poro em que água e óleo estão presentes (BOOTH, 2008).

Logo, o sistema que descreve o escoamento bifásico é dado pelas Equações 2.19, 2.20, 2.21, 2.22 e 2.24. As condições de contorno e inicial para uma das saturações devem ser especificadas (ABREU, 2007).

2.4.2 Modelagem de Deslocamento Miscível em Meio Poroso

No caso de deslocamento miscível, há duas possibilidades que variam de acordo com o tipo de fluido injetado: miscível-primeiro contato e miscível- multicontato ou miscibilidade dinâmica. O primeiro refere-se aos fluidos injetados que se misturam com o óleo residente, em todas as proporções, formando uma única fase. Já o segundo diz respeito aos fluidos que não se misturam com o óleo em um primeiro contato. Porém, pode haver ocorrência de transferência de massa *in-situ* entre as fases, formando uma zona de transição na qual todas as suas composições referentes a esses

fluidos são miscíveis (MOISSIS, 1988). Somente será considerada a miscibilidade de primeiro contato para a modelagem desta seção.

Segundo Booth (2008), o modelo do Peaceman foi o primeiro a ser desenvolvido para a resolução dos deslocamentos miscíveis. Assim como o modelo para deslocamentos imiscíveis, este assume escoamento incompressível, regido pela Lei de Darcy e negligencia a gravidade. A viscosidade depende da concentração de solvente (c), definida como a fração volumétrica de solvente na mistura óleo-solvente. O modelo é então descrito pelas equações:

$$\mathbf{v} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu(c)}.\nabla p \tag{2.26}$$

$$\nabla.\mathbf{v} = 0 \tag{2.27}$$

$$\phi\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla.(\mathbf{v}c) = \nabla.(\mathbf{D}\nabla c) \tag{2.28}$$

onde $\mathbf{v}$ é a velocidade superficial, $\mu(c)$ é a viscosidade da mistura, $\mathbf{K}$ é tensor permeabilidade da rocha, ϕ sua porosidade, c é a concentração do solvente e $\mathbf{D}$ é o tensor dispersão, que é uma combinação da difusão molecular (muitas vezes, insignificantes) e da dispersão hidrodinâmica. Esta descreve a mistura adicional resultante do escoamento pelos poros interconectados da rocha. E como a quantidade dispersa depende da distância percorrida por unidade de tempo, o coeficiente de dispersão deve ser proporcional à velocidade. O tensor $\mathbf{D}$ costuma ser anisotrópico, ou seja, seus coeficientes longitudinal e transversal são diferentes, sendo o primeiro três vezes maior que o segundo, de acordo com Moissis (1988).

Quanto à viscosidade do solvente e da mistura do óleo, verificou-se experimentalmente, sua dependência com a concentração do solvente. Não existe uma relação única e generalizada para tal, mas a equação derivada de Koval, definida pela Equação 2.29, é muito usada em se tratando de deslocamentos miscíveis (BOOTH, 2008).

$$\mu(c) = \left(\frac{c}{\mu(s)^{1/4}} + \frac{1-c}{\mu(o)^{1/4}}\right)^{-4} \tag{2.29}$$

onde $\mu(s)$ e $\mu(o)$ são as viscosidades do solvente puro e do óleo, respectivamente. Lembrando que condição inicial e de contorno devem ser especificadas, sendo que esta última depende da geometria do problema (MOISSIS, 1988).

2.5 Fluidodinâmica Computacional (CFD)

A modelagem do *Viscous Fingering*, em macroescala, pode ser resolvida pela abordagem da Fluidodinâmica Computacional (CFD) e nesta seção são apresentados, então, os aspectos relacionados à mesma e ao pacote CFD utilizado, o OpenFOAM.

2.5.1 Definição e Etapas de Solução

Por definição genérica, a Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) consiste na análise e na simulação numérica de processos físicos e/ou químicos que envolvem escoamento de fluidos, com ou sem troca de calor e massa. É dedicada à resolução, por via computacional, de equações fundamentais diferenciais não lineares que regem os fenômenos de transporte (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995; BUSTAMANTE et al., 2012). Devido à sua confiabilidade, rapidez e economicidade quando comparados a testes experimentais, os pacotes CFD têm se tornado cada vez mais importantes e vêm sendo bastante utilizados como ferramentas eficazes para a solução de muitos problemas em diversas áreas, desde a aerodinâmica de navios até a engenharia biomédica. Avanços no desenvolvimento da modelagem dos fenômenos físicos e nas técnicas numéricas para solucionar os mesmos, além do aumento do poderio computacional contribuem para este fato (SILVA, 2008; MELO, 2013).

Um estudo em CFD começa com a análise completa do problema: identificação das variáveis relevantes no processo, dos limites físicos onde se está avaliando o mesmo, das suas condições iniciais e de contorno, das propriedades físicas dos fluidos e dos parâmetros do escoamento. Para resolução de um caso é preciso seguir uma sequência lógica de passos envolvendo os itens supracitados, como ilustra a Figura 2.14. Criação da geometria/malha, definição da física do modelo estão dentro de um grupo chamado de pré-processamento, resolução do problema de CFD e visualização dos resultados dentro dos grupos *solver* e pós-processamento, respectivamente.

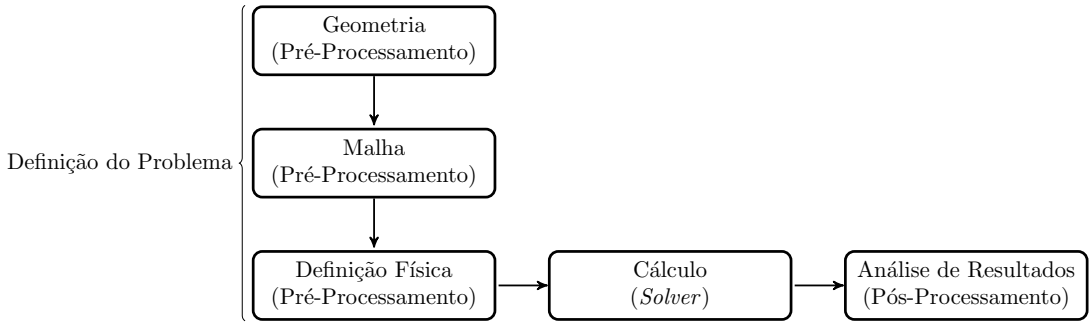

Figura 2.14: Esquema das etapas de solução de um problema por abordagem CFD.

Uma vez que a geometria do problema foi definida, segue-se para a etapa de discretização do espaço físico, ou seja, a subdivisão do mesmo em um número finito de pontos, gerando as chamadas malhas computacionais, cujas formas podem ser quadrilaterais, triangulares, hexaédricas, tetraédricas ou uma combinação destes elementos. É importante ressaltar que os pontos discretizados (células ou volumes de

controle) devem ser adequadamente distribuídos no domínio para permitir a obtenção de uma solução representativa do escoamento, pois a malha influi diretamente na acurácia da solução. Malhas mais refinadas garantem uma solução mais acurada, porém a um custo computacional maior. Pode-se reduzir o mesmo através do uso de malhas não-uniformes, refinadas na região de interesse e esparsas na região periférica, porém há de se levar em consideração que o erro da região menos refinada é propagado, acarretando em uma possível perda de acurácia da solução. De forma similar, as malhas adaptavivas são aplicadas para problemas de contorno móvel, transientes (BUSTAMANTE et al., 2012; MELO, 2013). Vale ressaltar que, quando o problema é transiente, tem-se ainda a discretização temporal, que subdivide seu domínio em um número finito de intervalos no tempo. A Figura 2.15 mostra os dois tipos de discretização (BUSTAMANTE et al., 2012; SILVA, 2008).

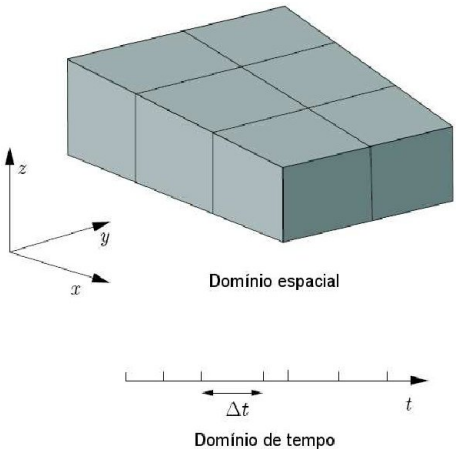

Figura 2.15: Discretização nos domínios de espaço e tempo. Fonte: (RUSCHE, 2002)

Como a modelagem matemática de um problema de fenômeno de transporte é expressa por meio dos balanços de quantidade de movimento e de energia, lei de conservação de massa total, equações constitutivas como lei de Newton de viscosidade (ou lei de Forier, lei de Fick) para um domínio contínuo no espaço, lança-se mão de sua aproximação por elementos discretos para que se obtenha uma solução numérica para tal, através de métodos como: Método das Diferenças Finitas (MDF), Método dos Elementos Finitos (MEF) e Método dos Volumes Finitos (MVF), sendo este o mais utilizado na engenharia química em termos de CFD. Estas equações discretizadas que são aplicadas à malha computacional (BUSTAMANTE et al., 2012; SIQUEIRA JÚNIOR, 2012; MELO, 2013).

Ao serem introduzidas, então, as condições iniciais e de contorno do problema, bem como outros parâmetros relevantes, o caso está pronto para ser simulado e resolvido pelo *solver*. Pelo MVF as equações diferenciais parciais são integradas em cada volume de controle e, utilizando o Teorema de Gauss, são convertidas em

equações algébricas através de um processo de discretização. O sistema algébrico de equações gerado é resolvido, assim, no domínio discreto através de um método apropriado, como Gauss-Seidel, GMRES, Gradiente Conjugado, entre outros (POZRIKIDIS, 2009). A solução obtida é, então, analisada e interpretada através de um pós-processador, que é um componente usado para visualizar e apresentar os resultados, como por exemplo, geometria e volumes de controle, gráficos vetoriais, variação de variáveis escalares, rastreamento de partículas, entre outras ferramentas (BUSTAMANTE et al., 2012; VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

Em se tratando de simulações numéricas, a técnica de CFD não é infalível: erros podem ocorrer na simulação desviando o resultado numérico do resultado exato, fazendo com que a solução numérica tenha pouca ou nenhuma representatividade quando comparada com a realidade física. Esses desvios podem estar associados a (NASCIMENTO, 2008):

i) Erros de arredondamento (devido ao arredondamento de dízimas periódicas ou truncamento de números em operações matemáticas);

ii) Erros de discretização (relacionado à malha computacional utilizada e/ou aos métodos numéricos de discretização das equações);

iii) Erros de modelagem (provenientes de simplificações do modelo, condições de contorno aproximadas ou fenômeno físico representado por modelo não adequado);

iv) Erros de convergência numérica.

Ainda assim, esta técnica possui muitas vantagens como a possibilidade de modificação dos parâmetros dos modelos utilizados para melhor ajuste das condições de contorno e geometria, a substituição da parte experimental quando esta é impossível ou muito difícil por ser custosa e/ou por tratar de condições perigosas ou fora dos limites normais de operação, além de, muitas vezes, gerar resultados mais detalhados, mais rápidos e menos custosos do que os obtidos em bancada (BUSTAMANTE et al., 2012; MELO, 2013).

São vários os pacotes de CFD existentes, dentre os quais estão os *softwares* de licença privada como CFX (ANSYS, 2009a), Fluent (ANSYS, 2009b) e Phoenics (CHAM, 2011) e os livres, como OpenFOAM (OPENFOAM, 2013b). Os primeiros, por receberem mais investimentos, códigos bem desenvolvidos e completos, além da ampla documentação oferecida acerca dos mesmos, são os mais utilizados. Porém o usuário lida com uma caixa preta, pois não sabe como foi feita a implementação dos modelos físicos nestes programas. Já os *softwares* livres são distribuídos de forma gratuita e permitem acesso ao código fonte, fazendo com que o usuário possa desenvolver seu próprio *solver*, estender e complementar os *solvers* já existentes conforme

suas necessidades. Além disso, sua outra vantagem é a resolução de casos com física mais complexas, como o *viscous fingering*, que ainda não estão implementadas nos pacotes comerciais de licença privada (MELO, 2013; SILVA, 2008).

2.5.2 OpenFOAM

O OpenFOAM (*Open Source Field Operation and Manipulation*) é um *software* de CFD de domínio público (gratuito), de código aberto escrito na linguagem de programação C++ e aplicado na manipulação e solução de campos tensoriais. Está dividido e organizado em três módulos: *solvers*, utilitários e bibliotecas, como esquematizado na Figura 2.16. Os primeiros são os códigos projetados para resolver os problemas de fenômenos de transporte e os segundos compreendem as ferramentas de pré e pós processamento. Já as bibliotecas são um suporte para os *solvers* e os utilitários, fornecendo modelos físicos, por exemplo (OPENFOAM, 2013b; MELO, 2013).

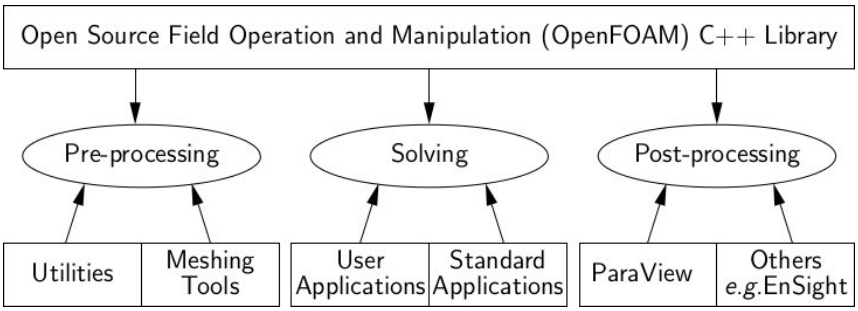

Figura 2.16: Visão geral da estrutura do OpenFOAM. Fonte: (OPENFOAM, 2013b)

Sua grande vantagem reside no fato de ter o código-fonte aberto permitindo, assim, ao usuário acessar, alterar e estender os *solvers* e/ou criar novos, aumentando a gama de aplicações, desde que haja, é claro, o conhecimento prévio dos métodos, da física e das técnicas de programação envolvidos por parte deste (SILVA, 2008; OPENFOAM, 2013b). Vale ressaltar que a implementação de códigos CFD no OpenFOAM utiliza a linguagem de programação C++ (OPENFOAM, 2013b; OPENFOAM, 2013a), que é orientada a objetos e, portanto, possui propriedades como abstração e encapsulamento de dados, herança e polimorfismo (MELO, 2013), sendo que a herança e os *templates* reduzem a duplicação de código e criam hierarquias de classe que impõem uma estrutura ao código (SILVA, 2008).

Visando facilitar ainda mais a criação e/ou modificação dos *solvers*, o OpenFOAM foi escrito de forma a aproximar a linguagem da programação computacional à linguagem da modelagem matemática. Assim, a sintaxe das equações diferenciais representadas no código se assemelha à descrição matemática utilizada na modelagem do problema físico, sendo possível, então, fazer uma correspondência simples

entre a implementação e a equação original (OPENFOAM, 2013b). Como exemplo, considere a Equação 2.30:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla.(\Phi \mathbf{u}) - \nabla^2(\mu \mathbf{u}) = -\nabla P \tag{2.30}$$

que é representada no Código 2.1 em C++:

Código 2.1: Trecho de código mostrando a implementação da Equação 2.30

```
solve
(
      fvm::ddt(rho,U)
    + fvm::div(phi, U)
    - fvm::laplacian(mu, U)
      ==
    - fvc::grad(p)
);
```

em que os *templates* **fvm** e **fvc** referem-se a operações de discretização implícita e explícita usando volumes finitos, respectivamente. O sistema linear resultante é resolvido com a função de classe **solve**. Vale ressaltar que a classe *finiteVolumeCalculus* (FVC), cujo *template* é o fvc, armazena os termos da equação diferencial em um campo geométrico e não em uma matriz, sendo útil, portanto no tratamento de termos fontes de outros que podem afetar a diagonalidade da matriz a ser resolvida pelo MVF (MELO, 2013; OPENFOAM, 2013b; SILVA, 2008).

Em relação à estrutura dos casos a serem simulados no OpenFOAM, há uma configuração apropriada dos três subdiretórios (tempo, *system* e *constant*) com os arquivos de simulação dentro deles, como mostra a Figura 2.17. Nesses diretórios, se encontram todos os arquivos de texto simples que armazenam as informações necessárias para que o *solver* resolva o caso, que são: descrição da geometria, detalhes da malha, condições de contorno, parâmetros para os métodos numéricos e as propriedades físicas do problema. Para configurar o caso, é necessário editar esses arquivos de texto.

i) *System*: contém os arquivos associados ao procedimento de solução do caso, como os relacionados ao controle de tempo, leitura e escrita dos dados de solução, os métodos de discretização de MVF usados e a especificação dos métodos de solução de sistemas lineares, bem como a tolerância do erro para as variáveis;

ii) *Constant*: contém os arquivos de propriedades físicas pertinentes ao caso, e a descrição completa de geometria e malha;

iii) Diretório de tempo: contém os arquivos individuais de dados para os campos das variáveis tratadas no caso (campo de velocidade, pressão, etc.). Refere-se ao instante simulado no qual os dados são escritos.

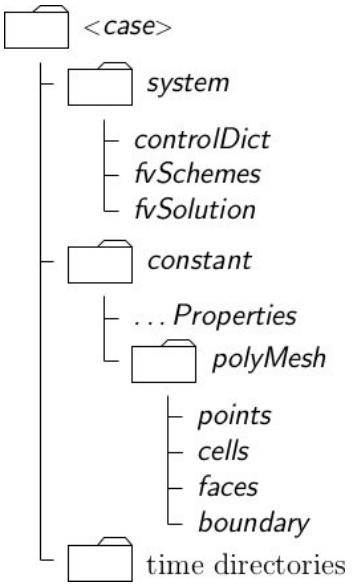

Figura 2.17: Estrutura de diretórios de um caso. Fonte: (OPENFOAM, 2013b)

Para informações mais detalhadas acerca do pacote OpenFOAM e de sua correta utilização, deve-se consultar a documentação básica do mesmo em OpenFOAM (2013b), OpenFOAM (2013a).

Capítulo 3

Estado da Arte

Este capítulo apresenta os diversos trabalhos, tanto os experimentais quanto os numéricos, realizados desde a primeira observação do *Viscous Fingering*, tendo um enfoque maior nos numéricos, uma vez que o objetivo do presente estudo é na área de simulação numérica deste fenômeno.

3.1 Trabalhos Experimentais

Em experimentos envolvendo regeneração de colunas usadas em processos de refino de açúcar, Hill (1952) observou o surgimento de instabilidades interfaciais entre os fluidos utilizados, onde o fluido deslocante (menos viscoso) penetrava, na forma de *fingers*, o fluido deslocado (mais viscoso) no meio poroso. Embora tenha sido o primeiro estudo científico e o pioneiro a reportar tal fenômeno, somente no final da década de 1950, com a publicação de dois trabalhos - Saffman e Taylor (1958) e Chuoke et al. (1959), que se tornariam clássicos anos mais tarde - é que o *Viscous Fingering* ganhou notoriedade e também passou a ser conhecido como instabilidade de Saffman-Taylor.

Devido à opacidade dos meios porosos e, portanto, sua dificuldade em se observar o comportamento dos escoamentos, como a formação e crescimento dos *fingers*, que neles ocorrem, Saffman e Taylor (1958) utilizaram um análogo conveniente para tais estudos: a célula de Hele-Shaw (retangular ou radial). Criada no final do século XX pelo engenheiro naval inglês Henry S. Hele-Shaw, a célula consiste em duas placas de vidro paralelas separadas por um pequeno espaço, como mostra a Figura 3.1 **(a)**. Na Figura 3.1 **(b)**, observa-se o fluido menos viscoso deslocando o mais viscoso e formando, assim, a digitação viscosa (GADELHA, 2007).

Por ser um aparato relativamente simples e de significativo potencial de aplicação, além de ter a mesma equação de um escoamento em meio poroso (Lei de Darcy) para determinar a relação entre velocidade e gradiente de pressão, a célula de Hele-Shaw tornou-se importante como padrão para experimentos e análises numéricas de instabilidades como as do *Viscous Fingering* (LINDNER et al., 1999).

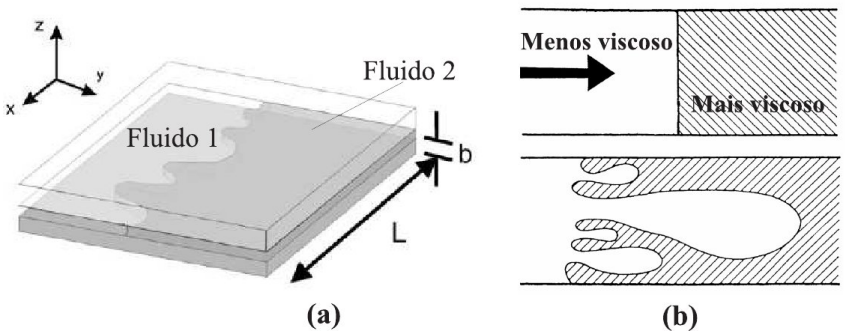

Figura 3.1: **(a)** Diagrama esquemático da célula de Hele-Shaw retilínea. **(b)** A instabilidade de Saffman-Taylor. Fonte: (GADELHA, 2007)

Em seu trabalho, Saffman e Taylor (1958) realizaram experimentos em uma célula de Hele- Shaw retilínea utilizando dois fluidos de viscosidades diferentes. Quando a célula é posta na posição vertical, há uma velocidade crítica para a interface, acima da qual a condição do escoamento é instável. Ao contrário, quando está na posição horizontal, não há ação da gravidade e a interface é sempre instável se o fluido menos viscoso desloca o mais viscoso. Além disso, descobriu-se que havia competição entre os *fingers* e quando esta ocorria em uma célula estreita, semelhante a um canal, um deles se tornava dominante e sua largura era a metade da largura da célula, como mostra a Figura 3.2.

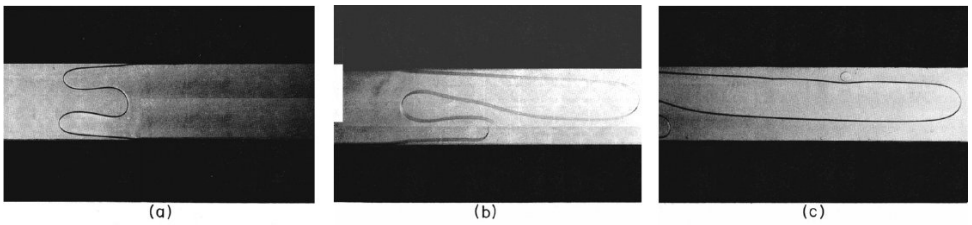

Figura 3.2: A competição entre os *fingers* ao longo do tempo em um canal estreito **(a)**, **(b)** e **(c)**. Fonte: (GADELHA, 2007)

Geralmente, a célula de Hele-Shaw retangular é usada com larguras maiores do que as utilizadas por Saffman e Taylor (1958) e com o fluido menos viscoso sendo injetado nela contra o mais viscoso (residente). A estabilidade linear consegue prever adequadamente o início da instabilidade da interface (CHUOKE et al., 1959; ZIMMERMAN; HOMSY, 1991). Para fluidos imiscíveis, foi observado que a tensão superficial entre estes era uma força significativa e responsável por tornar os *fingers* cada vez mais acentuados e, que efeitos de viscosidade, forças da gravidade, capilares e interfaciais ainda são pouco compreendidos (BENTSEN, 1985), (BENTSEN, 1987 apud MARIANO, 2008).

Desde então, o fenômeno vêm sendo estudado e reportado extensivamente na literatura, principalmente, pelo interesse nas áreas de exploração de petróleo e ambi-

ental, em especial quando ocorrem vazamentos (HOMSY, 1987; KUEPER; FRIND, 1988; CHRISTIE et al., 1991; ZHANG et al., 1996; LINDNER et al., 1999; BOTELHO, 2004; WITT et al., 2005; CURBELO, 2006; AGBALAKA et al., 2008; SESINI et al., 2010; RUIZ, 2012; MOORTGAT; FIROOZABADI, 2013). Com análise de diversos fluidos (miscíveis, imiscíveis, Newtonianos ou não-newtonianos) em geometrias como a célula de Hele-Shaw radial ou retangular, *Five-Spot*, entre outros, pesquisadores observaram que a interface instável é capaz de gerar distintas formas (GADELHA, 2007), como mostrado pela Figura 3.3. Na Figura 3.3 (**a**), observa-se o padrão de formação do *Fingering* para o um fluido de menor viscosidade deslocando outro de maior viscosidade e miscível a esse. O fluido é injetado no canto diagonal da geometria, um quarto de *Five-Spot* e a mistura sai pelo canto superior desta. Na Figura 3.3 (**b**), o *Fingering* é gerado por duas forças importantes: a gravitacional e a viscosa, visto que a célula de Hele-Shaw, geometria utilizada, foi colocada na posição vertical, então, o fluido menos denso e menos viscoso penetra no fluido mais denso, mais viscoso, que, no caso, é imiscível. Finalmente, a Figura 3.3 (**c**), ilustra o caso *Fingering* proveniente da interação de um fluido Newtoniano injetado na parte superior de uma célula de Hele-Shaw radial que contém um fluido não-Newtoniano e miscível.

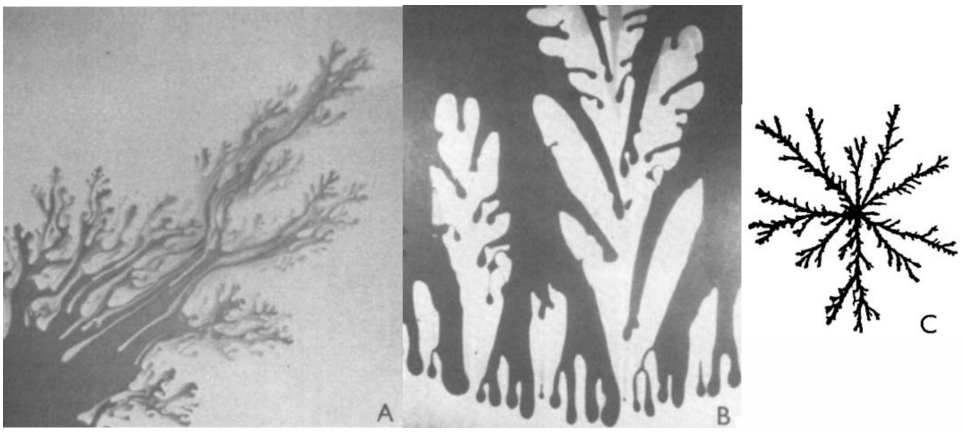

Figura 3.3: Diferentes formatos do *Viscous Fingering*: **(a)** escoamento miscível em geometria um quarto de *Five-Spot*, **(b)** escoamento imiscível em célula de Hele-Shaw retilínea com efeito gravitacional e **(c)** escoamento miscível de fluido não-Newtoniano em célula de Hele-Shaw radial. Fonte: (HOMSY, 1987)

Vale ressaltar também que há muitas e variadas abordagens numéricas para tratar o referido fenômeno em escalas micro-meso e macroscópica, como, por exemplo, LBM (*Lattice-Boltzmann-Method*), Percolação, DLA (*Diffusion-Limited-Aggregation*) para as primeiras e métodos de diferenças finitas, volumes finitos e pseudo-espectral para a última (SWERNATH et al., 2010; MOISSIS, 1988; SESINI et al., 2010; CHEN; DOOLEN, 1998; DONG et al., 2010; KUEPER; FRIND, 1988).

3.2 Trabalhos Numéricos

No que tange os trabalhos numéricos de simulação sobre o *Viscous Fingering*, estes começaram a surgir com o avanço da tecnologia dos computadores, que se tornaram mais rápidos e potentes ao longo dos anos. Tan e Homsy (1988) simularam escoamento miscível bidimensional usando método espectral e detalharam mecanismos de interação entre *fingers* como: blindagem, espalhamento (*spreading*), pareamento e separação de pontas (*tip-splitting*). Mas os resultados foram limitados pela dispersão isotrópica do meio, que geralmente ocorre em baixas taxas de deslocamento.

Zimmerman e Homsy (1991), Zimmerman e Homsy (1992) estenderam as simulações anteriores, incluindo efeito de anisotropia e velocidade dependente da dispersão e ainda a diferença de viscosidade para análise da evolução não-linear dos *fingers*. Constataram que os campos de pressão governam a interação entre os *fingers* e que esta não depende do campo de concentração. Além disso, concluíram também que as simulações bidimensionais seriam suficientes para a captura das características essenciais do *finger*. Porém, estas não seriam capazes de identificar o "*inner splitting*", novo fenômeno reportado por Oliveira e Meiburg (2011) em suas simulações DNS (*Direct Numerical Simulation*) tridimensionais da célula de Hele-Shaw.

Existem outros trabalhos numéricos nessa linha de pesquisa que não avaliam apenas o padrão de formação das instabilidades Saffman-Taylor diretamente, mas também, a recuperação de fluido e curvas de *breakthrough* (o instante em que o primeiro fluido injetado é produzido). Christie et al. (1991), por exemplo, utilizaram o método das diferenças finitas para simulações bi e tridimensionais em meios homogêneos com significativas forças viscosa e gravitacional para quantificar os efeitos do *Viscous Fingering*, do aumento da recuperação de óleo pelo método de injeção alternada de água e gás miscível (WAG - *Water-Alternating-Gas*) e recalibrar alguns parâmetros dos modelos empíricos que o descrevem. Fizeram comparações entre as curvas de recuperação das simulações bi e tridimensionais, identificando que para altas taxas de injeção os resultados destas são, praticamente, idênticos. Porém, quando a diferença de densidade aumenta, estes resultados tornam-se diferentes, sendo que no caso tridimensional a recuperação é mais baixa e o *breakthrough* mais rápido.

Zhang et al. (1996) propuseram um novo modelo númerico de volumes finitos que usa terceira ordem de acurácia numérica para o termo convectivo, englobando o tensor difusão/dispersão anisotrópico dependente de velocidade e segunda ordem para o temporal para simulações DNS de um escoamento miscível de primeiro contato em uma geometria do tipo um quarto de *five-spot*. Pelo fato de o escoamento nesta geometria ser dominante na diagonal e não seguir a mesma orientação do *grid* da malha,

é considerado difícil de resolver. Porém, relataram que o método desenvolvido foi capaz de prever, adequadamente, o padrão de formação de *Viscous Fingering* para a geometria em questão, quando comparado aos resultados experimentais.

Chen e Meiburg (1998a), Chen e Meiburg (1998b) também analisaram computacionalmente o *Viscous Fingering* em um quarto da geometria *five-spot*. No primeiro trabalho (CHEN; MEIBURG, 1998a), o caso de escoamento miscível homogêneo foi simulado usando a Lei de Darcy através da formulação de vorticidade e função fluxo considerando um termo difusivo molecular escalar e não um tensor dispersivo dependente de velocidade. Entre os resultados, concluíram que para uma melhorar a recuperação do *breakthough*, é aconselhável ter uma taxa de injeção de fluido dependente do tempo, sendo menor nos estágios iniciais do processo e aumentando a mesma nos estágios posteriores. Já o segundo artigo (CHEN; MEIBURG, 1998b) levou em consideração a heterogeneidade e seus efeitos e, verificou-se que, mesmo pequenas perturbações causadas por esta afetam bastante o processo e podem causar canalização, ilustrada na Figura 2.3, dependendo do seu grau. Notou-se que nesse caso heterogêneo, os *fingers* crescem mais perto dos contornos da geometria e não só na diagonal principal, onde o escoamento é, usualmente, dominante. Isso quer dizer que a heterogeneidade "espalha" os *fingers* de maneira estatiscamente mais uniforme dentro do domínio. Além disso, o *breakthough* pode ser alcançado mais ou menos rapidamente que o do caso homogêneo.

Coutinho e Alves (1999) apresentaram simulações numéricas da evolução não-linear do *Viscous Fingering* em meio poroso usando método de elementos finitos e aproximação das equações no espaço por elementos de mesma ordem e no tempo por um bloco iterativo de algoritmo preditor-multicorretor. Observaram os mecanismos entre os *fingers* que são reportados na literatura quando existe anisotropia e também o chamado *fingering* reverso quando a lei de viscosidade é não monotônica. Sesini et al. (2010) estenderam a análise anterior para testar a formulação numérica em escoamentos miscíveis de alta razão de mobilidade com malhas não estruturadas em duas geometrias diferentes: a célula de Hele-Shaw retilínea e radial, considerando apenas dispersão anisotrópica e viscosidade monotônica. Observaram complexos mecanismos de *fingering*, como coalescência dupla e separação de uma ponta só (*single-sided tip-splipitting*), que foram observados previamente em estudos de deslocamentos miscíveis com fluidos não-Newtonianos de baixa razão de mobilidade (AZAIEZ; MOHAMAD, 2004).

Ghesmat e Azaiez (2008) examinaram o efeito da anisotropia do tensor-dispersão dependente da velocidade em meio poroso homogêneo através de uma combinação dos métodos de diferenças finitas e pseudo-espectral. Concluem que esta afeta, sim, as estruturas e larguras dos *fingers* mesmo em um escoamento dominado pela convecção, ao contrário do que se pensava (ZIMMERMAN; HOMSY, 1992) que para

um fraco escoamento dispersivo a dependência da dispersão na velocidade não era importante. Além disso, também observaram que uma forte dispersão transversal resulta em *fingers* menos complexos e mais largos.

O trabalho de Gadelha (2007), por sua vez, estudou a competitividade entre os *fingers* em uma célula de Hele-Shaw radial e girante, onde levou em considerção, as forças de Coriolis e centrífuga. Constatou que os *fingers* dominantes ("*fastest growing mode*"), crescem mais rápido do que os outros suprimindo os menores e vizinhos, causando uma espécie de competição.

No entanto, poucos são os trabalhos nessa área utilizando CFD, como o do Mariano (2008) e o de Araujo e Neto (2009). O primeiro fez simulações do escoamento bifásico água-óleo em célula de Hele-Shaw e comparando com os experimentos que conduziu na mesma. Conseguiu relacionar propriedades dos fluidos com condições operacionais e fenômenos físicos que influenciam o *Viscous Fingering*. Comprovou, por exemplo, que o aumento das forças capilares levam a um aumento da instabilidade na interface e, consequentemente, um aumento no número de *fingers* desenvolvidos no escoamento. No entanto, a gravidade e a vazão de injeção mostraram uma importância menor comparados às forças capilares. Araujo e Neto (2009) estudaram o processo de recuperação de óleo pesado e ultraviscoso com esquema de injeção de água cinco pontos ou *five spots* e analisaram a influência da permeabilidade absoluta do reservatório sobre o avanço da frente de água.

Percebe-se então, que ainda há muito desenvolvimento a realizar no estudo e aplicação do *Viscous Fingering*, principalmente em termos computacionais e na área de CFD, que é uma ferramenta muito importante na análise detalhada de problemas de escoamento. Além disso, o conhecimento da modelagem do fenômeno em questão é de grande importância visto que pode-se relacionar quais os parâmetros que interferem no processo e controlá-los e até otimizá-los, sendo útil para a tomada de decisão da tecnologia a ser implementada tanto em projetos de exploração de Óleo e Gás, quanto em vazamentos, entre outras mais aplicações.

Capítulo 4

Metodologia

Neste capítulo são apresentados o problema físico utilizado como caso teste durante o estudo do *Viscous Fingering* e sua geometria, a modelagem completa e as condições iniciais e de contorno adotadas, os algoritmos desenvolvidos e implementados no OpenFOAM. Por fim, são apresentados os métodos numéricos para discretização das equações e o procedimento para avaliação da convergência de malha.

4.1 Problema Físico e Modelagem Matemática

O problema físico constitui-se do escoamento monofásico incompressível de uma mistura miscível de fluidos newtonianos em meio poroso homogêneo e isotrópico. Pelo fato de a célula de Hele-Shaw ser muito utilizada na literatura como geometria para estudo do *Viscous Fingering* (vide Capítulo 3), optou-se por esta. No caso deste trabalho, a mesma é do tipo retilínea, horizontal e bidimensional de 500 mm de comprimento (L) por 125 mm de altura (H), como esquematizada na Figura 4.1 (SESINI et al., 2010).

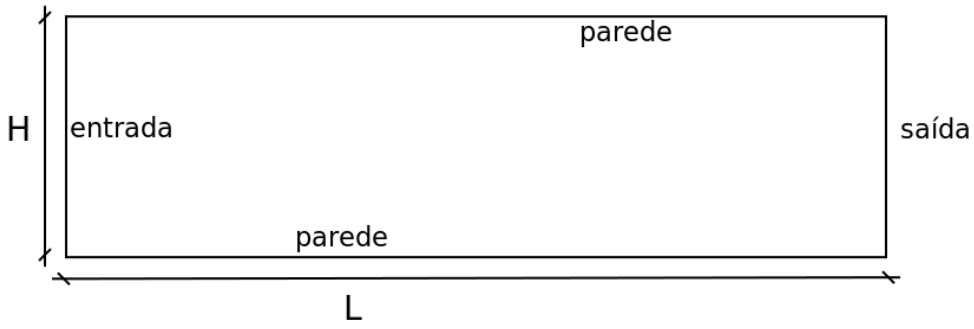

Figura 4.1: Geometria da célula de Hele-Shaw retangular utilizada.

A modelagem adotada é baseada no modelo de Peaceman (apresentado na Seção 2.4.2) e no trabalho de Sesini et al. (2010). Porém, algumas modificações foram feitas:

i) a razão entre o tensor de permeabilidade, $\mathbf{K}$, e a viscosidade, $\mu(c)$, foi definida

como:

$$\mathbf{A_c} = \frac{\mathbf{K}}{\mu(c)} \tag{4.1}$$

em que $\mu(c)$ é a viscosidade da mistura e $\mathbf{K}$ é tensor isotrópico de permeabilidade.

ii) a Equação 2.28 foi dividida pela porosidade (ϕ) e, consequentemente, a velocidade de Darcy (Equação 2.26), tornou-se instersticial. Assim, a mesma pode ser escrita como colocado na Equação 4.2:

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbf{A_c}}{\phi}.\nabla p \tag{4.2}$$

onde $\mathbf{u}$ é a velocidade intersticial e ϕ a porosidade. Considerando que os fluidos em questão são incompressíveis, a equação da continuidade toma a seguinte forma:

$$\nabla.\mathbf{u} = 0 \tag{4.3}$$

Para a equação de conservação de espécies, tem-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla.(\mathbf{u}c) = \nabla.(\mathbf{D}\nabla c) \tag{4.4}$$

em que c é a concentração de solvente, definida como a fração volumétrica de solvente na mistura óleo-solvente e $\mathbf{D}$ é o tensor difusão-dispersão, que é anisotrópico. Por fim, a relação entre a viscosidade e a concentração de solvente é assumida ser da forma exponencial (SESINI et al., 2010):

$$\mu(c) = \exp(-Rc) * \mu(dim) \tag{4.5}$$

$$MR = \exp R \tag{4.6}$$

onde R é um parâmetro relacionado à razão de mobilidade, MR, cuja relação entre estes está definido na Equação 4.6. Vale ressaltar que o sistema de equações está em sua forma dimensional com unidades no S.I., conforme mostra a Tabela 4.1 e que foi inserido o termo $\mu(dim)$, que é uma viscosidade de referência de valor unitário, a fim de compatibilizar as unidades no equacionamento. Nesta mesma tabela, foram mostradas as unidades dos elementos que compõem os tensores $\mathbf{A_c}$, $\mathbf{K}$, $\mathbf{D}$ e o vetor velocidade $\mathbf{u}$, indicados por A_{cij}, K_{ij}, D_{ij} e u_i, respectivamente.

De acordo com a esquematização da Figura 4.1, as condições de contorno utilizadas (SESINI et al., 2010) foram compiladas na Tabela 4.2, sendo $\mathbf{n}$ a normal unitária. Como a pressão teve valores especificados nas entrada e saída da geometria a fim de se obter uma queda de pressão e com isso, induzir ao escoamento, a velocidade teve como especificações nas entrada e saída, gradiente nulo, pois será calculada a partir do valor da diferença de pressão. Além disso, não há fluxo que atravessa a parede.

Tabela 4.1: Tabela com as unidades das variáveis do sistema de equações utilizado.

Variáveis	Unidades
p	Pa
K_{ij}	m^2
$\mu(c)$	$Pa.s$
A_{cij}	$\frac{m^2}{Pa.s}$
ϕ	adimensional
u_i	$\frac{m}{s}$
c	adimensional
D_{ij}	$\frac{m^2}{s}$

Para a concentração, foi especificado um valor apenas na entrada, pois ainda não há fluido no domínio e, portanto, gradiente nulo para os outros contornos. Vale ressaltar ainda que o utilitário do OpenFOAM, `blockMesh`, responsável pela criação de geometria e malha, só gera geometrias tridimensionais. Como, no caso deste trabalho, a mesma é bidimensional, teve-se de configurar o contorno das paredes de frente e de fundo como como *empty* - o plano desse contorno é normal a dimensão tridimensional para qual nenhuma solução é requerida (OPENFOAM, 2013b).

A condição inicial da concentração é constante e conhecida, como descrito pela Equação 4.7. Os valores das propriedades do meio poroso, análogo da célula de Hele-Shaw estão organizados na Tabela 4.3, sendo estes compatíveis com os encontrados na literatura para reservatório de petróleo (PGT, 2012; ROSA et al., 2006), enquanto que para outras variáveis, como razão de mobilidade, pressão e até mesmo os valores do coeficiente de difusão são reportados no Capítulo 5 com mais detalhes, uma vez que seus valores mudam de acordo com os casos estudados.

$$c(x, t = 0) = c_o(x = 0) = 1 \tag{4.7}$$

Tabela 4.2: Tabela com as condições de contorno do problema.

	$\mathbf{u}$	p	c
Entrada	gradiente nulo	valor especificado	valor especificado
Saída	gradiente nulo	valor especificado	gradiente nulo
Paredes	$\mathbf{u}.\mathbf{n} = 0$	gradiente nulo	gradiente nulo

Tabela 4.3: Tabela com valores dos parâmetros do meio poroso análogo (da célula de Hele-Shaw).

Parâmetros	Valores
ϕ	0.20
$K_x = K_y = K_z = K$	$4.9.10^{-12}\ m^2$

4.2 Implementação CFD no OpenFOAM

Esta seção apresenta, em detalhes, a implementação da modelagem matemática usada para estudo do *Viscous Fingering* no OpenFOAM. O desenvolvimento foi realizado nas versões 1.6-ext e 2.2.x do *software*.

A criação de um código CFD para resolução de instabilidades de *Viscous Fingering* se deu a partir de um *solver* já existente no OpenFOAM chamado `pisoFoam`, específico para obter a solução do escoamento transiente de um fluido incompressível (OPENFOAM, 2013b). As modificações, como a criação de novos campos e novas variáveis, inclusão de novas equações, foram feitas em etapas, a fim de se avaliar os resultados obtidos e concomitante validação dos códigos desenvolvidos.

4.2.1 Implementação de Código para Escoamento em Meio Poroso

Nesta etapa inicial, foi desenvolvido um *solver* aplicado ao escoamento de um fluido incompressível em meio poroso. A modelagem deste problema é composta pelas equações da continuidade (Equação 4.3), de Darcy estacionária (Equação 4.2) e da conservação de espécies (Equação 4.4) sem o termo difusivo, como descrita pela Equação 4.8.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla.(\mathbf{u}c) = 0 \tag{4.8}$$

Normalmente, as equações de quantidade de movimento (no caso, equação de Darcy) e da continuidade são resolvidas sequencialmente, sendo esta última usada como equação de pressão. Porém, quando os escoamentos são incompressíveis, não há dependência da pressão na equação da continuidade, não havendo mais, então, uma conexão entre estas equações. Logo, precisa-se lançar mão do acoplamento pressão-velocidade. Para tal propósito, a Equação 4.2 foi substituída na Equação 4.3, gerando a seguinte equação para a pressão:

$$\nabla.[\left(-\frac{\mathbf{A_c}}{\phi}\right).\nabla p] = 0. \tag{4.9}$$

Assim, as Equações 4.9 e 4.2 compõem o acoplamento pressão-velocidade, no qual o resultado do gradiente de pressão obtido pela Equação 4.9 é inserido na Equação 4.2 formando um laço de cálculo, em que este é repetido até convergência. Depois resolve-se a equação da advecção da concentração (Equação 4.8). Todo este procedimento é repetido a cada passo de tempo e está representado pelo Algoritmo 1, descrito pela Figura 4.2

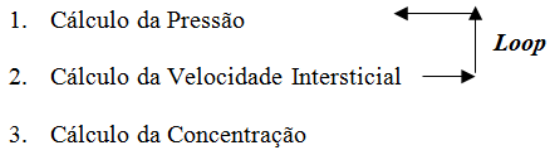

Figura 4.2: Esquema do *loop* de cálculo do Algoritmo 1.

Este *solver* é validado pela solução analítica de Darcy na direção do eixo x.

4.2.2 Inclusão do Efeito de Viscosidade - Acoplamentos

Nesta etapa, a viscosidade não é mais considerada constante ao longo do tempo, pois foi incluída a Equação 4.5, que representa sua dependência com a concentração. Além disso, também adicionou-se ao sistema de equações anterior, a Equação 4.1. Ressaltando que, neste caso, a equação de Darcy é transiente e, não mais estacionária, devido aos efeitos que sofre pela variação da concentração. De posse de um novo arranjo de equações, um novo algoritmo foi gerado, como esquematiza a Figura 4.3. Porém, *loop* de cálculo pressão-velocidade se mantém igual ao do Algoritmo 1.

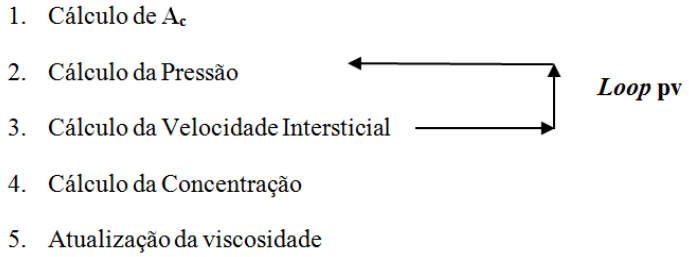

Figura 4.3: Esquema do *loop* de cálculo do acoplamento pv.

Decidiu-se estudar também um outro tipo de acoplamento, que englobaria todas as sequências de cálculo descritas nas etapas de 1 a 5 na Figura 4.3. Então, para cada passo de tempo, as etapas de cálculo realizadas tomariam a forma do algoritmo descrito pela Figura 4.4, cujo acoplamento consiste na pressão-velocidade-concentração.

Assim, foram desenvolvidos e implementados em dois *solvers* diferentes os acoplamentos: pressão-velocidade ou pv e pressão-velocidade-concentração ou pvc, lem-

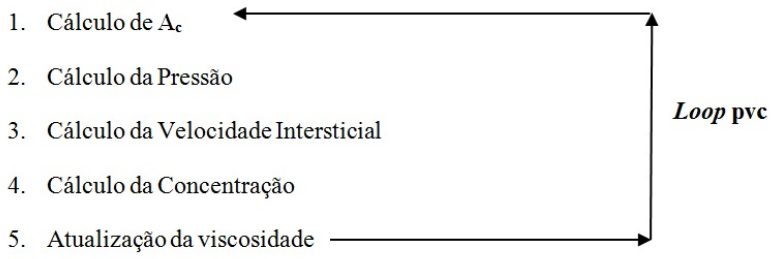

Figura 4.4: Esquema do *loop* de cálculo do acoplamento pvc.

brando que ambos são resolvidos a cada passo de tempo, como esquematizam as Figuras 4.3 e 4.4.

4.2.3 Inclusão do Termo Difusivo

A terceira e última etapa do desenvolvimento do *solver* para o problema do *Viscous Fingering* involve a inclusão do termo difusivo na equação da advecção da concentração (Equação 4.8), ou seja, é a própria equação 4.4, implementada nos esquemas de acoplamento pv e pvc.

No entanto, a definição da variável difusiva D foi feita em partes a fim de se avaliar seus efeitos. As considerações para o termo difusivo foram as seguintes:

i) termo escalar e constante;

ii) tensor isotrópico constante;

iii) tensor anisotrópico constante;

iv) tensor anisotrópico dependente da velocidade.

Para o caso o último e mais complexo caso, em que o tensor difusão-dispersão é dependente da velocidade, o mesmo é descrito da seguinte maneira (SESINI et al., 2010):

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \frac{1}{|\mathbf{u}|^2} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_x & -\mathbf{u}_y \\ \mathbf{u}_y & \mathbf{u}_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_{\parallel} & 0 \\ 0 & D_{\perp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_x & -\mathbf{u}_y \\ \mathbf{u}_y & \mathbf{u}_x \end{bmatrix}^T \tag{4.10}$$

onde $\mathbf{u}_x$ e $\mathbf{u}_y$ são as velocidades intersticiais nas direções x e y, $D_{\parallel}$ e $D_{\perp}$ são os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal, respectivamente e definidos como:

$$D_{\parallel} = 1 + \varepsilon(1 - |\mathbf{u}|^2) \tag{4.11}$$

$$D_{\perp} = \varepsilon \tag{4.12}$$

em que ε é um número que controla a magnitude da dispersão e é constante ao longo do tempo. O seu algoritmo de cálculo é representado na Figura 4.5.

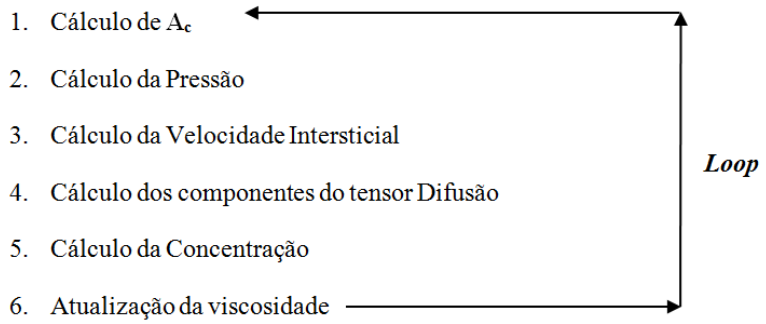

Figura 4.5: Esquema do *loop* de cálculo da modelagem completa, isto é, com o termo difusivo anisotrópico dependente de velocidade e de acoplamento pvc.

4.2.4 Código Desenvolvido da Modelagem Completa do Problema

Neste item, é apresentado apenas o código OpenFOAM desenvolvido através da implementação da modelagem completa do *Viscous Fingering* visto que todos os outros, cujos algoritmos estão descritos nos itens anteriores, seguem a mesma lógica e linha de raciocínio. Os mesmos encontram-se, então, compilados no Apêndice A.

Entende-se por esta modelagem completa aquela descrita na Seção 4.1, ou seja, a que compreende as Equações 4.2, 4.4, 4.5, sendo a da continuidade (Equação 4.3) substituída pela equação da pressão (Equação 4.9), incluindo ainda as que definem o tensor difusivo anisotrópico dependente de velocidade, Equações 4.10, 4.11 e 4.12 e a Equação 4.1. E o acoplamento dessa é o do tipo pressão-velocidade-concentração, como mostra o Código 4.1

Código 4.1: Arquivo principal do *solver* completo de acoplamento pressão-velocidade-concentração (pvc).

```
#include "fvCFD.H"
#include "singlePhaseTransportModel.H"
#include "turbulenceModel.H"
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //
int main(int argc, char *argv[])
{
#   include "setRootCase.H"
#   include "createTime.H"
#   include "createMesh.H"
#   include "createFields.H"
```

```
#   include "initContinuityErrs.H"
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //

    Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;

    while (runTime.loop())
    {
        Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;

#       include "readPISOControls.H"
#       include "readTimeControls.H"
#       include "CourantNo.H"


       // Pressure-velocity PISO corrector
        {
            // --- PISO loop
            for (int corr=0; corr<nCorr; corr++)
            {
             // Update the Ac tensor with new mi

               Ac = K/mi;

                volSymmTensorField rUA = Ac/fi;

               // Non-orthogonal pressure corrector loop
               for (int nonOrth=0; nonOrth<=nNonOrthCorr; nonOrth++)
               {
                   // Pressure corrector

                   fvScalarMatrix pEqn
                   (
                      fvm::laplacian(rUA, p)
                   );

                   pEqn.setReference(pRefCell, pRefValue);

                   if
                   (
                       corr == nCorr-1
                    && nonOrth == nNonOrthCorr
                   )
                   {
                       pEqn.solve(mesh.solver("pFinal"));
                   }
                   else
                   {
```

```
                        pEqn.solve();
                    }

                    if (nonOrth == nNonOrthCorr)
                    {
                        phi -= pEqn.flux();
                    }

                }

#               include "continuityErrs.H"

               U = (-rUA & fvc::grad(p));
               U.correctBoundaryConditions();


               phi = (linearInterpolate(U)  & mesh.Sf());
               adjustPhi(phi, U, p);

#               include "transport.H"

                solve
                (
                    fvm::ddt(C)
                   +fvm::div(phi, C)
                   -fvm::laplacian(D, C)
                );

                // Updating the effective viscosity
                 mi = exp(-R * C) *mi_dim;

            }
        }

        runTime.write();

        Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
            << "  ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
            << nl << endl;
    }

    Info<< "End\n" << endl;

    return 0;
}
```

Como pode ser observado no Código 4.1, o mesmo começa com a declaração e

inclusão de algumas bibliotecas, arquivos .H onde alguns são gerais para todos os *solvers* e outros específicos para cada um. A primeira biblioteca declarada e a principal do OpenFOAM é a `fvCFD.H`, responsável por permitir acesso a todas classes presentes nas outras bibliotecas necessárias ao funcionamento do *software*. Em seguida, há inclusão das bibliotecas `singlePhaseTransportModel.H` e `turbulenceModel.H`, onde a primeira é referente ao modelo de transporte monofásico e a segunda ao modelo de turbulência, que pode ou não ser considerado no escoamento.

O *solver*, propriamente dito, encontra-se dentro da função *main*, onde também há declarações de bibliotecas como `setRootCase.H`, que controla seus argumentos e as `createTime.H` e `createMesh.H`, que criam e armazenam dados sobre o caso simulado e a estrutura da malha utilizada, respectivamente. As variáveis e propriedades físicas do caso são declaradas no arquivo `createFields.H`. Já o `initContinuityErrs.H` inicializa e calcula o erro cumulativo da continuidade.

O comando `while` (`runTime.loop()`) é usado para dar início ao *loop* de cálculo, ou seja, conforme instruções de solução, as mesmas são resolvidas ao longo do tempo, repetidamente, até atingirem o tempo final especificado pelo usuário. O controle de tempo é feito pela biblioteca `readTimeControls.H`, o das iterações necessárias ao algoritmo PISO (*Pressure Implicit with Splitting Operators*) pela biblioteca `readPISOControls.H` e o passo de tempo pela `CourantNo.H`.

Dentro do *loop* de cálculo há a resolução das Equações 4.9, 4.2, 4.5 discretizadas. Há a inclusão de um arquivo, o `transport.H`, antes do comando *solve*, pois nele estão estruturadas as Equações que definem o termo difusivo anisotrópico dependente de velocidade. O referido comando é usado para resolver a equação da concentração e a mesma é feita através da forma implícita do método dos volumes finitos (`fvm::`), onde o termo de derivada temporal é representado por `ddt`, o divergente pelo `div` usando `phi` e o laplaciano do termo difusivo pelo `laplacian`, assim como o da pressão. A velocidade em Darcy é calculada de forma explícita pelo método dos volumes finitos (`fvc::`).

Deve-se ressaltar que o código possui um laço de correção de não ortogonalidade, caso a malha computacional seja composta por volumes cujas faces não são ortogonais às linhas que unem os centros dos volumes adjacentes.

O operador `linearInterpolate` é responsável pela interpolação de uma variável para a face, pois quando um divergente é resolvido, as propriedades devem estar localizadas nas faces e o `&` faz cálculo de produto escalar.

Os campos de pressão, velocidade e concentração são escritos em arquivos de saída, através do comando `runTime.write()` que permite a saída dos mesmos para diretórios de tempo do caso simulado.

4.2.5 Parâmetros de Simulação

São apresentados, neste item, os parâmetros de simulação, que se encontram no diretório `system` contido na pasta do caso a ser simulado. Dentro dele, estão presentes os arquivos: `controlDict`, `fvSchemes` e `fvSolution`, conforme ilustrado pela Figura 2.17. No primeiro, o usuário configura controle do passo de tempo, do número de Courant, do tempo total de simulação, entre outros. No segundo, ele pode escolher os métodos de discretização de MVF usados, enquanto que, no terceiro, ele especifica os métodos de solução de sistemas lineares, bem como a tolerância do erro para as variáveis.

No que tange às configurações do `controlDict`, foi escolhido um tempo total de simulação de 5000 s com escrita de seus resultados a cada 50 s e o passo de tempo ajustável com o número de Courant, este variado em testes apresentados na Seção 5.2. Em relação ao arquivo `fvSchemes`, todas suas especificações estão compiladas na Tabela 4.4.

Tabela 4.4: Tabela dos métodos numéricos utilizados no arquivo `fvSchemes`.

Equação	Termos	Esquema Numérico
4.9	$\nabla^2.[(\mathbf{A_c}/\phi)p]$	Gauss linear corrected
4.2	∇p	Gauss linear
	$\partial c/\partial t$	Euler
4.4	$\nabla.(\texttt{phi}c)$	Gauss n
	$\nabla^2.(\mathbf{D}c)$	Gauss linear corrected

O termo *Gauss* especifica a discretização padrão de volumes finitos por integração Gaussiana. Como esta necessita da interpolação dos valores dos centros das células para as suas faces, é necessário, portanto, definir, em seguida, um esquema de interpolação. Geralmente, o *linear*, que é o CDS (*Central Differencing Scheme*) é o mais recomendado (OPENFOAM, 2013b). No termo laplaciano, o Gauss requer, além de um método de interpolação, um esquema de gradiente normal a superficie, que, no caso é o *corrected*. Este é um método de correção explícita não-ortogonal, de segunda ordem, conservativo e não-limitado. Também é típico usá-lo, na maioria dos problemas (OPENFOAM, 2013b). No divergente, $\nabla.(\texttt{phi}c)$, onde `phi` é o fluxo, o termo n inclui três diferentes esquemas de interpolação variados: *upwind*, TVD (Total Variation Diminishing) e *vanLeer*, que são analisados na Seção 5.2. Por fim, o termo temporal é discretizado por Euler, que é de primeira ordem, implícito e limitado.

No arquivo do `fvSolution`, foram configuradas tolerâncias de resíduo para as variáveis pressão, velocidade intersticial e concentração iguais a 10^{-10}, 10^{-8} e 10^{-8},

respectivamente. O método de solução dos sistemas lineares usado é o do gradiente conjugado pré-condicionado. Vale ressaltar que para a velocidade intersticial e concentração o método é bi-conjugado, pois suas matrizes são assimétricas. Os pré-condicionadores são do tipo DIC (Diagonal Incompleta Cholesky) para a pressão e DILU (Diagonal Incompleta LU) para a velocidade intersticial e a concentração. Informações mais detalhadas sobre isto podem ser encontrada nos manuais do OpenFOAM (OPENFOAM, 2013b; OPENFOAM, 2013a).

4.3 Convergência de Malha

Esta seção visa descrever o procedimento feito para análise da convergência de malha. Como já foi mencionado, a quantidade de pontos discretos da malha determina, de forma proporcional, o nível de refinamento desta, isto é, quanto maior o número desses pontos, maior o refinamento da malha. Entretanto, quanto mais refinada a malha é, maior gasto computacional se tem, pois seu esforço é maior e acarreta, portanto, em um tempo demasiadamente longo de simulação. Para evitar este problema, é essencial fazer o teste de malha, porque existe um número mínimo de nós, em que os resultados numéricos tornam-se, significativamente, invariáveis, ou seja, fornecem soluções aceitáveis em comparação com as malhas ainda mais refinadas.

A partir da geometria retangular da célula de Hele-Shaw mostrada na Figura 4.1, foram criadas diferentes malhas hexaédricas com diversos graus de refinamento para serem testadas, visando determinar até que ponto suas características influenciam no resultado da simulação. A avaliação do refino de malhas para as simulações de *Viscous Fingering* foi um pouco diferente do que, usualmente se faz, visto que os *fingers* crescem em tamanhos diferentes, sofrem interferências dos seus vizinhos e se modificam ao longo do tempo. Então, decidiu-se seguir o procedimento abaixo para tal análise, usando a variável concentração:

i) São escolhidos determinados instantes de tempo: t1, t2, t3, etc, como ilustra a Figura 4.6 para cada malha;

ii) Mede-se a extensão média dos *fingers* na direção do eixo x, representada pelas linhas verticais na direção y, indicada pela Figura 4.6, onde será aplicada a integral para obtenção da concentração média ($\overline{c}$):

$$\overline{c} = \frac{1}{H}\int_0^H c(x,t)dy \tag{4.13}$$

Essa é obtida pelo *software* de visualização `Paraview` (PARAVIEW, 2013).

iii) Com os valores das concentrações médias de cada tempo de cada malha, faz-se uma média aritmética com todas elas (concentração média global);

iv) Por fim, são calculados os desvios relativos de cada concentração de cada malha em determinado instante de tempo com a concentração média global.

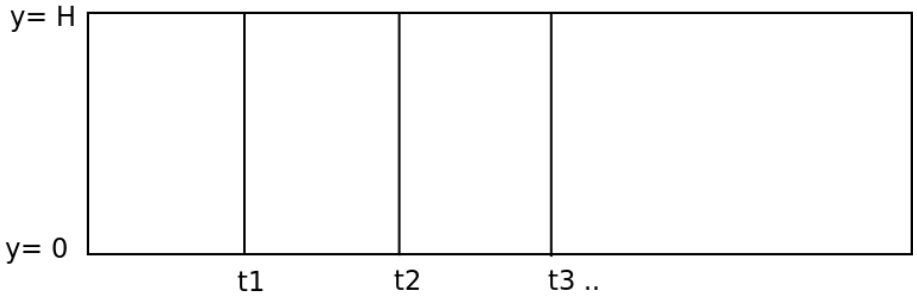

Figura 4.6: Esquema da célula de Hele-Shaw com determinados instantes de tempo selecionados com suas respectivas extensões médias dos *fingers*, representadas pelas linhas verticais.

Capítulo 5

Resultados e Discussão

Neste capítulo, são mostrados os resultados dos testes de refino de malha, bem como as análises do algoritmos 1, dos acoplamentos pv e pvc, dos métodos numéricos utilizados, dos parâmetros de operação e do termo difusão-dispersão.

Para essas simulações, utilizou-se um laptop Sony Vaio com UBUNTU 12.04.1 LTS – Intel® Core^{TM} i7, CPU Q 720, 1,6 GHz, 5,8 GB de memória RAM; um *cluster bewoulf* com Linux Cent OS – 18 Quad-Core AMD Opteron^{TM} Processor 2356, 8 núcleos, 16GB de memória RAM em cada nó e outro com 72 Xeon X5675 cores (288 Gb RAM, GPUs Tesla M2070) - do Laboratório de Termofluidodinâmica da COPPE – UFRJ.

Foram utilizados o `blockMesh` do OpenFOAM para a geração da geometria e da malha, os *solvers* desenvolvidos no presente trabalho, e o `Paraview` para análise e visualização dos resultados.

5.1 Geometria e Malha

A célula de Helle-Shaw usada é retangular e bidimensional com dimensões 0,5 m x 0,125 m (Comprimento x Altura), como mostra a Figura 4.1. A geometria e a malha foram confeccionadas através do utilitário `blockMesh` do OpenFOAM, cujo padrão é construir malhas estruturadas de elementos hexaédricos. Vale ressaltar que este só gera geometrias e, consequentemente, malhas, tridimensionais. Para que se obtenha uma geometria/malha bidimensional, é necessária a configuração da terceira dimensão z como `empty`, que corresponderia a apenas uma célula nesta direção. Todas as informações sobre a geração das malhas são inseridas no arquivo do `blockMeshDict`.

A partir da geometria da Figura 4.1, foram criadas oito malhas hexaédricas com diferentes níveis de refinamento a fim de se verificar até que ponto suas características influenciam no resultado da simulação. A tabela 5.1 mostra as diversas malhas M1, M2, M3, M4, M5, M6, M7 e M8 testadas em ordem crescente de refinamento.

Neste estudo, os casos simulados tiveram a configuração mostrada pela Tabela

5.2.

Tabela 5.1: Tamanho das malhas confeccionadas.

Malha	Número de elementos hexaédricos
M1	25 000
M2	56 250
M3	81 000
M4	100 000
M5	225 000
M6	506 250
M7	630 000
M8	783 000

Tabela 5.2: Valores dos parâmetros das simulações.

Variável	Valor
R	$1,6$
∇P	$10\ atm/m$

Para a análise da mesma, utilizou-se o procedimento descrito no capítulo anterior, Seção 4.3. Os instantes escolhidos para tal estudo foram: 1000 s, 2000 s, 3000 s, 4000 s e 5000 s e a extensão dos *fingers* avaliados para iso-superfície bidimensional de concentração igual a 0,5. Foi criada uma linha vertical na direção y e nela, aplicada a integral definida na Equação 4.13 para obter a concentração média desta região, como ilustra a Figura 5.1.

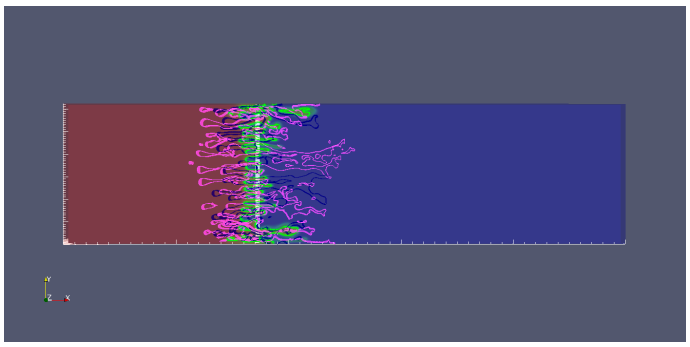

Figura 5.1: Exemplo mostrando isolinhas de concentração de 0,5 para três malhas diferentes dos resultados obtidos pelo esquema pvc no tempo de 3000 s e a linha na direção y, onde foi aplicada a integral da Equação 4.13, com o contorno de concentração no fundo.

Com os dados das concentrações médias de cada tempo para cada malha, calculou-se por média aritmética uma média global para cada tempo, bem como

os desvios das primeiras em relação às últimas e construiu-se os gráficos mostrados nas Figuras 5.2 e 5.3 para os resultados obtidos por cada esquema de acoplamento, pv e pvc.

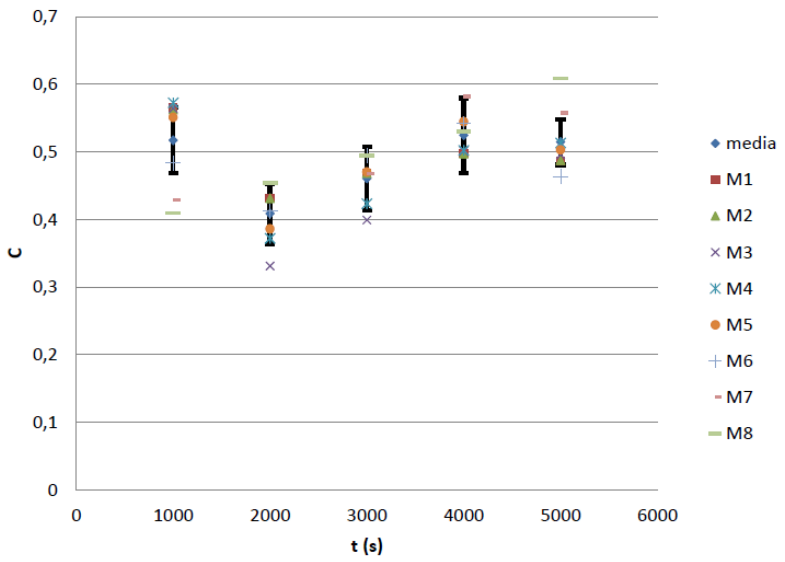

Figura 5.2: Convergência de Malha dos resultados obtidos pelo acoplamento pv.

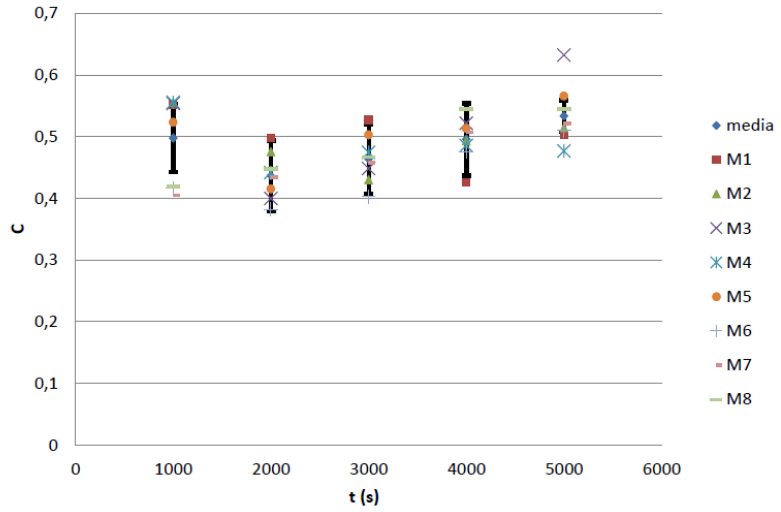

Figura 5.3: Convergência de Malha dos resultados obtidos pelo acoplamento pvc.

Observa-se que nos dois gráficos, mesmo as malhas mais refinadas como M7 e M8 estão fora do limite de desvio estabelecido pelos cálculos das concentrações médias em alguns instantes e, que apesar de as malhas mais grosseiras estarem dentro do limite do desvio, são muito pouco refinadas e os resultados de suas interfaces de concentração não estão bem definidos. Vale a pena ressaltar que o refinamento contínuo de malhas sempre resultará em *fingers* diferentes, além de aumentar o custo computacional. Logo, considerando-se tudo isto e que a malha convergida

tem de ser relativamente refinada e estar dentro dos desvios em todos os instantes de tempo avaliados, constata-se que a malha M5 é a convergida e mostrada na Figura 5.4. Portanto, esta foi a escolhida para ser usada em simulações posteriores deste trabalho, pois o tempo computacional é menor que o das mais refinadas e seus resultados fornecem níveis de erro de convergência relativamente baixos.

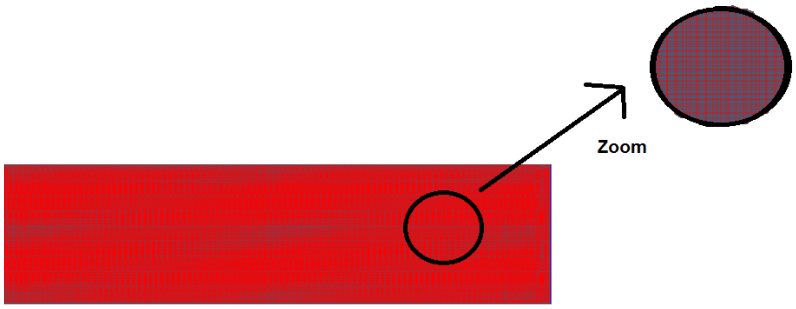

Figura 5.4: Representação da malha M5 com um *zoom* para melhor visualização dos seus elementos de malha retangulares.

5.2 Validação do Código de Escoamento em Meio Poroso

O *solver* com o Algoritmo 1, mostrado na Figura 4.2, foi desenvolvido na versão 1.6-ext do OpenFOAM e validado pela solução analítica de Darcy 1D na direção do escoamento (eixo x):

$$u_x = -\frac{K}{\phi\mu}.\frac{\delta P}{L} = \frac{4,9.10^{-12}m^2}{0,2 \times 1.10^{-3}Pa.s} \times \frac{10^5 Pa}{0,5m} = 0,0049m/s \tag{5.1}$$

onde a viscosidade utilizada foi a da água e os valores de porosidade e permeabilidade são compatíveis com os encontrados na literatura para meios porosos de rochas petrolíferas (PGT, 2012; ROSA et al., 2006), L é o comprimento da célula de Hele-Shaw e todas as variavéis estão com suas unidades no S.I. A Figura 5.5 mostra que a concentração está sendo advectada como era de se esperar. Como a escala de concentração será a mesma para as próximas figuras apresentadas neste capítulo, a mesma será omitidas destas e a referencia é a da Figura 5.5. Além disso, a Figura 5.6 mostra que a pressão foi bem desenvolvida.

5.3 Avaliação dos Acoplamentos pv e pvc

Para este estudo, foram simulados casos de escoamentos incompressíveis, bidimensionais e transientes com a malha convergida, M5, a partir da configuração dos

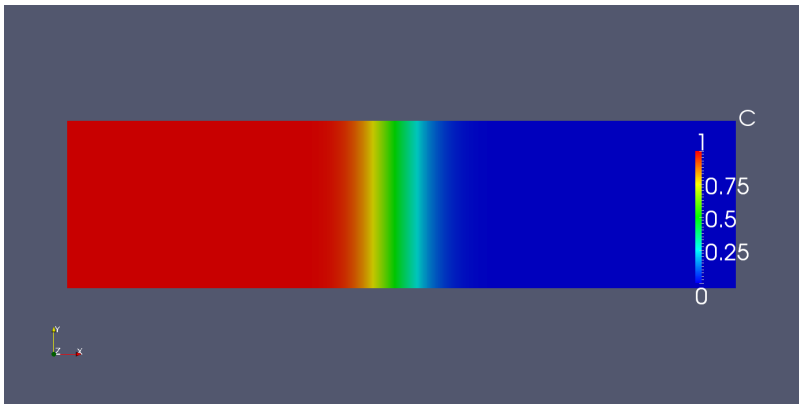

Figura 5.5: Concentração sendo advectada obtida pelo *solver* inicial.

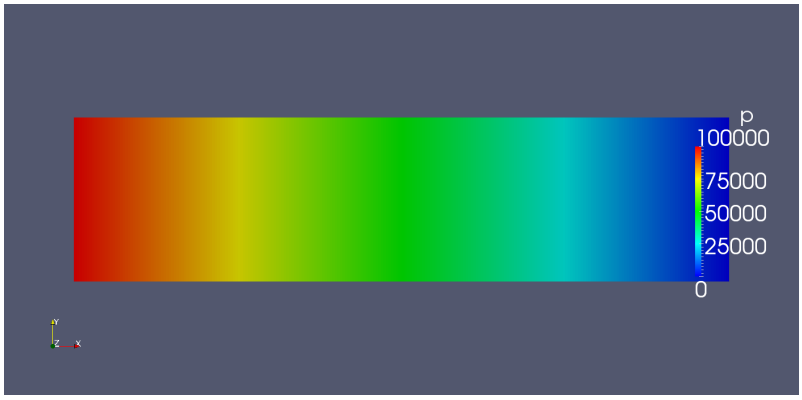

Figura 5.6: Desenvolvimento da Pressão obtido pelo *solver* inicial.

parâmetros de porosidade (ϕ) e permeabilidade ($\mathbf{K}$) constantes e esta última isotrópica, parâmetro da razão de mobilidade (R) e gradiente de pressão, conforme mostrados nas Tabelas 4.3 e 5.2 e, condição inicial constante e igual a 1. O passo de tempo foi adaptativo controlado pelo número de Courant ($0 < \text{Co} < 1$).

5.3.1 Variação do Número de Courant

Sabe-se que quanto maior o número de Courant, mais acurada é a solução, porém mais difícil é a convergência. Então, para testar a capacidade dos *solvers* em resolver os casos simulados de maneira que se obtenha convergência e acurácia, testou-se alguns valores de Co: 0,2, 0,5, 0,7 e 0,9 para os dois tipos de acoplamentos.

No entanto, para um Co = 0,9, o caso simulado usando o acoplamento pv, divergiu, enquanto que o pvc convergiu para todos os valores de Courant testados. Logo, há um indício de que o esquema de acoplamento tem uma importância significativa. Embora o caso com um Co = 0,9 tenha convergido para o esquema pvc, escolheu-se um valor para Courant igual a 0,7, pois o esforço para obter a convergência da solução é um pouco menor que o Courant igual a 0,9 e ainda tem-se uma acurácia significativa por ser um valor maior que 0,5. Além disso, para fins de comparação,

é o valor mais alto de Courant que pode ser usado para analisar a diferença entre os resultados obtidos pelos dois tipos de acoplamento, que são mostrados na Figura 5.7**(a)**,**(b)**.

5.3.2 Mecanismos de Interações Não-Lineares do *Viscous Fingering*

O valor da razão de mobilidade do caso simulado é baixo e o fluido é newtoniano, logo, os mecanismos de interações entre os *fingers* obtidos pelos acoplamentos pv e pvc são os clássicos, como era de se esperar. São observados, conforme mostra a Figura 5.7**(a)** e **(b)**, quatro tipos de mecanismos: *finger fading* (triângulo), coalescência (retângulo), blindagem (retângulo preto) e *tip-splitting* (círculo) que são coerentes quando comparados aos resultados reportados na literatura (SESINI et al., 2010; GHESMAT; AZAIEZ, 2008; JHA et al., 2011; ZIMMERMAN; HOMSY, 1991; ZIMMERMAN; HOMSY, 1992).

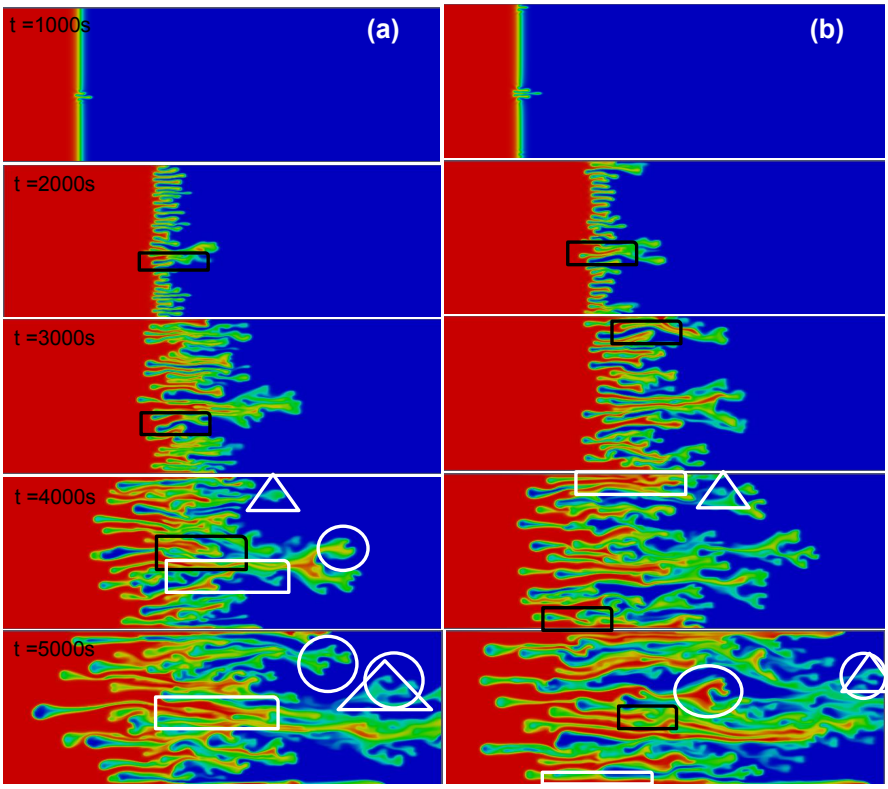

Figura 5.7: Contorno de concentração em diferentes tempos (em segundos) **(a)** *solver* 1, **(b)** *solver* 2.

Ainda que estes resultados sejam parecidos entre si, o *solver* de acoplamento pressão-velocidade será excluído das análises futuras abordadas neste trabalho. Porque além de não oferecer um resultado convergido para o caso com Courant igual

a 0,9, também divergiu no caso da razão de mobilidade R = 2, nos testes de variação deste parâmetro, cujos detalhes sobre sua influência serão abordados na Seção 5.4.2. Logo, o acoplamento pv não parece ser adequado e eficiente e, assim, as próximas simulações a serem discutidas foram geradas pelo *solver* de acoplamento pressão-velocidade-concentração.

5.3.3 Métodos Numéricos

Nesta etapa, houve mudança de versão do OpenFOAM. Passou-se a usar a versão 2.2.x, pois a implementação numérica dos métodos dedicados a resolver o sistema linear garantiram melhores convergências . Vale ressaltar que todas as análises feitas anteriormente, levaram em conta essa mudança e estão de acordo com a nova versão utilizada. Para o termo do divergente da concentração, $\nabla.(\phi c)$, mostrado na Tabela 4.4, foram avaliados três métodos numéricos de interpolação: *limitedLinear* (TVD), *upwind* e *vanLeer*. A solução obtida pelo *upwind* gerou uma pequena instabilidade, como apresentada pela Figura 5.8, e não compatível com os resultados obtidos pelos outros métodos. Talvez porque esse método é bem difusivo, ainda que seja considerado uma boa aproximação para os problemas dominados pela advecção e tenha estabilidade numérica boa também. Ele impõe o valor da concentração do centro para a face e vai difundindo esse tipo de informação ao longo do domínio.

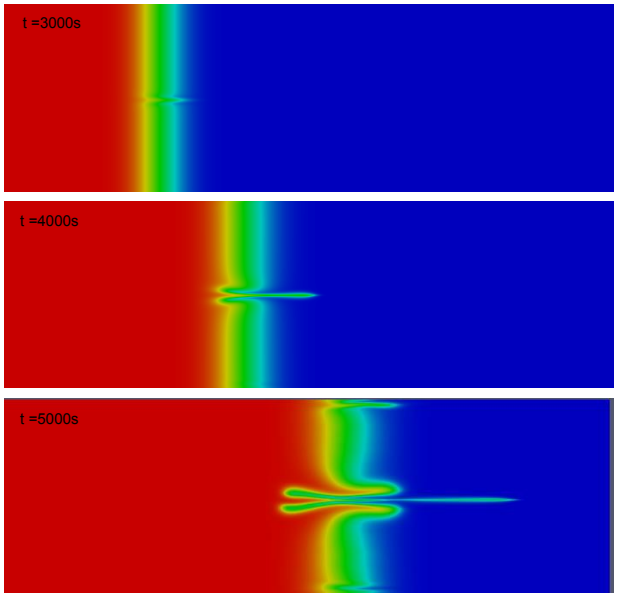

Figura 5.8: Contorno de concentração em diferentes tempos (em segundos) dos resultados obtidos pelo método do *upwind*.

Já o TVD (*Total Variation Diminishing*) e o *vanLeer* geraram *fingers* de comportamentos similares, como mostra a Figura 5.9. Estes métodos são de alta ordem

de acurácia e baseados nos limitadores de fluxo que controlam o processo de geração de oscilações, prevenindo os gradientes de ultrapassarem certos limites ou de mudarem de sinal entre pontos adjacentes. O valor usado para o limitador de fluxo foi igual a 1 para o TVD e *vanLeer*, mas neste caso, o seu valor é adaptado ao longo da simulação, causando um gasto computacional que pode ser desnecessário. Tendo isso em vista e o fato de os resultados obtidos por esses dois métodos terem sido muito semelhantes, optou-se por usar o TVD nas próximas simulações.

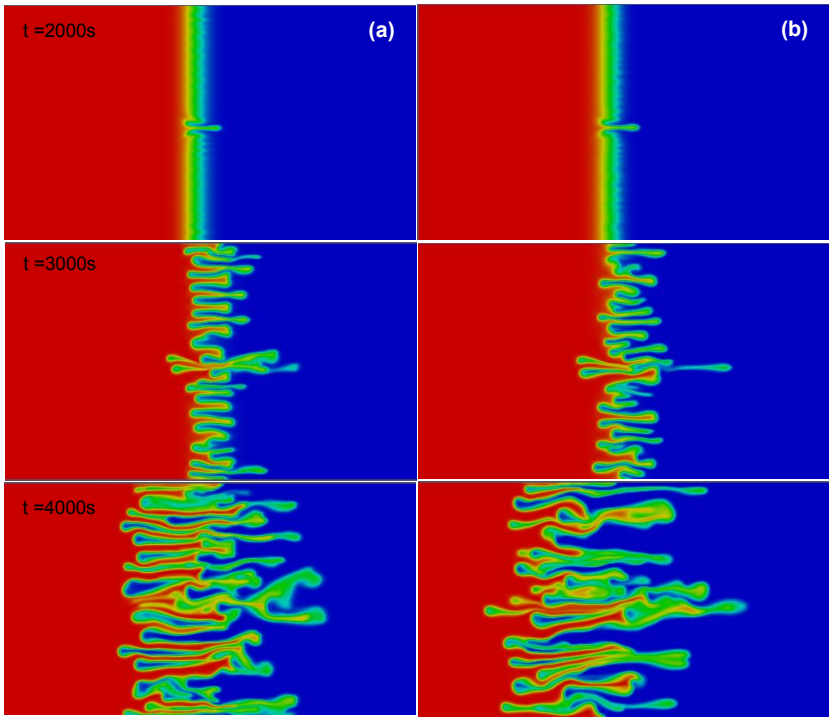

Figura 5.9: Contorno de concentração em diferentes tempos (em segundos) para os esquemas **(a)** TVD e **(b)** *vanLeer*.

5.4 Avaliação dos parâmetros de operação

Esta seção aborda os efeitos no comportamento do *Viscous Fingering* com a variação de parâmetros de operação como o gradiente de pressão e a razão de mobilidade.

5.4.1 Análise da variação do gradiente de Pressão

Foram simulados casos variando-se a queda de pressão a fim de se verificar sua influência no escoamento e no padrão de formação do *Viscous Fingering* usando o *solver* de acoplamento pressão-velocidade-concentração. Os valores testados foram

5 e 15 atm, cujos resultados foram comparados entre si e com o de 10 atm, usado nas simulações anteriores. Todos os outros parâmetros e variavéis permaneceram constantes, conforme as Tabelas 4.3 e 5.2.

Pode ser visto na Figura 5.10 que o caso simulado com queda de pressão de 10 atm está com a iso-superfície bidimensional de concentração de 0,5 entre as dos casos de 5 e 15 atm, respectivamente, em todos os instantes de tempo avaliados. Logo, observou-se que quanto maior a queda de pressão para um mesmo valor de razão de mobilidade, mais rápido é o escoamento, como um todo. No entanto, surgem *fingers* maiores, mais compridos, fazendo com que o domínio não seja molhado tão uniformemente quanto o é em um valor menor de queda de pressão.

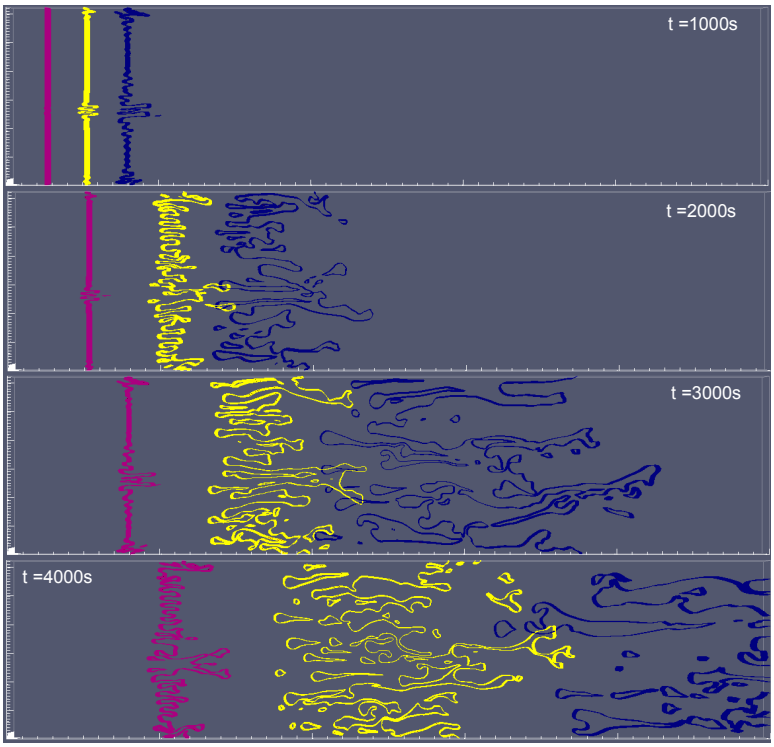

Figura 5.10: Isolinhas de concentração de 0,5 em diferentes instantes de tempo (em segundos) para os valores de queda de pressão de: 5 atm (rosa), 10 atm (amarelo) e 15 atm (azul).

5.4.2 Análise da Razão de Mobilidade

O caso-base deste trabalho usa uma baixa razão de mobilidade, R =1,6. Porém, esta é uma importante variável que afeta o processo de deslocamentos de fluidos de diferentes viscosidades em meios porosos e, portanto, deve ser bem estudada e avaliada. A tabela 5.3 mostra os valores de razão de mobilidade avaliados e comparados com o do caso-base.

Tabela 5.3: Valores das razões de mobilidade (MR) avaliadas e dos parâmetros R associados às mesmas.

Valor de MR	R
$7,39$	$2,0$
$20,08$	$3,0$
$148,41$	$5,0$

Quanto maior a razão de mobilidade, mais difícil é o escoamento e complexos mecanismos de interação entre os *fingers* podem surgir. Como se observa nas Figuras 5.11, 5.12 e 5.13, a medida em que se aumenta o valor desta razão, maiores são os *fingers* formados e percebe-se um certo atraso no deslocamento do fluido como um todo. Porém, pelo fato de os *fingers* serem mais compridos, o *breakthrough* ocorre mais rapidamente, e o domínio também é molhado de forma mais ligeira, embora de maneira não uniforme.

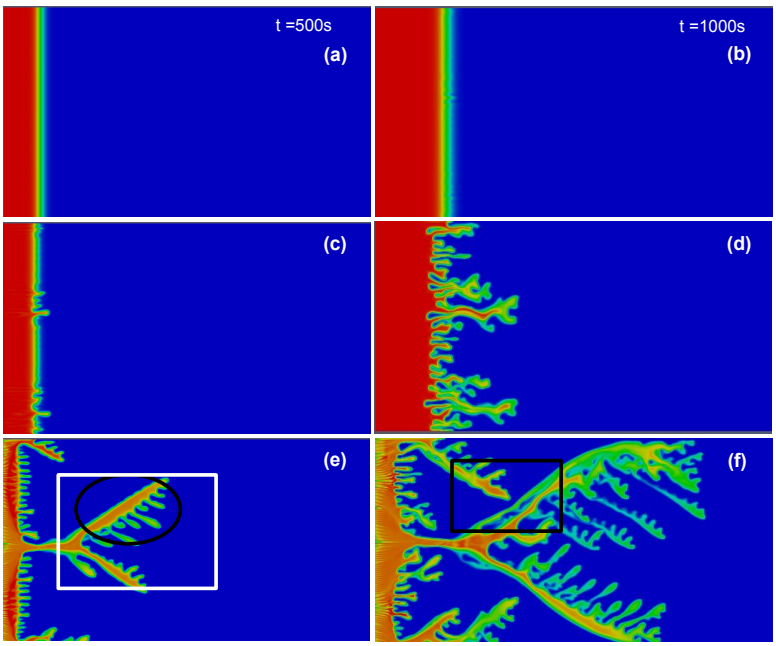

Figura 5.11: Contorno de concentração em diferentes instantes (em segundos) para as razões de mobilidade de parâmetros: R = 2 ((**a**) e (**b**)), R =3 ((**c**) e (**d**)) e R =5 ((**e**) e (**f**)).

Vale lembrar que o aumento da razão de mobilidade torna a solução mais difícil de se obter, visto que para uma razão de mobilidade igual a 5, o método TVD com limitador de de fluxo igual a 1 e Courant igual a 0,7, não foi capaz de convergir o caso. O mesmo só convergiu com um limitador de fluxo de 0,6 e Courant mais

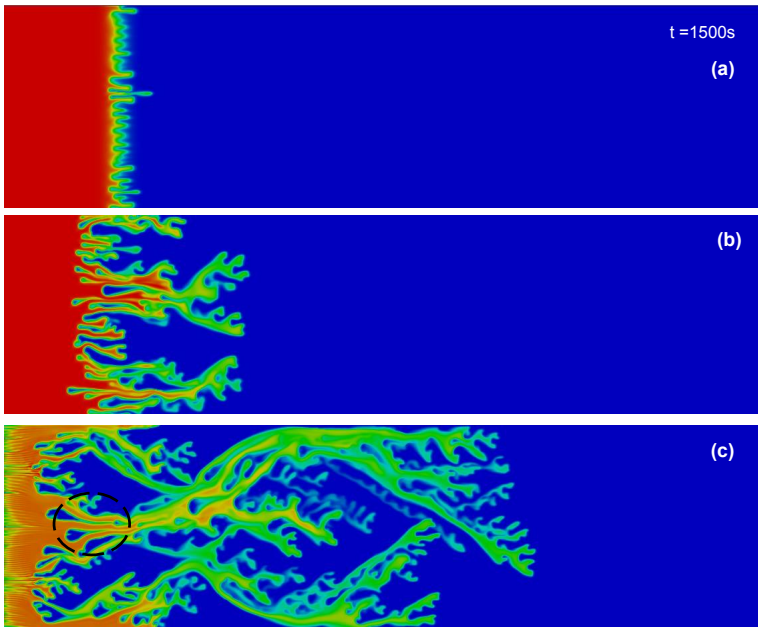

Figura 5.12: Contorno de concentração em diferentes instantes (em segundos) para as razões de mobilidade de parâmetros: **(a)** R = 2, **(b)** R =3 e **(c)** R =5.

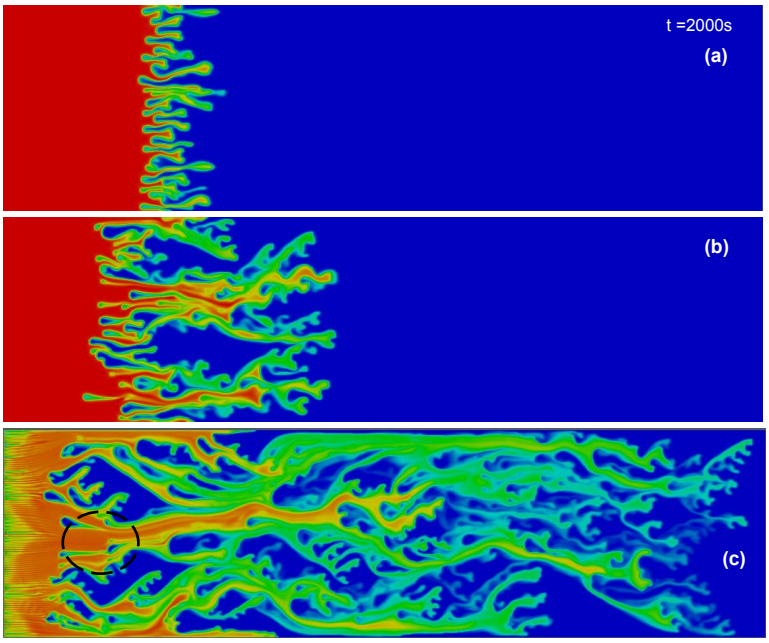

Figura 5.13: Contorno de concentração em diferentes intantes (em segundos) para as razões de mobilidade de parâmetros: **(a)** R = 2, **(b)** R =3 e **(c)** R =5.

baixo, com valor de 0,5. Porém, este valor para Courant é aceitável, visto que sua faixa mais ideal é entre 0,5 e 1. A tabela 5.4 ratifica este argumento, mostrando o

tempo de simulação para cada valor de razão de mobilidade testado, ou seja, quanto maior o valor deste parâmetro, maior é o custo computacional.

Tabela 5.4: Tempo computacional gasto para cada simulação com as diferentes razões de mobilidade (MR) avaliadas.

R	MR	Tempo Computacional (horas)
$1,6$	4,95	4,42
$2,0$	7,39	12,69
$3,0$	20,08	59,20
$5,0$	148,41	134,56

Em termos de mecanismos de interação entre os *fingers*, para valores de razão de mobilidade cujos R foram iguais a 2 e 3, houve semelhança destes com o caso-base, R = 1,6, mostrado na Figura 5.7 **(b)**. Já para o caso em que a razão de mobilidade associada a um R igual a 5, houve um efeito na direção transversal bem significativo e não observado nos outros casos, muito embora também pôde se observar, neste caso, os mesmos mecanismos relatados e ilustrados pela Figura 5.7 **(b)**. Além disso, foram observados mecanismos complexos de interação entre os *fingers* como *fingering* diagonal (retângulo branco), ramificação de um lado só (círculo preto de linha sólida), fusão de ramos (retângulo preto) e coalescência dupla (círculo preto de linha semi-sólida), mostrados pelas Figuras 5.11, 5.12 e 5.13 e compatíveis com os reportados por Sesini et al. (2010), Islam e Azaiez (2005) e Azaiez e Mohamad (2004). Estes mecanismos ocorrem com fluidos não newtonianos com baixa razão de mobilidade e newtonianos com alta razão de mobilidade.

5.5 Avaliação do Termo Difusivo

Esta análise foi feita em quatro etapas divididas em dois grandes casos: isotrópico e anisotrópico, com intuito de se avaliar passo a passo os efeitos gerados pelo termo difusivo introduzido na modelagem.

5.5.1 Caso Isotrópico

Primeiramente, o termo difusivo foi considerado como um escalar constante e depois como um tensor isotrópico constante. Para o coeficiente de difusão, D, escalar e constante, foram usados os valores iguais a $10^{-5}m^2/s^{-1}$, $10^{-7}m^2/s^{-1}$ e $10^{-9}m^2/s^{-1}$. Porém, não houve crescimento de *fingers*, o que significa dizer que o efeito difusional foi razoavelmente grande e suprimiu os efeitos das instabilidades. Utilizou-se um valor ainda mais baixo (escolhido aleatoriamente) a fim de se verificar a dominância

difusiva em relação à advectiva: $D = 10^{-12} m^2/s^{-1}$. Com este valor, obteve-se *finger*, já que o efeito difusional foi mínimo, não sendo capaz de anular o surgimento das instabilidades, conforme mostra a Figura 5.14.

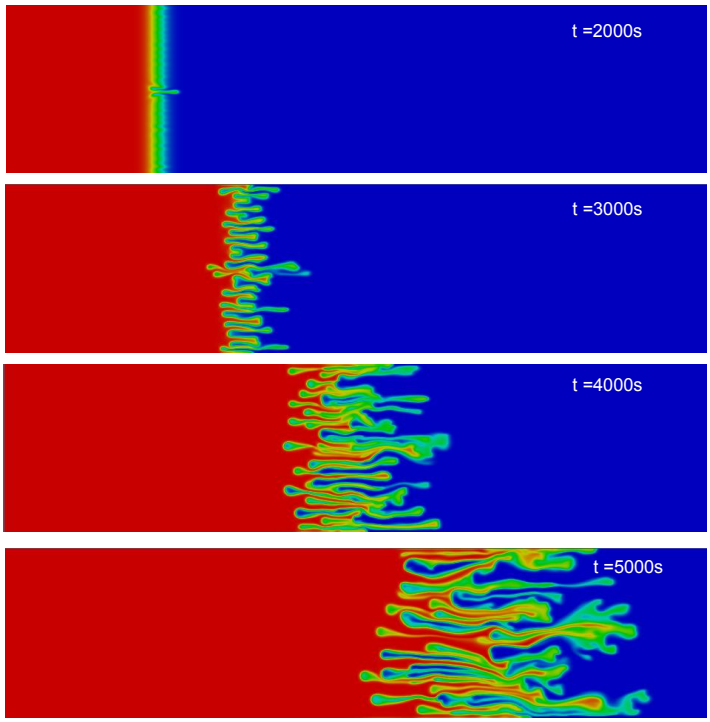

Figura 5.14: Coeficiente de difusão constante igual a $10^{-12} m^2/s^{-1}$ em diferentes instantes.

Quando o termo difusional passou a ser um tensor isotrópico, **D**, com elementos de sua diagonal principal dados por D_{ii}, observou-se o *viscous fingering* para valores de $D_{ii} = 10^{-12} m^2/s^{-1}$, como era de se esperar, uma vez que no caso constante também houve o fenômeno, e também, com um valor um pouco mais alto de difusão, $D_{ii} = 10^{-9} m^2/s^{-1}$, indicando que o fato de transformar o termo em um tensor afeta os cálculos e influencia no aparecimento dos *fingers*. A figura 5.15 ilustra os dois casos e observa-se que as instabilidades demoram mais a aparecer com um valor de difusão maior, apresentado pela Figura 5.15**(a)**, e são razoavelmente diferentes do caso de menor difusão, como mostra a Figura 5.15**(b)**.

5.5.2 Caso Anisotrópico

Neste item, o termo difusivo foi considerado anisotrópico constante e, posteriormente como anisotrópico dependente de velocidade. Para o primeiro, utilizou-se valores para as direções xx e yy compatíveis com o que existe na literatura (WITT et al., 2005), $D_{xx} = 1,43.10^{-8} m^2/s^{-1}$ e $D_{yy} = 5,65.10^{-10} m^2/s^{-1}$, respectivamente.

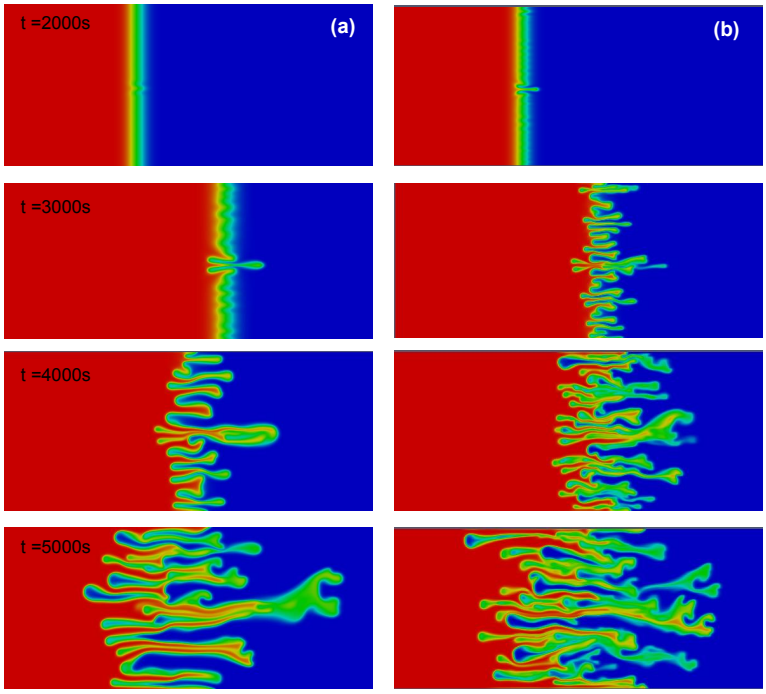

Figura 5.15: Tensor difusão isotrópico com elementos de sua matriz iguais a:**(a)** $D_{ii} = 10^{-9} m^2/s^{-1}$ e **(b)** $D_{ii} = 10^{-12} m^2/s^{-1}$ em diferentes instantes.

As Figuras 5.16 e 5.17 mostram os resultados obtidos para este caso. Observa-se que entre os instantes 3000 s e 4500 s, o comportamento é parecido com o obtido pelo método *upwind*, com a região de preferência para instabilidade no meio da geometria e nas paredes. Mas a medida que o escoamento flui, outras instabilidades vão surgindo entre a do meio e as das paredes, que são mais significativas, e os *fingers* ficam mais claros. Porém, isso só ocorre no final da simulação, com a célula quase toda preenchida, não sendo possível, portanto, identificar a evolução dos *fingers* e nem os mecanismos de interação não linear entre estes.

O último caso é aquele que considera o tensor difusivo como sendo dependente da velocidade, definido pelas Equações 4.10, 4.11 e 4.12, cujo único parâmetro a ser configurado é o que controla a magnitude da dispersão, ε. O valor utilizado foi de 0,05, como em Sesini et al. (2010) e a simulações feitas com este valor não produziram instabilidades de *viscous fingering* para a configuração das variáveis usadas neste trabalho. Foi feito um estudo mais detalhado, então, com vários valores típicos do número que controla a magnitude da dispersão, ε, abordados na literatura (ZIMMERMAN; HOMSY, 1991) para análise deste e do tensor de difusão-dispersão, considerando os valores de velocidade obtidos no presente trabalho. Duas avaliações foram feitas: a primeira manteve a magnitude da velocidade intersticial constante e variou-se os termos da matriz difusão-dispersão dependente de velocidade com o

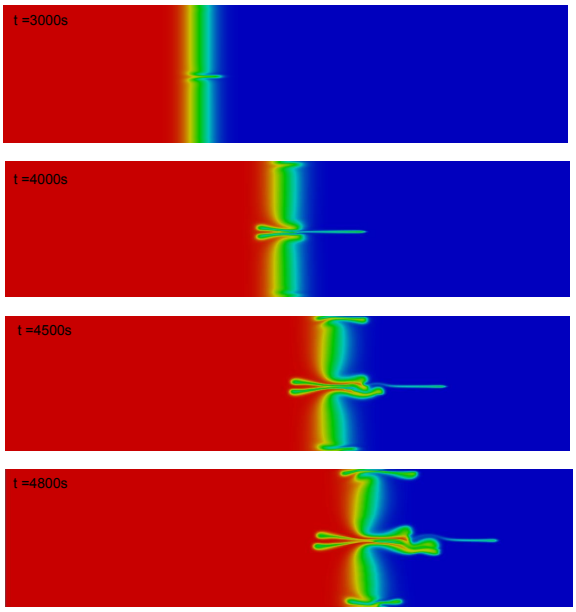

Figura 5.16: Tensor de difusão anisotrópico com os valores dos elementos da sua diagonal principal iguais a $D_{xx} = 1,43.10^{-8} m^2/s^{-1}$ e $D_{xy} = 5,65.10^{-10} m^2/s^{-1}$ em diferentes instantes.

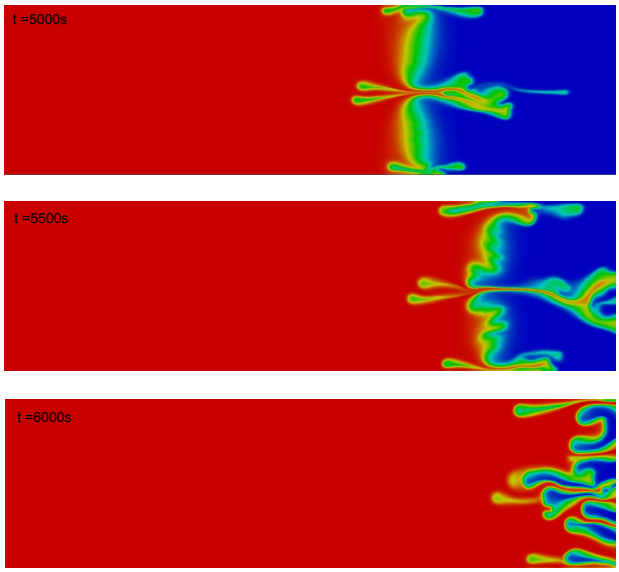

Figura 5.17: Tensor de difusão anisotrópico com os valores dos elementos da sua diagonal principal iguais a $D_{xx} = 1,43.10^{-8} m^2/s^{-1}$ e $D_{xy} = 5,65.10^{-10} m^2/s^{-1}$ em diferentes instantes.

número que controla a magnitude da dispersão e, a segunda manteve este último constante, enquanto os termos difusivos das direções xx, xy, yx e yy variaram com a velocidade intersticial, conforme mostram as Figuras 5.18 e 5.19.

Observa-se que nos dois casos, os valores para os coeficientes D_{xx}, D_{xy}, D_{yx}, D_{yy} são bem altos, principalmente o primeiro que chega a ser maior que a unidade, dominando a matriz difusão-dispersão, contribuindo para um efeito difusivo alto e

muito maior que o advectivo. Portanto, para qualquer um desses valores do número que controla a magnitude da dispersão, nas condições de operação usadas, não haverá o surgimento das instabilidades de *viscous fingering*. Logo, este modelo do termo difusivo dependente de velocidade com a variável ε, definido pelas Equações 4.11 e 4.12, foi descartado.

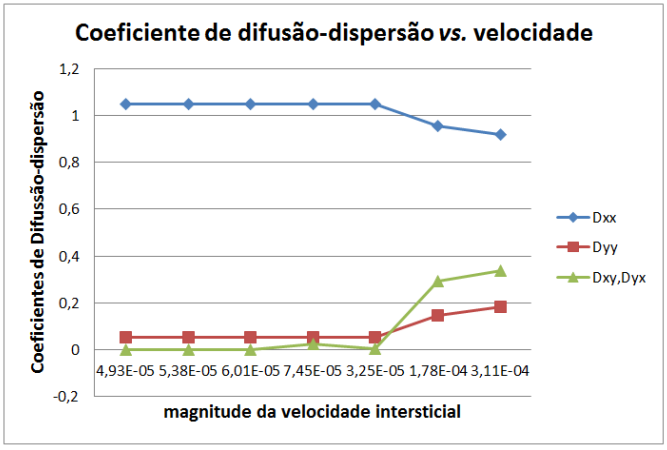

Figura 5.18: Gráfico que relaciona os coeficientes de difusão-dispersão com número que controla a magnitude da dispersão, ε, mantendo-se um valor constante e médio para a velocidade intersticial.

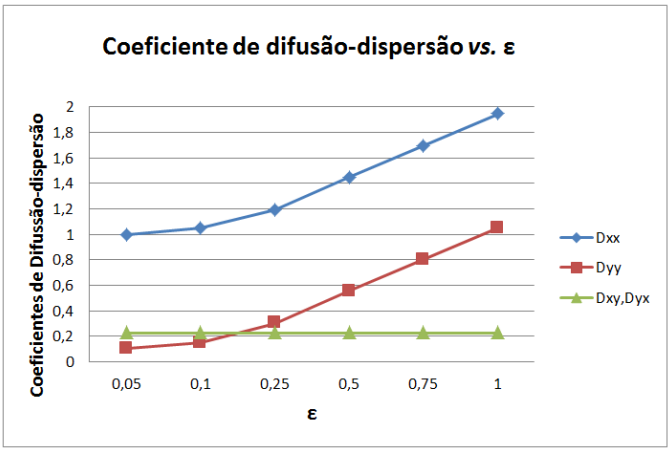

Figura 5.19: Gráfico que relaciona os coeficientes de difusão-dispersão com a velocidade intersticial mantendo-se um valor constante para o número que controla a magnitude da dispersão, ε.

O que foi feito em seguida, ainda tentanto manter a dependência com a velocidade, foi fixar os coeficientes de difusão paralelo e transversal, $D_{\|}$ e $D_{\perp}$, em valores como os já utilizados anteriormente na avaliação da anisotropia pura, isto é, $D_{\|} = 1,43.10^{-8} m^2/s^{-1}$ e e $D_{\perp} = 5,65.10^{-10} m^2/s^{-1}$. Os resultados obtidos apresentados nas Figuras 5.20 e 5.21, mostram que o início das instabilidades até a evolução das mesmas é, razoavelmente parecido com o caso anisotrópico puro, com caminhos

preferenciais no meio da geometria e na borda das paredes. De todo modo, estes não condizem com o predito por Sesini et al. (2010) e o efeito difusional parece implicar em menos *fingers* e em um escoamento um pouco mais uniforme que no caso advectivo, o que é bom, pois a existência das instabilidades traz prejuízos para indústria de petróleo.

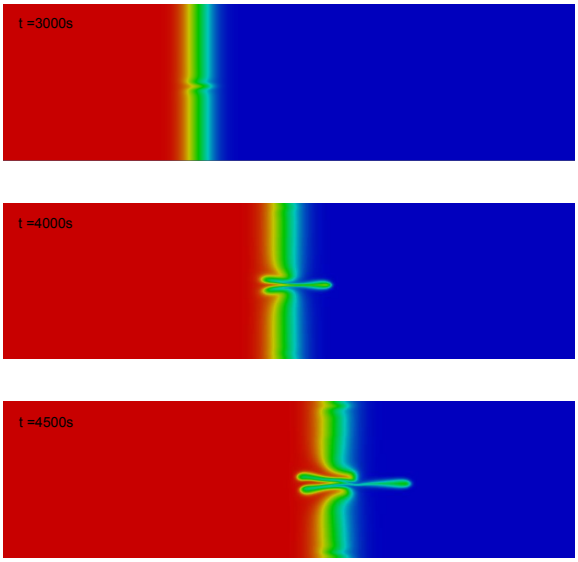

Figura 5.20: Tensor de difusão-dispersão anisotrópico dependente de velocidade em diferentes instantes.

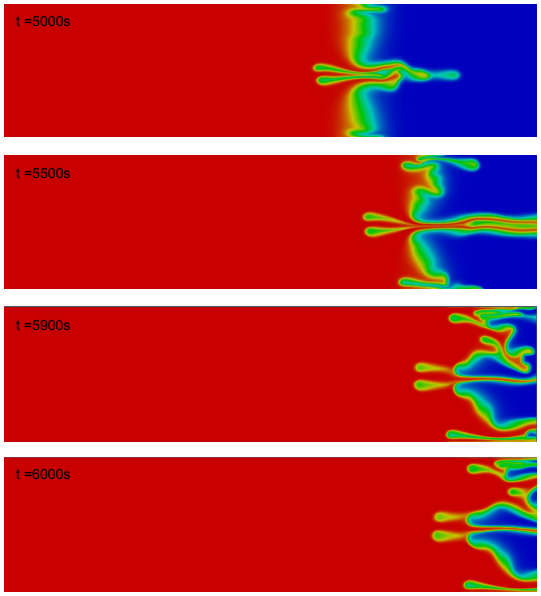

Figura 5.21: Tensor de difusão-dispersão anisotrópico dependente de velocidade em diferentes instantes.

Capítulo 6

Conclusões e Propostas para Trabalhos Futuros

6.1 Conclusões

As simulações do presente trabalho foram realizadas através do *software* livre OpenFOAM. A implementação da modelagem para a criação de um *solver* capaz de resolver as instabilidades de Saffman-Taylor teve de ser feita em partes. A primeira delas consistiu na criação de um *solver*, cujo algoritmo resolve escoamento em meio poroso com a Lei de Darcy (estacionário) e a Equação da advecção da concentração, sendo este, posteriormente, validado através de sua solução analítica.

Após isto, foi introduzido o efeito da viscosidade e foram implementados dois tipos de acoplamento com a modelagem completa advectiva do problema miscível: pressão-velocidade (pv) e pressão-velocidade-concentração (pvc). Os resultados foram similares e quatro mecanismos clássicos (*finger fading*, coalescência, blindagem e *tip-splitting*) observados e coerentes com os reportados pela literatura. No entanto, o acoplamento pvc mostrou-se superior ao pv, porque foi capaz de resolver o problema do *Viscous Fingering* de forma mais eficiente com alto número de Courant e para altas razões de mobilidade. Portanto, foi descartado o pv e todas as análises foram a partir do *solver* com acoplamento pvc.

Alguns métodos numéricos de baixa e alta ordem de acurácia também foram analisados. O *upwind* gerou uma instabilidade pequena, não compatível com os resultados obtidos anteriormente, pois é um método de baixa ordem e muito difusivo. Já o TVD (*Total Variation Diminishing*) e o *vanLeer*, métodos de alta ordem acurácia geraram *fingers* de comportamentos similares. Optou-se pelo TVD para as simulações por questões de custo computacional, pois o limitador de fluxo não é variável e ajustável como no *vanLeer*.

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) mostrou-se uma importante ferramenta na análise do *Viscous Fingering*, possibilitando o estudo da influência de variáveis operacionais como queda de pressão e razão de mobilidade. Nesse etapa, observou-se

que a queda de pressão influencia o deslocamento e interações do *Viscous Fingering*, isto é, quanto maior a pressão, mais rápido é o deslocamento como um todo, mas o molhamento não é uniforme. Em termos de razão de mobilidade, os mecanismos de interação observados foram similares, mas para o caso de maior razão de mobilidade (R = 5), houve um efeito na direção transversal bem significativo e não observado nos outros casos, além do aparecimento de mecanismos mais complexos de interação entre os *fingers*, como *fingering* diagonal, ramificação de um lado só, fusão de ramos e coalescência dupla condizentes com o que é reportado pela literatura. Além disso, conclui-se que quanto maior este parâmetro, mais difícil é a convergência da simulação e maior o custo computacional.

Por último, houve a inclusão do termo difusivo na equação de conservação de espécies, que também foi realizado em etapas e dividos em dois grupos: isotrópico e anisotrópico. No primeiro, o coeficiente de difusão foi considerado com um termo constante escalar e depois o termo difusivo passou a ser isotrópico constante. Nesses dois casos, só foram gerados *fingers* para baixos valores difusivos. No segundo grupo, o tensor difusão-dispersão foi considerado em dois casos diferentes como anisotrópico: constante e dependente de velocidade. Para o caso de anisotropia constante, os seus elementos tem valores compatíveis com os típicos da literatura e, o resultado obtido teve o comportamento parecido com o gerado pelo método *upwind* e não puderam ser observados os mecanismos de interação das instabilidades, com a região de preferência para estas no meio da geometria e nas paredes. Mas à medida que o escoamento flui, outras instabilidades vão surgindo entre a do meio e as das paredes, que são mais significativas, e os *fingers* ficam mais claros. Porém, isso só ocorre no final da simulação, com a célula quase toda preenchida, não sendo possível, portanto, identificar a evolução dos *fingers* e nem os mecanismos de interação não linear entre estes.

No caso do tensor difusão-dispersão dependente da velocidade, o modelo adotado não foi capaz de gerar *finger* para nenhum valor da variável controladora da magnitude da dispersão, ε, pois o termo difusivo tornava-se extremamente grande e dominava os efeitos viscosos. Adotou-se valores constantes para os coeficientes de difusão das direções xx e yy, mantendo a dependência com a velocidade, presentes nas outras matrizes, cujo o produto entre elas gerava o tensor difusivo que participava da equação de conservação de espécies. Os resultados foram semelhantes aos do caso anisotrópico constante, isto é, as instabilidades até a evolução das mesmas com caminhos preferenciais no meio da geometria e na borda das paredes. No entanto, isso distoa dos resultados que a literatura apresenta. Além disso, o efeito difusional relacionado a velocidade gera menos *fingers*, seu escoamento é mais uniforme que no caso advectivo puro e que nos outros casos com difusão. Porém, a ausência de instabilidades ou surgimento de poucas é bom para a indústria petroleira, visto que

o *Viscous Fingering* traz prejuízos econômico-operacionais para a mesma.

6.2 Propostas para Trabalhos Futuros

Considerando a complexidade do fenômeno do *Viscous Fingering* e pelos resultados das simulações realizadas no curto período de tempo disponível para a mesma, propõem-se as seguintes sugestões para os trabalhos futuros que vão aprimorar o desenvolvimento da implementação deste problema com abordagem CFD no OpenFOAM:

i) Variação do tipo de fluido, uso dos não-newtonianos e razões de mobilidade ainda maiores;

ii) Simulações em outras geometrias mais complexas, como a *Five-Spot* e tridimensionais;

iii) Avaliação de outras relações entre viscosidade e concentração, como por exemplo, a não-monotônica;

iv) Análise de outros modelos para o termo difusivo dependente de velocidade na modelagem macroscópica miscível;

v) Utilização de malhas adaptativas na região da frente do escoamento, interface;

vi) Implementação da modelagem macroscópica imiscível para simulações bifásicas entre água e óleo, por exemplo.

Referências Bibliográficas

ABREU, E. C. "*Modelagem e simulação computacional de escoamentos trifásicos em reservatórios de pertróleo heterogêneos.*" Tese (Doutorado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2007.

AGBALAKA, C.; DANDEKAR, A. Y.; PATIL, S. L.; KHATANIAR, S.; HEMSATH, J. R. "The effect of wettability on oil recovery: A review". In: *Society of Petroleum Engineers (SPE)*. Perth, Australia: [s.n.], 2008.

ALLEN, T.; ROBERTS, A. P. "*Production Operations: Well Completions, Workover, and Stimulation*". 4th edition. ed. Inc. Tulsa, Oklahoma, USA: Oil & Gas Consultants International, 1993. 1-26 p. (Production Operations: Well Completions, Workover, and Stimulation).

ANSYS, I. "*ANSYS CFX User's Guide*". Pennsylvania, 2009.

ANSYS, I. "*ANSYS FLUENT*". versão 12.1. Pennsylvania, 2009.

APETRO. 2013. Acesso em 10 de novembro de 2013. Disponível em: <http://www-.apetro.pt/index.php?option=com_content&task=view&id=89&Itemid=53>.

ARAUJO, M. V.; NETO, S. R. F. "Análise numérica do comportamento do óleo em reservatórios de petróleo quando se injeta água." *VIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Cientifica, Uberlândia, Minas Gerais.*, 2009.

AZAIEZ, J.; MOHAMAD, A. "Fingering instabilities in miscible displacement flows of non-newtonian fluids". *Journal of Porous Media*, v. 7, p. 29–40, 2004.

BARONI, M. P. M. A. "*Simulação, análise e caracterização computacional de padrões de fingering em deslocamento de fluidos em meios porosos*". Tese (Doutorado) — Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2009.

BAUTISTA, E. V. "*Análise Paramétrica da Simulação Composicional do Processo de Drenagem Gravitacional Assistida por Gás (GAGD).*" Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2010.

BEAR, J. "*Dynamics of Fluids in Porous Media*". Inc. 2o ed. Nova Iorque, EUA: American Elsevier Publishing Company, 1975.

BEAR, J.; BACHMAT, Y. "*Introduction to modeling of transport phenomena in porous media*". Holanda: Kluwer Academic Publishers, 1990.

BENTSEN, R. "A new approach to instability theory in porous media". *Society of Petroleum Engineers*, p. p.765–779, 1985.

BENTSEN, R. “The physical origin of interfacial coupling in two-phase flow through porous media.” *Transport Porous Media*, Vol. 44, p. p.109–122, 1987.

BOOTH, R. “*Miscible Flow Through Porous Media*”. Tese (Doutorado) — Linacre College University of Oxford, 2008.

BOTELHO, K. T. “Influência da viscosidade no contato Água-óleo na recuperação de reservatórios”. Monografia de Final de Curso, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis. 2004.

BRAILOVSKI, I.; BABCHIN, A.; FRANKEL, M.; SIVASHINSK, G. “Fingering instability in water-oil displacement”. *Transport in Porous Media*, 2006.

BRESSAN, L. W. “*Recuperação Avançada de Petróleo*”. 2008. Acesso em: 10 de novembro de 2013. Disponível em: <http://www.pucrs.br/cepac/download-/EOR_lia.pdf>.

BUSTAMANTE, F.; GUIMARÃES, J.; SEIXAS, V. “Fluidodinâmica computacional aplicada à simulação do processo de moldagem por transferência de resina”. Projeto Final de Curso, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro. 2012.

CHAM. “*Documentation for PHOENICS*”. Pennsylvania, 2011.

CHEN, C.-Y.; MEIBURG, E. “Miscible porous media displacements in the quarter five-spot configuration. Part 1. The homogeneous case”. *J. Fluid Mech.*, vol. 371, p. pp. 233–268, 1998.

CHEN, C.-Y.; MEIBURG, E. “Miscible porous media displacements in the quarter five-spot configuration. Part 2. Effect of heterogeneities”. *J. Fluid Mech.*, vol. 371, p. pp. 269–299, 1998.

CHEN, S.; DOOLEN, G. D. “Lattice Boltzmann method for fluid flows”. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, v. 30, p. 329–364, 1998.

CHRISTIE, M.; MUGGERIDGE, A.; BARLEY, J. “3d simulation of viscous fingering and wag schemes”. *Society of Petroleum Engineers*, 1991.

CHUOKE, R. l.; MEURS, P. von; AIME, J. M.; POEL, C. von der. “The instability of slow, immiscible, viscous liquid-liquid displacements in permeable media”. *PETROLEUM TRANSACTIONS, AIME*, v. 216, p. 188–194, 1959.

COUTINHO, A. L. G. A.; ALVES, J. L. D. “Finite element simulation of nonlinear viscous fingering in miscible displacements with anisotropic dispersion and nonmonotonic viscosity profiles”. *Computational Mechanics*, v. 23, p. 108–116, 1999.

CRAFT, B. C.; HAWKINS, M. F. “*Applied Petroleum Reservoir Engineering*”. 2nd. ed. EUA: Prentice-Hall, 1991.

CUNHA, A. de L. “*Recuperação Avançada Não-Isotérmica de Óleos Pesados em Reservatórios de Petróleo via Simulação Numérica.*” Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Campina Grande, 2010.

CURBELO, F. D. da S. "*Recuperação Avançada de Petróleo Utilizando Tensoativos*". Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2006.

DONALDSON, E.; CHILINGARIAN, V.; YEN, T.; SHARMA, M. "*Developments in Petroleum Sciences: Enhanced Oil Recovery*". Amsterdam: Elsevier B.V, 1989. 1-9 p.

DONG, B.; YAN, Y.; LI, W.; SONG, Y. "Lattice Boltzmann simulation of viscous fingering phenomenon of immiscible fluids displacement in a channel". *Computers & Fluids*, v. 39, p. 768–779, 2010.

DONG, B.; YAN, Y. Y.; LI, W. Z. "LBM simulation of viscous fingering phenomenon in immiscible displacement of two fluids in porous media". *Transport Porous Media*, 2011.

FERRER, M. P. de. "*Ynyección de Agua y Gas en Yacimentos Petrolíferos*". 2nd. ed. [S.l.]: Ediciones Astro Data S.A., 2007.

GADELHA, H. A. B. "*Efeitos da força de Coriolis na célula de Hele-Shaw girante: estabilidade linear e dinâmica não-linear*". Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2007.

GASPAR, H. C. ar de. "*Obtenção de Propriedades Petrofísicas a partir de Imagens Petrográficas*". [S.l.], 2003.

GHESMAT, K.; AZAIEZ, J. "Viscous fingering instability in porous media: Effect of anisotropic velocity-dependent dispersion tensor". *Transport in Porous Media*, v. 73, n. 3, p. 297–318, 2008.

GUAN, H.; BROUGHAM, D.; SORBIE, K.; PACKER, K. J. "Wettability effects in a sandstone reservoir and outcrop cores from nmr relaxation time distributions". *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 34, p. p. 35 – 54, 2002.

GUSTAFSSON, B.; VASIL'EV, A. "*Conformal and Potential Analysis in Hele-Shaw cells*". Basiléia, Suiça: [s.n.], 2004.

HILL, S. "Channelling in packed columns". *Chemical Engineering Science*, I, p. 247–253, 1952.

HOMSY, G. M. "Viscous fingering in porous media". *Annu. Rev. Fluid Mech.*, v. 19, p. 271–311, 1987.

IGLESIAS, R. "*Conceitos de Engenharia de Reservatório*". 2009. Acesso em: 25 de novembro de 2013. Disponível em: <http://www.pucrs.br/cepac/download-/Eng_Reservatorio_CCS.pdf>.

ISLAM, N.; AZAIEZ, J. "Fully implicit finite difference-pseudo spectral method for the simulation of high mobility-ratio miscible displacement". *Int. J. Num. Meth. Fluids*, v. 47, p. 161–183, 2005.

JHA, B.; FELGUEROSO, L. C.; JUANES, R. "Fluid mixing from viscous fingering". *Physical Review Letters*, 2011.

KUEPER, B. H.; FRIND, E. O. "An overview of immiscible fingering in porous media". *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 2, p. 95–110, 1988.

LAKE, L. W. "*Enhanced oil recovery*". [S.l.]: Englewood Cliffs, N.J. : Prentice Hall, 1989.

LEMAIRE, E.; LEVITZ, P.; DACCORD, G.; DAMME, H. V. "From viscous-fingering to viscoelastic fracturing in colloidal fluids." *Physical Review Letters*, v.67, 1991.

LINDNER, A.; BONN, D.; AMAR, M. B.; MEUNIER, J.; KELLAY, H. "Controlling viscous fingering". *Europhysics news*, p. 77–78, 1999.

MAITLAND, G. C. "Oil and gas production." *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, v.5, p. p. 301–311, 2000.

MARIANO, G. C. "*Estudo do Escoamento Imiscível Água/Óleo Mediante Experimentação em Célula de Hele-Shaw e Simulação CFD*". Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, 2008.

MELO, T. M. de. "*Implementação de modelos de transporte de massa multicomponente no OpenFOAM*". Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2013.

MOHAGHEGH, S.; AREFI, R.; AMERI, S.; AMINIAND, K.; NUTTER, R. "Petroleum reservoir characterization with the aid of artificial neural networks." *Journal of Petroleum Science and Engineering.*, v. 16, p. p. 263 – 274, 1996.

MOISSIS, D. "*Simulation of Viscous Fingering During Miscible Displacement in Nonuniform Porous Media*". Tese (Doutorado) — Rice University, 1988.

MONTALVO, M. E. D. A. "*Escoamento de Emulsões Óleo em Água através de Micro- capilares*". Dissertação (Mestrado) — PUC, 2008.

MOORTGAT, J.; FIROOZABADI, A. "Fickian diffusion in discrete-fractured media from chemical potential gradients and comparison to experiment". *Energy&Fuels*, 2013.

NASCIMENTO, J. T. "Uso de cfd na otimização das proporções geométricas de um hidrociclone para a separação de dispersões Óleo/Água provenientes de refinarias." Monografia de Final de Curso (Engenharia Química) – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro. 2008.

OLIVEIRA, R. M.; MEIBURG, E. "Miscible displacements in hele-shaw cells: three-dimensional navier–stokes simulations". *J. Fluid Mech.*, vol. 687, p. pp. 431–460, 2011.

OPENFOAM. "*Programmer's Guide*". versão 2.2.2. OpenCFD Limited, 2013.

OPENFOAM. "*User Guide*". versão 2.2.2. OpenCFD Limited, 2013.

PARANHOS, A.; VECHIA, D.; BELTRAME, M. "Capilaridade: Um fenômeno de superfície com aplicações cotidianas". In: *VIII Encontro Latino Americano de Pós-Graduação*. Universidade do Vale do Paraíba: [s.n.], 2007.

PARAVIEW. "*ParaView User's Guide.*" [S.l.], 2013.

PAULINO, L. C. "*Estudo de Sistemas Microemulsionados Utilizando Água do Mar na Recuperação Avançada de Petróleo*". Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2007.

PETRUCCI, E. G. R. "*Materiais de Construção.*" 12a edição. ed. [S.l.]: Editora Globo, 1998.

PGT, P. G. T. "*Geologia do Petróleo*". 2012. Acesso em 15 de dezembro de 2013. Disponível em: <http://www.slideshare.net/RicardoRochaRicardo/geologia-do-petroleo#>.

PORTAL PERFURADORES. 2013. Acesso em 10 de dezembro de 2013. Disponível em: <http://www.perfuradores.com.br/index.php?CAT=petroleo&SPG=oquee>.

POZRIKIDIS, C. "*Fluid Dynamics: Theory, Computation, and Numerical Simulation*". 2nd. ed. [S.l.]: Springer, 2009.

PWAGA, S.; ILUORE, C.; HUNDSETH Øystein; PERALES, F. J.; PERALES, F. J.; IDREES, M. U. "*Comparative Study of Different EOR Methods*". [S.l.], 2010.

ROSA, A.; XAVIER, D.; CARVALHO, R. "*Engenharia de Reservatórios de Petróleo*". Rio de Janeiro: Editora InterCiência, 2006.

RUIZ, C. P. A. "*Estudo Comparativo da Injeção de Água Usando Poços Verticais e Horizontais*". Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2012.

RUSCHE, H. "*Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*". Tese (Doutorado) — Imperial College of Science, Techno- logy and Medicine, Londres, Reino Unido, 2002.

SAFFMAN, P. G.; TAYLOR, S. G. "The penetration of a fluid into a porous medium or hele-shaw cell containing a more viscous liquid". *Proc. Roy. Soc. Lond.*, A.245, p. pg. 312 – 329, 1958.

SANTANA, A. P. S. C. "*Recuperação Suplementar - Apostila do curso de Tecnologia de Petróleo e Gás*". 2008.

SANTOS, P. Érico Sousa e; ARAUJO, R. B.; LIMA, A. M. de C.; SANTANA, A. P. S. C. de. "Métodos de recuperação secundária convencionais". In: *Cadernos de Graduação - Ciências Exatas e Tecnológicas.* Aracaju, Sergipe: ISSN 1980-1777, 2010. v. 12.

SARMA H., K. "Viscous fingering: One of the main factors behind poor flood efficiencies in petroleum reservoirs". *Powder Technology*, vol. 48, p. pag. 39–49, 1986.

SESINI, P. A.; SOUZA, D. A. F. d.; COUTINHO, A. L. G. A. "Finite element simulation of viscous fingering in miscible displacements at high mobility-ratios". *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 32, p. 292 – 299, 2010.

SILVA, L. F. L. R. "*Desenvolvimento de Metodologias para Simulação de Escoamentos Usando Código Livre*". Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2008.

SIQUEIRA JÚNIOR, S. L. O. de. "Desenvolvimento de solver para escoamento em meio poroso". Projeto Final de Curso, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro. 2012.

SWERNATH, S.; MALENGIER, B.; PUSHPAVANAM, S. "Effect of Korteweg stress on viscous fingering of solute plugs in a porous medium". *Chemical Engineering Science*, v. 65, p. 2284–2291, 2010.

TAN, C. T.; HOMSY, G. M. "Simulation of nonlinear viscous fingering in miscible displacement". *Phys. Fluids*, v. 31, p. 1330–1338, 1988.

THOMAS, J. E. "*Fundamentos de Engenharia de Petróleo*". Rio de Janeiro: Editora InterCiência, 2001.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. "*An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method*". Inglaterra: Longman Scientific & Technical, 1995.

WITT, A. D.; BERTHO, Y.; MARTIN, M. "Viscous fingering of miscible slices". *Physics of Fluids*, v. 17, 2005.

ZHANG, H. R.; SORBIE, K. S.; TSIBUKLIS, N. B. "Viscous fingering in five-spot experimental porous media: new experimental results and numerical simulation". *Chemical Engineering Science*, p. 37–54, 1996.

ZIMMERMAN, W.; HOMSY, G. "Nonlinear viscous fingering in miscible displacement with anisotropic dispersion". *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 3, p. 1859, 1991.

ZIMMERMAN, W. B.; HOMSY, G. M. "Viscous fingering in miscible displacements: Unification of effects of viscosity contrast , anisotropic dispersion, and velocity dependence of dispersion on nonlinear finger propagation". *Phys. Fluids A*, p. 2348–2359, 1992.

Apêndice A

Códigos Desenvolvidos

Código A.1: Arquivo principal do código de escoamento em meio poroso - Algoritmo 1.

```
#include "fvCFD.H"
#include "singlePhaseTransportModel.H"
#include "turbulenceModel.H"
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //
int main(int argc, char *argv[])
{
#   include "setRootCase.H"
#   include "createTime.H"
#   include "createMesh.H"
#   include "createFields.H"
#   include "initContinuityErrs.H"
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //

    Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;

    while (runTime.loop())
    {
        Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;

#       include "readPISOControls.H"
#       include "readTimeControls.H"
#       include "CourantNo.H"

        // Pressure-velocity PISO corrector
        {
            // --- PISO loop
            for (int corr=0; corr<nCorr; corr++)
            {
                volSymmTensorField rUA = Ac/fi;

                // Non-orthogonal pressure corrector loop
```

```
                for (int nonOrth=0; nonOrth<=nNonOrthCorr; nonOrth++)
                {
                    // Pressure corrector

                    fvScalarMatrix pEqn
                    (
                       fvm::laplacian(rUA, p)
                    );

                    pEqn.setReference(pRefCell, pRefValue);

                    if
                    (
                        corr == nCorr-1
                     && nonOrth == nNonOrthCorr
                    )
                    {
                        pEqn.solve(mesh.solver("pFinal"));
                    }
                    else
                    {
                        pEqn.solve();
                    }

                   if (nonOrth == nNonOrthCorr)
                    {
                        phi -= pEqn.flux();
                    }

                }

#               include "continuityErrs.H"

               U = (-rUA & fvc::grad(p));
               U.correctBoundaryConditions();


               phi = (linearInterpolate(U)  & mesh.Sf());
               adjustPhi(phi, U, p);



               }

            }

             solve
```

```
                (
                    fvm::ddt(C)
                  + fvm::div(phi, C)
                );

        runTime.write();

        Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
            << "  ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
            << nl << endl;
    }

    Info<< "End\n" << endl;

    return 0;
}
```

Código A.2: Arquivo principal do *solver* de acoplamento pressão-velocidade (pv).

```
#include "fvCFD.H"
#include "singlePhaseTransportModel.H"
#include "turbulenceModel.H"
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //
int main(int argc, char *argv[])
{
#   include "setRootCase.H"
#   include "createTime.H"
#   include "createMesh.H"
#   include "createFields.H"
#   include "initContinuityErrs.H"
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //

    Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;

    while (runTime.loop())
    {
        Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;

#       include "readPISOControls.H"
#       include "readTimeControls.H"
#       include "CourantNo.H"

// Update the Ac tensor with new mi

                Ac = K/mi;

        // Pressure-velocity PISO corrector
```

```
30          {
                // ——— PISO loop
32              for (int corr=0; corr<nCorr; corr++)
                {
34                   volSymmTensorField rUA = Ac/fi;

36                  // Non—orthogonal pressure corrector loop
                    for (int nonOrth=0; nonOrth<=nNonOrthCorr; nonOrth++)
38                  {
                        // Pressure corrector

                        fvScalarMatrix pEqn
42                      (
                           fvm::laplacian(rUA, p)
44                      );

46                      pEqn.setReference(pRefCell, pRefValue);

48                      if
                        (
50                          corr == nCorr—1
                         && nonOrth == nNonOrthCorr
52                      )
                        {
54                          pEqn.solve(mesh.solver("pFinal"));
                        }
56                      else
                        {
58                          pEqn.solve();
                        }

                       if (nonOrth == nNonOrthCorr)
62                      {
                            phi —= pEqn.flux();
64                      }

66                  }

68  #               include "continuityErrs.H"

70                U = (—rUA & fvc::grad(p));
                  U.correctBoundaryConditions();


74                phi = (linearInterpolate(U)  & mesh.Sf());
                  adjustPhi(phi, U, p);
```

```
            }
        }

                solve
                (
                    fvm::ddt(C)
                   + fvm::div(phi, C)
                );

                // Updating the effective viscosity
                 mi = exp(-R * C) *mi_dim;

        runTime.write();

        Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
            << "  ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
            << nl << endl;
    }

    Info<< "End\n" << endl;

    return 0;
}
```

Código A.3: Arquivo principal do *solver* de acoplamento pressão-velocidade-concentração (pvc).

```
#include "fvCFD.H"
#include "singlePhaseTransportModel.H"
#include "turbulenceModel.H"
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //
int main(int argc, char *argv[])
{
#   include "setRootCase.H"
#   include "createTime.H"
#   include "createMesh.H"
#   include "createFields.H"
#   include "initContinuityErrs.H"
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //

    Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;

    while (runTime.loop())
    {
        Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;
```

```
#       include "readPISOControls.H"
#       include "readTimeControls.H"
#       include "CourantNo.H"
       // Pressure-velocity PISO corrector
        {
            // --- PISO loop
            for (int corr=0; corr<nCorr; corr++)
            {
             // Update the Ac tensor with new mi

               Ac = K/mi;

                volSymmTensorField rUA = Ac/fi;

               // Non-orthogonal pressure corrector loop
               for (int nonOrth=0; nonOrth<=nNonOrthCorr; nonOrth++)
               {
                   // Pressure corrector

                   fvScalarMatrix pEqn
                   (
                      fvm::laplacian(rUA, p)
                   );

                   pEqn.setReference(pRefCell, pRefValue);

                   if
                   (
                       corr == nCorr-1
                    && nonOrth == nNonOrthCorr
                   )
                   {
                       pEqn.solve(mesh.solver("pFinal"));
                   }
                   else
                   {
                       pEqn.solve();
                   }

                  if (nonOrth == nNonOrthCorr)
                   {
                       phi -= pEqn.flux();
                   }

               }

#              include "continuityErrs.H"
```

```
                U = (-rUA & fvc::grad(p));
                U.correctBoundaryConditions();


                phi = (linearInterpolate(U)  & mesh.Sf());
                adjustPhi(phi, U, p);

                  solve
                  (
                      fvm::ddt(C)
                     + fvm::div(phi, C)
                  );

                  // Updating the effective viscosity
                   mi = exp(-R * C) *mi_dim;

            }
        }

        runTime.write();

        Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
            << "  ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
            << nl << endl;
    }

    Info<< "End\n" << endl;

    return 0;
}
```