

Simulação numérica da injeção de dióxido de carbono em reservatórios de metano incluindo acoplamento poço-reservatório[☆]

Numerical simulation of carbon dioxide injection into methane reservoirs including well-reservoir coupling

Yuri Brandão dos Santos Joia^{1,†}, Elisio da Costa Nhuta², Mayksoel Medeiros de Freitas³, Grazione de Souza^{3,†}, Helio Pedro Amaral Souto³

¹Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico - Nova Friburgo, RJ, Brasil

²Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico - Nova Friburgo, RJ, Brasil

³Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, Brasil

† **Autor correspondente:** gsouza@iprj.uerj.br

Resumo

A injeção de dióxido de carbono em reservatórios de gás natural é uma metodologia para a recuperação de hidrocarbonetos que tem a vantagem de contribuir com o sequestro de gás carbônico capturado a partir das ações humanas. Neste trabalho, estudou-se por meio de simulação numérica de reservatórios o escoamento bidimensional no plano xy em um reservatório de metano submetido à injeção de CO_2 . O método *Control Volume-Finite Difference* (CVFD) foi aplicado na discretização das equações governantes do escoamento, sendo utilizado o método de Picard como técnica de linearização das equações algébricas não lineares obtidas no processo de discretização. A solução numérica é obtida, em termos das incógnitas pressão da fase gás e fração molar de dióxido de carbono, pelo uso de uma decomposição de operadores e de um método iterativo de solução de sistemas lineares. Os resultados foram obtidos para as geometrias (i) *slab* e (ii) um quarto de *five-spot*, com a utilização de uma técnica de acoplamento poço-reservatório.

Palavras-chave

Simulação de reservatórios • reservatórios de metano • injeção de dióxido de carbono • acoplamento poço-reservatório

Abstract

The injection of carbon dioxide into natural gas reservoirs is a method for hydrocarbon recovery that has the advantage of contributing to the carbon dioxide sequestration, captured from human actions. In this work, numerical reservoir simulation was used to study two-dimensional flow in the xy plane in a methane reservoir subjected to CO_2 injection. The Control Volume-Finite Difference (CVFD) method was applied to discretize the flow governing equations, and the Picard method was used as a linearization technique for the non-linear algebraic equations obtained in the discretization process. The numerical solution is obtained, in terms of the unknowns gas phase pressure and carbon dioxide mole fraction, by using an operator splitting and an iterative method for solving linear systems. The results were obtained for (i) the slab geometry and (ii) the one quarter of a five-spot geometry, using a well-reservoir coupling technique.

[☆] Este artigo é uma versão estendida do trabalho apresentado no XXVII ENMC Encontro Nacional de Modelagem Computacional e XV ECTM Encontro de Ciência e Tecnologia de Materiais, ocorridos em Ilhéus – BA, de 1 a 4 de outubro de 2024.

Keywords

Numerical reservoir simulation • methane reservoirs • carbon dioxide injection • well-reservoir coupling

1 Introdução

Muitas pesquisas têm sido realizadas a fim de reduzir a quantidade de gás carbônico presente na atmosfera. A captura e o armazenamento de carbono (*Carbon Capture and Storage*, CCS), encontra-se neste contexto, sendo um dos conceitos mais promissores relacionados ao seu armazenamento denominado de recuperação aprimorada de gás (*Enhanced Gas Recovery*, EGR). A ideia do método é aumentar a produção de gás em reservatórios previamente depletados injetando o dióxido de carbono (CO₂) purificado das emissões de uma usina termoeletrica [1], por exemplo. Na Fig. 1 tem-se uma representação esquemática simplificada desse tipo de processo. Existem outros métodos de armazenamento, tais como a injeção de CO₂ em aquíferos salinos ou em reservatórios de óleo [2].

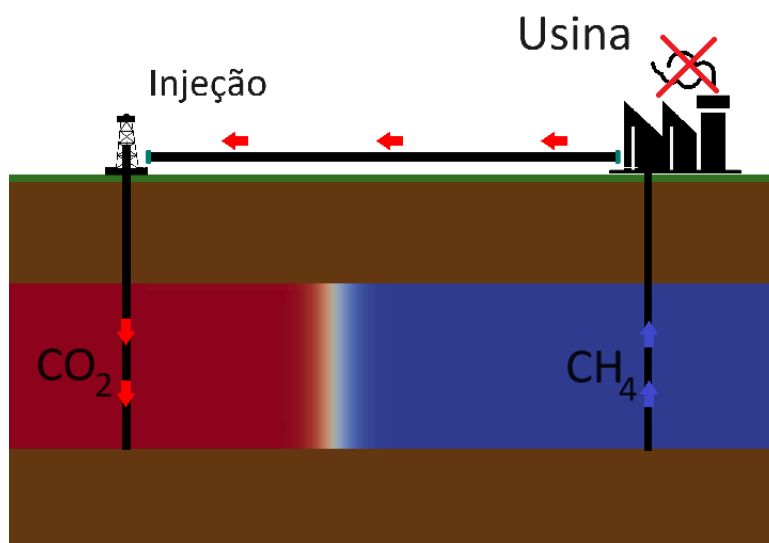


Figura 1: Injeção de CO₂ para a recuperação de CH₄.

Ao se injetar dióxido de carbono em um reservatório depletado ocorrerá um aumento de pressão, que pode inclusive chegar até o seu antigo nível original (antes da produção de fluido se iniciar na jazida). Este método tem diversas vantagens, como por exemplo, o fato de quantidades expressivas de CO₂ originário de combustíveis fósseis, previamente presentes abaixo da superfície, serem armazenados em reservatórios subterrâneos e deixarem de aumentar os níveis de gases de efeito estufa na atmosfera. Uma outra vantagem é que a pressão em reservatórios depletados é muito inferior ao do momento inicial, antes do início da produção. Assim, com essa readequação na pressão devida à injeção de dióxido de carbono são evitados deslizamentos de rocha e subsidências ou afundamentos de terra. Finalmente, o aumento na pressão dos reservatórios de gás pode gerar uma produção de metano e etano residuais em lugares que poderiam ser considerados praticamente depletados, quando do uso de tecnologias convencionais de extração de gás da jazida [1].

Do ponto de vista econômico, o gás natural tem aumentado a sua importância na matriz energética em âmbito global. A sua contribuição para a segurança energética, a flexibilidade na geração de eletricidade e o potencial de substituição de fontes mais poluentes são aspectos relevantes, sendo o metano (CH₄) o hidrocarboneto que compõe primariamente o gás natural. O CH₄ é, de fato, um gás do efeito estufa, de forma que a sua presença na atmosfera afeta a temperatura e o clima, sendo o metano emitido por diversas fontes, tanto naturais, quanto antropogênicas. Dentre as suas fontes de emissão que possuem origens antropogênicas estão aterros sanitários, sistemas de óleo e gás natural, atividades agrícolas, mineração de carvão, combustão estacionária (e.g., em usinas termoeletricas) e até mesmo em residências (como em fogões e em aquecedores). A combustão em aplicações móveis é a mais citada e diz respeito a veículos de pequeno, médio e grande porte. Além disso, tem-se como exemplo de liberação de metano o tratamento de resíduos em empresas de saneamento e em processos industriais [3].

O metano é o segundo gás do efeito estufa mais abundante, estando em primeiro lugar o dióxido de carbono. Nos últimos dois séculos, constatou-se que a quantidade de CH₄ na atmosfera mais do que dobrou. Ele possui um potencial de armazenar calor no planeta superior ao do CO₂, porém, o seu ciclo de permanência na atmosfera é de cerca de 12 anos, enquanto que o dióxido de carbono pode se manter na atmosfera por mais de 1000 anos. Parte das

emissões de dióxido de carbono serão absorvidas rapidamente pelos oceanos, no entanto, uma parcela expressiva se manterá na atmosfera por milhares de anos, devido ao processo extramente lento que faz com que o carbono seja transferido aos sedimentos oceânicos [4].

Dentre os países que mais emitem o metano estão a China, os Estados Unidos, a Rússia, a Índia, o Brasil, a Indonésia, a Nigéria e o México, responsáveis por quase a metade de toda a emissão de CH₄ na atmosfera que possui origem nas atividades humanas. As fontes de emissão principais variam em cada país. Na China, por exemplo, as maiores emissões vêm da mineração de carvão, enquanto que na Rússia a maior contribuição é proveniente de sistemas de óleo e gás natural. Já nos Estados Unidos as fontes principais são os aterros sanitários, os sistemas de óleo e gás e a fermentação entérica de animais ruminantes [3].

Apesar dos benefícios da recuperação do gás natural, ela não é tão largamente difundida por algumas razões. Geralmente, o metano é emitido como um subproduto de algum processo industrial. Por exemplo, nas minas de carvão, ele é retirado para o meio externo devido ao seu potencial explosivo. Historicamente, as companhias de mineração de carvão não o veem como uma fonte potencial de energia. Com frequência, principalmente em países em desenvolvimento, os responsáveis pelas emissões destes gases muitas vezes não estão familiarizados ou não conhecem os benefícios das tecnologias disponíveis para a recuperação de CH₄ e o seu potencial econômico. Em geral, nestes países os mercados de energia funcionam mal em projetos de captura e utilização do metano [3].

Sem dúvidas, a tecnologia de armazenamento de CO₂ em reservatórios subterrâneos vem sendo amplamente desenvolvida. Ela não só reduz os gases do efeito estufa na atmosfera, como, também, proporciona oportunidades para o aumento da recuperação de óleo e gás. Ressalta-se que o armazenamento subterrâneo de dióxido de carbono engloba diversas tecnologias, capazes de reduzir a sua presença na atmosfera. Dentre estas tecnologias, se pode incluir a recuperação avançada de óleo e gás via a injeção de CO₂, o armazenamento em jazidas não mineráveis de carvão e aquíferos salinos [5].

Cabe destacar que a relação de equilíbrio entre as mudanças climáticas e a produção de energia é, de fato, um desafio de interesse da comunidade internacional. Neste contexto, por exemplo, recentemente a capacidade de produção de carvão, tecnologia considerada ultrapassada devido aos riscos ambientais, vem sendo gradualmente eliminada pela China. Por volta de 2030, estima-se que o número de minas de carvão desativadas na China deve aumentar para 15.000, com as reservas de gás equivalentes a aproximadamente 500 bilhões de m³ e os recursos de carvão que restarão estarão na faixa de aproximadamente 42 bilhões de toneladas. Para que tais fontes sejam utilizadas, a tecnologia de recuperação de CH₄ em minas de carvão (*Enhanced Coalbed Methane*, ECBM) pode dispor do metano nelas presente, desta forma, realizando o sequestro de carbono e permitindo a posterior exploração e a reutilização dos recursos, em minas que perderiam seus benefícios econômicos por se encontrarem fechadas. Assim, essa tecnologia tem grande importância para a oferta de gás natural, reduzindo a poluição do ambiente, e favorecendo as atividades que objetivam a neutralidade de carbono [6].

No caso da injeção de dióxido de carbono em aquíferos salinos, os fluidos presentes são distintos no que diz respeito ao contraste entre as suas mobilidades. A utilização desse método pode ser classificada em quatro grupos característicos de tipos de captura: estrutural e estratigráfica; residual; de dissolução e mineral [2]. O método da captura estrutural e estratigráfica se refere ao processo de migração ascendente do CO₂ que migra, porém, fica inibido de acesso à superfície devido a uma camada sobrejacente de rocha impermeável ou pouco permeável. Nesses casos o risco de vazamento de CO₂ não está eliminado, pois na prática, operações de injeção poderiam acarretar em uma pressão que poderia gerar falhas e fraturas que levariam ao vazamento do CO₂ destes reservatórios [2].

Já no caso da captura residual, quando há o depósito de dióxido de carbono e ele se encontra na fase não molhante em muitas rochas sedimentares, faz-se com que a salmoura, fase molhante, tenda a absorver a pluma de CO₂ quando a injeção é finalizada. Assim, ele é deixado como bolhas e volumes acumulados imóveis desconectados [2]. Por outro lado, a captura de dissolução se dá pelo contato entre o dióxido de carbono e a salmoura insaturada, que fica mais densa e tende a afundar ao invés de emergir. Com isso o CO₂ fica menos suscetível a vazamentos. Finalmente, na captura mineral o CO₂ dissolvido reage com os minerais da rocha reservatório, podendo ser combinado com a água líquida e formando o ácido carbônico, H₂CO₃, levando à redução do pH e levando à uma precipitação de minerais na rocha [2].

Na discussão das estratégias de injeção de CO₂, a simulação numérica de reservatórios é uma ferramenta de extrema valia, que pode evitar que despesas desnecessárias sejam realizadas em jazidas não lucrativas ou conduzir a um melhor aproveitamento de tecnologias de extração e do potencial econômico de um campo. Entende-se que a simulação de reservatórios combina a física, a matemática, a engenharia de reservatórios e a programação computacional a fim de desenvolver ferramentas para a predição do desempenho de reservatórios de hidrocarbonetos, sob diversas condições de operação. De fato, além de envolverem capitais investidos de centenas de milhões de dólares, existem diversos riscos nas atividades de recuperação de hidrocarbonetos, tais como a complexidade dos reservatórios, devido as propriedades de rocha heterogêneas e anisotrópicas, as variações regionais de propriedades de fluidos e a aplicação de métodos preditivos limitados, inapropriados para certas aplicações [7]. Tem-se um contexto, então, no qual a injeção de CO₂ para a recuperação de gás natural apresenta-se como uma alternativa viável para a obtenção de uma fonte de energia ao mesmo tempo que contribui para a redução de dióxido de carbono na atmosfera, sendo a simulação de reservatórios uma ferramenta fundamental no planejamento desta aplicação [8, 9].

2 Modelagem físico-matemática do escoamento bicomponente

No que segue é apresentada a modelagem físico-matemática do escoamento monofásico, bicomponente, isotérmico e bidimensional em um meio poroso, que leva à obtenção das equações diferenciais parciais em termos da pressão da fase gás e da fração molar de CO₂.

2.1 Componentes químicos

Considerando uma mistura que contenha N_c componentes químicos, o número total de mols, n , é dado por [10]

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

onde n_m é o número de mols do componente m .

A fração molar da mistura é definida como

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

A partir das Eqs. (1) e (2) tem-se

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

A massa específica molar de cada componente é dada por

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

onde v_m é o volume molar do m -ésimo componente considerado.

Para uma mistura ideal, a massa específica molar da mistura pode ser escrita como

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

e a massa molar da mistura é dada por

$$W = \sum_{m=1}^{N_c} x_m W_m, \quad (3)$$

onde W_m é a massa molar do m -ésimo componente [11].

A massa específica molar é função da pressão, da temperatura e das frações molares de cada componente e pode ser determinada a partir do uso de equações de estado cúbicas [12, 13], como por exemplo, a equação de Peng-Robinson [14].

2.2 Equação de estado de Peng-Robinson

As equações de estado (*Equation of State*, EoS), são amplamente empregadas no cálculo de propriedades físicas no contexto das simulações de reservatórios. A equação de estado de Peng-Robinson é um exemplo de EoS e será utilizada para o cálculo do fator de compressibilidade, Z . Em termos da pressão p explícita, a mesma é apresentada na forma [11]:

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b) + b(v-b)}, \quad (4)$$

onde os parâmetros T e v são, nesta ordem, a temperatura e o volume molar do fluido e R é a constante universal dos gases. Para substâncias puras, os fatores a e b são funções das propriedades críticas das substâncias.

Dada uma mistura de N_c componentes, para cada componente m , $m = 1, 2, \dots, N_c$, os parâmetros a e b são [10]:

$$a_m = 0,45724\alpha_m \frac{R^2 T_{c_m}^2}{P_{c_m}}, \quad (5a)$$

$$b_m = 0,077796 \frac{RT_{c_m}}{P_{c_m}}, \quad (5b)$$

onde T_{c_m} e p_{c_m} são, respectivamente, a temperatura e a pressão críticas do componente m .

O parâmetro α_m é função de λ_m , o qual depende do fator acêntrico ω_m , que pode ser entendido como o desvio do formato das moléculas com relação ao de uma esfera [15].

Os parâmetros α_m e λ_m são determinados a partir de [10],

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

e

$$\lambda_m = \begin{cases} 0,37464 + 1,54226\omega_m - 0,26992\omega_m^2 & \text{se } \omega_m < 0,5 \\ 0,3796 + 1,485\omega_m - 0,1644\omega_m^2 + 0,01667\omega_m^3 & \text{se } \omega_m > 0,5. \end{cases}$$

Para uma mistura com N_c componentes, é possível utilizar a seguinte regra de mistura[16]:

$$a = \sum_{m=1}^{N_c} \sum_{v=1}^{N_c} x_m x_v (1 - k_{mv}) \sqrt{a_m a_v}, \quad (6a)$$

$$b = \sum_{m=1}^{N_c} x_m b_m, \quad (6b)$$

onde x_m e x_v são as frações molares dos componentes m e v , nesta ordem, a_m e b_m são os parâmetros da equação de estado para a substância pura m , dados pelas das Eqs. (5), e k_{mv} é um parâmetro de interação binária entre os componentes m e v , função da diferença dos tamanhos moleculares dos componentes [12].

O fator de compressibilidade, Z , é dado por

$$Z = \frac{pv}{RT}. \quad (7)$$

Substituindo-se a Eq. (7) na Eq. (4) é possível obter a equação cúbica

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 2B - 3B^2)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0, \quad (8)$$

onde os parâmetros A e B desta equação, escrita como um polinômio cúbico em Z , são [10]

$$A = \frac{ap}{R^2 T^2}, \quad (9a)$$

$$B = \frac{bp}{RT}. \quad (9b)$$

A equação cúbica possui três raízes. Quando somente uma delas é real, essa é a selecionada. Quando as três são reais, $Z_1 > Z_2 > Z_3$, Z_1 é a escolhida em se tratando da fase vapor. No caso em que a fase é líquida, a menor raiz positiva é a adotada [10], i.e., Z_1 , quando $Z_2 \leq 0$; $Z_2, Z_2 > 0$ e $Z_3 \leq 0$; e Z_3 para $Z_3 > 0$. Neste trabalho a metodologia de solução da equação cúbica foi o método de Cardano [17].

Uma vez calculado o fator de compressibilidade Z , é possível determinar a massa específica molar a partir de [15]

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

2.3 Viscosidade da fase gás

No cálculo da viscosidade da fase gás utiliza-se a correlação de Lohrenz [18], de larga aplicação em simuladores de reservatórios de petróleo. Para cada componente m , $m = 1, 2, \dots, N_c$, são necessárias os seguintes parâmetros [10]: a pressão crítica, p_{c_m} ; a temperatura crítica, T_{c_m} ; o volume molar crítico, v_{c_m} e a massa molar, W_m .

A temperatura reduzida para o componente m , $m = 1, 2, \dots, N_c$, é dada por

$$T_{r_m} = \frac{T}{T_{c_m}}.$$

No caso do cálculo da viscosidade do componente m a baixa pressão, μ_m^* (em cp), utiliza-se

$$\mu_m^* = \begin{cases} 34 \times 10^{-5} T_{r_m}^{0,94} / \eta_m^* & \text{se } T_{r_m} < 1,5 \\ 17,78 \times 10^{-5} (4,58 T_{r_m} - 1,67)^{5/8} / \eta_m^* & \text{se } T_{r_m} \geq 1,5, \end{cases}$$

onde as unidades estão em Kelvin para temperatura e atm para pressão, e η_m^* é dado por

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

Para a viscosidade da mistura a baixa pressão, μ^* (cp), faz-se

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

Finalmente, o cálculo da viscosidade da mistura, μ (em cp), é dado por

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

onde, no cálculo da massa específica molar reduzida, ξ_r , tem-se,

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

sendo

$$\xi_c = \frac{1}{\sum_{m=1}^{N_c} x_m v_{c_m}}$$

e

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

2.4 Equações de balanço

No processo de modelagem do escoamento bicomponente da fase gás em meios porosos, para o caso de injeção de CO₂ em um reservatório de CH₄, considera-se aqui a conservação da massa da fase gás apresentada na forma [10]

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \xi) = -\nabla \cdot (\xi \mathbf{u}) + q \quad (10)$$

onde ϕ é a porosidade, \mathbf{u} é a velocidade aparente e q é um termo fonte/sorvedouro.

Para escoamentos em meios porosos, tipicamente o princípio da conservação da quantidade de movimento pode ser expresso pela lei de Darcy clássica dada, desconsiderando os efeitos gravitacionais, por [19]

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla p, \quad (11)$$

onde \mathbf{k} é o tensor de permeabilidade absoluta (considerado diagonal neste trabalho). Na Eq. (11) foi desconsiderada a influência da gravidade pois almeja-se a modelagem do escoamento bidimensional no plano xy .

Por outro lado, a conservação da massa para cada componente m que compõe a fase gás pode ser expressa como [10]

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi x_m \xi) = -\nabla \cdot (x_m \xi \mathbf{u} - \phi \xi \mathbf{D}_m \nabla x_m) + q_m, \quad m = 1, 2, \dots, N_c, \quad (12)$$

onde q_m é o termo fonte/sorvedouro de cada componente e \mathbf{D}_m é o tensor efetivo de dispersão do m -ésimo componente na mistura gasosa, definido como

$$\mathbf{D}_m(\mathbf{u}) = \tau d_m \mathbf{I} + d_{\perp} |\mathbf{u}| \mathbf{I} + (d_{\parallel} - d_{\perp}) \frac{1}{|\mathbf{u}|} \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}, \quad m = 1, 2, \dots, N_c, \quad (13)$$

sendo τ a tortuosidade, d_m o coeficiente de difusão molecular, d_{\perp} e d_{\parallel} , nesta ordem, os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal, \mathbf{I} o tensor identidade e $\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}$ é o produto diádico [1].

A partir da Eq. (10), aplicando-se as regras do produto e da cadeia, é possível obter

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \xi) = \phi \left(\frac{\partial \xi}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{m=1}^{N_c} \frac{\partial \xi}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial t} \right) + \xi \frac{d\phi}{dp} \frac{\partial p}{\partial t} = \left(\phi \frac{\partial \xi}{\partial p} + \xi \frac{d\phi}{dp} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \phi \sum_{m=1}^{N_c} \frac{\partial \xi}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial t} \quad (14)$$

e, assim, define-se o coeficiente $c(p)$ como

$$c(p) = \phi \frac{\partial \xi}{\partial p} + \xi \frac{d\phi}{dp}, \quad (15)$$

e, também, a variável ψ

$$\psi = \phi \sum_{m=1}^{N_c} \frac{\partial \xi}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial t}. \tag{16}$$

Considera-se uma rocha de compressibilidade pequena e constante. Assim, ϕ é calculado utilizando-se [7],

$$\phi = \phi_0 [c_\phi (p - p_0)], \tag{17}$$

onde ϕ_0 é a porosidade medida na pressão de referência p_0 e c_ϕ é a compressibilidade da rocha. Dessa forma, tem-se que

$$\frac{d\phi}{dp} = \phi_0 c_\phi.$$

A partir das Eqs.(14)-(16) e substituindo a Eq.(11), reescreve-se a Eq. (10), conduzindo a

$$c(p) \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{\xi}{\mu} \mathbf{k} \nabla p \right) - \psi + q. \tag{18}$$

As Eqs. (11), (12) e (18) são utilizadas para se determinar os campos de pressão da fase gás e de fração molar para o componente injetado, CO₂, sendo considerados apenas dois componentes, pois a jazida inicialmente contém somente CH₄. As condições iniciais são dadas em termos da pressão da fase gás e da fração molar de CO₂ no reservatório antes da injeção/produção de fluidos. Por outro lado, as condições de contorno são do tipo fluxo nulo [7].

3 Metodologia de solução numérica

As Eqs. (12) e (18) foram discretizadas, assim como o domínio de solução de forma quadrada, utilizando o método *Control Volume-Finite Difference* (CVFD) [7]. Na Fig. 2 há uma visão esquemática da malha de blocos centrados empregada.

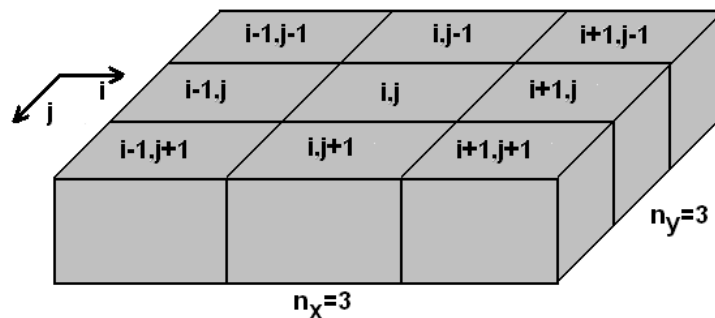


Figura 2: Modelo de malha computacional utilizado, para $n_x = n_y = 3$.

Cada um dos blocos na malha computacional possui comprimentos Δx_i e Δy_j , respectivamente nas direções x e y de forma que

$$\sum_{i=1}^{n_x} \Delta x_i = L_x \tag{19}$$

e

$$\sum_{j=1}^{n_y} \Delta y_j = L_y. \tag{20}$$

Para o bloco i, j , a posição central está em x_i, y_j . As fronteiras dos blocos são indicadas por $x_{i-1/2}$ e $x_{i+1/2}$ na direção x e $y_{j-1/2}$ e $y_{j+1/2}$ na direção y . As pressões e as frações molares são definidas nos centros dos blocos, utilizando-se a nomenclatura $p_{i,j}^n = p(x_i, y_j, t^n)$ e $x_{m,i,j}^n = x_m(x_i, y_j, t^n)$ para a pressão e a fração molar, respectivamente, no bloco i, j no nível temporal discreto n , para o qual as variáveis primitivas são conhecidas no processo de solução para determinado tempo. Analogamente, $p_{i,j}^{n+1} = p(x_i, y_j, t^{n+1})$ e $x_{m,i,j}^{n+1} = x_m(x_i, y_j, t^{n+1})$ para a pressão e a fração molar, respectivamente, no nível temporal discreto $n + 1$, para o qual a solução será determinada.

Tendo-se em vista o escoamento bidimensional no plano xy cartesiano as Eqs. (18) e (12) podem ser escritas, respectivamente, como:

$$c(p) \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\xi}{\mu} k_x \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\xi}{\mu} k_y \frac{\partial p}{\partial y} \right) - \psi + q \quad (21)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi \xi x_m) = & -\frac{\partial}{\partial x} (\xi u_x x_m) - \frac{\partial}{\partial y} (\xi u_y x_m) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi \xi d_{11} \frac{\partial x_m}{\partial x} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi \xi d_{22} \frac{\partial x_m}{\partial y} \right) + q_m, \quad m = 1, 2, \dots, N_c. \end{aligned} \quad (22)$$

onde k_x e k_y são, respectivamente, as permeabilidades nas direções x e y , u_x e u_y são as componentes do vetor velocidade \mathbf{u} e d_{11} e d_{22} são as componentes da diagonal principal do tensor $\mathbf{D}_m(\mathbf{u})$.

Considerando os termos difusivos das Eqs. (21) e (22) na direção x , tem-se, então, a forma geral

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \tau}{\partial x} \right) \right]_{i,j} \approx \frac{1}{\Delta x_i} \left[\left(\Psi^* \frac{\partial \tau}{\partial x} \right)_{i+1/2,j} - \left(\Psi^* \frac{\partial \tau}{\partial x} \right)_{i-1/2,j} \right],$$

onde foi utilizada uma aproximação do tipo diferenças centradas [7] na discretização da derivada. No cálculo da pressão tem-se,

$$\Psi^* = \frac{\xi k_x}{\mu} \quad \text{e} \quad \tau = p,$$

enquanto que para a fração molar, tem-se,

$$\Psi^* = \phi \xi d_{11} \quad \text{e} \quad \tau = x_m.$$

Aplicando novamente um esquema de diferenças centradas é possível aproximar as derivadas de τ em relação a x na forma

$$\left(\frac{\partial \tau}{\partial x} \right)_{i-1/2,j} \approx \frac{\tau_{i,j} - \tau_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1/2}} \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial \tau}{\partial x} \right)_{i+1/2,j} \approx \frac{\tau_{i+1,j} - \tau_{i,j}}{\Delta x_{i+1/2}},$$

e, assim,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \tau}{\partial x} \right)_{i,j} \Delta V_{i,j} = \Psi_{i+1/2,j} (\tau_{i+1,j} - \tau_{i,j}) - \Psi_{i-1/2,j} (\tau_{i,j} - \tau_{i-1,j}) \quad (23)$$

onde

$$\Psi_{i\pm 1/2,j} = \frac{\Psi^* \Delta y_j}{\Delta x_{i\pm 1/2}} \quad \text{e} \quad \Delta V_{i,j} = \Delta x_i \Delta y_j.$$

Resultados similares podem ser apresentados para a direção y .

Substituindo $\Psi^* = \frac{\xi k_x}{\mu}$ e $\tau = p$ na Eq. (23),

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\xi k_x}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \right)_{i,j} \Delta V_{i,j} = T_{x_{i-1/2,j}} p_{i-1,j} - (T_{x_{i-1/2,j}} + T_{x_{i+1/2,j}}) p_{i,j} + T_{x_{i+1/2,j}} p_{i+1,j}, \quad (24)$$

sendo a transmissibilidade na direção x definida como

$$T_{x_{i\pm 1/2,j}} = \left[\frac{\xi k_x}{\mu \Delta x} \right]_{i\pm 1/2,j} \Delta y_j = G_{x_{i\pm 1/2,j}} \left[\frac{\xi}{\mu} \right]_{i\pm 1/2,j},$$

com cálculos similares para a direção y .

Na Eq. (21), aproximando-se a derivada temporal por uma diferença recuada, obtém-se [7]

$$\left[\frac{\partial p}{\partial t} \right]_i^{n+1} \approx \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j}^n}{\Delta t} \quad (25)$$

onde Δt é o passo de tempo (diferença entre os tempos t^{n+1} e t^n).

Finalmente, substituindo as aproximações obtidas na Eq. (21), obtém-se, para uma formulação totalmente implícita no tempo para a determinação da pressão da fase gás,

$$\begin{aligned} & -T_{y_{i,j-1/2}}^{n+1} p_{i,j-1}^{n+1} - T_{x_{i-1/2,j}}^{n+1} p_{i-1,j}^{n+1} + (T_{y_{i,j-1/2}}^{n+1} + T_{x_{i-1/2,j}}^{n+1} + T_{x_{i+1/2,j}}^{n+1} + T_{y_{i,j+1/2}}^{n+1} + \Gamma_{i,j}^{n+1}) p_{i,j}^{n+1} \\ & - T_{x_{i+1/2,j}}^{n+1} p_{i+1,j}^{n+1} - T_{y_{i,j+1/2}}^{n+1} p_{i,j+1}^{n+1} = \Gamma_{i,j}^{n+1} p_{i,j}^n - \psi_{i,j}^{n+1} \Delta V_{i,j} + q_{i,j}^{n+1} \Delta V_{i,j}, \end{aligned} \quad (26)$$

onde

$$\Gamma_{i,j}^{n+1} = \frac{c_{i,j}^{n+1}(p)}{\Delta t} \Delta V_{i,j}. \quad (27)$$

No caso da Eq. (22), procedimentos análogos são adotados [20], no entanto, dois pontos devem ser destacados. Primeiramente, a Eq. (11), na sua forma discretizada, será usada para se determinar as velocidades presentes na Eq. (22), a partir de valores de pressão obtidos na solução da Eq. (26), utilizando-se uma estratégia de decomposição de operadores [17]. Em segundo lugar, deve ser destacado que os termos advectivos na Eq. (22) são aproximados via *upwind* de primeira ordem [7].

Substituindo $\Psi^* = \phi \xi d_{11}$ e $\tau = x_m$ na Eq. (23),

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\phi \xi d_{11} \frac{\partial x_m}{\partial x} \right)_{i,j} \Delta V_{i,j} = H_{x_{i-1/2,j}} x_{m_{i-1,j}} - \left(H_{x_{i-1/2,j}} + H_{x_{i+1/2,j}} \right) x_{m_{i,j}} + H_{x_{i+1/2,j}} x_{m_{i+1,j}} \quad (28)$$

onde

$$H_{x_{i\pm 1/2,j}} = \frac{(\phi \xi d_{11})_{i\pm 1/2,j}}{\Delta x_{i\pm 1/2}} \Delta y_j.$$

Um resultado similar pode ser obtido para a direção *y*.

Na Eq. (22), o termo advectivo na direção *x* é aproximado usando

$$-\frac{\partial}{\partial x} (\xi u_x x_m)_{i,j} = \frac{1}{\Delta x_i} \left[-(\xi u_x)_{i+1/2,j} x_{m_{i+1/2,j}} + (\xi u_x)_{i-1/2,j} x_{m_{i-1/2,j}} \right] \quad (29)$$

onde se utiliza uma aproximação do tipo *upwind* de primeira ordem [7] para avaliar

$$x_{m_{i+1/2,j}} = \alpha_{x_{i+1/2,j}} x_{m_{i,j}} + (1 - \alpha_{x_{i+1/2,j}}) x_{m_{i+1,j}} \quad (30)$$

sendo

$$\alpha_{x_{i+1/2,j}} = \begin{cases} 1, & \text{se } u_{x_{i+1/2,j}} \geq 0, \\ 0, & \text{se } u_{x_{i+1/2,j}} < 0, \end{cases}$$

e, similarmente, é possível realizar o mesmo desenvolvimento para o termo $x_{m_{i-1/2,j}}$.

De posse das aproximações para o termo advectivo faz-se

$$-\frac{\partial}{\partial x} (\xi u_x x_m)_{i,j} \Delta V_{i,j} = M_{x_{i-1/2,j}} x_{m_{i-1,j}} - \left(N_{x_{i-1/2,j}} + M_{x_{i+1/2,j}} \right) x_{m_{i,j}} + N_{x_{i+1/2,j}} x_{m_{i+1,j}}, \quad (31)$$

onde

$$M_{x_{i\pm 1/2,j}} = (\xi u_x)_{i\pm 1/2,j} \alpha_{x_{i\pm 1/2,j}} \Delta y_j \quad \text{e} \quad N_{x_{i\pm 1/2,j}} = (\xi u_x)_{i\pm 1/2,j} (\alpha_{x_{i\pm 1/2,j}} - 1) \Delta y_j.$$

O termo advectivo na direção *y* pode ser aproximado analogamente [20].

Aproximando a derivada no tempo na Eq. (22) utilizando uma aproximação por diferença recuada

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \xi x_m)_{i,j}^{n+1} \approx \frac{(\phi \xi)_{i,j}^{n+1} x_{m_{i,j}}^{n+1} - (\phi \xi)_{i,j}^n x_{m_{i,j}}^n}{\Delta t}. \quad (32)$$

Assim, é possível obter a equação discreta para a fração molar substituindo-se as aproximações adotadas, conduzindo à uma formulação totalmente implícita no tempo,

$$\begin{aligned} & - \left(M_{y_{i,j-1/2}}^{n+1} + H_{y_{i,j-1/2}}^{n+1} \right) x_{m_{i,j-1}}^{n+1} - \left(M_{x_{i-1/2,j}}^{n+1} + H_{x_{i-1/2,j}}^{n+1} \right) x_{m_{i-1,j}}^{n+1} \\ & + \left(N_{y_{i,j-1/2}}^{n+1} + N_{x_{i-1/2,j}}^{n+1} + M_{x_{i+1/2,j}}^{n+1} + M_{y_{i,j+1/2}}^{n+1} + H_{y_{i,j-1/2}}^{n+1} + H_{x_{i-1/2,j}}^{n+1} + H_{x_{i+1/2,j}}^{n+1} + H_{y_{i,j+1/2}}^{n+1} + \Lambda_{i,j}^{n+1} \right) x_{m_{i,j}}^{n+1} \\ & - \left(N_{x_{i+1/2,j}}^{n+1} + H_{x_{i+1/2,j}}^{n+1} \right) x_{m_{i+1,j}}^{n+1} - \left(N_{y_{i,j+1/2}}^{n+1} + H_{y_{i,j+1/2}}^{n+1} \right) x_{m_{i,j+1}}^{n+1} = \Lambda_{i,j}^n x_{m_{i,j}}^n + q_{m_{i,j}}^{n+1} \Delta V_{i,j} \end{aligned} \quad (33)$$

onde

$$\Lambda_{i,j}^{n+1} = \frac{(\phi \xi)_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} \Delta V_{i,j} \quad \text{e} \quad \Lambda_{i,j}^n = \frac{(\phi \xi)_{i,j}^n}{\Delta t} \Delta V_{i,j}.$$

No cálculo de propriedades avaliadas nas faces dos blocos na malha computacional se faz necessário utilizar diferentes técnicas dependendo do termo avaliado. Para a permeabilidade e a porosidade se utiliza uma média harmônica. Por outro lado, para a massa específica molar e a viscosidade utiliza-se uma média ponderada com relação à dimensão dos espaçamentos da malha computacional.

O sistema de equações discretas para a pressão da fase gás e a fração molar de CO₂ é não linear. Neste trabalho, o método de Picard foi adotado para a linearização [21]. Desta forma, os coeficientes em um nível iterativo v são usados para se obter a solução para as incógnitas primitivas no nível iterativo $v + 1$, obtendo-se, respectivamente, para as equações para a pressão do gás e para a fração molar de CO₂,

$$\begin{aligned} & -T_{y_{i,j-1/2}}^{n+1,v} p_{i,j-1}^{n+1,v+1} - T_{x_{i-1/2,j}}^{n+1,v} p_{i-1,j}^{n+1,v+1} + \left(T_{y_{i,j-1/2}}^{n+1,v} + T_{x_{i-1/2,j}}^{n+1,v} + T_{x_{i+1/2,j}}^{n+1,v} + T_{y_{i,j+1/2}}^{n+1,v} + \Gamma_{i,j}^{n+1,v} \right) p_{i,j}^{n+1,v+1} \\ & - T_{x_{i+1/2,j}}^{n+1,v} p_{i+1,j}^{n+1,v+1} - T_{y_{i,j+1/2}}^{n+1,v} p_{i,j+1}^{n+1,v+1} = \Gamma_{i,j}^{n+1,v} p_{i,j}^n - \psi_{i,j}^{n+1,v} \Delta V_{i,j} + q_{i,j}^{n+1,v} \Delta V_{i,j} \end{aligned} \quad (34)$$

e

$$\begin{aligned} & - \left(M_{y_{i,j-1/2}}^{n+1,v} + H_{y_{i,j-1/2}}^{n+1,v} \right) x_{m_{i,j-1}}^{n+1,v+1} - \left(M_{x_{i-1/2,j}}^{n+1,v} + H_{x_{i-1/2,j}}^{n+1,v} \right) x_{m_{i-1,j}}^{n+1,v+1} \\ & + \left(N_{y_{i,j-1/2}}^{n+1,v} + N_{x_{i-1/2,j}}^{n+1,v} + M_{x_{i+1/2,j}}^{n+1,v} + M_{y_{i,j+1/2}}^{n+1,v} + H_{y_{i,j-1/2}}^{n+1,v} + H_{x_{i-1/2,j}}^{n+1,v} + H_{x_{i+1/2,j}}^{n+1,v} + H_{y_{i,j+1/2}}^{n+1,v} + \Lambda_{i,j}^{n+1,v} \right) x_{m_{i,j}}^{n+1,v+1} \\ & - \left(N_{x_{i+1/2,j}}^{n+1,v} + H_{x_{i+1/2,j}}^{n+1,v} \right) x_{m_{i+1,j}}^{n+1,v+1} - \left(N_{y_{i,j+1/2}}^{n+1,v} + H_{y_{i,j+1/2}}^{n+1,v} \right) x_{m_{i,j+1}}^{n+1,v+1} = \Lambda_{i,j}^{n,v} x_{m_{i,j}}^n + q_{m_{i,j}}^{n+1,v} \Delta V_{i,j}. \end{aligned} \quad (35)$$

No processo de solução utilizou-se uma decomposição de operadores (*operator splitting*) [21], de forma que um subsistema será resolvido para o campo de pressões, que quando determinado é utilizado para determinar as velocidades, utilizadas quando da solução do subsistema para o cálculo das frações molares de CO₂. Elas são utilizadas, então, no termo ψ . As iterações prosseguem até que as pressões e as frações molares utilizadas no cálculo dos coeficientes das equações não lineares tenham convergido. Cada um dos subsistemas é resolvido pelo uso do método dos Gradientes Biconjugados Estabilizados (*Stabilized Biconjugate Gradients*, BiCGSTAB) [22].

Os processos iterativos internos, onde é aplicado o BiCGSTAB, e externo, quando da utilização do Método de Picard, são interrompidos utilizando-se as máximas diferenças nos valores de pressão da fase gás e de fração molar de dióxido de carbono, entre as iterações consecutivas em comparação com as tolerâncias numéricas adotadas, tol_p para a incógnita pressão e tol_{x1} para a fração molar (entre as iterações, para a pressão utiliza-se um critério de erro relativo e para a fração molar um critério de erro absoluto).

4 Acoplamento poço-reservatório

Parte das simulações realizadas neste trabalho utilizaram uma técnica de acoplamento poço-reservatório. Assim, no que segue discute-se brevemente a modelagem do termo fonte, que aparece nas Eqs. (21) e (22) (ou Eqs. (18) e (12)), de forma a relacionar a pressão e a vazão nos poços com as pressões nas células em que estes se encontram. Uma das dificuldades associadas à modelagem de poços, em simulações de reservatório de petróleo, é o fato da região onde tipicamente ocorrem os maiores gradientes de pressão encontrar-se nas proximidades do poço, tendo este raio de dimensão muito menor do que as dimensões usuais de uma célula em uma malha computacional [23].

Para cada célula c que contém um poço, as vazões totais (considerando ambos os componentes) podem ser escritas como [10]

$$q_c = -J_c (p_c - p_{wf_c}), \quad (36)$$

onde p_{wf_c} é a pressão no poço e J_c representa o índice de produtividade dado por

$$J_c = G_{wf_c} \left(\frac{\xi_c}{\mu_c} \right). \quad (37)$$

Para poços verticais (paralelos à direção z), o fator geométrico, G_{wf_c} , associado ao poço é dado por [24, 25, 7]

$$G_{wf_c} = \frac{2\pi \sqrt{k_{x_c} k_{y_c}} h}{\ln(r_{eq_c}/r_{wf})}, \quad (38)$$

onde h é a profundidade do poço, r_{wf} é o raio do poço e r_{eq_c} é o raio equivalente dado por

$$r_{eq_c} = 0,28 \left[\frac{\sqrt{\sqrt{k_{y_c}/k_{x_c}} (\Delta x_c)^2 + \sqrt{k_{x_c}/k_{y_c}} (\Delta y_c)^2}}{(k_{y_c}/k_{x_c})^{1/4} + (k_{x_c}/k_{y_c})^{1/4}} \right]. \quad (39)$$

As vazões para cada componente m podem ser escritas como [10]

$$q_{m_c} = -J_{m_c} (p_c - p_{wf_c}), \quad (40)$$

onde

$$J_{m_c} = x_{m_c} J_c. \tag{41}$$

Para simulações com vazão especificada, os termos fontes q_c e q_{m_c} são substituídos, respectivamente, nas Eqs. (21) e (22) para cada célula c que contém um poço. Uma vez calculados os campos de pressão e fração molar, a Eq. (36) pode ser utilizada no cálculo de p_{wf_c} como segue

$$p_{wf_c} = p_c + \frac{q_c}{J_c}. \tag{42}$$

Nas simulações com pressão especificada, p_{wf_c} é um valor conhecido (especificado) e, da Eq. (36), substitui-se

$$q_c = -J_c p_c + J_c p_{wf_c} \tag{43}$$

no termo fonte q_c , para cada célula c que contém um poço, para a determinação do campo de pressão. Analogamente, da Eq. (40), substitui-se

$$q_{m_c} = -J_{m_c} p_c + J_{m_c} p_{wf_c}, \tag{44}$$

no termo fonte q_{m_c} , para cada célula c que contém um poço, para a determinação das frações molares do CO₂.

5 Resultados

A Tab. 1 apresenta as condições iniciais de pressão, temperatura e fração molar no reservatório, no instante em que se inicia a injeção de CO₂, tendo-se em vista a construção de um caso base para a simulações numéricas, a partir do qual serão realizadas variações envolvendo um estudo de refinamento de malha computacional. Neste primeiro caso será considerada a geometria do tipo *slab*, sem presença de poço.

Tabela 1: Condições iniciais

Parâmetro	Valor	Unidade de medida
$p_{inicial}$	3500	kPa
T	370,0	K
$x_{1inicial}$	0,0	mol/mol

A Tab. 2 apresenta os valores das propriedades de ponto crítico que são necessárias para o cálculo da fração molar e da pressão, uma vez que elas estão presentes nas equações para a determinação das propriedades da mistura e na equação de estado.

Tabela 2: Propriedades do ponto crítico

Propriedade	Valor	Unidade de medida
p_{c,CO_2}	72,83	atm
T_{c,CO_2}	304,1	K
v_{c,CO_2}	$9,4 \cdot 10^{-5}$	m ³ /mol
W_{c,CO_2}	44,01	g/mol
p_{c,CH_4}	45,5	atm
T_{c,CH_4}	190,6	K
v_{c,CH_4}	$9,863 \cdot 10^{-5}$	m ³ /mol*
W_{c,CH_4}	16,04	g/mol

Na Tab. 3, encontram-se outros parâmetros selecionados para a construção do primeiro caso de simulação, como o tempo total de simulação em dias, o passo de tempo, os comprimentos do reservatório em x e y , L_x e L_y , respectivamente, e as tolerâncias numéricas adotadas na simulação.

As condições de contorno para o caso base, mostradas na Fig. 3 são:

$$\text{para a pressão : } \begin{cases} \frac{\partial p}{\partial y} = 0, & \text{nas fronteiras norte e sul,} \\ p(0, y) = P_w = 4000 \text{ kPa,} & \text{na fronteira oeste,} \\ p(L_x, y) = P_e = 3500 \text{ kPa,} & \text{na fronteira leste;} \end{cases} \tag{45}$$

$$\text{para a fração molar : } \begin{cases} \frac{\partial x_1}{\partial y} = 0, & \text{nas fronteiras norte e sul,} \\ \frac{\partial x_1}{\partial x} = 0, & \text{na fronteira leste,} \\ x_1(0, y) = x_{1w} = 1, & \text{na fronteira oeste.} \end{cases} \quad (46)$$

Tabela 3: Parâmetros gerais da simulação do primeiro caso

Parâmetro	Valor	Unidade de medida
t_{max}	100	dia
Δ_t	0,005	dia
L_x	500	m
L_y	100	m
$tol_p = tol_{x1}$	10^{-5}	-

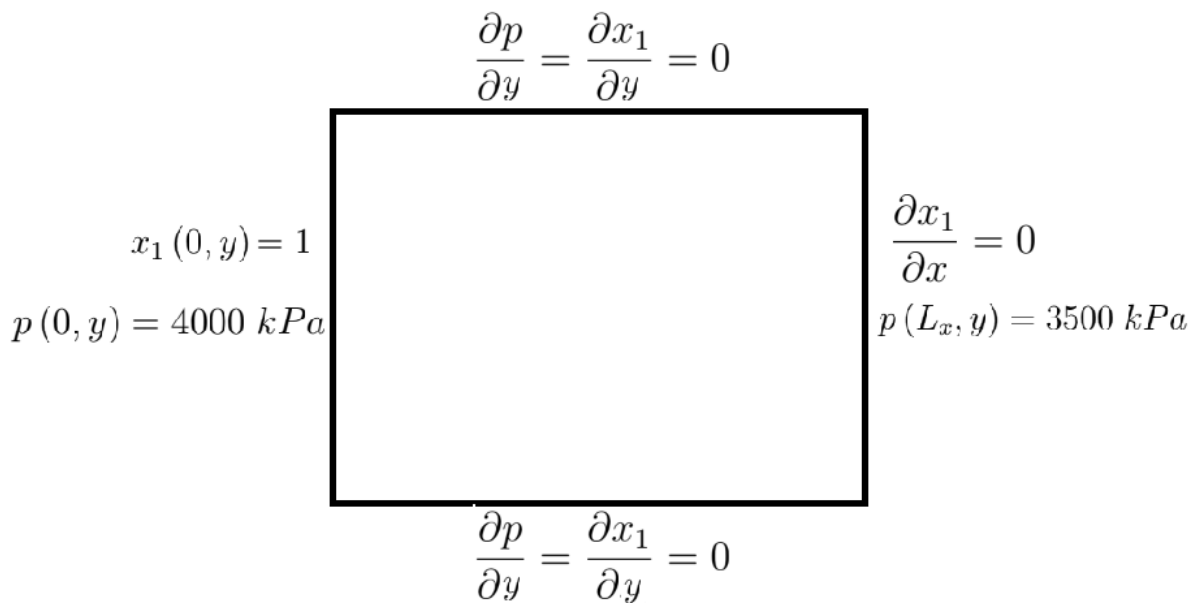


Figura 3: Ilustração da condição de contorno do caso base.

A Tab. 4 contém as propriedades de rocha e de fluido consideradas nas simulações e que são utilizadas no caso base.

Tabela 4: Propriedades de rocha e fluido

Propriedade	Valor	Unidade de medida
ϕ_{ref}	0,15	-
c_ϕ	10^{-7}	kPa ⁻¹
p_{ref}	3000	kPa
k_x	0,05	μm^2
k_y	0,05	μm^2
d_{im}	10^{-7}	m ² /s

5.1 Refinamento de malha

Nesta seção, os resultados de um refinamento de malha são apresentados tendo-se em vista um estudo de convergência numérica, quando da redução do espaçamento da malha computacional. Espera-se que à medida que são escolhidas células menores, os resultados tenderão para a solução exata [26]. A Tab. 5 mostra os valores selecionados para o primeiro refinamento de malha. Como o escoamento inicialmente estudado ocorre preferencialmente na direção x , optou-se por se manter o número de células na direção y constante.

Tabela 5: Malhas utilizadas no primeiro refinamento

Malha	N_x	N_y	Total de Células
1	20	16	320
2	40	16	640
3	80	16	1280
4	160	16	2560
5	320	16	5120

Os valores da fração molar em função da variação de x , para $y = L_y/2$, encontram-se na Fig. 4 para as diferentes malhas utilizadas. Eles mostram que para x entre 200 e 250 m existe uma redução expressiva na fração molar, consequência do avanço do CO₂ injetado no reservatório. Com o refinamento de malha, as curvas se aproximam umas das outras e observa-se o efeito da difusão numérica [26], devida ao uso da aproximação do tipo *upwind* de primeira ordem para os termos de advecção. Pode ser observado na Fig. 5 o quanto as curvas de pressão tendem para os mesmos valores à medida que as malhas são refinadas. Pode-se definir duas regiões características, em função do deslocamento da frente de CO₂ no interior do reservatório.

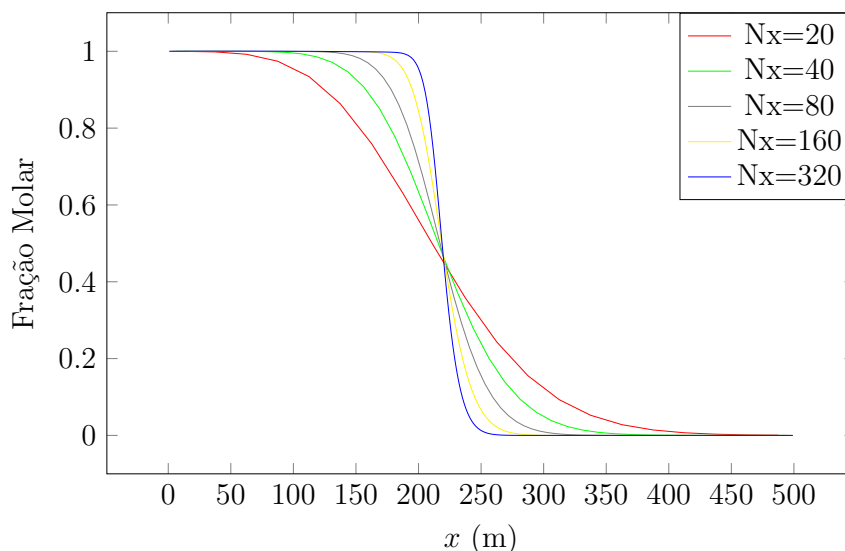


Figura 4: Primeiro refinamento de malha - fração molar de CO₂

Com o objetivo de se obter resultados mais acurados, utilizou-se um segundo grupo de malhas computacionais, que podem ser encontrados na Tab. 6. Tendo-se em vista o custo-benefício considerando o tempo de execução, optou-se por introduzir uma nova malha e interrompeu-se a sequência de duplicação das mesmas em comparação às suas precedentes.

Na Fig. 6 observa-se uma expressiva redução da difusão numérica e observa-se que os valores obtidos com $N_x=320$ e 400 estão muito próximos uns dos outros. Na Fig. 7 nota-se que todas as curvas de pressão estão praticamente sobrepostas. Desta forma, escolheu-se a malha com $N_x=320$ para ser a padrão, como mostra a Tab. 7.

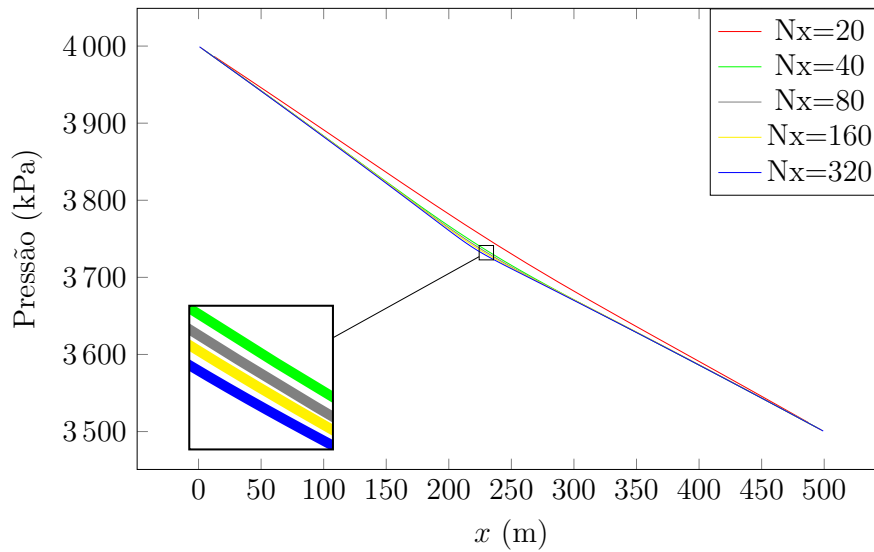


Figura 5: Primeiro refinamento de malha - pressão da fase gás

Tabela 6: Malhas utilizadas no segundo refinamento

Malha	N_x	N_y	Total de Células
1	80	16	1280
2	160	16	2560
3	240	16	3840
4	320	16	5120
5	400	16	6400

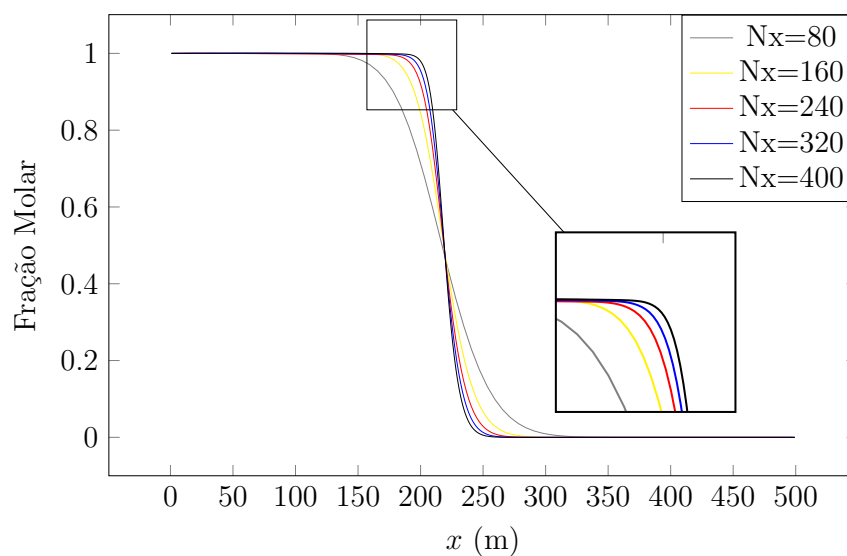


Figura 6: Segundo refinamento de malha - fração molar de CO₂

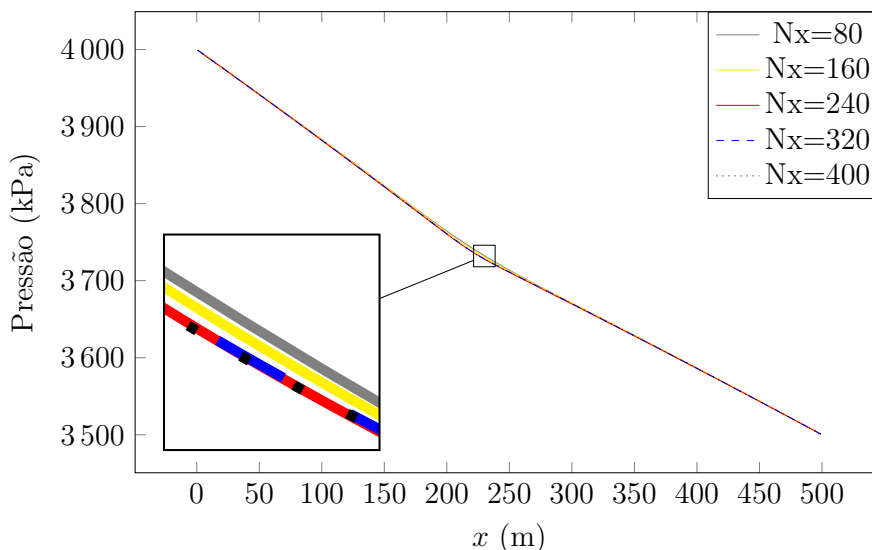


Figura 7: Segundo refinamento de malha - pressão da fase gás

Tabela 7: Malha escolhida após refinamento

Características da malha	Valores
N_x	320
N_y	16
Células	5120

5.2 Variação de permeabilidade

As Figs. 8 e 9 mostram como a variação da permeabilidade absoluta interfere no resultado final, no que diz respeito à fração molar e ao perfil de pressão, respectivamente.

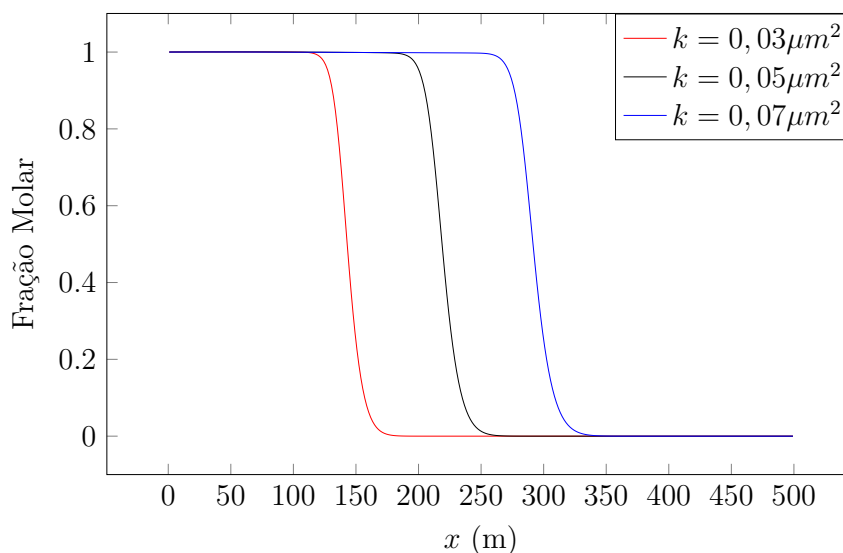


Figura 8: Variação da permeabilidade do meio - fração molar de CO₂

Fisicamente, espera-se que à medida que a permeabilidade diminui o fluido tenha uma maior dificuldade em se deslocar no interior do meio poroso. Como pode ser visto na Fig. 8, a frente de avanço do CO₂, para o mesmo intervalo de tempo, percorrerá uma maior distância para os valores mais elevados da permeabilidade. Na Fig. 9 é possível observar que para maiores valores de permeabilidade absoluta a pressão se mantém em patamares mais altos na região de mistura, enquanto após a posição atingida pelo CO₂ há uma inversão.

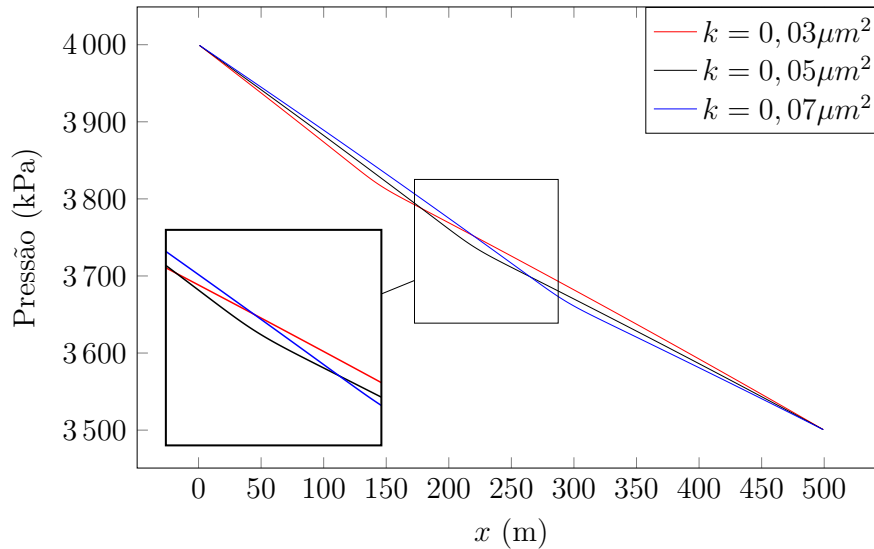


Figura 9: Variação da permeabilidade do meio - pressão

Nesta seção também é apresentado resultado para o escoamento bicomponente através de um campo de permeabilidade heterogêneo fictício, dado pela função

$$k(x, y) = 0,001 \times \max[F(x, y); 0, 3] \tag{47}$$

onde

$$F(x, y) = 50 \left\{ 0,7 \left[0,5 \sin \left(6\pi \frac{x}{L_x} \right) \cos \left(12\pi \frac{y}{L_y} \right) - 1 \right] + 1 \right\}.$$

Na Fig. 10 pode-se visualizar o campo de permeabilidade gerado pela Eq. (47). A Tab. 8 apresenta os novos valores utilizados, para algumas das propriedades, no caso do escoamento no meio heterogêneo.

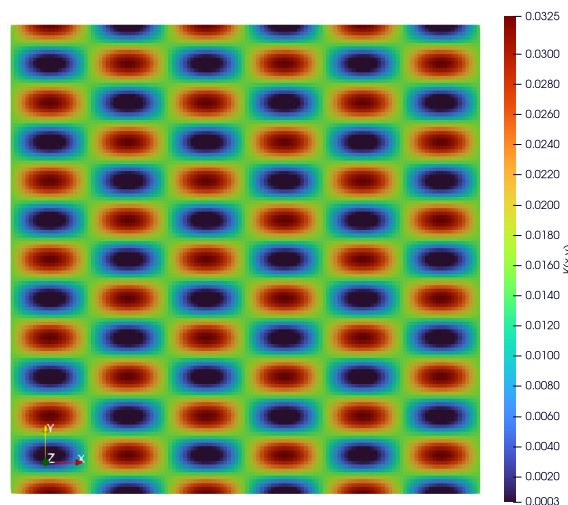


Figura 10: Campo heterogêneo de permeabilidade.

Tabela 8: Parâmetros para a simulação do meio heterogêneo

Parâmetros	Valor	Unidade de Medida
L_x	200	m
L_y	200	m
N_x	128	-
N_y	128	-

A Fig. 11 mostra o comportamento da fração molar ao longo de 100 dias de simulação, tendo sido escolhidas quatro faixas de tempo para a análise dos resultados: 25 dias, 50 dias, 75 dias e 100 dias. É possível perceber que o CO₂ avança mais pelos caminhos preferenciais formados nas localizações com maior permeabilidade absoluta, e menos nas menores, como é fisicamente esperado.

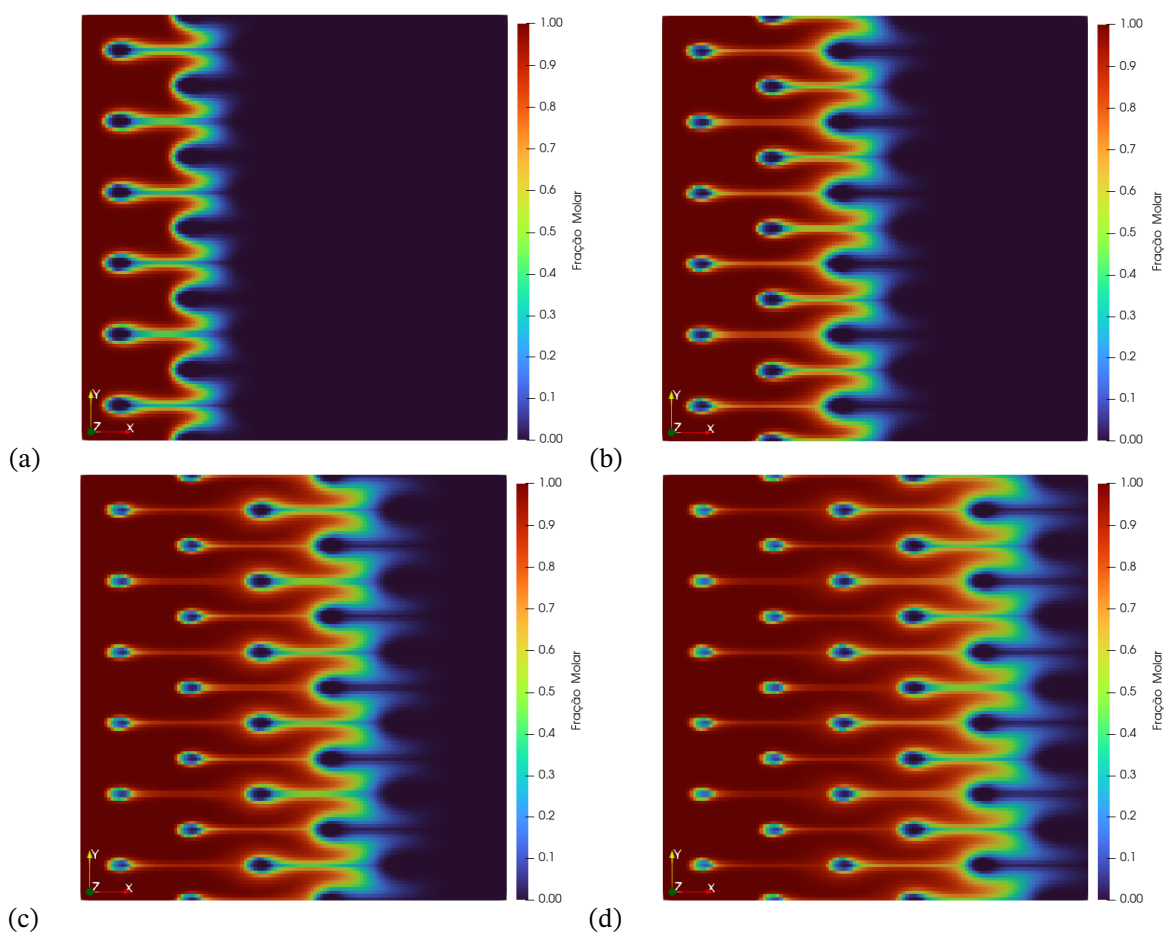


Figura 11: Variação da fração molar de CO₂ no escoamento no meio heterogêneo. Tempos de escoamento: (a) 25 dias; (b) 50 dias; (c) 75 dias; (d) 100 dias.

5.3 Resultados com a inclusão de acoplamento poço-reservatório

A Tab. 9 apresenta as condições iniciais de pressão, temperatura e fração molar no reservatório, no instante em que começa a injeção de CO₂, tendo-se em vista a definição de um caso base para a realização de simulações numéricas incluindo o acoplamento poço-reservatório, considerando a geometria um-quarto de *five-spot* [19]. O raio do poço, r_w , utilizado no cálculo de J_w seguindo o acoplamento poço-reservatório, é igual a 0,15 m.

Na Fig. 12 tem-se o comportamento da pressão da fase gás e da fração molar de CO₂ para o caso base de simulação construído a partir das análises realizadas por [20], considerando a linha reta em diagonal no reservatório, ligando o bloco onde se encontra a injeção de dióxido de carbono e o bloco no qual há a produção de gás.

Tabela 9: Parâmetros e propriedades

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
$L_x = L_y$	500 m	$x_{w_{prod}} = y_{w_{prod}}$	498,45 m
$n_x = n_y$	161	$x_{w_{inj}} = y_{w_{inj}}$	1,55 m
$k_x = k_y$	$0,5 \times 10^{-12} \text{ m}^2$	$p_{w_{prod}}$	3000 kPa
ϕ	0,15	$p_{w_{inj}}$	4000 kPa
$p_0 = p_{init}$	3500 kPa	t_{max}	750 dias
$x_{m,0} = x_{m_{init}}$	0	Δt	0,0005 dias
T	370 K	$tol_p = tol_{x1}$	1×10^{-5}
L_z	1 m	r_w	0,15 m

Ainda na Fig. 12, nota-se que ocorrem crescimento e redução de pressão em relação ao valor inicial, respectivamente, nas regiões de injeção e de produção. No caso da fração molar de dióxido de carbono, é possível observar que o componente injetado já preencheu completamente parcela significativa da jazida, de forma que no poço de produção já há a presença de CO₂ que passa a fazer parte do volume de gás recuperado. Desta forma, tendo-se em vista o acoplamento poço-reservatório implementado, com a prescrição de uma pressão de produção, a vazão de gás no poço passa a ser resultado da dinâmica do escoamento, sendo inicialmente composta somente por metano e, com o passar tempo, chega um momento em que a vazão passa a ser composta pelos dois componentes. Conforme transcorre mais tempo, maior a fração molar de CO₂ na vazão de gás produzido. Deve ser observado que, apesar do refinamento de malha adotado, o comportamento do perfil da fração molar de CO₂ observado é influenciado pela difusão numérica associada à utilização da aproximação do tipo *upwind* de primeira ordem.

O comportamento comentando e discutido a partir da análise da Fig. 12 para a dinâmica do dióxido de carbono no reservatório pode ser melhor observado na Fig. 13. Nela, tem-se os campos de CO₂ no reservatório para quatro tempos diferentes, mostrando o progressivo avanço do CO₂ na jazida. Observa-se a simetria na região ocupada pelo componente injetado, como é esperado para o caso de meio homogêneo e isotrópico considerado. Para o tempo de 750 dias o dióxido de carbono já atingiu o bloco no qual encontra-se o poço de produção, em acordo com o resultado para o perfil de fração molar apresentado na Fig. 12(b).

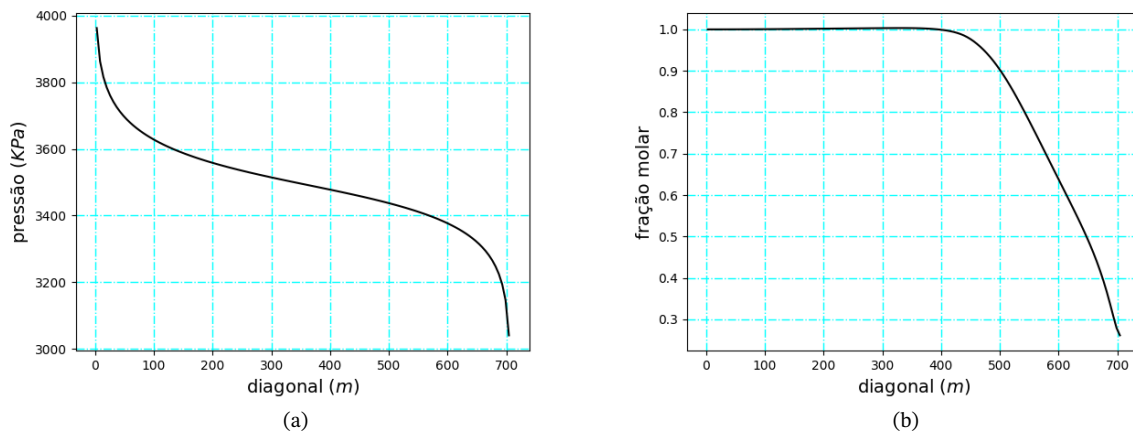


Figura 12: Resultados ao longo da diagonal entre as posições de injeção e de produção: (a) variação da pressão da fase gás e (b) fração molar de CO₂.

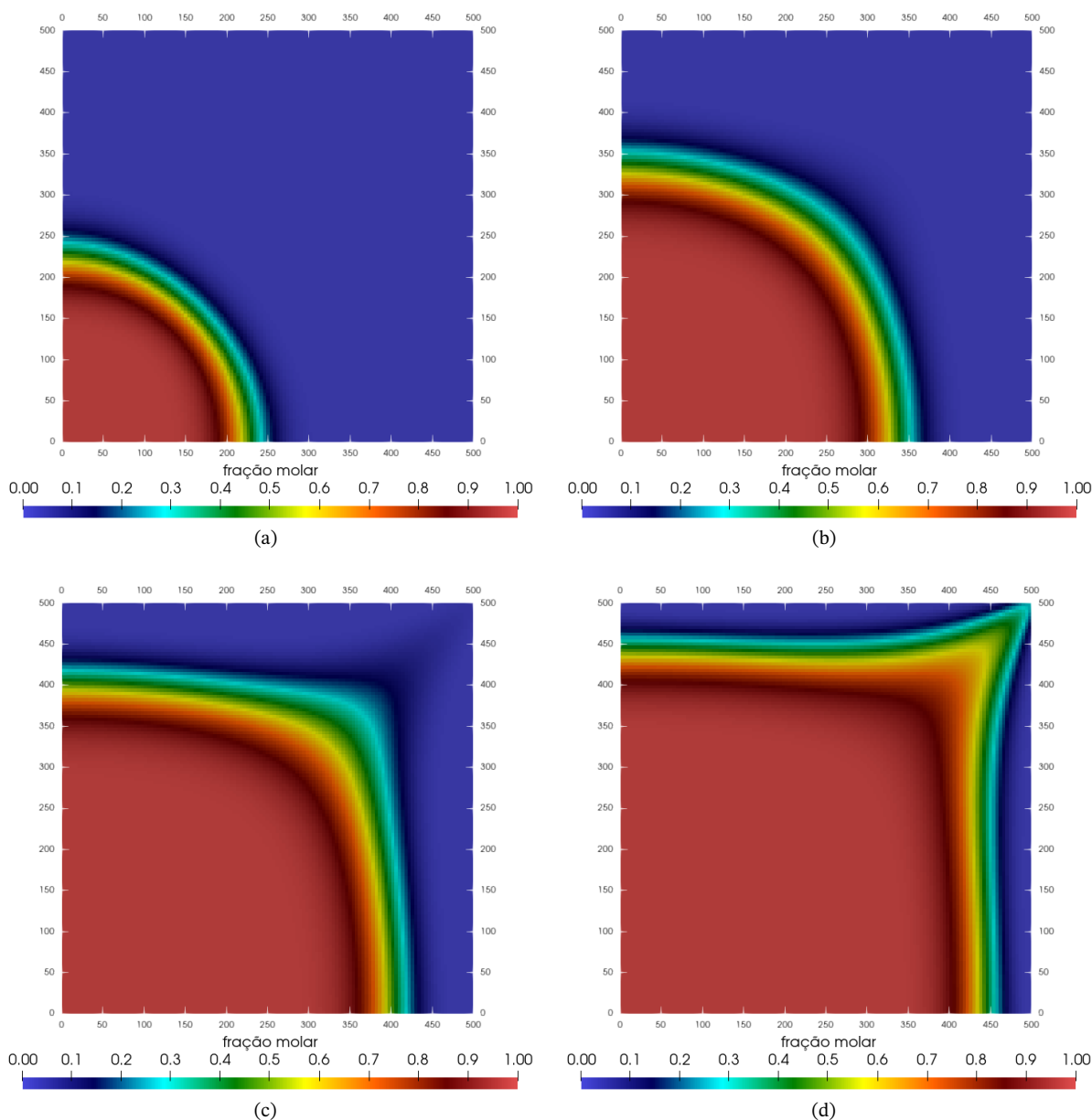


Figura 13: Variação da fração molar de CO₂ para a geometria um quarto de *five-spot*. Tempos de escoamento: (a) 150 dias (b) 350 dias; (c) 550 dias; (d) 750 dias.

A partir da análise dos resultados, consistentemente com a física do escoamento simulado, maiores valores de fração molar de dióxido de carbono são alcançados na região mais próxima à localização do poço injetor.

6 Conclusões

Os resultados obtidos a partir das simulações realizadas neste trabalho estiveram em acordo com a física do escoamento estudado, mostrando a viabilidade da utilização de estratégias de decomposição de operadores em problemas como o aqui abordado. O acoplamento poço-reservatório foi implementado de forma a se permitir a determinação da vazão de produção de gás, o que é de sobremaneira relevante para a previsão de cenários de operação realísticos e deve ser explorado em simulações no progresso desta pesquisa (incluindo melhorias na técnica de acoplamento poço-reservatório adotada). A difusão numérica esperada tendo em vista a adoção da aproximação do tipo *upwind* de primeira ordem deve ser reduzida com a escolha de outros tipos de aproximação.

Do ponto de vista de perfis de pressão e de fração molar obtidos, e também os campos de fração molar, os re-

sultados estão qualitativamente como esperado (tendo em vista as curvas capturadas para regiões de maior e menor pressão, região ocupada por CO₂ e simetria do avanço de dióxido de carbono no reservatório, dadas as condições de meio homogêneo e isotrópico) e se deve realizar verificações quantitativas nos trabalhos subsequentes. Os resultados para o caso heterogêneo também capturaram o comportamento fisicamente esperado.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. Os autores agradecem também o apoio da Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ).

Referências

- [1] N. Böttcher, A. K. Singh, O. Kolditz, e R. Liedl, “Non-isothermal, compressible gas flow for the simulation of an enhanced gas recovery application,” *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 236, pp. 4933–4943, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2011.11.013>
- [2] Y. Wang, C. Vuik, e H. Hajibeygi, “Analysis of hydrodynamic trapping interactions during full-cycle injection and migration of CO₂ in deep saline aquifers,” *Advances in Water Resources*, vol. 159, p. 104073, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2021.104073>
- [3] EPA. (2024) Environmental protection agency, importance of methane. <https://www.epa.gov/gmi/importance-methane>.
- [4] ——. (2024) Environmental protection agency, overview of greenhouse gases. <https://www.epa.gov/ghgemissions/overview-greenhouse-gasescarbon-dioxide>.
- [5] Z. Chen, L. Li, Y. Su, J. Liu, Y. Hao, e X. Zhang, “Investigation of CO₂-EOR and storage mechanism in injection-production coupling technology considering reservoir heterogeneity,” *Fuel*, vol. 368, p. 131595, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131595>
- [6] G. Bai, J. Su, S. Fu, X. Li, X. Zhou, J. Wang, Z. Liu, e X. Zhang, “Effect of CO₂ injection on the gas desorption and diffusion kinetics: An experimental study,” *Energy*, vol. 288, p. 129921, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.129921>
- [7] T. Ertekin, J. H. Abou-Kassem, e G. R. King, *Basic Applied Reservoir Simulation*, ser. SPE Textbook Series 7. Richardson: Society of Petroleum Engineers, 2001.
- [8] M. Abdelaal e M. Zeidouni, “Injection data analysis using material balance time for CO₂ storage capacity estimation in deep closed saline aquifers,” *Journal of Petroleum Science and Engineering*, vol. 208, p. 109385, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.109385>
- [9] E. Zhao, Z. Jin, G. Li, K. Zhang, e Y. Zeng, “Numerical simulation of CO₂ storage with enhanced gas recovery in depleted tight sandstone gas reservoirs,” *Fuel*, vol. 371, p. 131948, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131948>
- [10] Z. Chen, *Reservoir Simulation – Mathematical Techniques in Oil Recovery*. Philadelphia, USA: Society of Industrial and Applied Mathematics, 2007.
- [11] N. Ezekwe, *Petroleum Reservoir Engineering Practice*. Westford, USA: Prentice Hall, 2010.
- [12] T. H. Ahmed, *Reservoir Engineering Handbook*. Houston, USA: Gulf Professional Publishing, 2001.
- [13] K. Neeraj, “Compressibility factors for natural and sour reservoir gases by correlations and cubic equations of state,” Dissertação de mestrado, Texas Tech University, Lubbock, USA, 2004.
- [14] D. Peng e D. B. Robinson, “A new two-constant equation of state,” *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, vol. 15, no. 1, pp. 59–64, 1976. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/i160057a011>
- [15] Y. Wu e S. Sun, “Equivalence of two models in single-phase multicomponent flow simulations,” *Computer and Mathematics with Applications*, no. 71, pp. 1303–1316, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2016.02.008>
- [16] G. Soave, “Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state,” *Chemical Engineering Science*, vol. 27, pp. 1197–1203, 1972. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(72\)80096-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(72)80096-4)

- [17] J. G. S. Debossam, J. D. S. Heringer, P. T. Honório, Jr., G. Souza, e H. P. A. Souto, “Simulação numérica de escoamento monofásico com dois componentes em reservatórios de petróleo,” em *XX Encontro Nacional de Modelagem Computacional*, Nova Friburgo, Brasil, 2017.
- [18] J. Lohrenz, B. C. Bray, e C. R. Clark, “Calculating viscosities of reservoir fluids from their compositions,” *Journal of Petroleum Technology*, 1964.
- [19] A. J. Rosa, R. S. Carvalho, e J. A. D. Xavier, *Engenharia de Reservatórios de Petróleo*. Rio de Janeiro, Brasil: Interciência, 2006.
- [20] Y. B. S. Joia, “Simulação numérica do escoamento bidimensional considerando injeção de dióxido de carbono em reservatórios de metano,” Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Relatório técnico, 2024.
- [21] J. G. S. Debossam, J. D. S. Heringer, G. Souza, e H. P. A. Souto, “Numerical simulation of single-phase flow in naturally fractured oil reservoirs,” *Coupled Systems Mechanics*, vol. 8, no. 2, pp. 129–146, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.12989/csm.2019.8.2.129>
- [22] Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2^a ed. USA: Society of Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- [23] Z. Chen e Z. Youqian, “Well flow models for various numerical methods,” *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, vol. 6, no. 3, pp. 375–388, 2009.
- [24] D. Peaceman, “Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation,” *Society of Petroleum Engineers Journal*, vol. 18, no. 3, pp. 183–194, 1978. Disponível em: <https://doi.org/10.2118/6893-PA>
- [25] D. W. Peaceman, “Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability,” *Society of Petroleum Engineers Journal*, vol. 23, no. 3, pp. 531–543, 1983. Disponível em: <https://doi.org/10.2118/10528-PA>
- [26] R. L. Burden e J. D. Faires, *Numerical Analysis*, 9^a ed. Boston, USA: Cengage Learning, 2011.