



Guilherme Lima Righetto

**Desenvolvimento e aplicação de um esquema de
acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativo
visando o armazenamento geológico de CO₂**

Tese de Doutorado

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil do Departamento de Engenharia Civil e Ambiental da PUC-Rio.

Orientador: Prof. Sergio Augusto Barreto da Fontoura
Co-orientador: Dr. Nelson Inoue



Guilherme Lima Righetto

**Desenvolvimento e aplicação de um esquema de
acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativo
visando o armazenamento geológico de CO₂**

Tese apresentada como requisito parcial para
obtenção do grau de Doutor pelo Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Civil do Departamento de
Engenharia Civil e Ambiental do Centro Técnico
Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão
Examinadora abaixo assinada.

Prof. Sergio Augusto Barreto da Fontoura

Orientador

Departamento de Engenharia Civil e Ambiental – PUC-Rio

Dr. Nelson Inoue

Co-orientador

GTEP/PUC-Rio

Prof. Celso Romanel

Departamento de Engenharia Civil e Ambiental – PUC-Rio

Prof.^a Raquel Quadros Velloso

Departamento de Engenharia Civil e Ambiental – PUC-Rio

Dr. Antônio Luiz Serra de Souza

CENPES/PETROBRAS

Dr.^a Flávia de Oliveira Lima Falcão

PETROBRAS

Prof. Márcio da Silveira Carvalho

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 16 de dezembro de 2016

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Guilherme Lima Righetto

Graduou-se em Engenharia Civil na Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), tendo desenvolvido trabalho científico na área de comportamento de materiais geotécnicos e modelagem numérica aplicada à engenharia de fundações. cursou mestrado em Engenharia Civil da PUC-Rio, tendo desenvolvido dissertação na área de modelagem numérica do processo de reativação de falhas em reservatórios de petróleo. Durante o período de doutorado, trabalhou junto ao Grupo de Tecnologia e Engenharia de Petróleo da PUC-Rio, onde atualmente se enquadra como pesquisador na área de simulação numérica aplicada à geomecânica de reservatórios.

Ficha Catalográfica

Righetto, Guilherme Lima

Desenvolvimento e aplicação de um esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativo visando o armazenamento geológico de CO₂ / Guilherme Lima Righetto; orientador: Sergio Augusto Barreto da Fontoura; co-orientador: Nelson Inoue. – 2016.

193 f. : il. (color.) ; 30cm

Tese (doutorado)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, 2016.

Inclui bibliografia

1. Engenharia civil – Teses. 2. Armazenamento geológico de CO₂. 3. Fenômenos acoplados. 4. Acoplamento termo-hidro-mecânico-químico. 5. Geomecânica de reservatórios. I. Fontoura, Sergio Augusto Barreto da. II. Inoue, Nelson. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil. IV. Título.

CDD: 624

Je dédie ce travail à la personne qui a décidé de
marcher son chemin à côté de moi, en partageant
toutes les expériences édifiantes que la vie nous
permet de vivre. Ses paroles de soutien,
d'encouragement et sa sérénité ont rendu ce qui
paraissait être sans fin, possible. Ellen Ferrando, je
suis fier de t'avoir dans ma vie.

Agradecimentos

O processo de autoconhecimento proporcionado pelo doutorado é, de fato, extremamente enriquecedor e complexo. Concluir uma tese de doutorado é uma tarefa árdua compartilhada com diversas pessoas ao longo dos, pelo menos, quatro anos. Todas as pessoas próximas vivenciam esta experiência e participam das alegrias e angústias encontradas ao longo de todo o processo. Sobretudo, o doutorado é uma questão de determinação e fé, de forma que inicio esta sessão agradecendo a Deus, pai eterno, pela oportunidade de evolução moral, intelectual e espiritual.

Todo o caminho trilhado até hoje começou a ser pavimentado pelos meus maiores referenciais, Vera Lúcia de Lima Righetto e Oswaldo Righetto. Sinto-me honrado por ter como mãe, uma mulher íntegra e ética que jamais sucumbiu às dificuldades de ensinar o valor que o conhecimento tem na vida de um ser humano; quando ninguém mais acreditava, você não desistiu. Sou eternamente grato por isso. Agradeço ao meu pai, sem dúvidas, minha maior inspiração profissional. Sua determinação pessoal e entusiasmo com a vida têm servido como exemplo para a minha!

Agradeço a todos os meus irmãos, especialmente a minha irmã Germanna, que sempre esteve ao meu lado, compartilhando todos os momentos especiais; são tantas lembranças e histórias divertidas que vivemos, que sinto vontade de voltar no tempo. A vida nos levou para lugares diferentes, no entanto, os laços de sangue são eternos!

A evolução moral e intelectual deve ser complementada com a evolução espiritual, e isso é mérito das minhas mentoras Edna Pagotto, Dona Cida (*in memoriam*) e Nide. Os inúmeros ensinamentos sobre a amplitude das nossas ações no processo de evolução têm sido salutares.

Gostaria de agradecer a minha querida Ellen por todo o seu amor, carinho, pela imensa paciência. Tenho em você meu porto seguro. Agradeço também a toda a família Rökpe Ferrando, especialmente Claire, Marcel e Úrsula por todas as palavras de incentivo e apoio ao longo desse processo.

Agradeço a Aline Streb por todas as conversas, risadas e, sobretudo, pelos ensinamentos de como manter o equilíbrio em momentos de dificuldade. Obrigado por iniciar o processo de ampliação dos meus horizontes quanto às formas de compreensão da vida.

Nesta longa jornada, tive o privilégio de encontrar um grande amigo, que considero como irmão, Carlos Emmanuel R. Lautenschläger (Jovem Manolo). Desde meados de 2005, em Porto Alegre, estamos juntos nesta batalha de desbravar o meio acadêmico-profissional. Muitas experiências foram acumuladas, dentre elas alegrias e frustrações, no entanto, os momentos de alegria e as incontáveis risadas ainda permeiam a minha vida! Sinto-me feliz por poder compartilhar todos esses momentos com um profissional e ser humano exemplar como você!

A vinda definitiva para o Rio de Janeiro e a troca de área de pesquisa teve como mentora e principal incentivadora, uma grande amiga, Carla M. Carrapatoso. A imagem de nós três na praça de alimentação no Shopping Praia de Belas, conversando entusiasmados sobre as oportunidades na PUC-Rio, é uma lembrança que me deixa muito feliz. É muito reconfortante saber que posso contar contigo. Obrigado por todo o apoio e incentivo para terminar esta tese!

Gostaria de agradecer ao meu orientador Sergio Augusto Barreto da Fontoura pela confiança e oportunidade de trabalhar no GTEP; a primeira oportunidade de trabalho formal é, de fato, inesquecível. Atribuo o meu amadurecimento profissional às inúmeras discussões técnicas que tivemos (e ainda temos). O enriquecimento intelectual adquirido ao longo desses anos de parceria trouxe segurança para que, a cada novo dia, novos desafios pudessem ser transpostos.

Gostaria de agradecer ao meu co-orientador Nelson Inoue por acreditar na minha capacidade técnica. Desde o final de 2010, iniciamos uma parceria que vem gerando frutos. Agradeço pela paciência e entusiasmo em compartilhar seus vastos conhecimentos na área de modelagem numérica. Agradeço, também, pelas incontáveis discussões tomadas ao longo do desenvolvimento desse trabalho. Nos momentos de maior incerteza e dificuldade, você esteve presente e estendeu a mão para me ajudar e, por isso, sou imensamente grato!

Aos amigos do GTEP/PUC-Rio, gostaria de agradecer, especialmente, ao pessoal do São Marcelo: Rafael Albuquerque, Daniel Melo, Ismael Pimentel, Juan David Uribe e Bismarck Gomes. É mais fácil desenvolver um trabalho quando você dispõe de um ambiente de trabalho agradável. Agradeço, também, a todo o corpo técnico-administrativo do GTEP por proporcionar condições favoráveis para o desenvolvimento de pesquisas.

Gostaria de agradecer aos engenheiros da Petrobras, Gabriel Serrão Seabra e Daniel Miranda, pela contribuição decisiva quanto aos problemas encontrados no emprego do simulador de fluxo composicional. Gostaria de agradecer também ao suporte técnico da CMG, Juan Mateo e Diana Mercado, por todo o auxílio com o pacote de programas.

Agradeço a todos os meus amigos que mesmo distantes torceram pelo meu sucesso: Michel Rafael Milanesi, João Rodrigo Zanetti Cardoso, Diego Augusto Ribeiro, Marina B. Teixeira, Carla L. Henz, Marcelle D. Ribeiro, Bruno Tasca de Linhares (Chapecó), Emanuele Weschenfelder, Marina Herriges, Luis Eduardo de Melo, Ingrid Milena Reyes Martinez e todos os nomes citados anteriormente.

Ao final desta longa trajetória, agradeço a todos vocês, amigos do coração, por terem feito parte da realização de um sonho pessoal. Sem a colaboração de vocês, esse trabalho não teria sido possível.

Resumo

Righetto, Guilherme Lima; Fontoura, Sergio Augusto Barreto; Inoue, Nelson. **Desenvolvimento e aplicação de um esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativo visando o armazenamento geológico de CO₂**. Rio de Janeiro, 2016. 193p. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Atrelado aos cenários cada vez mais complexos de extração de energia, o estudo de fenômenos acoplados em meios porosos – notadamente térmicos, hidráulicos, químicos e mecânicos – tem se apresentado como essencial na previsão de comportamento de meios geológicos no que diz respeito à disposição de rejeitos radioativos, armazenamento de dióxido de carbono, engenharia de reservatórios geotérmicos e geomecânica de reservatórios. Assim, este trabalho objetiva desenvolver um esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativo visando a simulação do armazenamento geológico de dióxido de carbono, empregando um simulador de fluxo composicional (GEM) e um programa de análise de tensões (ABAQUS ou CHRONOS). A idealização das metodologias de acoplamento foi efetuada através dos processos hidro-mecânico, termo-hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico-químico, bem como as validações e aplicações em casos reais. Os casos de validação, realizados empregando modelos simplificados monofásicos, apresentaram resultados satisfatórios quanto ao comportamento hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico. Adicionalmente às validações, os esquemas termo-hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico-químico foram aplicados em dois casos reais de armazenamento de CO₂ apresentados na literatura, projeto In Salah (Argélia) e aquífero Utsira (Noruega), respectivamente. De maneira geral, os resultados encontrados, para ambos os casos estudados, representaram acuradamente as respostas encontradas em campo, fato que evidencia a qualidade, robustez e aplicabilidade dos esquemas de acoplamento propostos neste trabalho.

Palavras-chave

Armazenamento geológico de CO₂; fenômenos acoplados, acoplamento termo-hidro-mecânico-químico; geomecânica de reservatórios.

Abstract

Righetto, Guilherme Lima; Fontoura, Sergio Augusto Barreto (advisor); Inoue, Nelson (co-advisor). **Development and application of a thermo-hydro-mechanical-chemical iterative coupling scheme aiming the geological storage of CO₂**. Rio de Janeiro, 2016. 193p. D.Sc. Thesis – Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Considering the increasingly complex scenarios of energy extraction, the study of coupled phenomena in porous media - notably thermal, hydraulic, chemical and mechanical - has been considered as essential in order to predict the behavior of geological media with regard to radioactive waste storage, CO₂ geological storage, geomechanics of geothermal reservoirs and reservoir geomechanics. Thus, this work aims to develop a thermo-hydro-mechanical-chemical iterative coupling scheme in order to simulate the geological storage of CO₂, employing a compositional flow simulator (GEM) and a stress analysis program (ABAQUS or CHRONOS). The idealization of the coupling methodologies was carried out through the processes hydro-mechanical, thermo-hydro-mechanical and thermo-hydro-mechanical-chemical, as well as the validations and applications in real cases. The validation cases, performed employing simplified single-phase models, presented satisfactory results regarding the hydro-mechanical and thermo-hydro-mechanical behaviors. Additionally to the validations, the thermo-hydro-mechanical and thermo-hydro-mechanical-chemical schemes were applied in two real cases of CO₂ geological storage reported by the literature, In Salah project (Algeria) and Utsira aquifer (Norway), respectively. In general, the results found, in both cases studied, accurately represented the behavior observed in the field, which in turn highlights the accuracy, robustness and applicability of the coupling schemes proposed in this work.

Keywords

Geological storage of CO₂; coupled phenomena; thermo-hydro-mechanical-chemical coupling; reservoir geomechanics.

Sumário

1	Introdução	20
1.1	Relevância e motivação	20
1.2	Objetivos	21
1.3	Organização da tese	22
2	Revisão bibliográfica	24
2.1	Processo de injeção de CO ₂ em meios geológicos	24
2.1.1	Potencial de sequestro e armazenamento de CO ₂ no Brasil	28
2.1.2	Mecanismos de aprisionamento de CO ₂	32
2.2	Fenômenos acoplados em meios porosos	34
2.2.1	Panorama geral	34
2.2.2	Técnicas para representação de fenômenos acoplados	42
2.3	Análises numéricas associadas à injeção de CO ₂	45
3	Desenvolvimento de uma metodologia de acoplamento Termo-Hidro-Mecânico-Químico iterativo	50
3.1	Fundamentação teórica do acoplamento termo-hidro-mecânico	50
3.1.1	Equações governantes do acoplamento THM	50
3.1.2	Teorias e aplicações da termo-poroelasticidade	67
3.2	Equação de fluxo monofásico em meios porosos	69
3.2.1	Conservação de massa de fluido	69
3.2.2	Acoplamento hidro-térmico	72
3.3	Proposição de um esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico	73
3.3.1	Abordagem para a conservação de massa	74
3.3.2	Abordagem para a conservação de energia	77
3.3.3	Panorama do esquema de acoplamento THM iterativo	78
3.4	Inclusão do acoplamento químico	81
3.4.1	Efeitos geoquímicos – GEM	81
3.4.2	Estratégia para inclusão do efeito químico	90
3.4.3	Panorama do esquema de acoplamento THMC iterativo	92
3.4.4	Considerações sobre o acoplamento químico-mecânico	94
4	Validação e aplicação das metodologias de acoplamento HM, THM e THMC iterativo	100
4.1	Validação do esquema de acoplamento hidro-mecânico	100
4.2	Validação do esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico	107

4.3 Aplicação ao projeto In Salah, Argélia	113
4.3.1 Descrição geral do campo Krechba	114
4.3.2 Modelo numérico idealizado – THM	117
4.3.3 Resultados da análise THM	122
4.4 Aplicação ao projeto Utsira, Noruega	127
4.4.1 Descrição geral do aquífero Utsira	128
4.4.2 Modelo numérico idealizado – THMC	131
4.4.3 Resultados da análise THMC	137
4.5 Discussão geral dos resultados	141
5 Considerações finais	143
5.1 Conclusões	143
5.2 Sugestões para sequenciamento da pesquisa	146
6 Referências bibliográficas	148
Apêndice A Simulação de fluxo composicional	171
Apêndice B Considerações sobre a termodinâmica química	178
Apêndice C Validação da metodologia termo-hidro-mecânica do ABAQUS	190

Lista de figuras

Figura 2.1. Fontes emissoras de dióxido de carbono nos diferentes setores da indústria brasileira (adaptado de IGLESIAS <i>et al.</i> , 2014)	28
Figura 2.2. Mapa de densidade de emissões de CO ₂ e as bacias sedimentares brasileiras (MACHADO <i>et al.</i> , 2013)	29
Figura 2.3. Capacidade teórica de armazenamento de CO ₂ em bacias sedimentares brasileiras (adaptado de ROCKETT <i>et al.</i> , 2011)	30
Figura 2.4. Fontes emissoras de CO ₂ na bacia do Paraná (adaptado de ROCKETT <i>et al.</i> , 2011)	30
Figura 2.5. Seção transversal esquemática da bacia do Paraná (ANP, 2013)	31
Figura 2.6. Mecanismos de aprisionamento de CO ₂ em relação ao tempo e segurança do armazenamento (IPCC, 2013)	33
Figura 2.7. Fenômenos básicos do acoplamento THMC (adaptado de LANRU & XIATING, 2003)	42
Figura 2.8. Esquema de acoplamento THM entre os programas TOUGH2 e FLAC (modificado de RUTQVIST <i>et al.</i> , 2002)	47
Figura 3.1. Volume de controle de um elemento infinitesimal de um meio poroso	60
Figura 3.2. Termos de acoplamento para o fenômeno termo-hidro-mecânico em um meio poroso (adaptado de BAI & ABOUSLEIMAN, 1997)	65
Figura 3.3. Conjunto de equações resolvidas pelo código de acoplamento HERMES	74
Figura 3.4. Comparação entre as equações de conservação de massa do simulador de fluxo e do acoplamento termo-hidro-mecânico	74
Figura 3.5. Comparação entre as equações da <i>pseudo-compressibilidade</i> para os problemas hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico	76
Figura 3.6. Comparação entre as equações de conservação de energia do simulador de fluxo e do acoplamento termo-hidro-mecânico	77
Figura 3.7. Equações resolvidas por cada um dos programas envolvidos no processo de acoplamento THM iterativo	78
Figura 3.8. Fenômenos envolvidos no esquema de acoplamento THM iterativo desenvolvido	79

Figura 3.9. Visão geral do HERMES: programa gerenciador do processo de acoplamento iterativo	79
Figura 3.10. Troca temporal de informações entre os programas durante uma análise THM	80
Figura 3.11. Equações resolvidas por cada um dos programas envolvidos no processo de acoplamento THMC iterativo	92
Figura 3.12. Fenômenos envolvidos no esquema de acoplamento THMC iterativo desenvolvido	93
Figura 3.13. Comparação entre os comportamentos mecânicos (superfícies de ruptura e de colapso de poros) de amostras de rocha carbonática intacta e degradada quimicamente (adaptado de XIE <i>et al.</i> , 2011).	97
Figura 3.14. Variação da deformação axial e da permeabilidade da rocha durante um ensaio triaxial considerando degradação química (adaptado de XIE <i>et al.</i> , 2011).	97
Figura 3.15. Amostras de rocha carbonática após o ensaio triaxial: detalhe para a formação de canais de fluxo preferenciais (<i>wormholes</i>) (XIE <i>et al.</i> , 2011).	98
Figura 4.1. Modelo simplificado empregado para as validações dos esquemas de acoplamento hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico CHRONOS-GEM – baseado em Dean <i>et al.</i> (2006)	101
Figura 4.2. Vista tridimensional do modelo completo de elementos finitos (reservatório + rochas adjacentes) utilizado nas validações dos esquemas hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico	101
Figura 4.3. Panorama do modelo de validação (11 x 11 x 5) construído no simulador GEM	102
Figura 4.4. Pontos de aferição dos deslocamentos verticais no <i>overburden</i> para as análises comparativas envolvendo os esquemas de acoplamento HM e THM	103
Figura 4.5. Variação temporal da pressão de poros média no reservatório para a condição de acoplamento hidro-mecânico	103
Figura 4.6. Pressão de poros no reservatório para a condição de acoplamento hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11, j = 6, k = 1$ após 1200 dias de análise	104
Figura 4.7. Porosidade no reservatório para a condição de acoplamento hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11, j = 6, k = 1$ após 1200 dias de análise	105

Figura 4.8. Subsidiência do leito marinho para a condição de acoplamento hidro-mecânico após 1200 dias de análise	106
Figura 4.9. Variação temporal da pressão de poros média no reservatório para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico	109
Figura 4.10. Pressão de poros no reservatório para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11$, $j = 7$, $k = 1$ após 1200 dias de análise	110
Figura 4.11. Porosidade no reservatório para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11$, $j = 7$, $k = 1$ após 1200 dias de análise	111
Figura 4.12. Temperatura no reservatório para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11$, $j = 7$, $k = 1$ após 1200 dias de análise	112
Figura 4.13. Expansão do leito marinho para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico após 1200 dias de análise	113
Figura 4.14. Panorama geral do projeto In Salah: linhas azuis correspondem aos poços injetores de CO ₂ e as linhas vermelhas aos poços produtores de gás (Onuma & Ohkawa, 2009).	115
Figura 4.15. Projeto In Salah: localização dos poços injetores de CO ₂ no campo de Krechba (modificado de Mathieson, 2013).	116
Figura 4.16. Projeto In Salah: mapa de deslocamentos verticais para duas datas distintas (2004 e 2008). Regiões vermelhas estão relacionadas aos poços injetores KB-501 – 503 (modificado Onuma & Ohkawa, 2009).	116
Figura 4.17. Projeto In Salah: mapa de deslocamentos verticais em 2010 na região dos poços injetores de CO ₂ (Mathieson, 2013).	117
Figura 4.18. Modelo idealizado do campo Krechba (região do poço KB-501) para análise termo-hidro-mecânica empregando CHR-GEM: (a) litologia e (b) vistas da geometria adotada (metros)	119
Figura 4.19. Vista tridimensional do modelo completo empregada na análise CHR-GEM termo-hidro-mecânica: (a) malha de elementos finitos e (b) <i>grid</i> de diferenças finitas com destaque para o poço injetor	120
Figura 4.20. Deslocamento vertical na superfície (poço KB-501) como resposta ao armazenamento de CO ₂ considerando um comportamento termo-hidro-mecânico do reservatório	122
Figura 4.21. Mapas de deslocamentos verticais na superfície do terreno na região do poço injetor KB-501 após 1400 dias de injeção: (a) resposta	

obtida via InSAR (adaptado de Mathieson, 2013) e (b) resultado obtido via acoplamento iterativo CHR-GEM	124
Figura 4.22. Comparação entre as distribuições de pressão de poros após 30 dias de injeção de CO ₂ considerando o comportamento termo-hidro-mecânico do reservatório	125
Figura 4.23. Comparação entre as distribuições de pressão de poros após 1200 dias de injeção de CO ₂ considerando o comportamento termo-hidro-mecânico do reservatório	125
Figura 4.24. Duração dos processos envolvidos no acoplamento THM iterativo CHR-GEM para cada passo de tempo	127
Figura 4.25. Panorama geral do campo Sleipner (produtor de gás) e da formação Utsira (local do armazenamento do CO ₂) (IPCC, 2005).	129
Figura 4.26. Faixa de porosidade da formação Utsira (adaptado de <i>British Geological Survey</i> , 2002).	129
Figura 4.27. Litologia da região de armazenamento composta pelas rochas capeadoras e o aquífero Utsira (adaptado de <i>British Geological Survey</i> , 2002).	130
Figura 4.28. Modelo idealizado aquífero Utsira para análise termo-hidro-mecânica-química empregando CHR-GEM: (a) litologia e (b) vistas da geometria adotada (metros)	133
Figura 4.29. Vista tridimensional do modelo completo empregada na análise CHR-GEM termo-hidro-mecânica-química: (a) malha de elementos finitos e (b) <i>grid</i> de diferenças finitas com destaque para o poço injetor	134
Figura 4.30. Distribuição espacial da fração molar do CO ₂ para o aquífero Utsira resultante do emprego da análise termo-hidro-mecânica-química iterativa – seção transversal passando pelo poço injetor	138
Figura 4.31. Mapas de deslocamentos verticais após 5 anos de injeção obtido via acoplamento CHR-GEM: (a) topo do reservatório e (b) superfície do leito marinho	139
Figura 4.32. Duração dos processos envolvidos no acoplamento THMC iterativo CHR-GEM para cada passo de tempo	140
Figura A.1. Fluxograma para a determinação constante de equilíbrio por equação de estado (adaptado de TAREK, 2010)	177
Figura B.1. Diagrama PV para uma substância pura (Fernandes <i>et al.</i> , 2006)	179

Figura B.2. Isotermas para: (a) $T > T_c$ e (b) $T < T_c$ (Fernandes *et al.*, 2006) 180

Figura C.1. Idealização e modelo numérica da coluna de adensamento termo-poroelástica empregada na avaliação da formulação do programa ABAQUS 191

Figura C.2. Comparações entre as dissipações do excesso de pressões de poros considerando diferentes formulações termo-hidro-mecânicas 192

Figura C.3. Comparações entre as evoluções temporais da temperatura considerando diferentes formulações termo-hidro-mecânicas 193

Figura C.4. Comparações entre os deslocamentos da superfície considerando diferentes formulações hidro-mecânicas e termo-hidro-mecânicas 193

Lista de quadros

Quadro 2.1. Vantagens, desvantagens e capacidade de armazenamento de CO ₂ em meios geológicos (adaptado de HEYBERGER & MERCIER, 2005)	26
Quadro 2.2. Principais interações fenomenológicas encontradas em meios porosos (adaptado de FRYDMAN & FONTOURA, 2001).	35
Quadro 2.3. Tipos de processos acoplados (adaptado de TSANG, 1987)	40
Quadro 2.4. Detalhamento dos processos envolvendo o acoplamento THMC (adaptado de LANRU & XIATING, 2003).	41
Quadro 4.1. Propriedades utilizadas na validação da metodologia hidro-mecânica – baseado em Dean <i>et al.</i> (2006) e Lautenschläger (2014)	102
Quadro 4.2. Propriedades utilizadas na validação da metodologia termo-hidro-mecânica	108
Quadro 4.3. Propriedades utilizadas na simulação termo-hidro-mecânica do projeto In Salah	121
Quadro 4.4. Propriedades utilizadas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento de CO ₂ no aquífero Utsira	135
Quadro 4.5. Concentrações iniciais dos componentes aquosos utilizadas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento no aquífero Utsira	136
Quadro 4.6. Reações de equilíbrio químico empregadas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento no aquífero Utsira	136
Quadro 4.7. Reações geoquímicas consideradas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento no aquífero Utsira	136
Quadro 4.8. Parâmetros das reações geoquímicas utilizadas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento no aquífero Utsira	137
Quadro C.1. Propriedades utilizadas na simulação da coluna de adensamento termo-poroelástica	191

Lista de símbolos

a_k	Atividade do componente k .
C	Concentração.
CCS	<i>Carbon Capture and Storage</i>
c_f	Calor específico do fluido e compressibilidade do fluido.
c_s	Calor específico dos sólidos.
c_p	Pseudo-compressibilidade.
c_r	Compressibilidade de rocha.
D^c	Coefficiente de difusão molecular.
D_{ij}	Tensor de dispersão hidrodinâmica.
$1/K$	Compressibilidade da rocha.
$1/K_s$	Compressibilidade da matriz sólida.
e	Energia interna.
E	Módulo de Young.
f	Fugacidade.
g	Aceleração da gravidade.
G	Módulo cisalhante e energia livre de Gibbs.
H_β	Entalpia da reação β .
H_i	Constante de Henry do componente i .
HM	Hidro-mecânico.
i, j, k	Direções dos eixos nos modelos de fluxo.
k	Permeabilidade absoluta.
K	Módulo volumétrico.
$K_{eq,\alpha}$	Constante de equilíbrio químico da reação α .
N_β	Quantidade total de mols do mineral β .
n	Indicativo de tempo no processo iterativo e número de mols.
p	Pressão de poros.
p_i^n	Pressão de poros no passo de tempo n .
p_i^{n+1}	Pressão de poros no passo de tempo $n+1$.
p^o	Pressão de poros inicial.
q	Vazão de fluido e taxa de condução de energia.
$Q\alpha$	Produto de atividade iônica da reação α .
$[Q]$	Matriz de acoplamento – pressão.
$[H]$	Matriz de acoplamento – temperatura.
$\{\Delta F_p\}$	Vetor de carregamentos nodais – pressão.

$\{\Delta F_T\}$	Vetor de carregamentos nodais – temperatura.
$\{\Delta p\}$	Vetor de pressões de poros.
$\{\Delta T\}$	Vetor de temperaturas.
R	Constante universal dos gases.
R_{aq}	Taxas de reação aquosas.
R_{mn}	Taxas de reação mineral.
S	Saturação e entropia.
t	Tempo.
T	Temperatura.
THM	Termo-hidro-mecânico.
$THMC$	Termo-hidro-mecânico-químico.
u	Vetor de deslocamentos nodais (u, v, w).
u	Deslocamento e velocidade na direção x.
V	Volume e energia cinética.
v_f	Velocidade de fluxo e de reação.
x_m	Fração molar do componente m na fase líquida.
y_m	Fração molar do componente m na fase gasosa.
z_m	Fração molar do componente m .
α	Coefficiente de Biot e dispersividades.
β	Coefficiente de expansão térmica.
λ	Condutividade térmica e parâmetro de Lamé.
ε_v	Deformação volumétrica.
μ	Viscosidade do fluido e potencial químico.
ν	Coefficiente de Poisson.
ρ	Massa específica.
ρ_w	Massa específica da água.
ρ_β	Massa específica do mineral β .
Δ	Indicador de variação de uma propriedade.
ε	Deformação.
ϕ	Porosidade e coeficiente de fugacidade.
ϕ_{ch}	Porosidade devido às reações geoquímicas.
σ	Tensões.
τ	Tortuosidade do meio poroso.
o	Sobrescrito indicativo de inicial.

Parte I: “Déjà vu”

*“Home is behind, the world ahead
and there are many paths to tread
through shadow, to the edge of night
until the stars are all alight (...)”*
(Howard Shore – *The Steward of Gondor*)

Parte II: “Eternity”

*“(...) We move in circles
balanced all the while
on a gleaming razor’s edge
A perfect sphere
colliding with our fate
this story ends where it began”*
(Dream Theater – *Octavarium*)

1 Introdução

1.1 Relevância e motivação

Considerando cenários de exploração de hidrocarbonetos mais complexos, como os reservatórios do pré-sal compostos por óleo leve, e métodos de recuperação avançados, como por exemplo, a injeção simultânea/alternada de dióxido de carbono e água, faz-se necessária a utilização de modelos numéricos que levem em consideração fenômenos que não podem ser simulados somente com o modelo *blackoil*. De maneira geral, quando se faz necessária a descrição detalhada dos fluidos presentes no reservatório bem como suas interações, lança-se mão de um modelo composicional. Além disso, o sequestro e armazenamento de CO₂ tem se tornado uma discussão constante na indústria do petróleo, sendo assim necessário compreender seus fenômenos relacionados de forma a prever o comportamento dos materiais envolvidos, isto é, meio poroso, fluido e suas interações.

Atrelado aos cenários complexos, o estudo de fenômenos acoplados em meios porosos – notadamente térmicos, hidráulicos, químicos e mecânicos – tem se apresentado como essencial na previsão de comportamento de meios geológicos no que diz respeito à disposição de rejeitos radioativos, armazenamento de dióxido de carbono, engenharia de reservatórios geotérmicos e geomecânica de reservatórios. Evidentemente, cada classe de problema apresenta seus fenômenos preponderantes, de maneira que o conhecimento do comportamento como um todo se faz necessário, uma vez que a utilização de hipóteses simplificadoras costuma fazer parte da rotina dos analistas.

No universo dos fenômenos acoplados em meios porosos, existem diversas maneiras de levar em consideração as interações entre os efeitos envolvidos, os quais podem ser divididos em quatro categorias: acoplamento total, acoplamento explícito, acoplamento iterativo e pseudo-acoplamento. De fato, cada um dos esquemas apresenta vantagens e desvantagens em relação ao seu emprego. Tendo em vista o elevado grau de complexidade dos problemas geomecânicos a serem

resolvidos na atualidade, existe uma clara tendência, por parte dos pesquisadores, de utilização das formas de acoplamento empregando programas diferentes (acoplamento explícito, acoplamento iterativo e pseudo-acoplamento). Tal fato pode ser facilmente compreendido, uma vez que se busca empregar programas específicos (de amplo conhecimento em suas respectivas áreas de aplicação) e integrá-los de maneira consistente para representar o fenômeno acoplado que se deseja modelar.

Neste contexto, esta Tese se dedica ao desenvolvimento de um esquema de acoplamento iterativo – empregando um programa de análise de tensões e um programa de simulação de fluxo composicional – que leve em consideração os efeitos de variação de temperatura, variação de saturação e pressão de poros, variação do estado de tensões/deformações e variação do volume poroso pelas reações geoquímicas (dissolução/precipitação) de forma acoplada, objetivando seu emprego em cenários de sequestro de dióxido de carbono em meios geológicos.

1.2 Objetivos

O objetivo principal desta Tese consiste em desenvolver um esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativo visando a simulação do armazenamento geológico de dióxido de carbono.

Para alcançar o objetivo principal, estabeleceram-se os seguintes objetivos secundários:

- Verificar o atual estado do conhecimento nos tópicos de principal relevância ao escopo desta pesquisa, quais sejam: modelagem do processo de injeção de CO₂ em reservatórios; simulação multifásica multicomponente; fenômenos acoplados em meios porosos e esquemas de acoplamento.
- Criar uma metodologia de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico robusta para emprego na geomecânica de reservatórios.
- Ampliar o código de acoplamento hidro-mecânico existente (desenvolvido pelo Grupo de Geomecânica Computacional ATHENA/ GTEP/ PUC-Rio) através da inclusão dos efeitos térmicos e químicos empregando os programas: ABAQUS/CHRONOS (análise de tensões) e GEM (análise de fluxo).
- Validar e aplicar a metodologia de acoplamento desenvolvida, considerando o problema hidro-mecânico, termo-hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico-químico, através da construção de modelos numéricos

(reservatório e rochas adjacentes) para o estudo do armazenamento geológico de dióxido de carbono.

- Avaliar o comportamento do reservatório frente às diversas formas de solicitações provenientes do acoplamento e compará-las com resultados disponíveis na literatura.

1.3

Organização da tese

A presente Tese de Doutorado está organizada em seis capítulos e três apêndices, cuja estrutura e conteúdo podem ser brevemente apreciados nos itens elencados na sequência.

- **Capítulo 1 - Introdução:** este capítulo apresenta a relevância e motivação do presente estudo bem como o objetivo principal da Tese e os objetivos secundários.
- **Capítulo 2 - Revisão bibliográfica:** este capítulo apresenta uma breve revisão da literatura acerca dos três tópicos principais relacionados ao tema principal desta Tese. O primeiro tópico, denominado "Processo de injeção de CO₂ em meios geológicos", versa sobre os conceitos fundamentais envolvidos nos processos de sequestro e armazenamento de dióxido de carbono. O segundo tópico denominado "Fenômenos acoplados em meios porosos" delinea os aspectos fundamentais dos fenômenos acoplados preponderantes em meios porosos, fazendo referência à geomecânica de reservatórios. O terceiro tópico apresenta um panorama geral das diferentes formas de avaliação numérica associadas à injeção de dióxido de carbono em meios porosos.
- **Capítulo 3 – Desenvolvimento de um esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativo:** este capítulo apresenta o desenvolvimento de uma metodologia de acoplamento THMC iterativo em conjunto com uma revisão bibliográfica a respeito de cada fase do processo. O capítulo está dividido em quatro partes; iniciando com a formulação do problema termo-hidro-mecânico, passando pela proposição de um esquema de acoplamento THM iterativo e finalizando com a estratégia para inclusão dos efeitos químicos de forma a configurar a metodologia THMC iterativa.
- **Capítulo 4 – Validação e aplicação das metodologias de acoplamento HM, THM e THMC iterativo:** este capítulo apresenta a validação/aplicação da implementação CHRONOS–GEM considerando os seguintes fenômenos integrados: acoplamento hidro-mecânico, acoplamento termo-hidro-mecânico e acoplamento termo-hidro-mecânico-químico.
- **Capítulo 5 – Considerações finais:** este capítulo apresenta as principais conclusões obtidas nesta Tese, de acordo com os objetivos estabelecidos, sendo enfatizado o potencial de aplicação do esquema de acoplamento desenvolvido nas diversas áreas relacionadas à extração de energia.

Sugestões para prosseguimento da linha de pesquisa também são apresentadas neste capítulo.

- **Capítulo 6 – Referências Bibliográficas:** este capítulo apresenta a listagem das referências que serviram como pavimento nas diversas etapas da Tese.
- **Apêndice A – Simulação de fluxo composicional:** este apêndice apresenta, em linhas gerais, as equações que governam a simulação de fluxo multifásico multicomponente.
- **Apêndice B – Considerações sobre a termodinâmica química:** este apêndice apresenta sucintamente os conceitos fundamentais relacionados ao comportamento de substâncias, equilíbrio de fases e equilíbrio químico. Tais conceitos são importantes para o entendimento da simulação de fluxo composicional.
- **Apêndice C – Validação da metodologia termo-hidro-mecânica do ABAQUS:** este apêndice apresenta a aplicação do programa ABAQUS na previsão do comportamento termo-hidro-mecânico de uma coluna de adensamento termo-poroelástica. O objetivo está relacionado com a verificação da formulação, uma vez que esta serviu como elemento de comparação na fase de validação da metodologia proposta.

2 Revisão bibliográfica

O objetivo desta revisão bibliográfica é fornecer ao leitor uma visão global do universo onde esta Tese está inserida. Para tanto, subdividiu-se este capítulo em três partes para que os aspectos mais relevantes sobre os processos de sequestro e armazenamento de dióxido de carbono, fenômenos acoplados em meios porosos, bem como análises numéricas associadas à injeção de CO₂ pudessem ser cobertos de forma satisfatória.

2.1 Processo de injeção de CO₂ em meios geológicos

Em termos ambientais, a injeção de dióxido de carbono tem sido discutida intensamente pela comunidade técnica como alternativa para a mitigação do efeito estufa. Segundo IEA (2007), o potencial do sequestro e armazenamento de dióxido de carbono (CCS – *Carbon Capture and Storage*) pode contribuir para a redução das emissões de CO₂ em 20% em 2030 e 40% para o fim do século. Em termos globais a queima de combustíveis fósseis é responsável por 70% do dióxido de carbono liberado na atmosfera, enquanto que os 30% restantes estão relacionados ao desmatamento e uso do solo (ROCKETT *et al.*, 2011).

Segundo o relatório do IPCC (*Intergovernmental Panel on Climate Change*) apresentado em 2013, entre 1750 e 2011 foram emitidos aproximadamente 1340 GtCO₂ na atmosfera devido a atividades relacionadas a combustão de combustíveis fósseis e produção de cimento. O relatório também aponta que somente no ano de 2011 foram emitidos, aproximadamente, 35 GtCO₂.

Baseado nas metas de redução de emissões de médio e longo prazo acordadas no Protocolo de Quioto, são necessários elevados investimentos para o sequestro e armazenamento de CO₂, cujos custos se equiparam aos custos envolvidos no emprego das energias nuclear e renováveis (HERZOG *et al.*, 1997). Neste contexto, Bachu (2000) define *sequestro* como a remoção de CO₂ tanto de fontes antropogênicas quanto da atmosfera; e *armazenamento* como a disposição deste composto químico permanentemente ou por períodos geológicos.

Bachu (2000) também cita diversas opções para o armazenamento do CO₂, como por exemplo: florestas, oceanos e meios geológicos. Naturalmente, os dois primeiros apresentam uma série de efeitos sócio-econômico-ambientais. Em relação às florestas, considerando a quantidade de gás emitida, seria necessária uma área grande para que significativas quantidades de CO₂ fossem sequestradas. Além disso, as questões socioeconômicas seriam importantes, uma vez que as áreas destinadas ao sequestro estariam em conflito com outros diversos possíveis usos do solo. Segundo a IEA (1997), os oceanos apresentam o maior potencial de armazenamento de CO₂. No entanto, os efeitos da disposição do composto químico, principalmente no que se refere aos efeitos geoquímicos no bioma marinho ainda é um tema pouco conhecido (BACHU, 2000). Aliado a isso, existem também questões operacionais e logísticas que poderiam gerar conflitos políticos e ambientais, tornando o processo inviável.

A disposição em meios geológicos, portanto, resta com alternativa viável para mitigar o processo de aquecimento global. Adicionalmente, Bachu (2000) elenca as duas principais vantagens da disposição em meios geológicos: aceitabilidade pública e tecnologia consolidada. Em termos tecnológicos, a disposição em meios geológicos apresenta a vantagem de utilizar o conhecimento e estrutura da indústria do petróleo.

Bachu (2000) lista os principais meios geológicos atrativos para o armazenamento de dióxido de carbono, quais são:

- a) cavernas de sal;
- b) reservatórios de petróleo – recuperação avançada;
- c) jazidas de carvão – recuperação de metano;
- d) reservatórios depletados;
- e) aquíferos salinos profundos.

Considerando os cinco meios geológicos apresentados e os dois anteriores (florestas e oceano), Bachu (2000) salienta que o armazenamento em aquíferos profundos em bacias sedimentares apresenta o maior potencial de aplicabilidade. Ainda, aquíferos salinos apresentam o maior potencial de sequestro e armazenamento de CO₂ em termos volumétricos, econômicos, logísticos e de impactos ambientais.

Relacionado ao armazenamento em meios geológicos, Bachu & Gunter (1999) listam alguns critérios que devem ser levados em consideração. São eles:

- a) geológico;
- b) hidrodinâmica e geotermia;
- c) potencial de hidrocarboneto e maturidade da bacia;
- d) econômico;
- e) socioeconômico.

De acordo com Heyberger & Mercier (2005), em um panorama global, existem vantagens e desvantagens relacionadas com cada um dos possíveis candidatos ao armazenamento de dióxido de carbono, notadamente reservatórios, jazidas de carvão e aquíferos salinos. O Quadro 2.1 apresenta uma comparação entre os três meios geológicos supracitados.

Pelos dados apresentados no Quadro 2.1, em termos de capacidade de armazenamento, os aquíferos salinos dispõem de uma grande capacidade mesmo com as incertezas relacionadas à caracterização. Contudo, o panorama ideal seria uma combinação dos três meios geológicos de forma a superar as limitações de cada um isoladamente.

Quadro 2.1. Vantagens, desvantagens e capacidade de armazenamento de CO₂ em meios geológicos (adaptado de HEYBERGER & MERCIER, 2005)

Meio geológico	Capacidade de armazenamento global de CO ₂	Vantagens	Desvantagens
<i>Reservatórios de hidrocarbonetos</i>	930 Gt	<ul style="list-style-type: none"> - Existência de estruturas trapeadoras impermeáveis a gases não reativos - Capacidade de armazenamento conhecida - Potencial econômico para recuperação avançada de petróleo (EOR) 	<ul style="list-style-type: none"> - Geralmente distantes das fontes emissoras de CO₂
<i>Jazidas de carvão (extração inviável)</i>	40 Gt	<ul style="list-style-type: none"> - Próximas dos locais de emissão de CO₂ - Potencial econômico através da recuperação de metano 	<ul style="list-style-type: none"> - Problemas de injetividade devido à baixa permeabilidade do carvão - Capacidade limitada de armazenamento
<i>Aquíferos salinos profundos</i>	400 – 10000 Gt	<ul style="list-style-type: none"> - Distribuição geográfica ampla e vasto potencial de armazenamento - Instalações próximas das fontes emissoras de CO₂ - Fontes de água não-potável 	<ul style="list-style-type: none"> - Caracterização ainda pobre

Uma experiência prática bem documentada de captura e armazenamento geológico de dióxido de carbono diz respeito a um aquífero no Mar do Norte, na Noruega, onde o CO₂ é extraído do campo de Sleipner e injetado em um aquífero (Utsira) de 250 metros de espessura a uma profundidade de 800 metros do leito marinho (BAKLID *et al.*, 1996). A motivação para o projeto está relacionada com a necessidade de encontrar uma alternativa para mitigar o impacto da emissão de 25 Mt de CO₂ previstos durante a vida útil do campo (TORP & GALE, 2002). Maiores detalhes sobre os reservatórios e o projeto podem ser encontrados em Korbol & Kaddour (1995) e Marçon (2009).

Outro projeto que merece ser destacado é o campo de Weyburn-Midale, no Canadá. Diferentemente do caso anterior, Weyburn-Midale são dois campos terrestres que vêm empregando técnicas de recuperação avançada (EOR), especialmente a injeção de CO₂. O projeto foi iniciado em 2000 e tem duração estimada de 15 anos (COSTA, 2006). Este projeto apresenta uma particularidade interessante, o CO₂ utilizado para a recuperação de petróleo é proveniente de uma planta de gaseificação pertencente aos Estados Unidos (Dakota do Norte), que está a uma distância de aproximadamente 300 km (TORP & BROWN, 2004; COSTA, 2006). De acordo com PTRC (2015), são injetadas diariamente 6500 toneladas de CO₂, aproximadamente, no campo de Weyburn e outras 2000 toneladas de CO₂ no campo de Midale.

Em 2004 foi iniciado, na Argélia, outro projeto de armazenamento de CO₂ em larga escala. Desde o início do programa, já foram armazenados mais de 3.8 Mt de CO₂ no campo terrestre de gás depletado conhecido como In Salah (RINGROSE *et al.*, 2013). Parte do gás natural produzido no próprio campo e de campos próximos (ricos em CO₂) tem sido reinjetada para fins de armazenamento geológico (RUTQVIST *et al.*, 2010).

Em termos de coletânea de dados e de monitoramento em curto e médio prazo, os três casos supracitados apresentam uma vasta literatura a respeito, uma vez que servem como base fundamental para as agências reguladoras e companhias de petróleo interessadas em desenvolver projetos de captura e armazenamento de CO₂.

2.1.1

Potencial de sequestro e armazenamento de CO₂ no Brasil

Por questões hidrogeológicas favoráveis, a matriz energética brasileira pode ser considerada limpa. Segundo Beck *et al.* (2011), mais de 80% da energia elétrica é produzida por hidrelétricas, sendo o restante dividido entre combustíveis fósseis, biomassa e nuclear. A maior parcela de emissão de CO₂ (75%) é proveniente do desmatamento (ROCKETT *et al.*, 2011). Adicionalmente, os autores citam também as principais fontes emissoras relacionadas à indústria: cimenteira, energia, refinarias, produção de etileno, siderurgia, biomassa, etanol e amônia, conforme pode ser observado na Figura 2.1. Embora o Brasil não seja um grande emissor, projetos relacionados com carvão e a produção de petróleo dos reservatórios do “Pré-sal” podem aumentar o nível de emissões.

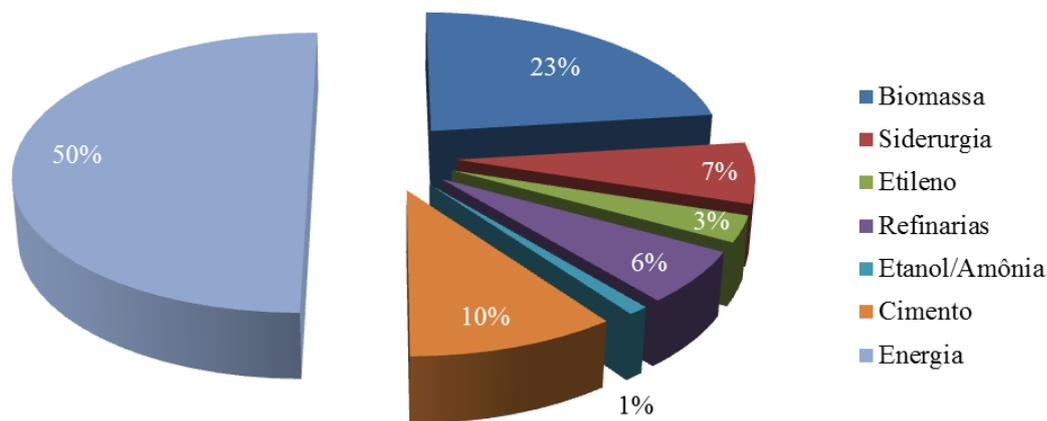


Figura 2.1. Fontes emissoras de dióxido de carbono nos diferentes setores da indústria brasileira (adaptado de IGLESIAS *et al.*, 2014)

A contribuição brasileira, de acordo com a meta definida na COP 21, inclui uma redução das emissões de gases do efeito estufa (*Greenhouse Gas – GHG*) de 37% até 2025 e 43% até 2030, tomando como referência o ano de 2005 (BRASIL, 2016). Além disso, o país tem buscado estudar suas bacias sedimentares de forma a contribuir para o processo de captura e armazenamento. Considerando isso, foi desenvolvido um projeto de mapeamento relacionado à captura, transporte e armazenamento do CO₂. Este mapeamento foi condensado no denominado *Brazilian Atlas of CO₂ Capture and Geological Storage*, desenvolvido pela PUCRS (Machado *et al.*, 2010; Rockett *et al.*, 2011; Machado *et al.*, 2013 e Ketzer *et al.*, 2014).

O mapeamento realizado identificou as fontes emissoras de dióxido de carbono bem com as bacias sedimentares logisticamente viáveis. A Figura 2.2 apresenta um mapa de densidade de emissões de CO₂ conjuntamente com as bacias sedimentares brasileiras.

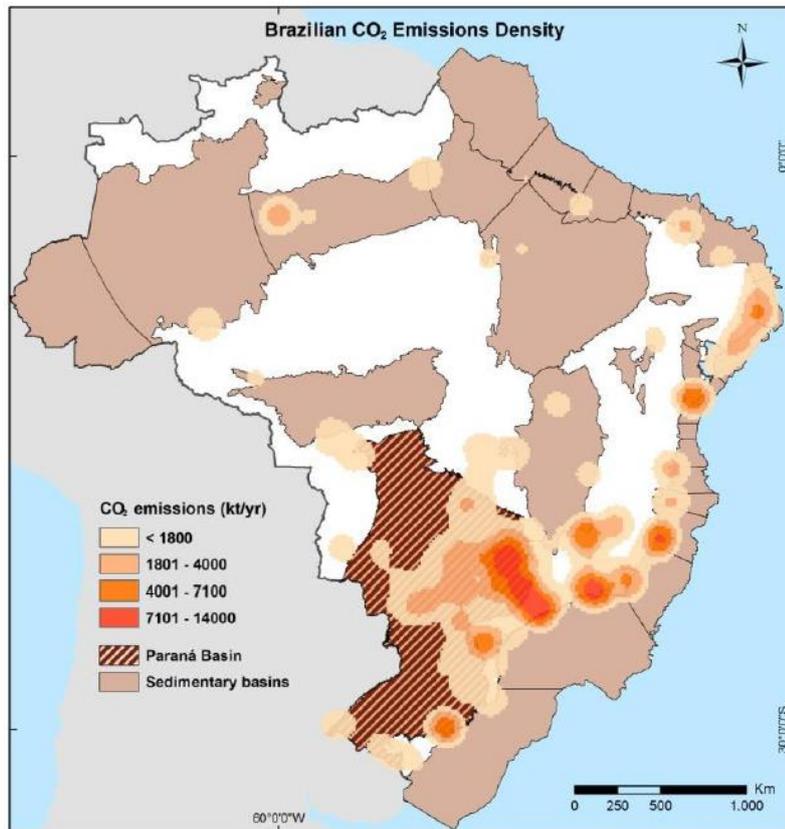


Figura 2.2. Mapa de densidade de emissões de CO₂ e as bacias sedimentares brasileiras (MACHADO *et al.*, 2013)

Em relação às possíveis unidades geológicas de armazenamento, Rockett *et al.* (2011) mapearam 32 bacias sedimentares (na costa e fora da costa). Destas 32 bacias, 22 estão em processo de exploração e produção de hidrocarbonetos. Os autores supracitados afirmam que as bacias sedimentares brasileiras tem um elevado potencial de armazenamento, isto é, podendo armazenar mais de 2035 Gt de CO₂ em aquíferos, campos de petróleo e jazidas de carvão, conforme ilustrado na Figura 2.3.

Segundo o levantamento realizado, a maioria das fontes emissoras de dióxido de carbono está localizada nas bacias do Paraná (135 MtCO₂) e de Santos (80 MtCO₂). Relacionando a capacidade de armazenamento das bacias sedimentares e considerando um raio de ação viável (logística) de 300 km, Rockett *et al.* (2011) apresentam o potencial de armazenamento da bacia do

Paraná conforme apresentado na Figura 2.4. Cabe ser mencionado que os 300 km supracitados se referem à distância máxima economicamente viável, a partir da fonte emissora, de acordo com o IPCC (KETZER *et al.*, 2014).

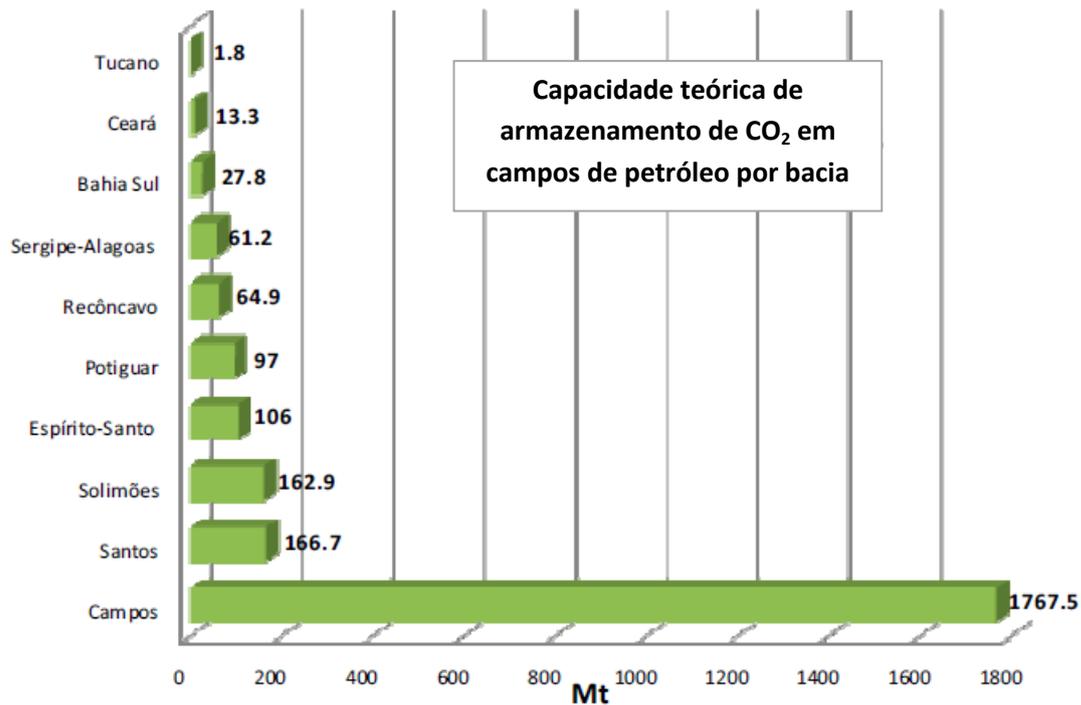


Figura 2.3. Capacidade teórica de armazenamento de CO₂ em bacias sedimentares brasileiras (adaptado de ROCKETT *et al.*, 2011)

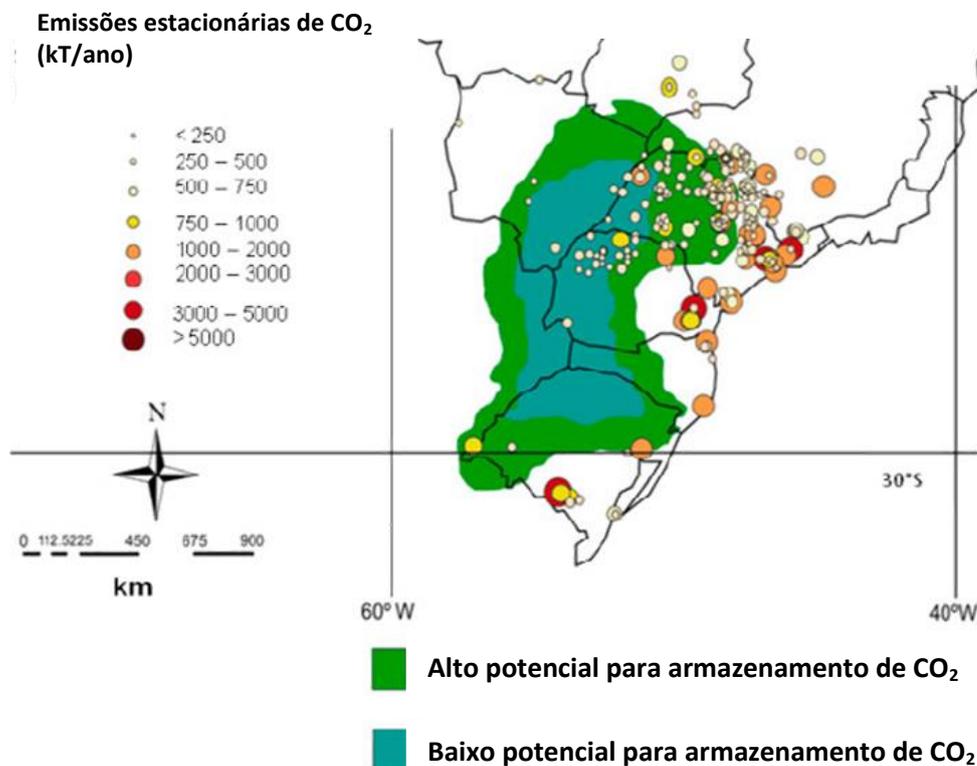


Figura 2.4. Fontes emissoras de CO₂ na bacia do Paraná (adaptado de ROCKETT *et al.*, 2011)

Ainda em relação à bacia do Paraná, a Figura 2.5 apresenta uma seção transversal típica. Pode ser observada a existência de diversas falhas que podem tornar o processo de armazenamento mais complexo, uma vez que existe a necessidade de prever o possível processo de reativação devido à injeção de CO₂, além dos estudos relacionados à integridade da rocha capeadora, frente aos esforços geomecânicos e geoquímicos.

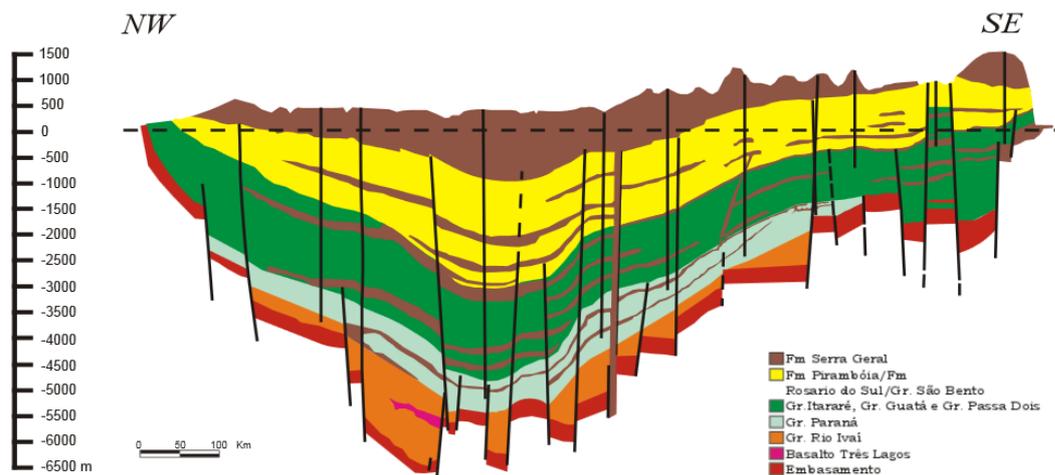


Figura 2.5. Seção transversal esquemática da bacia do Paraná (ANP, 2013)

Alguns estudos relacionados à bacia do Paraná já foram iniciados, como por exemplo, Lima (2010), no qual foram extraídas amostras de um potencial aquífero salino (Grupo Guatá) com o objetivo de avaliar a reatividade química devido ao armazenamento de CO₂.

Embora a bacia do Paraná tenha um elevado potencial de armazenamento de dióxido de carbono, questões políticas e socioambientais podem inviabilizar sua candidatura, uma vez que o possível escape de CO₂ pode contaminar o maior aquífero de água doce do planeta, o aquífero Guarani. Román (2011) apresenta uma revisão interessante sobre aspectos socioeconômicos, políticos e ambientais de captura e armazenamento de CO₂ entre alguns países em desenvolvimento, como o Brasil, Índia e África do Sul.

Ainda em relação às potencialidades de armazenamento de dióxido de carbono em bacias sedimentares brasileiras, Ketzer *et al.* (2014) elenca alguns passos fundamentais para a escolha de uma bacia, isto é:

- a) ocorrência de depósitos de carvão;
- b) produção ativa de hidrocarbonetos;
- c) dados sobre a existência de formações salinas;

- d) determinação da capacidade teórica de armazenamento;
- e) existência de campos de óleo/gás maduros;
- f) proximidade das fontes emissoras;
- g) existência de uma infraestrutura de transporte (dutos, terminais).

Além das questões geopolíticas e socioeconômicas, é evidente que análises robustas (geoquímicas e geomecânicas) serão fundamentais, no âmbito brasileiro, de forma a garantir que o processo de armazenamento de CO₂ possa ser realizado de forma segura e que o composto se mantenha estável por longos períodos de tempo (escala geológica). Adicionalmente ao armazenamento em bacias sedimentares, uma estimativa dos volumes recuperáveis de metano nas jazidas brasileiras, via recuperação primária e avançada (associada à injeção de CO₂), pode ser encontrada em Godec *et al.* (2014).

2.1.2 Mecanismos de aprisionamento de CO₂

O armazenamento de dióxido de carbono em meios geológicos ocorre através de uma combinação de mecanismos de aprisionamentos físicos e químicos (IPCC, 2005). O aprisionamento físico pode ser dividido em: estrutural (estratigráfico) e aprisionamento residual. Já o aprisionamento químico pode ocorrer de duas maneiras: por solubilidade e mineral. Uma breve descrição de cada um será apresentada a seguir.

- **Aprisionamento físico**

Conforme já mencionado, o aprisionamento físico pode ocorrer das seguintes maneiras:

- *Aprisionamento estrutural e stratigráfico*

Este tipo de aprisionamento é dominante em relação aos demais mecanismos. Devido à diferença de massa específica entre o dióxido de carbono e a água salgada, o CO₂ migra através dos poros até ser “barrado” pela rocha capeadora.

- *Aprisionamento por gás residual*

Com a injeção de CO₂ ocorre sua migração para o topo do reservatório. A continuidade do processo faz com que mais CO₂ migre e, por efeitos de permeabilidade relativa, parte deste composto químico fique retido nos poros da rocha após o término da injeção.

- **Aprisionamento químico**

Assim como realizado para o aprisionamento físico, o aprisionamento químico pode ser dividido em:

- *Aprisionamento por solubilidade*

Assim que o CO₂ entra em contato com a água salgada ocorre o processo de dissolução. A taxa de dissolução é função da pressão, temperatura e da quantidade de dióxido de carbono que entra em contato com a água salgada (LIMA, 2010). Com a dissolução, a água salgada rica em CO₂ migra para o fundo do reservatório pela diferença de massa específica.

- *Aprisionamento mineral*

Assim como o aprisionamento por solubilidade, o aprisionamento mineral é dependente das composições químicas da água de formação e da rocha além da pressão e temperatura do sistema (LIMA, 2010). Portanto, o aprisionamento mineral é a fixação de CO₂ em mineral (carbonatos) devido a reações geoquímicas entre a água contida no aquífero e os minerais presentes na rocha. A título de exemplo, o carbono pode ser imobilizado, em fase sólida, como calcita, dolomita, siderita, magnesita, dentre outros (HITCHON, 1996).

Os mecanismos de trapeamento podem ser dispostos relacionando a segurança e a contribuição pela escala de tempo analisado, conforme apresentado na Figura 2.6.

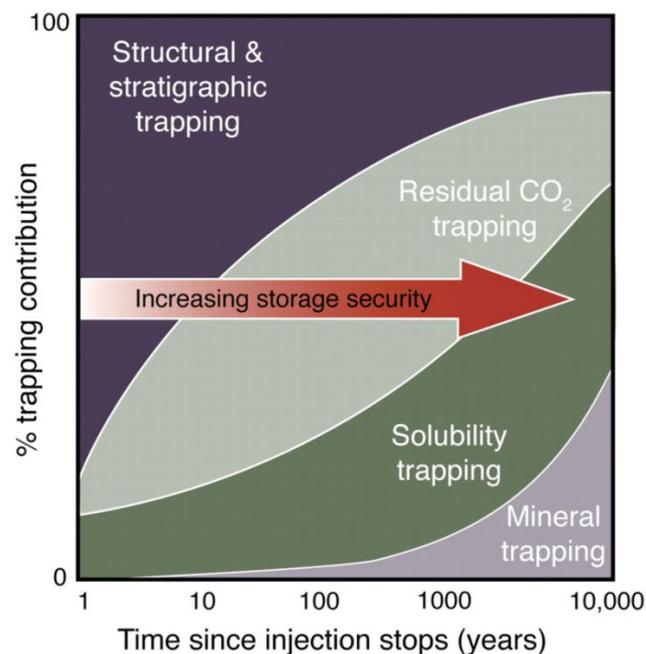


Figura 2.6. Mecanismos de aprisionamento de CO₂ em relação ao tempo e segurança do armazenamento (IPCC, 2013)

Pelas definições apresentadas anteriormente, é evidente que o mecanismo de trapeamento mineral é mais eficiente, no entanto, o tempo necessário para que as reações geoquímicas ocorram e o trapeamento seja efetivo pode ser muito longo dependendo das condições termodinâmicas do sistema. A maior parcela de aprisionamento diz respeito ao estrutural, logo, a partir de um viés geomecânico, deve-se atentar para um possível fraturamento da rocha capeadora devido à pressão exercida pela fase gasosa não dissolvida na água de formação (trapeamento por solubilidade).

Um projeto bastante interessante lançado em 2007, resultado de uma cooperação entre cientistas franceses, islandeses e americanos, tem encontrado resultados promissores quanto ao armazenamento geológico de CO₂ em rochas basálticas localizadas na Islândia (Matter *et al.*, 2009, 2011, 2016, Aradóttir *et al.*, 2011 e Gislason *et al.*, 2014). O objetivo do projeto, denominado *CarbFix*, é otimizar os métodos industriais envolvidos no armazenamento geológico do dióxido de carbono em escala de campo. Em relação à eficiência, Gislason *et al.* (2014) concluem que a escala de tempo do processo de mineralização do CO₂ pode ser reduzida de milhares de anos (bacias sedimentares) para anos (rochas basálticas), promovendo assim, uma redução substancial dos riscos associados à injeção massiva de CO₂, além da melhora da aceitação pública quanto ao processo.

2.2 Fenômenos acoplados em meios porosos

Este item tem como objetivo apresentar conceitos fundamentais a respeito dos fenômenos acoplados em meios porosos, enfatizando as principais formas de acoplamento observadas em campo e empregadas na modelagem numérica. Além disso, foca-se também nas diferentes técnicas disponíveis para consideração da interatividade entre os processos envolvidos no acoplamento.

2.2.1 Panorama geral

No universo de aplicações para engenharia, diversos fenômenos possuem leis constitutivas que descrevem a relação entre as forças geradoras e a resposta do sistema (ARAÚJO, 2005). Como exemplos, podemos citar:

- *lei de Darcy* (que relaciona o fluxo de fluidos a gradientes de pressão);
- *lei de Fourier* (que relaciona o fluxo de calor a gradientes de temperatura);
- *lei de Fick* (que relaciona a difusão de matéria a gradientes de concentração);
- *lei de Ohm* (que relaciona corrente elétrica a gradientes de potencial elétrico).

No entanto, tais fenômenos, geralmente, ocorrem de maneira combinada, sendo que dificilmente um material (especialmente um meio poroso) apresentará a ocorrência de apenas um destes processos isoladamente. Em um meio geológico (solo ou rocha) é frequente a observação da interdependência de diversos fenômenos, fato que configura os processos acoplados. Esta interdependência pode gerar fluxo de fluido não somente pelo gradiente de pressão, mas também devido a gradientes térmicos e químicos, por exemplo. O Quadro 2.2, apresentado por Frydman & Fontoura (2001), resume algumas das relações fundamentais envolvidas no comportamento de meios porosos.

De acordo com Zienkiewicz & Chan (1984), processos (formulações) acoplados são aqueles aplicados a múltiplos domínios nos quais as variáveis dependentes descrevem diferentes fenômenos físicos. Nestes processos, os domínios não podem ser resolvidos separadamente e as variáveis dependentes não podem ser eliminadas explicitamente.

Quadro 2.2. Principais interações fenomenológicas encontradas em meios porosos (adaptado de FRYDMAN & FONTOURA, 2001).

Força Fluxo	<i>Gradiente hidráulico</i>	<i>Gradiente de potencial químico</i>	<i>Gradiente de temperatura</i>	<i>Gradiente de potencial elétrico</i>
<i>Fluido</i>	Difusão hidráulica (lei de Darcy)	Osmose química	Termo-difusão	Eletro-osmose
<i>Soluto (íons)</i>	Advecção	Difusão molecular (lei de Fick)	Efeito Soret	Eletroforese
<i>Calor</i>	Transferência de calor	Efeito Dufour	Condução térmica (lei de Fourier)	Efeito Peltier
<i>Corrente</i>	Fluxo de corrente	Difusão de corrente	Efeito Seebeck	Condução elétrica (lei de Ohm)

Associando procedimentos numéricos a fenômenos de acoplamento, Zienkiewicz & Chan (1984) também classificam os problemas acoplados em duas categorias, quais sejam:

- *Classe I*: problemas onde existe a sobreposição de vários domínios (total ou parcialmente), por exemplo, interação solo-fluido dos poros. Nesta classe o acoplamento ocorre via equações diferenciais utilizadas para descrever diferentes fenômenos físicos;
- *Classe II*: problemas onde o acoplamento ocorre somente nas interfaces do domínio, por exemplo, interação fluido-estrutura. Este tipo de acoplamento ocorrerá através da interação entre as condições de contorno impostas. Esta classe pode ser subdividida em duas, ou seja,
 - a) Problemas onde diferentes processos físicos (variáveis dependentes) ocorrem em diferentes domínios;
 - b) Problemas onde diferentes procedimentos numéricos são empregados nos diferentes domínios para resolver os mesmos processos físicos.

A descrição matemática de interações fenomenológicas apresenta um grau de complexidade elevado, uma vez que existe a necessidade de superar duas grandes barreiras: compreensão profunda dos processos preponderantes (intimamente ligado à tomada de hipóteses simplificadoras) e determinação experimental das variáveis descritas no modelo matemático (relacionado à aplicabilidade da formulação desenvolvida).

No universo de meios geológicos, os estudos de fenômenos acoplados foram estimulados principalmente pela observação do processo de adensamento de uma massa de solo. Dois mecanismos têm um papel chave na interação entre o fluido e o material poroso: (i) um aumento da pressão de poros induz a uma dilatação da rocha e (ii) a compressão da rocha causa um aumento da pressão de poros, caso o fluido não possa escapar da rede de poros. De fato, se o excesso de pressão de poros gerado pelo carregamento é dissipado, ocorre a deformação do meio poroso.

A redução do volume poroso de um solo, devido à expulsão de água de seus vazios, foi amplamente estudada por Terzaghi (1925) tendo como resultado, a conhecida teoria do adensamento unidimensional. De fato, os estudos realizados por Terzaghi serviram como lastro para a compreensão da interação entre a

difusão e as deformações (fenômeno hidro-mecânico), observada rotineiramente em obras de engenharia civil.

Anos mais tarde, Biot (1935, 1941) apresenta o que podemos considerar como um marco no escopo do acoplamento hidro-mecânico, a teoria do adensamento tridimensional (conhecida também como a teoria da poroelasticidade linear). A racionalização dos fenômenos apresentada por Biot tem sido empregada como referencial para uma ampla gama de trabalhos subsequentes como: Biot (1956); Biot & Willis (1957); Cryer (1963); Prevost (1981); Zienkiewicz & Shiomi (1984); Cheng & Detournay (1988); Detournay & Cheng, (1993); Charlez (1991), Lewis & Schrefler (2000); Wang (2000); Coussy, (2004), dentre outros.

Conforme discutido anteriormente, uma das dificuldades intrínsecas à descrição matemática de fenômenos acoplados está relacionada ao significado físico das constantes envolvidas. Um exemplo bastante ilustrativo deste fato é o trabalho apresentado por Rice & Cleary (1976) que relaciona os parâmetros poroelásticos, apresentados por Biot (1941), com conceitos bem fundamentados na mecânica dos solos e mecânica das rochas objetivando simplificar a obtenção dos coeficientes.

Paralelamente aos desenvolvimentos e aplicações da teoria da poroelasticidade, podemos citar a consideração de efeitos térmicos em meios porosos, que tem sido estudada extensivamente desde o final da década de 1970, alavancada principalmente pelas demandas energéticas, através da energia geotérmica, e pelos efeitos da disposição de rejeitos radioativos em meios porosos (TSANG, 1987).

De fato, a inclusão dos efeitos térmicos no acoplamento hidro-mecânico – idealizado por Biot (1941) – culminou na criação de uma força-tarefa internacional, incentivada principalmente, pela indústria de energia nuclear. Esta cooperação de centros de pesquisa internacionais é conhecida como DECOVALEX (*DEvelopment of COupled models and their VALidation against EXperiments in nuclear waste isolation*). Este projeto foi dividido em várias fases, e teve como objetivo principal a realização de estudos teórico-experimentais dos processos de acoplamento térmico, hidráulico e mecânico em rochas duras fraturadas visando garantir a segurança dos locais de disposição de rejeitos radioativos (JING *et al.*, 1995). Segundo Chan *et al.* (1995), embora o acoplamento químico (THMC – *Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical*) também

seja influente nos processos de disposição de rejeitos radioativos, os esforços iniciais foram concentrados nas análises THM.

De acordo com Lanru & Xiating (2003) o acoplamento THM tem sido desenvolvido a partir de dois mecanismos bem conhecidos, isto é, a termoelasticidade em sólidos (TM), responsável pela interação entre tensões/deformações e temperatura, e pela teoria da poroelasticidade (HM), responsável pela interação entre a deformabilidade e a pressão de fluido no meio poroso. Estes fenômenos e suas interações podem ser estabelecidos, de forma geral, empregando: estado de equilíbrio pela lei de Hooke, o fluxo de fluido em meios porosos pela lei de Darcy e a condução de calor pela lei de Fourier. Portanto, o sistema termo-hidro-mecânico (THM) pode, então, ser escrito através de três equações diferenciais expressas a partir das leis de conservação de massa, momento e energia, conforme apresentado no Capítulo 3.

De forma mais ampla, os fenômenos acoplados em meios porosos têm sido reportados considerando quatro efeitos principais, isto é, térmicos, hidráulicos, mecânicos e químicos. Segundo Tsang (1987), a combinação destes quatro fenômenos resulta em 11 tipos de acoplamento de vários níveis de importância, os quais estão listados na Quadro 2.3.

A importância da interação destes quatro fenômenos transcende o universo da disposição de rejeitos radioativos e de extração de energia geotérmica, uma vez que permite incluir análises de transporte de contaminantes, recuperação avançada de hidrocarbonetos e avaliação de impactos ambientais (LANRU & XIATING, 2003).

Considerando todos os fenômenos listados na Quadro 2.3, será dada uma atenção especial ao número 9 (THM) e ao número 11 (THMC). Segundo Tsang (1987), o acoplamento termo-hidro-mecânico descreve o comportamento hidro-mecânico do meio poroso não-isotérmico, onde a temperatura e a pressão de fluido podem afetar o volume poroso e vice-versa. Aliado ao processo THM, o fenômeno (geo)químico pode ter influência fundamental na resposta do sistema. Assim, surge o acoplamento termo-químico-hidro-mecânico (THMC) que inclui reações químicas (precipitação e dissolução do meio poroso) e transporte de massa devido às variações de temperatura e pressão de fluido. Os efeitos térmicos podem gerar variações no volume poroso (efeito mecânico), que, por sua vez, resultam na variação da permeabilidade (função da porosidade). As reações

geoquímicas de precipitação e dissolução de minerais também podem afetar a permeabilidade da rocha. Consequentemente, estes efeitos combinados influenciam nos processos de fluxo de fluidos e transporte químico.

Lanru & Xiating (2003) apresentam uma descrição detalhada das interações entre os fenômenos térmicos, hidráulicos, mecânicos e químicos, conforme pode ser observado na Quadro 2.4.

De acordo com Lanru & Xiating (2003), existem fenômenos cuja forma de acoplamento pode ser considerada “forte”, conforme pode ser observado na Figura 2.7. De forma geral, os processos de interação entre as parcelas mecânica, térmica e hidráulica estão bem estabelecidas, com exceção apenas a influência da parcela mecânica sobre os processos térmicos. Este último, geralmente negligenciado, representa a conversão do trabalho mecânico (deformações elásticas) em incremento de energia (contração e expansão térmica).

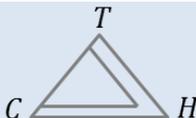
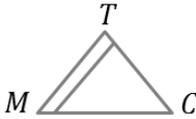
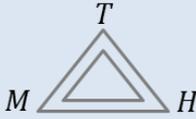
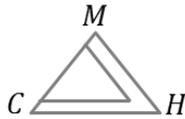
Ainda relacionado à Figura 2.7, ficam evidentes as incertezas associadas à descrição fenomenológica do processo termo-químico-hidro-mecânico na forma totalmente acoplada. A compreensão da interatividade entre os processos envolvidos se resume, basicamente, às parcelas termo-químicas (TC), hidro-químicas (HC), além das parcelas amplamente discutidas (TM e HM). Além disso, as duas primeiras apresentam acoplamento “forte” apenas em uma via. No acoplamento termo-químico, está bem definida a influência da variação de temperatura na cinética das reações geoquímicas (estabilidade mineral) e nos processos de equilíbrio químico. Por outro lado, a variação da temperatura como resultado da perda ou consumo de calor devido às reações químicas consiste de um acoplamento pouco desenvolvido no âmbito da geomecânica.

Em relação ao processo HC, a influência da variação da pressão e saturação dos fluidos nas reações químicas entre os fluidos e o meio poroso é bem estabelecida. Embora os autores considerem a influência dos fenômenos químicos sobre os fenômenos hidráulicos como “fracos”, existem diversas relações, provenientes da geoquímica e hidrogeologia, que relacionam as reações de precipitação e dissolução mineral com parâmetros hidráulicos.

Nos processos discutidos anteriormente, as questões em aberto estão relacionadas à definição se o acoplamento se dá de forma bem estabelecida (“forte” ou “fraco”). No entanto, quando se trata da parcela química-mecânica (CM), uma maior incerteza pode ser percebida. Lanru & Xiating (2003) sugerem a

indefinição de uma forma de acoplamento entre tais fenômenos. A influência das reações geoquímicas (precipitação/dissolução mineral) pode resultar na alteração da resistência mecânica do meio poroso (CM). Por outro lado, a vertente (MC) apresenta ainda mais incertezas relacionadas à influência das alterações mecânicas (deformações, dano, etc.) nos processos geoquímicos. Naturalmente, definir leis gerais para estes processos é uma tarefa complexa, de forma que é possível encontrar na literatura particularizações de análises tipo THMC como, por exemplo, os esquemas totalmente acoplados apresentados por Olivella *et al.* (1994, 1995), Olivella (1995), Guimarães (2002).

Quadro 2.3. Tipos de processos acoplados (adaptado de TSANG, 1987)

Número	Tipo	Exemplo
1	$T = C$	Mudança de fase
2	$T = H$	<i>Buoyancy flow</i>
3	$T = M$	Fraturas induzidas termicamente
4	$H = C$	Dissolução e precipitação
5	$H = M$	Fraturamento hidráulico
6	$C - M$	Tensões induzidas pela corrosão
7		Reações químicas e transporte em sistemas hidrotermais
8		Efeitos termomecânicos com variação da resistência mecânica devido às transformações termoquímicas
9		Comportamento hidromecânico induzidos termicamente
10		Transporte químico influenciado pelos efeitos hidromecânicos
11		Transporte e reações químicas no meio poroso induzidas por carregamentos térmicos e hidráulicos

Note: T = térmico, M = mecânico, H = hidráulico, C = químico

A linha (–) indica acoplamento fraco e a linha (=) indica acoplamento forte

Quadro 2.4. Detalhamento dos processos envolvendo o acoplamento THMC (adaptado de LANRU & XIATING, 2003).

Mecânico – M Tensões/deformações, dano, resistência mecânica, ruptura do meio geológico	Acoplamento M-H Efeitos das tensões e deformações no meio poroso (porosidade, permeabilidade)	Acoplamento M-T Conversão do trabalho gerado pelo processo mecânico em variação de energia	Acoplamento M-C+ Alteração das trajetórias de transporte e propriedades de fluxo devido as deformações
Acoplamento H-M Variação das tensões efetivas do meio poroso devido às alterações de pressão e saturação	Hidráulico – H Fluxo de fluidos (Darcyano ou não-Darcyano) em meios porosos	Acoplamento H-T Convecção de calor devido ao campo de velocidades dos fluidos no meio poroso	Acoplamento H-C* Efeito da velocidade, pressão e saturação de fluido nos processos de dissolução/precipitação
Acoplamento T-M Tensões geradas pela variação da temperatura e expansão do meio poroso	Acoplamento T-H Difusão térmica, efeito <i>buoyancy</i> , variação da viscosidade e mudança de fase	Térmico – T Condução/convecção de calor em meios geológicos por efeitos naturais ou antrópicos	Acoplamento T-C* Efeito da temperatura nas taxas de reação e estabilidade química dos elementos/minerais
Acoplamento C-M+ Alteração da resistência e deformabilidade do meio geológico devido às reações químicas	Acoplamento C-H* Variação das propriedades de fluxo do meio poroso devido às reações químicas	Acoplamento C-T* Liberação/consumo de calor devidos às reações químicas entre os fluidos e o meio poroso	Químico – C Transporte reativo ou não-reativo de componentes, interação rocha-fluido

No Quadro 2.4, os fenômenos envolvidos em uma análise termo-hidro-mecânico-química estão exemplificados em cada um dos quadros. Lanru & Xiating (2003) evidenciam os processos que carecem de estudos aprofundados. O processo de acoplamento assinalado por (+), representado pelo fenômeno químico-mecânico, ainda não é bem estabelecido na forma como as reações geoquímicas influenciam no comportamento mecânico. Já os processos assinalados por (*), os quais envolvem a parcela química, configuram acoplamentos bem compreendidos em searas diferentes, como a geoquímica; no entanto, sua compreensão e aplicação no escopo de modelagem geomecânica se apresenta restrita. Por último, o processo de acoplamento que, geralmente, é negligenciado nas análises envolvendo variação de temperatura, destacado por (-), está relacionado com a influência da parcela mecânica na parcela térmica.

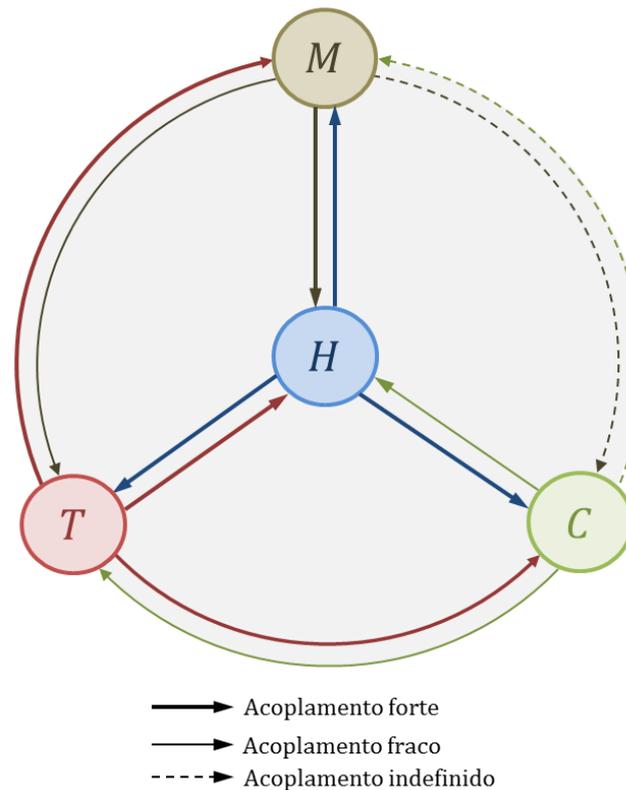


Figura 2.7. Fenômenos básicos do acoplamento THMC (adaptado de LANRU & XIATING, 2003)

Uma vez elucidado o universo onde estão inseridos os fenômenos relevantes ao esquema de acoplamento que será desenvolvido, parte-se, nesta fase da tese, para a descrição matemática do problema envolvendo a interação entre os processos térmicos, hidráulicos, mecânicos e químicos, conforme descrito no próximo capítulo.

2.2.2 Técnicas para representação de fenômenos acoplados

De maneira geral, a descrição matemática de fenômenos acoplados pode ser idealizada de diversas formas; de acordo com Settari (2001) e Tran *et al.* (2002, 2009), os esquemas de acoplamento podem ser divididos em quatro grupos, conforme a seguinte classificação: total, explícito, iterativo e pseudo-acoplado. A seguir, serão apresentadas as definições de cada um deles de maneira sucinta.

- **Acoplamento total**

Neste esquema de acoplamento, as variáveis relacionadas aos fenômenos envolvidos (por exemplo, pressão de poros, temperatura, deslocamentos) são determinadas simultaneamente através de um único sistema de equações.

Podemos citar, como vantagens deste método, a confiabilidade e precisão da solução, que por diversas vezes atua como balizador para os outros esquemas de acoplamento. Por outro lado, esta forma de acoplamento é acompanhada de um custo computacional elevado principalmente para análises de grande porte. Nota-se que o baixo desempenho computacional relacionado ao acoplamento total faz com que sua aplicação seja bastante restrita nos universos onde existem fenômenos diversos atuando simultaneamente. Um representante bastante conhecido desta classe é o programa comercial ABAQUS, que pode realizar uma análise termo-hidro-mecânica totalmente acoplada (fluxo monofásico). Outro programa bastante difundido é o CODE_BRIGHT desenvolvido na Universidade Politécnica da Catalunha.

- **Acoplamento explícito (em uma via)**

Este esquema de acoplamento faz uso de dois programas diferentes (um responsável pela análise de fluxo e outro pela análise de tensões) para a determinação da resposta acoplada. A troca de informações é dada apenas em um sentido, isto é, as variações de pressão, saturação, temperatura calculadas pelo simulador de fluxo são transferidas para o simulador de tensões resultando em variações de tensões/deformação. No entanto, estas variações não são computadas na simulação de fluxo, de forma que a análise de fluxo passa para o próximo passo de tempo. Além disso, este sistema também permite estabelecer a frequência de atualização das variáveis provenientes da análise de tensões.

Uma das vantagens principais desta metodologia é a velocidade dos cálculos, governada basicamente pela simulação de fluxo. Contudo, quando o objetivo é efetuar análises para as quais a robustez das interações fenomenológicas se faz necessária, este esquema torna-se menos atrativo.

- **Pseudo-acoplamento**

O esquema pseudo-acoplado permite computar, de maneira aproximada, as respostas geomecânicas através de tabelas que relacionam a pressão de poros com multiplicadores de porosidade e permeabilidade (SAMIER *et al.*, 2007). Segundo Falcão (2013), esta metodologia contempla a situação em que a pressão do reservatório declina ao longo da produção (compactação) e a situação oposta, quando a pressão do reservatório aumenta (dilatância).

Falcão (2013) também afirma que a construção da tabela é uma etapa fundamental para o sucesso do emprego do pseudo-acoplamento. Idealmente, os valores desta tabela devem ser estabelecidos com base em ensaios de laboratório empregando a rocha-reservatório. Caso contrário, faz-se necessária a utilização de correlações, as quais podem prejudicar a acurácia no que se refere à representação do comportamento da rocha.

As vantagens desta metodologia estão relacionadas à facilidade de implementação no simulador de fluxo e baixo esforço computacional, além de não requerer um módulo geomecânico. Conforme já mencionado, uma desvantagem deste esquema é a obtenção e representatividade dos ensaios de laboratório para confecção da tabela; além disso, a metodologia não permite o cálculo de deslocamentos.

Maiores detalhes sobre a confecção da tabela, bem como o emprego do pseudo-acoplamento na análise geomecânica de reservatórios podem ser encontrados no trabalho de Falcão (2013). Como exemplo desta classe, podemos citar o programa comercial de simulação de fluxo IMEX (CMG).

- **Acoplamento iterativo (em duas vias)**

Este esquema de acoplamento também faz uso de dois simuladores distintos (um responsável pela análise de fluxo e outro pela análise de tensões) para a determinação da resposta acoplada. O problema é resolvido de forma sequencial e iterativa, isto é, existe troca de informações entre ambos os simuladores. A partir da análise de fluxo, são extraídas as pressões e temperaturas que por sua vez, servirão como carregamentos para a análise de tensões. O retorno das informações ocorre, geralmente, através da atualização da porosidade e permeabilidade da rocha. Este processo cessa somente quando um critério de convergência é atingido. De maneira geral, este critério está baseado na variação de pressão de poros ou na variação de tensões entre as duas últimas iterações.

Relacionado à robustez dos parâmetros responsáveis pelo acoplamento (porosidade e permeabilidade, por exemplo), o comportamento acoplado da rocha frente às solicitações pode ser representado de forma tão precisa quanto a resposta totalmente acoplada, com a vantagem de uma maior flexibilidade e menor custo computacional.

Além da flexibilidade, este esquema de acoplamento permite a aferição da robustez da metodologia, além de uma relativa facilidade na extensão dos procedimentos do acoplamento para o emprego de outros programas. Como desvantagens, podemos citar a necessidade de convergência para todos os passos de tempo, fato que aumenta consideravelmente o custo computacional, e a dificuldade em estabelecer de forma consistente os parâmetros de acoplamento. Este esquema de acoplamento pode ser representado pelos programas comerciais STARS e GEM da CMG, o VISAGE da Schlumberger e o GEOSIM da CGG que podem interagir com o programa ECLIPSE. No âmbito acadêmico, temos o acoplamento entre os programas FLAC da ITASCA e o TOUGH do LBNL (*Lawrence Berkeley National Laboratory*).

Esta metodologia tem sido extensivamente aferida e utilizada em aplicações diversas pelo grupo de geomecânica computacional do GTEP. Dentre os trabalhos elaborados, podemos citar: Inoue & Fontoura (2009a, b); Inoue *et al.* (2011a, b); Inoue & Fontoura (2011); Lautenschläger *et al.* (2011); Yaquetto (2011); Lautenschläger *et al.* (2013a, b); Righetto (2012); Fontoura *et al.* (2013a, b); Albuquerque *et al.* (2013); Righetto *et al.* (2013a, b); Albuquerque (2014); Albuquerque *et al.* (2014) e Inoue *et al.* (2014a, b); Lautenschläger (2014); Lautenschläger *et al.* (2014) e Righetto *et al.* (2014).

À luz das considerações supracitadas cabe salientar que o desenvolvimento da metodologia de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico, desenvolvida no Capítulo 3, seguirá a filosofia representada pelo esquema de acoplamento iterativo em duas vias.

2.3

Análises numéricas associadas à injeção de CO₂

Conforme mencionado anteriormente, a consideração de efeitos térmicos, geoquímicos e mecânicos na análise do comportamento de meios porosos tem alavancado o desenvolvimento de ferramentas numéricas robustas para auxiliar os geocientistas na resolução de problemas relacionados à disposição de rejeitos radioativos em meios geológicos, extração de energia geotérmica, recuperação avançada de óleo e gás, armazenamento de gás natural e, especialmente, armazenamento de CO₂ que é o objetivo deste item.

De forma geral, pesquisadores têm empregado simuladores distintos (associados às diversas formas de acoplamento supracitadas) para a confecção de análises acopladas visando a previsão do comportamento do dióxido de carbono ao longo do tempo, bem como das rochas adjacentes, notadamente a rocha capeadora. Adicionalmente, grande parte dos trabalhos disponíveis na literatura foca no processo de reativação de falhas e, conseqüentemente, na observação de atividades microsísmicas.

Em relação às análises geomecânicas associadas à injeção de CO₂ em meios geológicos, alguns trabalhos podem ser destacados: Cappa & Rutqvist (2010, 2011); Chiaramonte (2008); Duceillier *et al.* (2011); Dempsey *et al.* (2014); Kolditz *et al.* (2012), Lynch *et al.* (2013); Rutqvist *et al.* (2002, 2007, 2008, 2010, 2014); Rutqvist (2011); Streit & Hillis (2004); Vilarrasa *et al.* (2010ab, 2011, 2013, 2014); Vilarrasa & Carrera (2015) e Yamamoto *et al.* (2013).

Os trabalhos supracitados apresentam diferentes formas para a consideração do acoplamento entre os fenômenos envolvidos na estocagem de CO₂ (hidráulicos e mecânicos, por exemplo), as quais serão delineadas sucintamente neste item com o objetivo de ilustrar as diversas abordagens possíveis de serem empregadas. Deve ser ressaltada que será dada ênfase aos trabalhos que fazem uso de esquemas de acoplamento entre programas diferentes.

Nos trabalhos desenvolvidos por Rutqvist *et al.* (2002, 2007, 2008, 2010, 2014), Cappa & Rutqvist (2010, 2011), Cappa & Rutqvist (2010, 2011) e Rutqvist (2011), foi empregado um esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico, que faz uso dos programas TOUGH2 (análise de fluxo) e FLAC (análise de tensões). A metodologia de acoplamento desenvolvida, apresentada por Rutqvist *et al.* (2002), pode ser observada na Figura 2.8. A partir de uma simulação hidrotérmica (HT), os resultados de pressão de poros, temperatura e saturação são transferidos para o simulador de tensões através do módulo de acoplamento. Basicamente, este módulo (TH-M) é responsável pela interpolação das variáveis-resposta dos elementos (TOUGH) para os nós (FLAC). Após os cálculos da análise de tensões, as tensões efetivas são utilizadas para a atualização dos parâmetros de acoplamento. Os autores consideram como parâmetros a porosidade, permeabilidade e a pressão capilar. O módulo de acoplamento (M-TH) é responsável pela atualização destas propriedades.

Rutqvist *et al.* (2002) assumem expressões empíricas, funções das tensões efetivas, para computar a variação dos parâmetros de acoplamento. Os autores salientam que a determinação destas deve ser efetuada a partir de dados de laboratório e, se possível, calibrada com dados de campo.

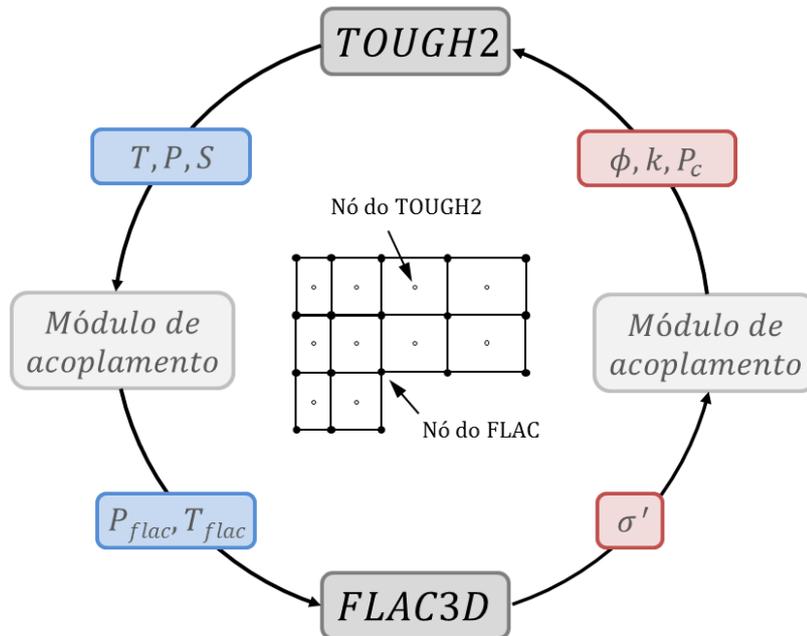


Figura 2.8. Esquema de acoplamento THM entre os programas TOUGH2 e FLAC (modificado de RUTQVIST *et al.*, 2002)

Em termos de esquema de acoplamento, a metodologia desenvolvida por Rutqvist *et al.* (2002) permite o emprego de dois procedimentos: explícito e implícito. No esquema explícito, o programa de fluxo é executado, entre dois passos de tempo consecutivos, até que a conservação da massa seja garantida. Durante este processo, a porosidade e a permeabilidade permanecem constantes, de acordo com os valores do início do passo. No esquema implícito, a porosidade e a permeabilidade são atualizadas, via simulação de tensões, a cada interação realizada pelo TOUGH necessária para atingir a convergência do balanço de massa. Portanto, o esquema idealizado pode ser considerado como duas vias interativo com traços de pseudo-acoplamento devido ao emprego de variáveis empíricas para a atualização dos parâmetros de acoplamento.

Nos estudos realizados por Dempsey *et al.* (2014), foi empregado o simulador FEHM (*Finite Element Heat and Mass transfer*) para estudos a respeito da integridade da rocha capeadora devido à injeção de CO_2 . O programa integra os fenômenos de transporte reativo, calor e massa através do método dos

elementos finitos. O grau de acoplamento entre os fenômenos envolvidos pode ser definido previamente. Assim, a metodologia empregada no programa FEHM pode ser classificada como totalmente acoplada, de acordo com Bower & Zyvoloski (1997).

Ducellier *et al.* (2011) fazem uso de um esquema de acoplamento hidro-mecânico totalmente acoplado, através do programa de elementos finitos denominado GEFDYN. Detalhes sobre a construção do programa podem ser encontrados nos trabalhos de Aubry *et al.* (1986) e Aubry & Modaressi (1996).

Lynch *et al.* (2013) fazem uso de uma metodologia de acoplamento iterativo (duas vias) empregando o programa de fluxo TEMPEST e o programa para análise geomecânica ELFEN. De acordo com Angus *et al.* (2011), o esquema de acoplamento permite a realização de dois esquemas de acoplamento, isto é, em uma e duas vias. No esquema em duas vias, as informações provenientes do simulador de fluxo (pressão de poros e propriedades de fluxo) são transferidas para o simulador de tensões que, por sua vez, fornece valores de deformação. A partir disto, o ELFEN calcula as variações na porosidade, as quais retornam para o TEMPEST com o objetivo de recalculá-la empregando os volumes porosos atualizados. Este processo ocorre, dentro de um passo de tempo, até que o critério de convergência seja atingido, ou seja, valor constante de pressão/porosidade. Uma vez atingido o critério de convergência, a simulação passa para o próximo intervalo de tempo.

Nos estudos realizados por Vilarrasa *et al.* (2010ab, 2011, 2013, 2014) e Vilarrasa & Carrera (2015), os autores fazem uso de um programa de elementos finitos, inicialmente desenvolvido por Olivella (1994), que permite a realização de uma análise termo-hidro-mecânica totalmente acoplada. Inicialmente, o código (denominado CODE_BRIGTH) permitia a simulação numérica do comportamento de sistemas selantes, como as rochas salinas, frente às solicitações provenientes da disposição de rejeitos radioativos. O programa vem sendo modificado para a inclusão de outros efeitos, como o transporte reativo, consideração do meio geológico como não saturado e a injeção de dióxido de carbono (GUIMARÃES, 2002; GENS *et al.*, 2008; VILARRASA, 2012). Este último estudou o comportamento de aquíferos salinos durante o processo de armazenamento de CO₂ considerando uma análise termo-hidro-mecânica totalmente acoplada.

Yamamoto *et al.* (2013) apresentam um estudo de estabilidade do sistema aquífero-rocha capeadora durante a injeção de CO₂. Para tanto, os autores também empregam o programa CODE_BRIGHT, modificado por Vilarrasa (2012), para a realização da análise hidro-mecânica totalmente acoplada.

Chiaramonte (2008) apresenta um estudo amplo relacionando uma caracterização geomecânica de um reservatório, candidato a ser um local para armazenamento de CO₂, com simulações de fluxo visando estabelecer cenários seguros para a injeção. Em termos metodológicos, a autora apresenta um esquema híbrido, que utiliza simulações de fluxo e abordagens analíticas. Deve ser mencionado que as abordagens analíticas se referem ao potencial de reativação das falhas presentes no reservatório.

Streit & Hillis (2004) apresentam uma abordagem puramente analítica para a análise da estabilidade mecânica de falhas devido à injeção de CO₂. Os autores verificam o estado de tensões atuante nas falhas presentes no reservatório através da análise de tendência ao deslizamento. Os autores também salientam que esta abordagem analítica pode ser empregada em conjunto com modelagens numéricas como, por exemplo, no trabalho de Rueda *et al.* (2014).

Uma iniciativa bastante interessante pode ser encontrada no projeto *OpenGeoSys* (OGS), a qual configura uma rede científica colaborativa para o desenvolvimento de um simulador numérico com código aberto. Em linhas gerais, a ferramenta emprega uma metodologia totalmente acoplada para tratar dos fenômenos termo-hidro-mecânico-químicos (THMC) em meios porosos.

No escopo das simulações de armazenamento de dióxido de carbono em meios geológicos, diversas metodologias de acoplamento, bem como interações fenomenológicas podem ser encontradas. Evidentemente, existe uma tendência bastante pronunciada para o emprego de análises numéricas em detrimento de estudos analíticos, uma vez que estes últimos, geralmente, apresentam um potencial de aplicação reduzido. No entanto, deve-se ter em mente que um modelo acoplado robusto (seja totalmente acoplado ou iterativo) não está relacionado somente com a coerência das descrições matemáticas dos fenômenos envolvidos, mas também com os parâmetros necessários para o seu emprego. Estas constatações devem servir como diretrizes para garantir a aplicabilidade, representatividade e acurácia das análises numéricas.

3

Desenvolvimento de uma metodologia de acoplamento Termo-Hidro-Mecânico-Químico iterativo

Este capítulo tem como objetivo apresentar o desenvolvimento de um esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativo à luz dos diversos trabalhos apresentados na literatura técnica. Os fenômenos envolvidos, bem como as hipóteses assumidas, serão explicitadas de forma detalhada. Inicialmente será discutida a inclusão da parcela térmica no esquema de acoplamento hidro-mecânico; posteriormente, será apresentada a estratégia para a consideração dos efeitos químicos.

3.1

Fundamentação teórica do acoplamento termo-hidro-mecânico

A partir da metodologia de acoplamento hidro-mecânica já estabelecida, busca-se, primeiramente, incluir os efeitos térmicos no comportamento de meios porosos. Assim, este item apresenta detalhadamente as equações que governam o acoplamento termo-hidro-mecânico em meios geológicos.

3.1.1

Equações governantes do acoplamento THM

As equações apresentadas a seguir foram baseadas no trabalho de Lewis *et al.* (1986). Assim, a descrição completa do problema deve conter a equação de equilíbrio e as equações que governam os fluxos de fluido e calor em meios porosos. Cabe ser salientado que as equações serão apresentadas para o caso monofásico.

A metodologia seguida para a descrição fenomenológica parte dos fundamentos teóricos desenvolvidos por Biot (1941) e por Schrefler (1984), sendo o primeiro responsável pelo desenvolvimento da teoria da proelasticidade e o último pela sua aplicação utilizando o método dos elementos finitos. Portanto, este trabalho parte diretamente do exposto por Schrefler (1984).

- **Comportamento não-isotérmico da fase sólida**

A formulação para a descrição do comportamento mecânico não-isotérmico da porção sólida, que compõe o meio poroso, faz uso das equações de equilíbrio, relações deformação-deslocamento e tensão-deformação-pressão-temperatura. A inclusão do efeito da pressão de poros atuante no meio poroso foi incluída à luz do trabalho apresentado por Biot (1941), de forma que a relação tensão-deformação-pressão pode ser encarada como uma generalização da lei de Hooke para meios porosos isotérmicos. Adicionalmente, aliam-se os efeitos de variação de temperatura considerando o meio poroso como um material termoelástico, de forma que sua inclusão pode ser realizada considerando a deformação associada a uma variação de temperatura (ZIMMERMAN, 2000).

Considerando um elemento infinitesimal, o estado de tensões atuante deve satisfazer as equações de equilíbrio, isto é,

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial z} = 0 \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} = 0 \quad (3.3)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} \quad (3.4)$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} \quad (3.5)$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy} \quad (3.6)$$

As relações deformação-deslocamento podem ser escritas como:

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.7)$$

$$\varepsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y} \quad (3.8)$$

$$\varepsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (3.9)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (3.10)$$

$$\varepsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \quad (3.11)$$

$$\varepsilon_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (3.12)$$

A partir da lei de Hooke generalizada, as inclusões do efeito da pressão de poros, bem como da temperatura podem ser considerados através das teorias da poroelasticidade e da termoelasticidade, respectivamente. Portanto, considerando o trabalho de Biot (1941) e a deformação associada a uma variação de temperatura, tem-se:

$$\varepsilon_x = \frac{1}{E} [\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)] - \frac{\alpha}{K} p + \beta T \quad (3.13)$$

$$\varepsilon_y = \frac{1}{E} [\sigma_y - \nu(\sigma_x + \sigma_z)] - \frac{\alpha}{K} p + \beta T \quad (3.14)$$

$$\varepsilon_z = \frac{1}{E} [\sigma_z - \nu(\sigma_x + \sigma_y)] - \frac{\alpha}{K} p + \beta T \quad (3.15)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{\tau_{xy}}{2G} \quad (3.16)$$

$$\varepsilon_{xz} = \frac{\tau_{xz}}{2G} \quad (3.17)$$

$$\varepsilon_{yz} = \frac{\tau_{yz}}{2G} \quad (3.18)$$

Pode ser observado pelo conjunto de equações que compõe as relações tensão-deformação-pressão-temperatura que o efeito da pressão de poros e da temperatura afeta somente as deformações normais com a mesma magnitude, em virtude da hipótese de isotropia. Consequentemente, as deformações cisalhantes são independentes da pressão de poros e da temperatura. Em relação às equações apresentadas (3.1 – 3.18), temos que σ_{ij} são os componentes do tensor de tensões totais, ε_{ij} são os componentes do tensor de deformações, (u, v, w) são os componentes do vetor de deslocamentos, E é o módulo de Young, G é o módulo cisalhante, K é o módulo de deformação volumétrica (inverso da

compressibilidade do meio poroso), α é o coeficiente de Biot, β é o coeficiente de expansão térmica linear do meio e T é a temperatura.

Reescrevendo as Equações (3.13 – 3.18) de uma maneira mais conveniente, temos:

$$\sigma_x = 2G\varepsilon_x + \lambda\varepsilon_v - \alpha p + \beta KT \quad (3.19)$$

$$\sigma_y = 2G\varepsilon_y + \lambda\varepsilon_v - \alpha p + \beta KT \quad (3.20)$$

$$\sigma_z = 2G\varepsilon_z + \lambda\varepsilon_v - \alpha p + \beta KT \quad (3.21)$$

$$\sigma_{xy} = 2G\varepsilon_{xy} \quad (3.22)$$

$$\sigma_{xz} = 2G\varepsilon_{xz} \quad (3.23)$$

$$\sigma_{yz} = 2G\varepsilon_{yz} \quad (3.24)$$

onde λ é o parâmetro de Lamé.

Portanto, o estado de tensões totais idealizado através das Equações (3.19 – 3.24) deve satisfazer as equações de equilíbrio, de forma que na direção x temos:

$$\frac{\partial}{\partial x}(2G\varepsilon_x + \lambda\varepsilon_v - \alpha p + \beta KT) + \frac{\partial}{\partial y}(2G\varepsilon_{xy}) + \frac{\partial}{\partial z}(2G\varepsilon_{xz}) = 0 \quad (3.25)$$

Substituindo as relações deformação-deslocamento na Equação (3.25), vem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}(2G\varepsilon_x + \lambda\varepsilon_v - \alpha p + \beta KT) + 2G \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \\ + 2G \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Reordenando e manipulando algebricamente, temos:

$$G\nabla^2 u + \frac{G}{(1-2\nu)} \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial x} - \alpha \frac{\partial p}{\partial x} - \beta K \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (3.27)$$

Analogamente nas outras direções (x, y), podemos escrever:

$$G\nabla^2 v + \frac{G}{(1-2\nu)} \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial y} - \alpha \frac{\partial p}{\partial y} - \beta K \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad (3.28)$$

$$G\nabla^2 w + \frac{G}{(1-2\nu)} \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial z} - \alpha \frac{\partial p}{\partial z} - \beta K \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad (3.29)$$

Portanto, condensando as Equações (3.27 – 3.29) temos a expressão Navier generalizada para o problema termo-poroelástico, isto é,

$$G\nabla^2 \mathbf{u} + \frac{G}{(1-2\nu)} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \alpha \nabla p - \beta K \nabla T = 0 \quad (3.30)$$

De maneira geral, a Equação (3.30) representa matematicamente o acoplamento entre os fenômenos mecânico, hidráulico (variação de pressão de poros) e térmico (variação de temperatura) em um meio poroso deformável.

• Comportamento não-isotérmico da fase líquida

Satisfazendo a conservação de massa de fluido em um meio poroso saturado, podemos escrever que:

$$\nabla^T \rho_f q + \frac{\partial m}{\partial t} = 0 \quad (3.31)$$

onde ρ_f é massa específica do fluido, q é a vazão de fluido e $\partial m / \partial t$ representa o termo de acumulação da massa no meio poroso.

Considerando a conservação de momento (para número de Reynolds menor que 1), isto é, aplicando a lei de Darcy, temos:

$$q = -\frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla(p + \rho_f gh) \quad (3.32)$$

onde \mathbf{k} é matriz de permeabilidade absoluta, p é a pressão, μ é a viscosidade dinâmica do fluido, g é a aceleração da gravidade e h é a altura medida em relação a uma referência arbitrária.

Substituindo a Equação (3.32) na Equação (3.31), temos:

$$\nabla^T \left[-\frac{\mathbf{k}\rho_f}{\mu} \nabla(p + \rho_f gh) \right] + \frac{\partial m}{\partial t} = 0 \quad (3.33)$$

De acordo com Lewis *et al.* (1986), para o caso isotérmico, o termo de acumulação de massa ($\partial m / \partial t$) é influenciado por diversos fatores, são eles:

- variação da deformação total

$$\frac{\partial \varepsilon_v}{\partial t} = \mathbf{m}^T \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial t}$$

- variação do volume do grão devido à variação de pressão

$$\frac{(1 - \phi) \partial p}{K_s \partial t}$$

- variação do volume do fluido devido à variação de pressão

$$\frac{\phi \partial p}{K_f \partial t}$$

- variação do tamanho dos grãos devido à variação de tensões efetivas

$$-\frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}'}{\partial t}$$

Considerando que a equação constitutiva que relaciona as tensões efetivas com as deformações no esqueleto, assumindo um material não linear geral, pode ser escrita como:

$$d\boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{D}_T (d\boldsymbol{\varepsilon} + d\boldsymbol{\varepsilon}_c + d\boldsymbol{\varepsilon}_p + d\boldsymbol{\varepsilon}_T + d\boldsymbol{\varepsilon}_o) \quad (3.34)$$

onde $d\boldsymbol{\varepsilon}$ representa a deformação total no esqueleto, $d\boldsymbol{\varepsilon}_c = \mathbf{c}dt$ é a deformação devido à fluência e $d\boldsymbol{\varepsilon}_o$ representa todas as deformações autógenas, isto é, deformações não diretamente associadas com a variação da tensões (químicas, inchamento, porção irreversível das deformações volumétricas, etc.). Segundo Zienkiewicz *et al.* (1999), a deformação volumétrica total relacionada à compressão uniforme dos grãos (material isotrópico) pela pressão de poros ($d\boldsymbol{\varepsilon}_p$), pode ser definida como:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}_p = -\mathbf{m} \left(\frac{dp}{3K_s} \right) \quad (3.34a)$$

sendo K_s o módulo volumétrico dos sólidos que compõem o meio poroso e $\mathbf{m} = [1, 1, 1, 0, 0, 0]^T$. A parcela reversível do incremento de deformações devido à variação de temperatura ($d\boldsymbol{\varepsilon}_T$) pode ser escrita como:

$$d\varepsilon_T = \mathbf{m} \frac{\beta_s}{3} dT \quad (3.34b)$$

onde β_s é o coeficiente de expansão térmica da fase sólida.

Lewis *et al.* (1986) pontuam que as parcelas das deformações térmicas (reversível e irreversível) podem ser dissociadas uma vez que a influência da temperatura sobre a superfície de plastificação e os parâmetros de enrijecimento de geomateriais podem ser negligenciados, por hipótese.

Assim, substituindo a Equação (3.34) no termo de variação do tamanho dos grãos devido à variação de tensões efetivas, vem:

$$-\frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} - \mathbf{c} - \frac{\mathbf{m}}{3K_s} \frac{\partial p}{\partial t} \right)$$

Assim, considerando que o efeito combinado dos quatro termos supracitados compõe o termo de acumulação de massa, temos:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \mathbf{m}^T \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{(1-\phi)}{K_s} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\phi}{K_f} \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} - \mathbf{c} - \frac{\mathbf{m}}{3K_s} \frac{\partial p}{\partial t} \right) \quad (3.35)$$

Rearranjando os termos comuns, vem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial m}{\partial t} = & \left[\frac{(1-\phi)}{K_s} + \frac{\phi}{K_f} - \frac{1}{(3K_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right] \frac{\partial p}{\partial t} + \left[\mathbf{m}^T - \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \right] \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \\ & + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{c} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Logo, substituindo a Equação (3.36) na Equação (3.33), temos a equação diferencial completa que rege o fluxo em um meio poroso isotérmico. Deve ser salientado que o termo no lado direito da igualdade se refere a uma fonte ou sumidouro.

$$\begin{aligned} \nabla^T \left[-\frac{\mathbf{k} \rho_f}{\mu} \nabla(p + \rho_f gh) \right] + \left[\frac{(1-\phi)}{K_s} + \frac{\phi}{K_f} - \frac{1}{(3K_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right] \frac{\partial p}{\partial t} \\ + \left[\mathbf{m}^T - \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \right] \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{c} = q \end{aligned} \quad (3.37)$$

Considerando a Equação (3.37), Lewis *et al.* (1986) sugerem a adaptação de três termos de forma a levar em consideração a variação de temperatura. As massas específicas do fluido e do sólido (ρ_s e ρ_f) serão tomadas em função da temperatura e da pressão. A seguir será explicitado, em tópicos, cada um dos termos supracitados.

$$\frac{\phi}{K_f} \frac{\partial p}{\partial t}$$

A variação da massa específica do fluido, em função apenas da pressão, pode ser escrita como:

$$\phi \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial t} = \frac{\phi}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.38)$$

Aplicando a definição de módulo volumétrico do fluido, temos:

$$\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial p} = \frac{1}{K_f} \quad (3.39)$$

Portanto, substituindo a Equação (3.39) na Equação (3.38) retomamos a equação original, isto é,

$$\phi \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial t} = \frac{\phi}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.40)$$

A temperatura e a pressão podem ser levadas em consideração a partir da Equação (3.38), conforme segue:

$$\phi \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial t} = \frac{\phi}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial p} \Big|_T \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\phi}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial T} \Big|_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.41)$$

Por definição,

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial p} \Big|_T = \frac{\rho_f}{K_f} \quad (3.42)$$

e

$$\left. \frac{\partial \rho_f}{\partial T} \right|_p = -\rho_f \beta_f \quad (3.43)$$

onde β_f é o coeficiente de expansão térmica do fluido.

Assim, substituindo as Equações (3.42) e (3.43) na Equação (3.41), podemos escrever que:

$$\phi \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial t} = \frac{\phi}{\rho_f} \frac{\rho_f}{K_f} \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\phi}{\rho_f} \rho_f \beta_f \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.44)$$

Simplificando os termos necessários, vem:

$$\phi \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial t} = \frac{\phi}{K_f} \frac{\partial p}{\partial t} - \phi \beta_f \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.45)$$

Na Equação (3.45) fica evidente a parcela térmica introduzida pela variação da massa específica do fluido com a temperatura.

O segundo termo a ser modificado diz respeito à variação da massa específica da parte sólida.

$$\frac{(1 - \phi) \partial p}{K_s \partial t}$$

O desenvolvimento é análogo ao apresentado para a massa específica do fluido, de forma que o índice “f” pode ser substituído pelo índice “s”. Como se trata da fase sólida, é evidente que a porosidade (ϕ) deve ser substituída pela parcela correspondente à fase sólida ($1 - \phi$). Portanto, a taxa de variação do volume da fase sólida com a pressão e temperatura pode ser escrita como:

$$\frac{(1 - \phi) \partial \rho_s}{\rho_s \partial t} = \frac{(1 - \phi) \partial p}{K_s \partial t} - (1 - \phi) \beta_s \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.46)$$

onde β_s é o coeficiente de expansão térmica da fase sólida.

O terceiro termo a ser modificado diz respeito à variação do tamanho do grão devido às variações das tensões efetivas.

$$-\frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial t} - \mathbf{c} - \frac{\mathbf{m}}{3K_s} \frac{\partial p}{\partial t} \right)$$

A consideração do efeito térmico pode ser realizada através da inclusão das deformações induzidas pelas variações de temperatura, Equação (3.34b), de forma que o referido termo passa a ser:

$$-\frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial t} - \mathbf{c} - \frac{\mathbf{m}}{3K_s} \frac{\partial p}{\partial t} - \mathbf{m} \frac{\beta_s}{3} \frac{\partial T}{\partial t} \right) \quad (3.47)$$

Portanto, a Equação (3.37) pode ser reescrita considerando um sistema não-isotérmico, empregando as modificações supracitadas, conforme segue:

$$\begin{aligned} \nabla^T \left[-\frac{\mathbf{k} \rho_f}{\mu} \nabla(p + \rho_f gh) \right] + \left[\frac{(1-\phi)}{K_s} + \frac{\phi}{K_f} - \frac{1}{(3K_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right] \frac{\partial p}{\partial t} \\ + \left[\mathbf{m}^T - \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \right] \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{c} \\ + \left[-\phi \beta_f - (1-\phi) \beta_s + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \frac{\beta_s}{3} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = q \end{aligned} \quad (3.48)$$

De forma geral, a massa específica do fluido pode ser assumida como constante ao longo do espaço (no volume de controle), Equação (3.31), portanto, a Equação (3.48) fica:

$$\begin{aligned} -\nabla^T \left[\frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla(p + \rho_f gh) \right] + \left[\frac{(1-\phi)}{K_s} + \frac{\phi}{K_f} - \frac{1}{(3K_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right] \frac{\partial p}{\partial t} \\ + \left[\mathbf{m}^T - \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \right] \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{c} \\ + \left[-\phi \beta_f - (1-\phi) \beta_s + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \frac{\beta_s}{3} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = q \end{aligned} \quad (3.49)$$

Assim, a Equação (3.49) define o escoamento de um fluido em um meio poroso deformável não-isotérmico.

- **Transporte de energia em um meio poroso deformável**

Adicionalmente às equações que regem o comportamento dos sólidos e o escoamento de fluido em um meio poroso deformável não-isotérmico, faz-se necessário, para completar o sistema de equações, a derivação da equação de transporte de energia.

Assim como já apresentado anteriormente para a massa, o sistema avaliado também deve ser conservativo em termos de energia. Como hipótese, é assumido que as fases sólida e líquida apresentam a mesma temperatura (equilíbrio termodinâmico), e que não existem reações químicas que produzem calor. Cabe ser enfatizado que as derivações realizadas neste item seguem a lógica apresentada por Incropera *et al.* (2007). Alternativamente, o desenvolvimento da equação de conservação de energia pode ser realizada através da aplicação do *teorema de transporte de Reynolds* (vide Shaughnessy *et al.*, 2005 e Bielinski, 2007).

De forma geral, a conservação de energia pode ser equacionada através da seguinte relação:

$$\dot{E}_a = \dot{E}_e - \dot{E}_s + \dot{E}_g \quad (3.50)$$

onde \dot{E}_a , \dot{E}_e , \dot{E}_s e \dot{E}_g são as taxas de acumulação, de entrada, de saída e de geração de energia respectivamente. Vale frisar que a taxa de geração de energia pode ser compreendida como um fenômeno relacionado à energia interna química, elétrica, térmica, etc., do sistema.

Considerando o volume de controle apresentado na Figura 3.1, podemos escrever, na forma tridimensional, a taxa de condução de energia (q) que entra e sai das faces como:

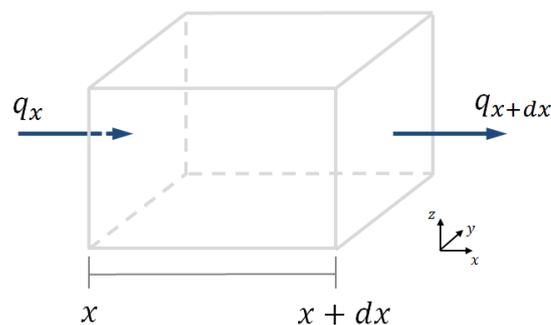


Figura 3.1. Volume de controle de um elemento infinitesimal de um meio poroso

$$q_{x+dx} = q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} dx \quad (3.51a)$$

$$q_{y+dy} = q_y + \frac{\partial q_y}{\partial y} dy \quad (3.51b)$$

$$q_{z+dz} = q_z + \frac{\partial q_z}{\partial z} dz \quad (3.51c)$$

Em um meio, pode existir uma fonte de energia que está associada com a taxa de geração de energia térmica (\dot{E}_g), isto é,

$$\dot{E}_g = \dot{q} dx dy dz \quad (3.52)$$

onde \dot{q} é a taxa de energia gerada por unidade de volume do meio (W/m^3).

Desconsiderando os efeitos de mudança de fase (efeitos de energia latente), o termo de acumulação de energia (\dot{E}_a) pode ser definido como:

$$\dot{E}_a = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dx dy dz \quad (3.53)$$

onde ρ é a massa específica do material, c_p é o calor específico e o produto ρc_p a capacidade calorífica. Cabe ser salientado que o termo $\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}$ leva em consideração os movimentos de rotação, translação e vibração dos átomos/moléculas que compõem o material.

Substituindo as Equações (3.52) e (3.53) na Equação (3.50), temos:

$$\begin{aligned} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dx dy dz = \\ = (q_x + q_y + q_z) - (q_{x+dx} + q_{y+dy} + q_{z+dz}) \\ + \dot{q} dx dy dz \end{aligned} \quad (3.54)$$

Substituindo a Equação (3.51) na Equação (3.54), temos:

$$-\left(\frac{\partial q_x}{\partial x} dx + \frac{\partial q_y}{\partial y} dy + \frac{\partial q_z}{\partial z} dz \right) + \dot{q} dx dy dz = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dx dy dz \quad (3.55)$$

As taxas de condução (difusão) de calor podem ser avaliadas pela lei de Fourier, a qual pode ser escrita tridimensionalmente por:

$$q_x = -\lambda dy dz \frac{\partial T}{\partial x} \quad (3.56a)$$

$$q_y = -\lambda dx dz \frac{\partial T}{\partial y} \quad (3.56b)$$

$$q_z = -\lambda dx dy \frac{\partial T}{\partial z} \quad (3.56c)$$

onde λ é a condutividade térmica do material. Portanto, substituindo a Equação (3.56) na Equação (3.55) e dividindo toda a expressão por $(dx dy dz)$, vem:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.57)$$

Agrupando os termos utilizando o operador gradiente, a Equação (3.57) pode ser reescrita como:

$$\nabla(\lambda \nabla T) + \dot{q} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.58)$$

Adicionalmente ao processo de condução de calor definido pela Equação (3.58), faz-se necessária a inclusão de uma condição transiente de forma a computar os efeitos da movimentação do fluido (advecção/convecção).

Retomando a Equação (3.50), um termo adicional de energia, referente ao processo supracitado, deve ser considerado (\dot{E}_{conv}). Na direção x , temos:

$$\dot{E}_{conv,x} - \dot{E}_{conv,x+dx} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\rho u \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] dy dz \quad (3.59)$$

onde u é a velocidade em x , ρ é a massa específica do material, e é a energia interna térmica e $V^2 = u^2 + v^2 + w^2$ é a energia cinética. Assumindo que $de = c_v dT$ e $c_v = c_p$ (igualdade entre calores específicos a volume e pressão constantes), logo a parcela referente à convecção pode ser escrita como:

$$\rho c_p \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.60)$$

Reescrevendo a Equação (3.60) em uma forma mais geral, temos:

$$\nabla(\rho c_p VT) \quad (3.61)$$

Assim, a equação de conservação de energia, na sua forma generalizada, considerando as parcelas referentes ao transporte de calor (condução e convecção) para um meio sólido fica:

$$\nabla(\lambda \nabla T) - \nabla(\rho c_p V T) + \dot{q} = \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} \quad (3.62)$$

Considerando um meio poroso, o termo de acumulação da Equação (3.62) pode ser reescrito como:

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \{ [(1 - \phi) \rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] T \} \quad (3.63)$$

Portanto, substituindo a Equação (3.63) na Equação (3.62), vem:

$$\nabla(\lambda^* \nabla T) - \nabla(\rho c_p V T) + \dot{q} = \frac{\partial}{\partial t} \{ [(1 - \phi) \rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] T \} \quad (3.64)$$

Vale ser ressaltado que a condutividade térmica do meio (λ^*) pode ser considerada como uma combinação das condutividades dos constituintes, isto é,

$$\lambda^* = \phi \lambda_f + (1 - \phi) \lambda_s \quad (3.65)$$

Ainda, lembrando que o movimento do fluido no meio poroso é governado pela lei de Darcy (V_f), a Equação (3.64) pode ser alterada da seguinte maneira:

$$\nabla(\lambda^* \nabla T) + \nabla \left[\rho_f c_f \left(\frac{k}{\mu} \nabla p \right) T \right] + \dot{q} = [(1 - \phi) \rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.66)$$

Portanto, o conjunto de equações que rege o comportamento **termo-hidro-mecânico** de um meio poroso deformável é formado pelas Equações (3.30), (3.49) e (3.66). Estas equações estão apresentadas novamente ao final deste item por conveniência.

$$G \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{G}{(1 - 2\nu)} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \alpha \nabla p - \beta K \nabla T = 0 \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned}
& -\nabla^T \left[\frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla(p + \rho_f gh) \right] + \left[\frac{(1-\phi)}{K_s} + \frac{\phi}{K_f} - \frac{1}{(3K_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right] \frac{\partial p}{\partial t} \\
& + \left[\mathbf{m}^T - \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \right] \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{c} + \\
& + \left[-\phi \beta_f - (1-\phi) \beta_s + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \frac{\beta_s}{3} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = q
\end{aligned} \tag{3.49}$$

$$\nabla(\lambda^* \nabla T) + \nabla \left[\rho_f c_f \left(\frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla p \right) T \right] + \dot{q} = [(1-\phi) \rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] \frac{\partial T}{\partial t} \tag{3.66}$$

Pela análise detalhada das Equações (3.30), (3.49) e (3.66) pode ser notado a forma que o acoplamento entre os fenômenos envolvidos (hidráulico, mecânico e térmico) é estabelecido. É interessante notar que em cada uma das equações, os três fenômenos são caracterizados, com exceção da equação de conservação de energia (3.66), na qual a parcela mecânica (denotada pela variação das deformações) não está presente de forma explícita.

A inclusão da variante térmica nos fenômenos acoplados em meios porosos tem apresentado diferentes formulações quando se trata da equação da conservação de energia. Muitos trabalhos utilizam a versão desacoplada da Equação (3.66), como por exemplo, Brooker & Savvidou (1985) e mais recentemente, Watanabe (2011), sendo este último responsável pela extensão da formulação termo-hidro-mecânica para meios porosos fraturados. A versão desacoplada da equação de conservação de energia desconsidera a parcela convectiva. Assim, a Equação (3.66) reduz-se para:

$$\nabla(\lambda^* \nabla T) + \dot{q} = [(1-\phi) \rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] \frac{\partial T}{\partial t} \tag{3.67}$$

De acordo com Lewis *et al.* (1986), a aplicação da versão desacoplada da equação de conservação de energia pode não representar o fenômeno apropriadamente em regiões de elevados gradientes de temperatura, como nas proximidades das fontes de energia. Por outro lado, Bai & Abousleiman (1997) apresentam uma formulação envolvendo interações entre os fenômenos térmicos/hidráulicos/mecânicos nas três equações (conservação de momento,

massa e energia). Os termos de acoplamento entre os fenômenos supracitados podem ser apreciados pela análise da Figura 3.2, apresentada a seguir.

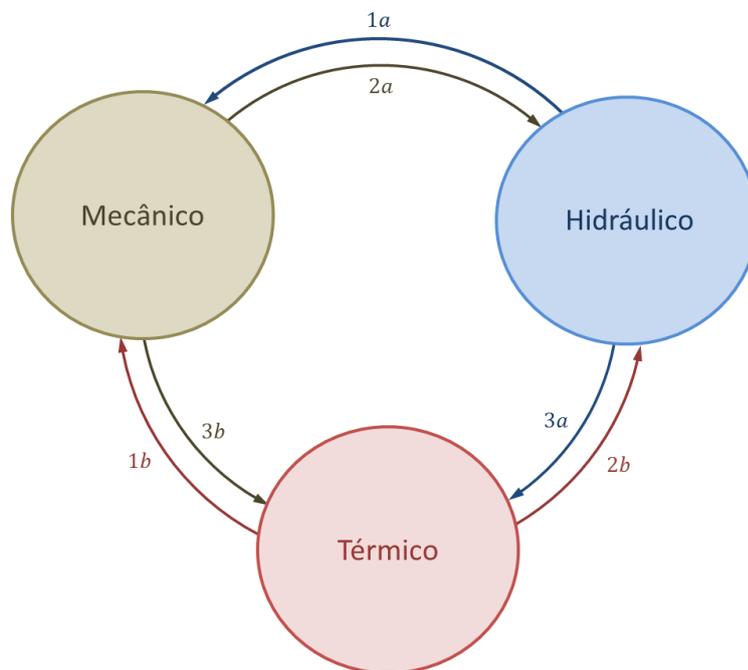


Figura 3.2. Termos de acoplamento para o fenômeno termo-hidro-mecânico em um meio poroso (adaptado de BAI & ABOUSLEIMAN, 1997)

- *Acoplamento hidro-mecânico*

O termo **1a** representa a modificação das tensões efetivas devido à variação da pressão de poros. O termo **2a** representa a variação de massa acumulada/retirada como função da variação volumétrica do meio poroso.

- *Acoplamento termo-mecânico*

O termo **1b** representa as modificações na deformação total do meio poroso como resultado da expansão/contração térmica. O termo **3b** representa a transformação de energia como resultado das deformações elásticas na forma de contração e expansão térmica.

- *Acoplamento hidro-térmico*

O termo **2b** representa a variação da taxa de acumulação como resultado da expansão/contração térmica do meio poroso (fluido e sólido). O termo **3a** representa os efeitos convectivos na equação de transporte de energia devido ao movimento do fluido (velocidade) no meio poroso.

Portanto, de acordo com as interações fenomenológicas explicitadas, fica evidente a parcela desconsiderada na formulação apresentada por Lewis *et al.*

(1986). A influência da parcela mecânica (deformações elásticas) na equação de transporte de energia (termo **3b**) foi negligenciada, de forma que o acoplamento termo-mecânico se apresenta em uma via.

A parcela em questão pode, então, ser introduzida no termo de acumulação da equação de conservação de energia desenvolvida, Equação (3.66), que serve como fundamentação para o desenvolvimento do acoplamento parcial (ABAQUS-GEM). Assim, à luz das proposições realizadas por Bai & Abousleiman (1997), Zhou (1998), Belotserkovets & Prevost (2011), o termo a ser adicionada pode ser escrito como:

$$-K\beta_s T_o \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial t} \quad (3.68)$$

onde K é módulo de deformação volumétrica da rocha, β_s é o coeficiente de expansão térmica dos sólidos, T_o é a temperatura inicial e ε_v é a deformação volumétrica.

Reescrevendo a Equação (3.66), considerando a parcela adicional dada pela Equação (3.68), temos:

$$\begin{aligned} \nabla(\lambda^* \nabla T) + \nabla \left[\rho_f c_f \left(\frac{k}{\mu} \nabla p \right) T \right] - [(1 - \phi)\rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] \frac{\partial T}{\partial t} - \\ -K\beta_s T_o \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial t} = \dot{q} \end{aligned} \quad (3.69)$$

Naturalmente, as equações que regem o comportamento termo-hidro-mecânico totalmente acoplado foram estabelecidas considerando a influência de diversos fenômenos que, a depender do caso de aplicação, podem ser negligenciados (por exemplo, a desconsideração dos efeitos de fluência do material). No entanto, para tanto, deve-se ter um conhecimento profundo dos impactos gerados pela aplicação de hipóteses simplificadoras. Tal fato é abordado de forma direta através de análises comparativas no trabalho de Bai & Abousleiman (1997). Deve ser salientado que as formulações apresentadas neste trabalho também apresentam algumas hipóteses, como por exemplo, a desconsideração dos efeitos Dufour e Soret, os quais caracterizam os efeitos cruzados dos fenômenos, isto é, o primeiro está relacionado com o transporte de energia promovido pelos gradientes de concentração de massa (soluto), e o último

está relacionado com a difusão de massa (soluto) resultante dos gradientes de temperatura, conforme apresentado no item 3.4 (SANTOS, 1992; NIELD & BEJAN, 2006).

3.1.2

Teorias e aplicações da termo-poroelasticidade

Dentro do espectro de aplicações da teoria da termo-poroelasticidade, diversos trabalhos podem ser citados, os quais, de forma geral, apresentam ligeiras diferenças na descrição fenomenológica do acoplamento termo-hidro-mecânico.

À luz dos trabalhos apresentados por Biot (1941, 1956, 1977), Charlez (1991) descreve as equações que regem o comportamento termo-poroelástico de um meio poroso saturado. Partindo da teoria da poroelasticidade, a formulação apresentada inclui os efeitos de expansão/contração térmica considerando a teoria de termoelasticidade. Charlez (1997) também apresenta algumas aplicações das formulações desenvolvidas, bem como os ensaios necessários para a determinação das variáveis presentes nas equações.

Em termos de desenvolvimento e aplicação empregando métodos numéricos, os trabalhos apresentados por Schrefler (1984), Lewis *et al.* (1986), Lewis *et al.* (1989), Lewis & Sukirman (1993), Lewis & Schrefler (1998) e Pao *et al.* (2001) resumem de maneira bastante ampla a evolução conjunta de procedimentos numéricos e estudos de fenômenos acoplados, os quais partem da poroelasticidade, atingindo aplicações para meios multifásicos, normalmente encontrados em reservatórios de petróleo.

Partindo da descrição matemática do fluxo de fluido e transporte de energia em sistemas hidrotérmicos porosos (FAUST & MERCER, 1977), Faust & Mercer (1979) apresentam um modelo matemático aplicado a sistemas geotérmicos, o qual descreve o fluxo de água/vapor e transporte de calor em um meio poroso deformável. Em relação a este modelo, Bear & Corapcioglu (1981) afirmam que o efeito da compactação do meio poroso não é levado em consideração de forma completa.

Assim, motivados pelos desafios da exploração e energia geotérmica, Bear & Corapcioglu (1981) apresentam um modelo matemático para a determinação da subsidência de um aquífero deformável considerando o fluxo de fluido compressível não-isotérmico. Os autores afirmam que a diferença da formulação

proposta em relação aos demais trabalhos consiste, principalmente, na forma como a porosidade varia com a pressão e temperatura.

A partir de um viés termodinâmico, Coussy (2004) também apresenta uma descrição bastante elegante das equações que governam o comportamento termo-hidro-mecânico em meios porosos utilizando como ponto de partida a teoria da termoelasticidade. O autor supracitado também apresenta as formulações considerando o meio poroso de forma linear a não linear, bem como possíveis casos de aplicação.

Considerando o acoplamento de fenômenos THM na análise geomecânica de poços, Detournay (1995) apresenta uma formulação termo-poroelástica aplicada a diversas situações encontradas em uma análise de poços de petróleo (perfuração, estabilidade, fraturamento hidráulico, ensaio de *leak-off*). Vale ressaltar que a equação de conservação de energia empregada pelo autor não incorpora os efeitos do acoplamento hidráulico e mecânico.

Em relação ao acoplamento entre a poroelasticidade e a termoelasticidade, Bai & Abousleiman (1997) apresentam uma discussão sobre as hipóteses simplificadoras em processos de acoplamento THM. Os impactos do “desacoplamento” dos fenômenos na resposta das análises são apresentados através de estudos analíticos aplicados a problemas simplificados.

Zhou (1998) apresenta desenvolvimentos de modelos matemáticos (analíticos e numéricos) para o problema THM considerando meios porosos saturados e não-saturados. A robustez da formulação apresentada permite a análise de uma ampla gama de problemas geotécnicos, como por exemplo: aquecimento, secagem/umedecimento e efeitos de histerese em um meio poroso.

Zimmerman (2000) apresenta, de forma sucinta, a inclusão dos efeitos térmicos (termoelasticidade) na teoria da poroelasticidade. O estudo define parâmetros que quantificam a influência dos acoplamentos poroelástico e termoelástico. Conforme mencionado anteriormente, Zimmerman (2000) afirma que o parâmetro de acoplamento poroelástico (influência da deformação mecânica na pressão de poros) tem importância fundamental no processo THM; por outro lado, o parâmetro de acoplamento termoelástico (influência da deformação mecânica na temperatura) pode ser negligenciado.

Baseado no trabalho apresentado por Coussy (2004), Belotserkovets & Prevost (2011) apresentam o desenvolvimento de um método analítico para obter

a solução do problema de uma esfera porosa saturada não-isotérmica sujeita a um carregamento. O problema foi baseado no estudo realizado por Cryer (1963).

Watanabe (2011) desenvolveu uma metodologia numérica (método dos elementos finitos) para modelar o acoplamento termo-hidro-mecânico em meios contínuos e fraturados com o objetivo de analisar reservatórios fraturados para fins de utilização de energia geotérmica. Desta forma, as equações governantes foram descritas separadamente para a matriz e para as fraturas.

Embora a apresentação das equações desenvolvidas pelos autores supracitados não faça parte do escopo deste item, é válido ressaltar que o termo “termo-poroelasticidade” não tem sido empregado de forma congruente, de forma que cabe ao leitor fazer uma triagem profunda a respeito de qual formulação se apresenta mais apropriada para o problema que se deseja modelar.

3.2

Equação de fluxo monofásico em meios porosos

À luz dos desenvolvimentos realizados para o desenvolvimento da metodologia de acoplamento hidro-mecânico (ABAQUS-ECLIPSE e ABAQUS-IMEX), faz-se necessária a apresentação das equações de fluxo e transporte resolvidas no simulador de fluxo multifásico multicomponente GEM. Cabe ser ressaltado que o simulador GEM apresenta um acoplamento (geo)químico, que pode ser utilizado em conjunto com as análises de fluxo. Segundo Nghiem *et al.* (2004), o programa GEM está habilitado a resolver o problema hidro-químico de maneira totalmente acoplada.

3.2.1

Conservação de massa de fluido

Embora o simulador de fluxo seja multifásico multicomponente, as equações desenvolvidas neste item serão particularizadas para o problema de escoamento de apenas um único fluido no meio poroso (sem reações geoquímicas), uma vez que os desenvolvimentos apresentados no item anterior se referem a uma situação monofásica. As equações que governam o problema de escoamento multifásico multicomponente estão apresentadas no Apêndice A.

- **Balço de massa**

O desenvolvimento da equação de conservação de massa em meios porosos pode ser encontrado em diversos trabalhos clássicos da literatura como, por exemplo, Peaceman (1977), Ertekin (1978), Ertekin *et al.* (2001) e Rosa *et al.* (2006). As formulações apresentadas aqui foram baseadas nos trabalhos de Peaceman (1977) e Chen *et al.* (2006). Portanto, a equação geral do fluxo monofásico em meios porosos, similar a Equação (3.33), pode ser escrita como:

$$\nabla \cdot \left[\mathbf{k} \frac{\rho}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla D) \right] + q = \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} \quad (3.70)$$

O termo de acumulação (lado direito da equação) é tratado, de forma geral, através de linearizações da porosidade e da massa específica do fluido. Assim, podemos escrever que:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \rho \frac{\partial\phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial\rho}{\partial t} \quad (3.71)$$

Aplicando a regra da cadeia na primeira parcela, temos:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\partial\phi}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.72)$$

Considerando a definição de compressibilidade do meio poroso (c_r):

$$c_r = \frac{1}{\phi} \frac{\partial\phi}{\partial p} \quad (3.73)$$

Integrando a equação diferencial supracitada, vem:

$$\phi = \phi^0 e^{c_r(p-p^0)} \quad (3.74)$$

onde ϕ^0 é a porosidade na pressão de referência p^0 . Linearizando a Equação (3.74) através da expansão por séries de Taylor, temos:

$$\phi \approx \phi^0 [1 + c_r(p - p^0)] \quad (3.75)$$

Logo,

$$\frac{\partial \phi}{\partial p} = \phi^o c_r \quad (3.76)$$

De forma análoga, o segundo termo da Equação (3.71) também pode ser linearizado, de forma que:

$$\frac{\partial \rho}{\partial p} = \rho^o c_f \quad (3.77)$$

Portanto, reescrevendo a Equação (3.71), temos:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho}{\partial t} = \rho \frac{\partial \phi}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.78)$$

e substituindo as Equações (3.76) e (3.77) na Equação (3.78), vem:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho}{\partial t} = \rho \phi^o c_r \frac{\partial p}{\partial t} + \phi \rho^o c_f \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.79)$$

Uma hipótese normalmente assumida está relacionada à pequena compressibilidade do fluido, de forma que $\rho \approx \rho^o$, logo, a Equação (3.79) pode ser reescrita como:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho}{\partial t} = \rho (\phi^o c_r + \phi c_f) \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.80)$$

Portanto, reescrevendo a Equação (3.70), temos:

$$\nabla \cdot \left[\mathbf{k} \frac{\rho}{\mu} (\nabla p - \rho \mathbf{g} \nabla D) \right] + q = \rho (\phi^o c_r + \phi c_f) \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.81)$$

A Equação (3.81) não é adequada para fluxo de fluidos compressíveis (como gases), de forma que a hipótese de que, na faixa de pressão de interesse, a massa específica é praticamente constante não configura uma hipótese realística. A Equação (3.81) pode, ainda, ser escrita de uma forma mais conveniente através da definição da compressibilidade (inverso do módulo volumétrico dos materiais), além de desconsiderar, por hora, o termo fonte/sumidouro e os efeitos gravitacionais; assim, temos:

$$\left[\frac{\phi}{K} + \frac{\phi}{K_f} \right] \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{k}{\mu} \nabla^2 p = 0 \quad (3.82)$$

A maneira como a equação de escoamento monofásico foi escrita, sem perda de generalidade, visa facilitar a definição da estratégia de acoplamento que será desenvolvida no próximo capítulo.

- **Balanco de energia**

Como o objetivo é comparar as equações do simulador de fluxo GEM visando estabelecer a estratégia para implementação do acoplamento termo-hidro-mecânico, faz-se necessária a descrição do balanço de energia. Novamente, as equações apresentadas neste item se referem ao fluxo monofásico e foram baseados nos trabalhos de Ertekin (1978) e Lewis *et al.* (2004).

Para um sistema monofásico, o balanço de energia em um meio poroso (convecção e condução) pode ser escrito como:

$$-\nabla \lambda \nabla T - \nabla \left[\rho_f c_{p_f} \left(\frac{k}{\mu} \nabla p \right) T \right] + [(1 - \phi) \rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (3.83)$$

A Equação (3.83) apresenta parcelas equivalentes à Equação (3.69) utilizada para a dedução do acoplamento termo-hidro-mecânico. Naturalmente, por se tratar apenas dos fenômenos de fluxo/transporte (acoplamento hidro-térmico), a Equação (3.83) não considera a influência da parcela mecânica no balanço de energia, dada pela Equação (3.68).

Conforme será explicitado apropriadamente nos itens posteriores, a equação de balanço de energia, empregada nos simuladores de fluxo e transporte em meios porosos (como o GEM), apresenta um termo adicional que representa a transferência de calor para as rochas adjacentes.

3.2.2 Acoplamento hidro-térmico

De posse das equações apresentados no item anterior, é possível explicitar o problema hidro-térmico, o qual é resolvido pelo simulador de reservatórios, para o caso particularizado de fluxo e transporte monofásico. Assim, o sistema a ser resolvido consiste das Equações (3.82) e (3.83).

$$\left[\frac{\phi}{K} + \frac{\phi}{K_f} \right] \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{k}{\mu} \nabla^2 p = 0 \quad (3.82)$$

$$-\nabla \lambda \nabla T - \nabla \left[\rho_f c_{p_f} \left(\frac{k}{\mu} \nabla p \right) T \right] + [(1 - \phi) \rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (3.83)$$

É evidente que este arranjo não configura um sistema hidro-térmico totalmente acoplado, uma vez que os termos cruzados necessários para tal (influência da temperatura na equação de fluxo monofásico) não estão contidos em ambas as equações. Consequentemente, o desenvolvimento da metodologia de acoplamento parcial deverá fazer uso destas equações de forma que elas representem, em conjunto com a parcela mecânica, o fenômeno termo-hidro-mecânico de forma totalmente acoplado.

3.3

Proposição de um esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico

De posse das equações que regem o comportamento termo-hidro-mecânico (THM) de um meio poroso deformável, bem como das equações disponíveis nos programas de elementos finitos (ABAQUS e CHRONOS) e de diferenças finitas (GEM), é possível idealizar uma metodologia robusta de acoplamento iterativo a luz dos desenvolvimentos realizados no fenômeno hidro-mecânico (INOUE & FONTOURA, 2009; INOUE *et al.*, 2011; LAUTENSCHLAGER *et al.*, 2013).

A filosofia consiste em comparar as equações resolvidas pelo simulador GEM (conservação de massa e energia) com as equações que governam o sistema THM acoplado à luz dos desenvolvimentos apresentados no capítulo anterior. Adicionalmente, faz-se necessária, também, a inclusão dos efeitos térmicos na análise de tensões, bem como a adaptação dos parâmetros de acoplamento no programa gerenciador do sistema de acoplamento iterativo (HERMES). Portanto, as equações resolvidas pelo HERMES formam o seguinte sistema, apresentado na Figura 3.3.

$$G \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{G}{(1-2\nu)} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \alpha \nabla p - \beta_s K \nabla T = 0$$

ABAQUS /
CHRONOS

$$\left[\frac{\phi}{K} + \frac{\phi}{K_f} \right] \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla^2 p = 0$$

$$-\nabla \lambda \nabla T - \nabla \left[\rho_f c_{p_f} \left(\frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla p \right) T \right] + [(1-\phi)\rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] \frac{\partial T}{\partial t} = 0$$

GEM

Figura 3.3. Conjunto de equações resolvidas pelo código de acoplamento HERMES

3.3.1 Abordagem para a conservação de massa

Em relação ao balanço de massa, a comparação se dará através das Equações (3.49) e (3.83). A partir da Figura 3.4 é possível observar as diferenças fundamentais entre as duas formulações matemáticas. Os termos que compõem cada uma das equações serão classificados de acordo com a sua ocorrência.

Ainda em relação à Figura 3.4, é evidente o termo que deve ser inserido (em verde) de forma a garantir a influência da temperatura no balanço de massa. Além disso, temos também a influência do processo mecânico representado pela deformação volumétrica do meio poroso. Por outro lado, o efeito da compressibilidade da matriz sólida ($1/K_s$) pode ser negligenciado, de acordo com (CHIN *et al.*, 2002).

$$\left[\frac{\phi}{K} + \frac{\phi}{K_f} \right] \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla^2 p = 0$$

$$-\nabla^T \left[\frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla(p + \rho_f g h) \right] + \left[\frac{(1-\phi)}{K_s} + \frac{\phi}{K_f} - \frac{1}{(3K_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right] \frac{\partial p}{\partial t} + \left[\mathbf{m}^T - \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \right] \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial t} - \left[\phi \beta_f + (1-\phi)\beta_s + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \frac{\beta_s}{3} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = 0$$

 Termos iguais
 Termos para adicionar
 Termos para excluir

Figura 3.4. Comparação entre as equações de conservação de massa do simulador de fluxo e do acoplamento termo-hidro-mecânico

Portanto, em relação à conservação de massa, é possível definir os parâmetros de acoplamento que ajustam a equação do simulador à do acoplamento THM. De acordo com Lewis *et al.* (1986) e Zienkiewicz *et al.* (1999), a porosidade pode ser escrita em função da variação da pressão de poros, da deformação volumétrica e da variação da temperatura, de acordo com a Equação (3.84):

$$\begin{aligned} \phi = \phi^0 + \left[1 - \frac{\mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m}}{9K_s} \right] \Delta \varepsilon_v + \left[\frac{(1 - \phi)}{K_s} + \frac{\phi}{K_f} - \frac{1}{(3K_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right] \Delta p \\ - \left[\phi \beta_f + (1 - \phi) \beta_s + \frac{1}{3K_s} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \frac{\beta_s}{3} \right] \Delta T \end{aligned} \quad (3.84)$$

Assumindo a hipótese de que a compressibilidade dos grãos é bastante pequena ($1/K_s \rightarrow 0$), a Equação (3.84) reduz-se para:

$$\phi = \phi^0 + \Delta \varepsilon_v + \frac{\phi}{K_f} \Delta p - [\phi \beta_f + (1 - \phi) \beta_s] \Delta T \quad (3.85)$$

Portanto, de forma condensada, a Equação pode ser reescrita como:

$$\phi = \phi^0 + \Delta \varepsilon_v + \frac{\phi}{K_f} \Delta p - \beta_m \Delta T \quad (3.86)$$

Vale salientar que o parâmetro de Biot (α), neste esquema de acoplamento tem valor igual a 1, uma vez que foi assumida a hipótese de incompressibilidade dos grãos da matriz. Novamente, é evidente a contribuição de cada um dos fenômenos envolvidos na variação da porosidade do meio poroso. Vale destacar que β_m pode ser calculado de acordo com a seguinte expressão:

$$\beta_m = \phi \beta_f + (1 - \phi) \beta_s \quad (3.87)$$

A parcela responsável pelo ajuste robusto da formulação THM é a *pseudo-compressibilidade* (c_p), que também atua nesta formulação como parâmetro de acoplamento. A Figura 3.5 apresenta um paralelo entre o acoplamento hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico a partir das equações a serem aproximadas, bem como os parâmetros de acoplamento responsáveis por esta função.

$-\frac{k}{\mu} \nabla^2 p + \frac{\phi}{K_f} \frac{\partial p}{\partial t} + \alpha \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial t} = 0$ $-\frac{k}{\mu} \nabla^2 p + \left[\frac{\phi}{K} + \frac{\phi}{K_f} \right] \frac{\partial p}{\partial t} = 0$ <p style="text-align: center; color: blue; font-weight: bold;">↓</p> $c_p = \frac{1}{\phi} \left(\frac{\partial \varepsilon_v}{\partial p} \right)$ <p style="text-align: center; font-weight: bold; color: black;">Problema Hidro-mecânico</p>	$-\frac{k}{\mu} \nabla^2 p + \frac{\phi}{K_f} \frac{\partial p}{\partial t} + \alpha \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial t} - \beta_m \frac{\partial T}{\partial t} = 0$ $-\frac{k}{\mu} \nabla^2 p + \left[\frac{\phi}{K} + \frac{\phi}{K_f} \right] \frac{\partial p}{\partial t} = 0$ <p style="text-align: center; color: blue; font-weight: bold;">↓</p> $c_p = \frac{1}{\phi} \left(\frac{\partial \varepsilon_v}{\partial p} - \beta_m \frac{\partial T}{\partial p} \right)$ <p style="text-align: center; font-weight: bold; color: black;">Problema Termo-hidro-mecânico</p>
---	---

Figura 3.5. Comparação entre as equações da *pseudo-compressibilidade* para os problemas hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico

Assim, através do novo parâmetro de acoplamento (c_p) é possível retomar a equação de balanço de massa do acoplamento total THM a partir da conservação de massa do simulador de reservatórios. A seguir é apresentada a demonstração da afirmação supracitada.

Substituindo a equação da *pseudo-compressibilidade* (apresentada na Figura 3.5) na equação de fluxo monofásico do GEM, no termo que representa a compressibilidade da rocha ($1/K$), temos:

$$-\frac{k}{\mu} \nabla^2 p + \left[\phi \frac{1}{\phi} \left(\frac{\partial \varepsilon_v}{\partial p} - \beta_m \frac{\partial T}{\partial p} \right) + \frac{\phi}{K_f} \right] \frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (3.88)$$

Manipulando, vem:

$$-\frac{k}{\mu} \nabla^2 p + \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} - \beta_m \frac{\partial T}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\phi}{K_f} \frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (3.89)$$

Realizando as simplificações necessárias, obtém-se a equação de conservação de massa desenvolvida para o acoplamento iterativo, ou seja,

$$-\frac{k}{\mu} \nabla^2 p + \frac{\phi}{K_f} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial t} - \beta_m \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (3.90)$$

Conforme esperado, a equação obtida através da inclusão da *pseudo-compressibilidade* (3.90) é idêntica à equação oriunda da formulação THM

acoplada apresentada na coluna direita da Figura 3.5. Evidentemente, as Equações (3.49) e (3.90) são iguais através da adoção de duas hipóteses simplificadoras, isto é, desconsideração dos efeitos de fluência e incompressibilidade dos sólidos.

3.3.2 Abordagem para a conservação de energia

A abordagem para aproximar a equação de conservação de energia segue a mesma filosofia apresentada anteriormente, isto é, comparação entre as equações do acoplamento THM (3.69) e do simulador de fluxo (3.83). A partir da Figura 3.6 é possível observar que a diferença fundamental entre as duas formulações matemáticas está na energia térmica gerada pela deformação do meio poroso.

$$\begin{aligned} & \boxed{-\nabla\lambda\nabla T} - \boxed{\nabla\left[\rho_f c_{p_f}\left(\frac{\mathbf{k}}{\mu}\nabla p\right)T\right]} + \boxed{[(1-\phi)\rho_s c_s + \phi\rho_f c_f]\frac{\partial T}{\partial t}} = 0 \\ & \boxed{-\nabla(\lambda\nabla T)} - \boxed{\nabla\left[\rho_f c_{p_f}\left(\frac{\mathbf{k}}{\mu}\nabla p\right)T\right]} + \boxed{[(1-\phi)\rho_s c_s + \phi\rho_f c_f]\frac{\partial T}{\partial t}} + \boxed{K\beta_s T_o\frac{\partial\varepsilon_v}{\partial t}} = 0 \end{aligned}$$

 Termos iguais
 Termos para adicionar

Figura 3.6. Comparação entre as equações de conservação de energia do simulador de fluxo e do acoplamento termo-hidro-mecânico

Pela Figura 3.6, apenas um único termo deve ser inserido para que a equação de conservação de energia do simulador GEM se ajuste à equação do acoplamento THM. No entanto, o real impacto deste termo tem sido negligenciado por alguns pesquisadores de fenômenos acoplados (Lewis *et al.*, 1986; Detournay, 1995; Watanabe, 2011), os quais utilizaram esta hipótese em suas formulações. Zimmerman (2000) afirma que a temperatura tem influência importante nas tensões e deformações, no entanto, o campo de temperatura e o fluxo de calor podem ser, geralmente, calculados sem levar em consideração os efeitos mecânicos.

De fato, a literatura não apresenta uma convergência em relação à consideração deste termo e a sua real influência no processo acoplado de uma forma global. Assim, neste trabalho, será desconsiderada a contribuição do fenômeno mecânico na conservação de energia, de forma que não existe a

necessidade de criação de um novo parâmetro de acoplamento para aproximar as equações.

3.3.3

Panorama do esquema de acoplamento THM iterativo

Uma vez definida a metodologia de acoplamento THM iterativo, pode-se traçar um panorama geral das equações resolvidas por cada programa, conforme apresentado na Figura 3.7.

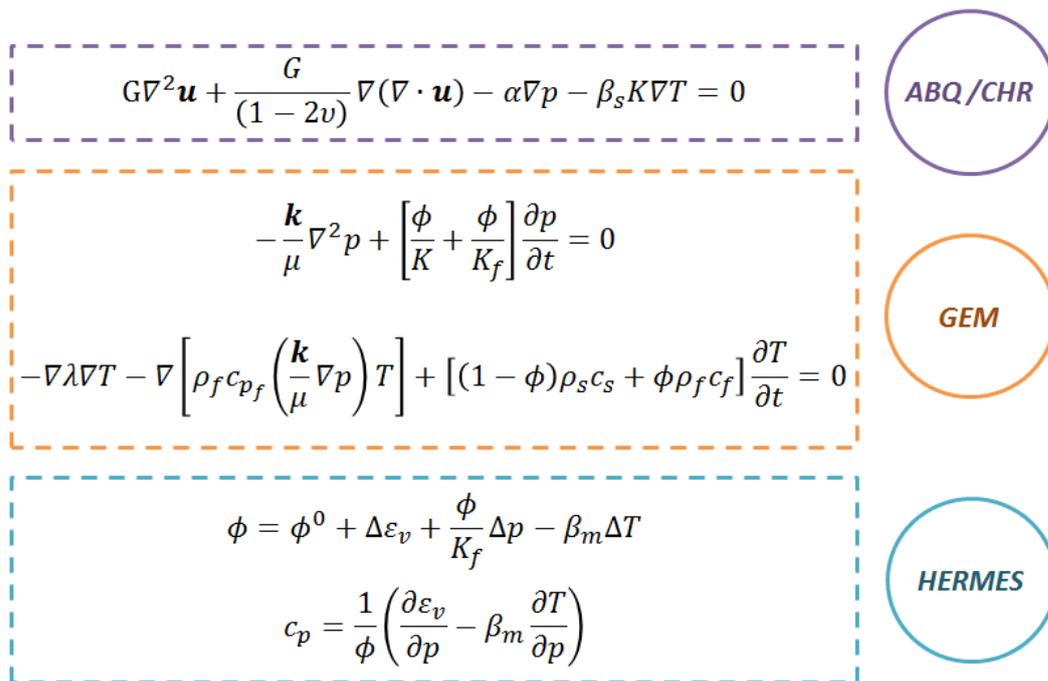


Figura 3.7. Equações resolvidas por cada um dos programas envolvidos no processo de acoplamento THM iterativo

O sistema de equações que compõe o fenômeno termo-hidro-mecânico, definido na Figura 3.7, pode ser apresentado na forma de diagrama (vide Figura 3.8). Conforme já apresentado anteriormente, o esquema idealizado configura uma interação fenomenológica robusta em todos os processos envolvidos, salvo a variação de energia devido à deformação volumétrica (acoplamento M-T).

O programa HERMES é responsável por gerenciar as chamadas dos programas de elementos finitos e diferenças finitas e preparar os arquivos de entrada de cada um dos simuladores ao longo dos passos de tempo da análise, conforme pode ser observado na Figura 3.9. Após o término da simulação de fluxo, os dados de saída (pressão, saturação e temperatura) são manipulados de forma a criar os carregamentos necessários para a realização da análise de tensões

(F_p e F_h) que, por sua vez, como resultado, permite o cálculo dos parâmetros de acoplamento (através das deformações experimentadas pelo meio poroso).

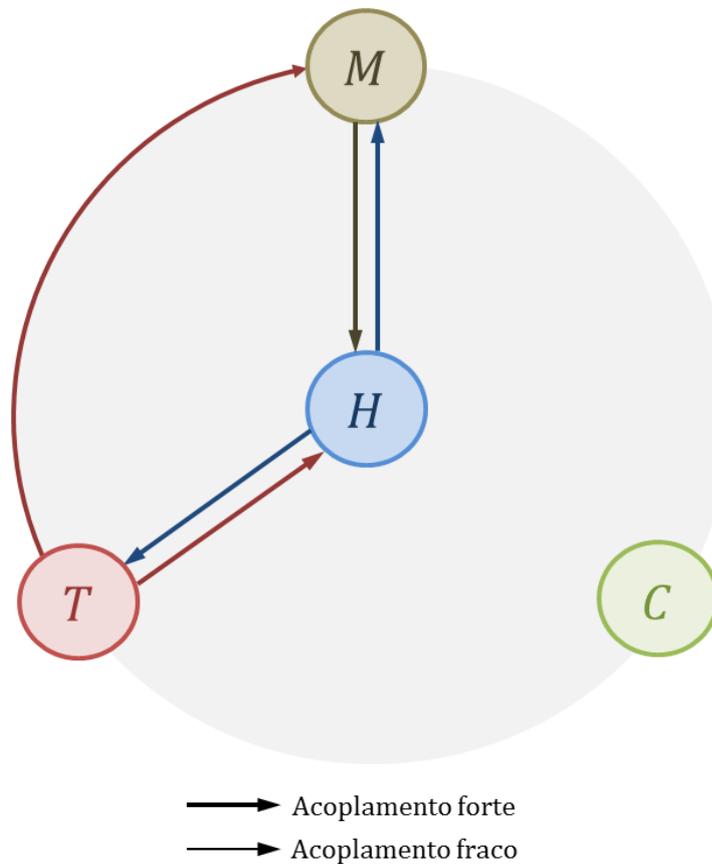


Figura 3.8. Fenômenos envolvidos no esquema de acoplamento THM iterativo desenvolvido

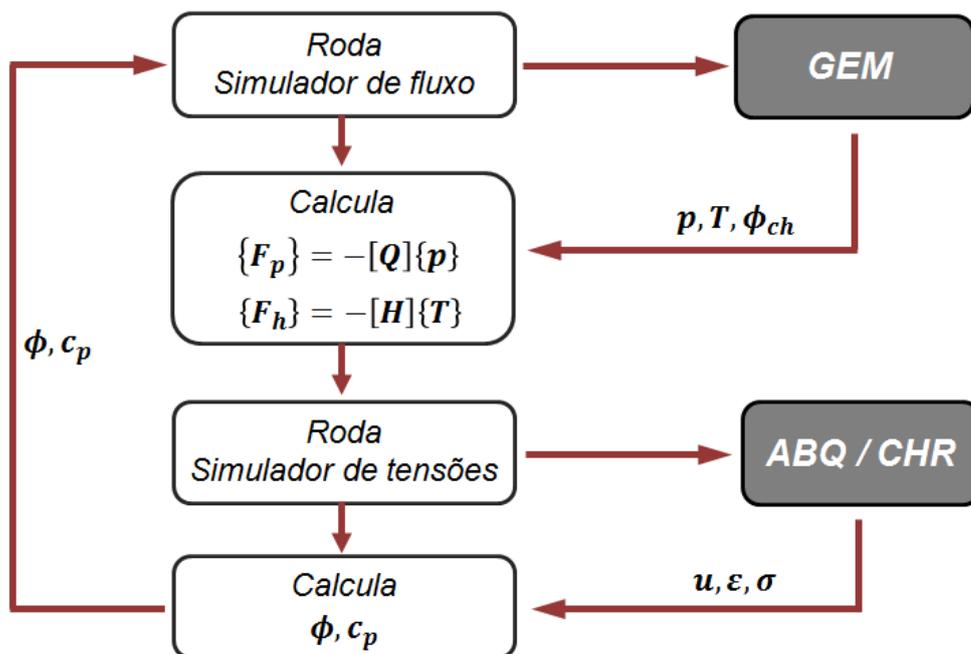


Figura 3.9. Visão geral do HERMES: programa gerenciador do processo de acoplamento iterativo

Este processo é iterativo e cessa somente quando o critério de convergência é atingido. Neste caso, o critério de convergência adotado é a pressão de poros, conforme pode ser observado na Equação (3.91).

$$p_m^{n+1} - p_m^n < \textit{tolerância} \quad (3.91)$$

onde p_m^{n+1} e p_m^n são as pressões de poros médias para os passos de tempo $n + 1$ e n , respectivamente. O algoritmo mapeia apenas as células que apresentam variação de pressão de poros para efetuar o cálculo da pressão média (p_m). De forma geral, tem sido atribuído um valor de $3 \textit{ psi}$ como valor para a *tolerância*.

Ao longo dos passos de tempo, ditados pelo simulador de fluxo, as interações entre o GEM e o ABAQUS/CHRONOS podem ser esquematizadas de acordo com a Figura 3.10. Conforme já mencionado, a análise acoplada passa para o próximo passo de tempo (t_{n+1} , t_{n+2} , etc) uma vez satisfeito o critério de convergência. Cabe ser enfatizado que foi empregado o esquema conhecido como *restart à frio* nas simulações do GEM, ou seja, a cada novo passo de tempo, as condições iniciais do escoamento são reescritas de acordo com os resultados obtidos no passo de tempo anterior.

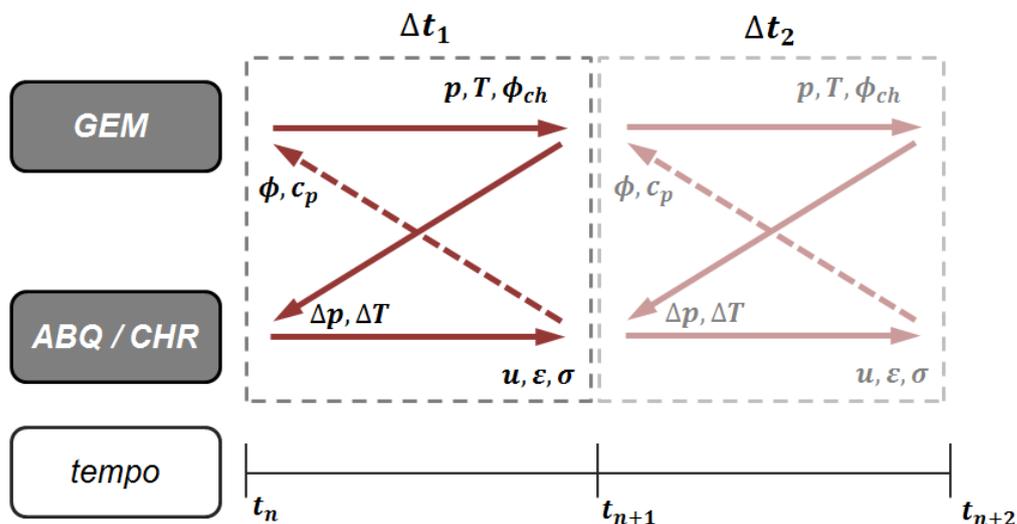


Figura 3.10. Troca temporal de informações entre os programas durante uma análise THM

Em relação ao desenvolvimento de um esquema de acoplamento iterativo termo-hidro-mecânico empregando diferentes simuladores, a metodologia idealizada apresenta-se robusta uma vez que leva em consideração os fenômenos fundamentais, bem como suas interações.

Uma vez que o programa GEM também permite a inclusão de reações geoquímicas no processo de simulação de reservatórios (otimizado para análise de armazenamento de dióxido de carbono), faz-se necessária uma extensão da metodologia de acoplamento THM para levar em consideração o acoplamento químico.

3.4 Inclusão do acoplamento químico

O emprego do simulador GEM no esquema de acoplamento em desenvolvimento permite a inclusão, além do fluxo difusivo/convectivo e do equilíbrio termodinâmico, de processos de equilíbrio químico das reações entre os componentes aquosos e reações de dissolução e precipitação dos minerais que compõem o meio poroso. As duas últimas funcionalidades se referem à vertente de simulação de armazenamento de dióxido de carbono (CCS – *Carbon Capture and Storage*) do programa. Vale salientar que este módulo do GEM é denominado de GHG (*Greenhouse Gas*).

Assim, a inclusão do GEM no esquema de acoplamento iterativo permitirá modelar, de forma acoplada, processos de armazenamento de CO₂ em reservatórios depletados e aquíferos salinos, levando em consideração os fenômenos geoquímicos resultantes das interações entre o CO₂, água e a rocha.

3.4.1 Efeitos geoquímicos – GEM

Para realizar uma simulação composicional considerando o acoplamento geoquímico é necessário integrar fenômenos de transporte, equilíbrio termodinâmico entre as fases hidrocarboneto/ aquosa e as equações que governam os fenômenos geoquímicos. Este último envolve reações entre a fase aquosa e os minerais constituintes da rocha resultando nos processos de precipitação e dissolução. Este cenário surgiu com grande impacto devido ao processo de recuperação terciária de petróleo (através da injeção de dióxido de carbono) e, na última década, relacionado ao processo de sequestro e armazenamento de CO₂, este último principalmente requer o acoplamento geoquímico.

O acoplamento geoquímico discutido neste item se refere ao acoplamento desenvolvido por Nghiem *et al.* (2004, 2011) para o *software* GEM. O módulo

geoquímico (GHG) foi idealizado principalmente com o objetivo de simular o processo de armazenamento de CO_2 em aquíferos salinos. Portanto, segundo os autores supracitados, o simulador GEM–GHG modela os seguintes fenômenos:

- a) Fluxo convectivo e difusivo em meios porosos;
- b) Equilíbrio termodinâmico entre as fases óleo, gás e água;
- c) Equilíbrio químico das reações entre os componentes aquosos e
- d) Reações de dissolução e precipitação mineral.

De fato, os itens a) e b) já foram mencionados ao longo deste capítulo e nos apêndices A e B, restando assim, somente os itens c) e d) para atingir o objetivo deste estudo. Cabe ser salientado que as equações apresentadas a seguir se referem, principalmente, ao processo de injeção de CO_2 em aquíferos salinos. Portanto, o sistema será composto fundamentalmente por uma fase aquosa e uma fase gás.

- **Solubilidade de gás na fase aquosa**

A injeção de dióxido de carbono na fase aquosa resulta na sua dissolução, a qual pode ser representada pela seguinte reação química reversível:



onde $\text{CO}_{2(g)}$ e $\text{CO}_{2(aq)}$ denotam dióxido de carbono nas fases gasosa e aquosa, respectivamente. Alternativamente, a Equação (3.92) pode ser reescrita como:

$$\text{CO}_{2(g)} - \text{CO}_{2(aq)} = 0 \quad (3.93)$$

onde os coeficientes estequiométricos do $\text{CO}_{2(g)}$ e $\text{CO}_{2(aq)}$ são 1 e -1 , respectivamente. Assume-se a hipótese de que a taxa de dissolução do gás no líquido é rápida o suficiente de forma que as fases aquosa e gasosa estão em equilíbrio termodinâmico (ver Apêndices A e B). Portanto, a equação para o equilíbrio pode ser expressa em termos da igualdade de fugacidades dos componentes das fases gás e aquosa, isto é,

$$f_{ig} = f_{iw}, \quad i = 1, \dots, n_g \quad (3.94)$$

onde f_{ig} e f_{iw} são as fugacidades do componente i nas fases vapor e líquida, respectivamente. O gás é assumido como uma mistura multicomponente, levando em conta o fato da injeção de CO_2 impuro, ou seja, CO_2 misturado com outros

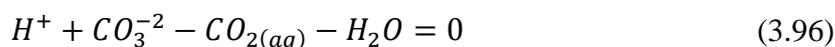
gases. A fugacidade do gás (f_{ig}) é determinada pelos procedimentos explicitados no item relacionado ao cálculo *flash* (Apêndices A e B). A fugacidade dos componentes gasosos solúveis na fase aquosa (f_{iw}) é calculada através da lei de Henry. Portanto, de acordo com a lei de Henry, temos que:

$$f_{iw} = y_{iw} \cdot H_i \quad (3.95)$$

onde H_i é a constante de Henry do componente i e y_{iw} é a fração molar do componente i na fase aquosa. Segundo Li & Nghiem (1986), a consideração da salinidade da fase aquosa é levada em consideração no valor da constante de Henry.

- **Estequiometria das reações**

As reações químicas modeladas nos processos discutidos aqui podem ser divididas em dois grupos: reações que ocorrem entre componentes na fase aquosa e reações que ocorrem entre os minerais e os componentes da fase aquosa. Como exemplo do primeiro tipo de reação, temos a dissociação do $CO_{2(aq)}$, conforme segue:



Como exemplo do segundo tipo de reação, temos a dissociação da calcita ($CaCO_3$), conforme segue:



Assim como as Equações (3.96) e (3.97), diversas outras equações podem ser adicionadas quando se objetiva considerar efeitos geoquímicos em simulações de reservatórios. As reações químicas entre as espécies aquosas são homogêneas uma vez que envolvem somente componentes da fase aquosa. Por outro lado, as reações químicas envolvendo minerais e componentes da fase aquosa são consideradas reações heterogêneas.

As reações entre componentes na fase aquosa são rápidas em relação às reações de dissolução/precipitação mineral. Portanto, as reações intra-aquosas podem ser representadas como reações de equilíbrio químico enquanto que as reações de dissolução/precipitação são dependentes da taxa de reação.

- **Equilíbrio químico**

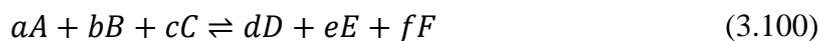
Considerações gerais acerca do equilíbrio químico de reações estão sucintamente apresentadas no Apêndice A e B. Neste item, será abordado o assunto de uma maneira mais aplicada e direta. As reações de equilíbrio químico são modeladas com as constantes de equilíbrio químico, isto é:

$$Q_\alpha - K_{eq,\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, R_{aq} \quad (3.98)$$

sendo que,

$$Q_\alpha = \prod_{k=1}^{n_{aq}} a_k^{v_{k\alpha}} \quad (3.99)$$

onde $K_{eq,\alpha}$ é a constante de equilíbrio químico para a reação α , a_k é a atividade do componente k , $v_{k\alpha}$ são os coeficientes estequiométricos, Q_α é o produto da atividade e R_{aq} é o número de reações entre componentes. Marçon (2009) reescreve as Equações (3.98) e (3.99) de uma maneira mais simplificada conforme segue.



A velocidade da reação direta (v_1) é determinada por:

$$v_1 = k_1[A]^a[B]^b[C]^c \quad (3.101)$$

Analogamente, a velocidade da reação inversa (v_2) é determinada por:

$$v_2 = k_1[D]^d[E]^e[F]^f \quad (3.102)$$

Sabendo que no equilíbrio termodinâmico as velocidades de reações direta e inversa são iguais,

$$v_1 = v_2 \quad (3.103)$$

Logo, podemos escrever que:

$$K_{eq} = \frac{[D]^d[E]^e[F]^f}{[A]^a[B]^b[C]^c} = Q_\alpha \quad (3.104)$$

Assim, a constante de equilíbrio químico é resultado do quociente entre o produto das concentrações das substâncias obtidas na reação e o produto das concentrações das substâncias reagentes, sendo que todas as concentrações estão elevadas a expoentes iguais aos seus respectivos coeficientes estequiométricos. Segundo Nghiem *et al.* (2004), tabelas de valores de K_{eq} em função da temperatura podem ser encontrados para diversas reações aquosas em Bethke (1996) e Kharaka *et al.* (1989).

- **Reações de dissolução e precipitação mineral**

A lei da taxa de reação de dissolução e precipitação mineral, sugerida por Bethke (1996), tem a seguinte forma:

$$r_{\beta} = \hat{A}_{\beta} k_{\beta} \left(1 - \frac{Q_{\beta}}{K_{eq,\beta}} \right), \beta = 1, \dots, R_{mn} \quad (3.105)$$

onde r_{β} é a taxa, \hat{A}_{β} é a área de superfície reativa do mineral β , k_{β} é a taxa constante de reação mineral β , $K_{eq,\beta}$ é a constante de equilíbrio químico para a reação mineral β , Q_{β} é o produto da atividade (análoga à 3.99) e R_{mn} é o número de reações entre componentes aquosos e minerais. Assim como para $K_{eq,\alpha}$, diversos valores de $K_{eq,\beta}$ podem ser encontrados na literatura. O valor de Q_{β} é análogo ao produto de atividade Q_{α} apresentado para as reações entre componentes aquosos. As variáveis \hat{A}_{β} e k_{β} podem ser calculadas através das Equações (3.106 e 3.107).

$$k_{\beta} = k_{o\beta} \exp \left[-\frac{E_{a\beta}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_o} \right) \right] \quad (3.106)$$

onde $k_{o\beta}$ é a taxa constante de reação mineral β na temperatura T_o , $E_{a\beta}$ é a energia de ativação para a reação mineral β , T é a temperatura e R é a constante universal dos gases.

$$\hat{A}_{\beta} = \hat{A}_{o\beta} \frac{N_{\beta}}{N_{\beta}^0} \quad (3.107)$$

onde $\hat{A}_{o\beta}$ é a área de superfície reativa inicial do mineral β , N_β é a quantidade total de mols do mineral β por volume e N_β^0 é a quantidade total de mols do mineral β por volume para o tempo inicial.

Em relação à Equação (3.105), a relação $Q_\beta/K_{eq,\beta}$ é denominada de índice de saturação da reação. Este índice é importante uma vez que define se um mineral sofre dissolução ou precipitação. Portanto, se:

$$\frac{Q_\beta}{K_{eq,\beta}} > 1 \Rightarrow r_\beta < 0 \rightarrow \text{dissolução mineral} \quad (3.108)$$

caso contrário,

$$\frac{Q_\beta}{K_{eq,\beta}} < 1 \Rightarrow r_\beta > 0 \rightarrow \text{precipitação mineral} \quad (3.109)$$

Caso a relação seja igual à unidade, a taxa de reação torna-se zero e nenhum mineral será precipitado ou dissolvido. Esta convenção é seguida pelo programa GEM.

A variação do volume poroso devido às reações químicas de precipitação em dissolução mineral são quantificadas no GEM de acordo com as expressões propostas por Nghiem *et al.* (2004):

$$\hat{\phi}^* \equiv \phi^* - \sum_{\beta=1}^{n_m} \left(\frac{N_\beta}{\rho_\beta} - \frac{N_\beta^0}{\rho_\beta} \right) \quad (3.110)$$

$$\phi = \hat{\phi}^* [1 + c_r(p - p^*)] \quad (3.111)$$

onde ϕ é a porosidade, ϕ^* é a porosidade de referência sem a dissolução/precipitação mineral, $\hat{\phi}^*$ é a porosidade de referência considerando a dissolução/precipitação mineral, N_β é a quantidade total de mols do mineral β por volume para o passo de tempo atual, N_β^0 é a quantidade total de mols do mineral β por volume para o tempo inicial (zero), ρ_β é a densidade molar do mineral, c_r é a compressibilidade da rocha, p^* é a pressão de referência e p é a pressão no passo de tempo atual. Evidentemente, a desconsideração dos fenômenos químicos na

Equação (3.111) retoma a Equação (3.75), onde a porosidade é apenas função da variação da pressão de poros.

O programa GEM também pode levar em consideração a variação da permeabilidade absoluta devido ao processo de dissolução/precipitação mineral através da equação de Kozeny-Carman, conforme segue:

$$\frac{k}{k^0} = \left(\frac{\phi}{\phi^0}\right)^3 \left(\frac{1-\phi^0}{1-\phi}\right)^2 \quad (3.112)$$

onde k^0 e ϕ^0 são a permeabilidade e porosidade iniciais, respectivamente. O programa também permite inserir uma lei de potência como função da relação entre as porosidades (ϕ/ϕ^0) elevada a um expoente atribuído pelo usuário.

- **Transporte de íons**

Para a modelagem do transporte de íons em um meio poroso, se faz necessária a inclusão de mais uma equação no sistema resolvido pelo simulador GEM. De forma geral, o fenômeno de migração de íons de áreas de maior concentração para áreas de menor concentração é conhecido por difusão molecular e pode ser representado pela lei de Fick. Assim, de acordo com Araújo (2005), temos:

$$J_s^d = -D^c \nabla C \quad (3.113)$$

onde J_s^d representa o fluxo difusivo, D^c é o coeficiente de difusão molecular e C a concentração. De forma mais ampla, o coeficiente de difusão molecular para um meio poroso pode considerar a tortuosidade do meio, bem como a combinação dos transportes difusivo e advectivo (dispersão hidrodinâmica), de forma que D^c pode ser reescrito como (BEAR 1988, e FRIND, 1995):

$$D_{ij} = \alpha_T^c |v_f| \delta_{ij} + \frac{(\alpha_L^c - \alpha_T^c) v_h v_v}{|v_f|} + D^c \tau \delta_{ij} \quad (3.114)$$

onde D_{ij} representa o tensor de dispersão hidrodinâmica, δ_{ij} o delta de Kronecker, α_T^c e α_L^c representam as dispersividades transversal e longitudinal, respectivamente, v_f é a velocidade do fluido, v_h e v_v são as velocidades do fluido

na direções horizontal e vertical, respectivamente, e τ a tortuosidade do meio poroso.

Portanto, considerando o movimento do fluido associado à difusão molecular supracitada, podemos escrever a equação de transporte de soluto, isto é,

$$J_s = v_f C - \mathbf{D}_{ij} \nabla C \quad (3.115)$$

onde J_s representa o transporte de soluto, v_f é a velocidade do fluido, C é a concentração e \mathbf{D}_{ij} é o tensor de dispersão hidrodinâmica (FRYDMAN *et al.*, 2003).

É válido mencionar que no GEM, a parcela que representa a difusão molecular, na Equação (3.113), é escrita para uma situação multifásica-multicomponente como:

$$J_i = - \sum_k \phi \rho_k S_k \mathbf{D}_{ik} \nabla y_{ik} \quad (3.116)$$

onde J_i representa o transporte do componente i , ϕ é a porosidade, ρ_k é a massa específica da fase k , S_k é a saturação da fase k , \mathbf{D}_{ik} é o tensor de dispersão hidrodinâmica do componente i na fase k e y_{ik} é a fração molar do componente i na fase k (CMG, 2010). Cabe mencionar que $i = 1, \dots, n_c$ e $k = o, g, w$; sendo n_c o número de componentes e o, g, w se referem às fases óleo, gás e água. A componente do movimento do fluido, primeira parcela da Equação (3.115), também é computada no programa GEM.

Adicionalmente, o simulador leva em consideração duas formas de reações presentes nos sistemas geológicos de armazenamento de dióxido de carbono, isto é, as reações intra-aquosas e as reações de dissolução/precipitação mineral. Portanto, considerando a conservação de massa de soluto e o termo de acumulação, a Equação (3.115) pode ser reescrita como:

$$\nabla(v_f C) - \nabla(\mathbf{D}_{ij} \nabla C) + \frac{\partial(\phi C)}{\partial t} + R_{aq} + R_{mn} = 0 \quad (3.117)$$

onde R_{aq} representa as taxas de reação intra-aquosa e R_{mn} representa as taxas de reação de dissolução/precipitação (dada pela expressão 3.105). Assim, o primeiro termo (do lado esquerdo da equação) representa o termo convectivo, o segundo

representa o termo de dispersão molecular, o terceiro representa o termo de acumulação, o quarto e quinto representam as reações presentes no sistema. A variação da porosidade do meio poroso em relação ao tempo é efetuada considerando as equações (3.110) e (3.111).

Note que a conservação de massa de componentes reativos (difusão e dispersão de componentes na fase aquosa) apresenta-se acoplada em relação ao fluxo de fluido (conservação de massa do fluido) através da velocidade do fluido (v_f). A influência da temperatura também está presente na Equação (3.117), uma vez que a cinética das reações químicas envolvidas é altamente dependente da temperatura, conforme já descrito anteriormente.

De acordo com Mateo (2014) e Steefel *et al.* (2005) a equação de conservação de massa (3.82) é afetada pelo transporte de íons/reativo no meio poroso através da inclusão do termo $\bar{V}_\beta \rho_\beta R_{mn}$. As variáveis \bar{V}_β e ρ_β representam o volume molar e a massa específica do mineral β . Em relação a equação de conservação de energia (3.83), os autores supracitados consideram o ganho/perda de calor devido às reações químicas através da incorporação do termo $H_\beta R_{mn}$, sendo H_β a entalpia de reação. Vale ressaltar que Nghiem *et al.* (2004) afirmam que o simulador resolve o sistema de equações (acoplamento hidro-químico) de maneira totalmente acoplada.

A ideia fundamental é apenas empregar o simulador GEM para efetuar análises de armazenamento de dióxido de carbono utilizando o esquema de acoplamento iterativo apresentado no item anterior. Considerando o exposto neste capítulo, a única modificação se refere à inclusão dos efeitos químicos na variação da porosidade (consequentemente a permeabilidade), conforme será apresentado no item a seguir.

Neste trabalho não será considerada, de forma robusta e direta, o efeito das reações químicas no comportamento mecânico (acoplamento C-M), de forma que a resistência e a deformabilidade do material rochoso permanecem constantes ao longo do tempo. O acoplamento mecânico-químico (M-C) ocorre de forma fraca, uma vez que as deformações do meio poroso alteram as trajetórias de transporte e propriedades dos componentes, como por exemplo: a área da superfície reativa do mineral.

Uma vez compreendido como as equações químicas são computadas no simulador composicional de reservatórios, parte-se diretamente para a extensão da metodologia de acoplamento THM iterativo, apresentada no item 3.3.3. Esta extensão permitirá a solução de problema envolvendo os quatro fenômenos de interesse (THMC), bem como suas interações.

3.4.2 Estratégia para inclusão do efeito químico

A estratégia para levar em consideração os efeitos relacionados às reações químicas faz uso da hipótese de que a vertente de acoplamento do fenômeno mecânico com o químico ocorre apenas na direção M-C de forma fraca, através da alteração das trajetórias de transporte devido às deformações do meio poroso.

Conforme já discutido anteriormente, a equação da porosidade utilizada pelo simulador, Equação (3.111), não considera os fenômenos térmico e mecânico, de forma que se faz necessária sua adaptação, conforme exposto no item 3.3.1. Portanto, partindo das Equações (3.86) e (3.110), podemos incluir os efeitos químicos como:

$$\phi = \phi^0 + \Delta\varepsilon_v + \frac{\phi}{K_f} \Delta p - \beta_m \Delta T + \phi_{ch} \quad (3.116)$$

sendo que,

$$\phi_{ch} \equiv \hat{\phi}^* = \phi^* - \sum_{\beta=1}^{n_m} \left(\frac{N_\beta}{\rho_\beta} - \frac{N_\beta^0}{\rho_\beta} \right) \quad (3.117)$$

onde ϕ_{ch} representa a variação de porosidade devido somente aos processos geoquímicos (precipitação/dissolução mineral). Assim, podemos estender a Equação (3.86) de forma a considerar o acoplamento termo-hidro-mecânico-químico (THMC) como:

$$\phi = \phi^0 + \Delta\varepsilon_v + \frac{\phi}{K_f} \Delta p - \beta_m \Delta T + \phi_{ch} \quad (3.118)$$

Atrelada à porosidade, os processos acoplados descritos aqui também se mostram influentes na variação da permeabilidade do meio poroso. O simulador GEM permite que a permeabilidade seja atualizada como resposta aos fenômenos

experimentados pelo reservatório através da Equação (3.112). O programa HERMES também permite a atualização da permeabilidade do meio poroso através da relação apresentada por Bai & Elsworth (1994), isto é,

$$\frac{k}{k^o} = \left\{ 1 \pm \frac{1}{2} \left[\frac{9(1-v^2)}{2} (\pi \Delta \varepsilon_v)^2 \right]^{1/3} \right\}^2 \quad (3.119)$$

onde v é o coeficiente de Poisson, ε_v é a deformação volumétrica e k^o a permeabilidade inicial (ou do passo anterior). Os sinais de adição/subtração denotam se a permeabilidade do meio aumenta ou diminui como função da deformação volumétrica. Cabe ressaltar que uma abordagem similar, no que diz respeito à inclusão de ϕ_{ch} , foi empregada por Hou *et al.* (2010).

Vale ressaltar que o efeito químico foi inserido sem a aproximação de uma teoria termo-quimo-poroelástica; conseqüentemente, a equação da *pseudo-compressibilidade* permanece inalterada. Adicionalmente, é evidente que a influência da variante química nos processos mecânicos (C-M), como a alteração da resistência e deformabilidade do meio poroso, foi negligenciada neste trabalho.

De fato, a descrição matemática das interações entre os fenômenos químicos com os demais (térmicos, hidráulicos e mecânicos) apresenta um grau de incerteza maior no escopo da geomecânica. Isto é ainda mais pronunciado quando se busca estabelecer a relação entre os processos mecânicos e químicos, conforme afirmam Lanru & Xiating (2003). Existe a necessidade de realização de estudos laboratoriais visando a determinação do comportamento mecânico de meios porosos frente à percolação de fluidos reativos, de forma a estabelecer as relações supracitadas.

O último item deste capítulo tem como objetivo ilustrar, de forma sucinta, como as interações entre os processos mecânicos e químicos têm sido descritas e quais são os cenários de aplicação. Além disso, serão apresentados também os estudos relacionados com a determinação de relações empíricas, baseadas em ensaios de laboratório, entre os comportamentos mecânico (resistência e deformabilidade) e hidráulico (parâmetros de fluxo) de rochas após a ocorrência de reações geoquímicas de precipitação e dissolução.

3.4.3

Panorama do esquema de acoplamento THMC iterativo

Uma vez estabelecida a forma de consideração dos efeitos químicos no processo de acoplamento termo-hidro-mecânico iterativo, pode traçar um novo panorama das equações resolvidas por cada programa. Assim, a Figura 3.11 representa uma atualização da Figura 3.7 para o caso THMC.

The diagram consists of three vertically stacked dashed boxes, each containing a set of equations. To the right of each box is a colored circle containing the program name: ABQ/CHR (purple), GEM (orange), and HERMES (teal).

ABQ/CHR (purple dashed box):

$$G\nabla^2 \mathbf{u} + \frac{G}{(1-2\nu)} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \alpha \nabla p - \beta_s K \nabla T = 0$$

GEM (orange dashed box):

$$-\frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla^2 p + \left[\frac{\phi}{K} + \frac{\phi}{K_f} \right] \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{\beta=1}^{mn} \bar{V}_\beta \rho_\beta R_{mn} = 0$$

$$-\nabla \lambda \nabla T - \nabla \left[\rho_f c_{p_f} \left(\frac{\mathbf{k}}{\mu} \nabla p \right) T \right] + \sum_{\beta=1}^{mn} H_\beta R_{mn} + [(1-\phi)\rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] \frac{\partial T}{\partial t} = 0$$

$$\nabla(v_f C) - \nabla(\mathbf{D}_{ij} \nabla C) + \frac{\partial(\phi C)}{\partial t} + R_{aq} + R_{mn} = 0$$

HERMES (teal dashed box):

$$\phi = \phi^0 + \Delta \varepsilon_v + \frac{\phi}{K_f} \Delta p - \beta_m \Delta T + \phi_{ch}$$

$$c_p = \frac{1}{\phi} \left(\frac{\partial \varepsilon_v}{\partial p} - \beta_m \frac{\partial T}{\partial p} \right)$$

Figura 3.11. Equações resolvidas por cada um dos programas envolvidos no processo de acoplamento THMC iterativo

Assim como foi apresentado para o acoplamento THM, o sistema de equações que compõe o fenômeno termo-hidro-mecânico-químico, definido na Figura 3.11, pode ser apresentado na forma de diagrama (vide Figura 3.12). Conforme já discutido anteriormente, o esquema idealizado configura uma interação fenomenológica robusta em diversos dos processos envolvidos, salvo a variação de energia devido à deformação volumétrica (acoplamento M-T) e as interações relacionadas ao acoplamento mecânico-químico. A inclusão dos fenômenos químicos não altera a rotina de atividades do programa gerenciador de chamadas dos programas de análise de tensões e fluxo (HERMES), de forma que o esquema que representa o seu funcionamento (Figura 3.9) permanece inalterado.

Vale ser ressaltado que o programa deve ser adaptado para coletar a variação da porosidade do meio poroso como função das reações químicas (ϕ_{ch}), uma vez que esta variável faz parte do parâmetro de acoplamento *porosidade*.

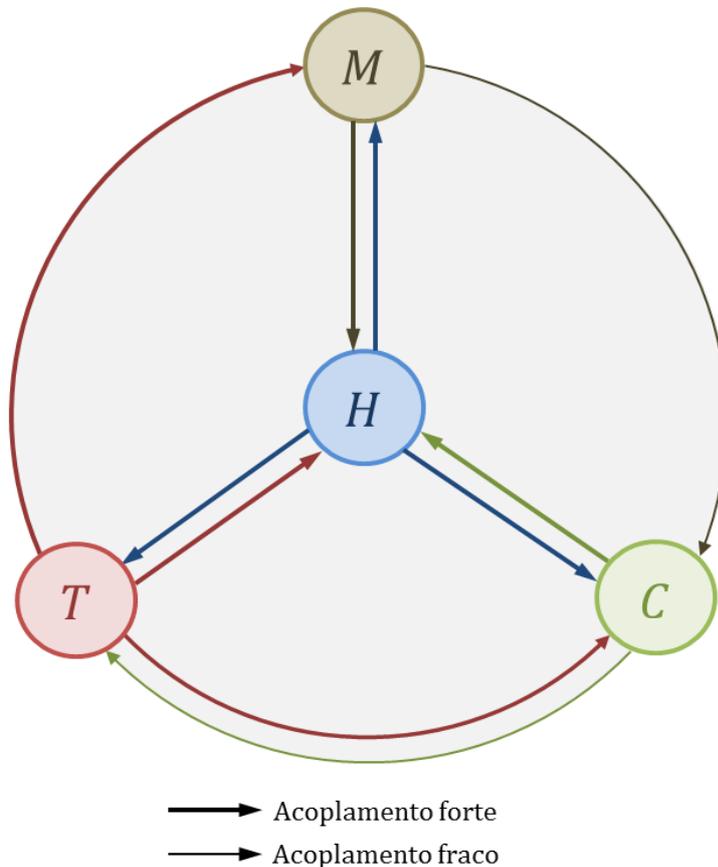


Figura 3.12. Fenômenos envolvidos no esquema de acoplamento THMC iterativo desenvolvido

Em relação ao critério de convergência, as análises termo-hidro-mecânico-químicas farão uso do mesmo critério apresentado no item 3.3.3, através da Equação (3.91).

O desenvolvimento de um esquema de acoplamento iterativo envolvendo três classes distintas de problemas (hidro-mecânico, termo-hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico-químico), na forma como foi idealizada, permite a solução robusta de um amplo espectro de problemas enfrentados por diversos setores da indústria, como por exemplo: obras de infraestrutura onde se faz necessária uma análise hidro-mecânica (HM), o setor energético visando à extração de energia geotérmica (acoplamento THM) e o setor ambiental onde se busca a mitigação do efeito estufa através do armazenamento de CO_2 em reservatórios (acoplamento THMC).

3.4.4 Considerações sobre o acoplamento químico-mecânico

A inclusão de efeitos químicos nos fenômenos THM ou TH permite a modelagem e a previsão comportamental de depósitos minerais, da remediação da acidificação de minas, de repositórios de rejeitos, de sistemas de convecção hidrotérmica, do transporte de contaminantes e da qualidade de um aquífero (XU & PREUSS, 1998). Coussy & Ulm (1996) afirmam também que uma modelagem mecânico-química acurada requer a previsão e, possivelmente, a prevenção de deterioração de estruturas de engenharia compostas por materiais porosos reativos (solos, rochas e concreto).

Embora neste trabalho o acoplamento químico-mecânico não esteja contemplado de forma robusta, este item visa pontuar alguns aspectos relevantes deste fenômeno. Na literatura existem diversos trabalhos que buscam descrever a interdependência entre a poroelasticidade e os efeitos químicos, motivados, fundamentalmente, pela instabilidade de poços devido à reatividade dos folhelhos frente aos fluidos de perfuração.

Araújo (2005) apresenta uma revisão dos modelos matemáticos, disponíveis na literatura, para tratar o problema de instabilidades em poços perfurados em zonas de folhelhos. No que se refere aos modelos que empregam o acoplamento químico em conjunto com os efeitos mecânicos, podemos citar: Araújo (2005), Chen *et al.* (2003), Detournay *et al.* (2005), Ekbote & Abousleiman (2006), Frydman *et al.* (2003), Ghassemi *et al.* (1998, 1999, 2009), Ghassemi & Diek (2002, 2003), Heidug & Wong (1996), Roshan & Rahman (2011), Tao *et al.* (2005) e Zhou & Ghassemi (2009). Modelos matemáticos considerando aplicações diversas do acoplamento químico-mecânico podem ser encontrados em: Bungler (2007, 2010), Coussy & Ulm (1996), Gajo & Loret (2003), Gens *et al.* (2008), Loret *et al.* (2002) e Olivella (1995).

Pode ser observado que grande parte dos trabalhos supracitados, principalmente aqueles relacionados ao comportamento de folhelhos, incorporam a natureza físico-química do processo, enfatizando a geração de pressão osmótica no interior da rocha como função do gradiente de concentração salina. No entanto, Loret *et al.* (2002) adicionam dois fenômenos que ocorrem em solos argilosos; o primeiro está relacionado com a expansão da massa de solo e os danos gerados sobre as estruturas e o segundo, por outro lado, está relacionado com o benefício

da expansão da bentonita, que tem sido empregada na construção de barreiras de contenção de fluxo (água, contaminantes) e na disposição de rejeitos radioativos.

Em termos específicos do acoplamento entre os fenômenos mecânicos e químicos em folhelhos reativos, Araújo (2005) sugere a inclusão de um termo no princípio das tensões efetivas de forma a considerar a pressão gerada como resposta à expansão volumétrica provocada pelo inchamento de argilominerais expansivos (por exemplo, esmectita, vermiculita, clorita). Esta pressão é conhecida como *pressão de inchamento* e é função da massa específica do fluido e da concentração salina. Portanto, a influência da concentração salina (proveniente do fluido de perfuração) no comportamento mecânico configura o acoplamento químico-mecânico (C-M), restando então, apresentar como a parcela mecânica influencia a conservação de massa de soluto (M-C). Esta vertente de acoplamento pode ser compreendida observando a Equação (3.117), isto é, mais especificamente o termo de acumulação. O acoplamento mecânico-químico está contido na parcela de variação de porosidade com o tempo; vale lembrar que este termo pode ser função da variação de volume poroso (parcela mecânica), variação de temperatura (parcela térmica) e variação de pressão (parcela hidráulica), conforme descrito no item 3.3.1.

Neste contexto, Detournay *et al.* (2005) apresentam um estudo a respeito da determinação de parâmetros químicos-poroelásticos a partir de ensaios de laboratório em folhelhos reativos. Isto vem de encontro com as discussões apresentadas anteriormente (item 2.2.1), uma vez que a alimentação dos modelos matemáticos robustos é primordial para a execução de uma previsão confiável de fenômenos acoplados.

Embora a forma de acoplamento (MC) descrita acima represente uma classe de problemas geomecânicos (folhelhos reativos) bastante conhecida, esta ainda não pode ser incorporada diretamente a outros sistemas, por exemplo, injeção de fluidos reativos em formações rochosas como aquíferos salinos e carbonáticos. Um exemplo ilustrativo disto é a consideração de uma lei que represente o comportamento mecânico de uma rocha frente às reações geoquímicas de dissolução/precipitação.

Em termos do comportamento hidro-químico (HC), Melo (2012) apresenta diversos resultados de amostras sintéticas de rochas carbonáticas ensaiadas através da injeção de um fluido reativo ácido (HCl). Aliada a heterogeneidade do

meio gerado, o processo de dissolução resultou em um aumento bastante expressivo da permeabilidade da rocha (entre 10 e 100 vezes do valor inicial) através da formação de canais de fluxo preferenciais (*wormholes*).

Wojtacki *et al.* (2015) afirmam que ainda existem poucos trabalhos na literatura que tratam do comportamento mecânico da rocha (variação das propriedades elásticas e de resistência) como resposta aos processos geoquímicos originários, por exemplo, da injeção de CO₂. Os autores também salientam as dificuldades relacionadas aos ensaios de laboratório, uma vez que a escala de tempo necessária é da ordem de milhões de anos. No escopo das alterações na resistência/deformabilidade e de propriedades petrofísicas de rochas, temos os trabalhos de Bachaud *et al.* (2011), Bemmer & Lombard (2010), Egermann *et al.* (2010), Gouze & Luquot (2011), Izgec *et al.* (2008), Luquot & Gouze (2009), Nguyen *et al.* (2011), Qajar *et al.* (2012), Xie *et al.* (2011).

Xie *et al.* (2012) apresentam um estudo bastante interessante a respeito da influência da degradação química na resposta mecânica de uma rocha carbonática através da execução de dois conjuntos distintos de ensaios triaxiais. Para acelerar as reações químicas, os autores utilizaram uma solução de nitrato de amônia (NH₄NO₃). O primeiro conjunto consiste na comparação entre o comportamento mecânico de uma amostra intacta e uma amostra degradada quimicamente. A Figura 3.13 apresenta os diferentes comportamentos obtidos nos ensaios, em termos de colapso de poros e superfície de ruptura. Os autores observaram um ligeiro decréscimo na coesão da amostra degradada, o ângulo de atrito interno permaneceu praticamente inalterado; por outro lado, a tensão de escoamento de colapso dos poros apresentou uma redução mais acentuada. Cabe ser salientado que a porosidade passou de 23% (amostra intacta) para 27% (amostra degradada). Em relação ao comportamento mecânico de carbonatos, Bemmer & Lombard (2010) também chegaram a conclusões congruentes com os resultados apresentados na Figura 3.13.

Ainda, Xie *et al.* (2012) também executaram ensaios triaxiais empregando um acoplamento químico-mecânico, isto é, a amostra sofreu o processo de degradação química durante o ensaio, ao contrário dos ensaios supracitados. O objetivo foi avaliar a variação da permeabilidade da amostra ao longo do tempo, considerando a dissolução da rocha. O resultado por ser observado na Figura 3.14.

Conforme esperado, a dissolução da rocha combinada com o carregamento mecânico resultou em um aumento importante da permeabilidade do carbonato.

Nas análises numéricas apresentadas por Wojtacki *et al.* (2015) é apresentado um espectro de variação de propriedades elásticas considerando um esquema de acoplamento químico-mecânico. Através de um modelo proveniente da microestrutura (micro-tomografia), uma amostra virtual foi sujeita a um processo de degradação química e ensaiada de forma a obter os parâmetros elásticos. Como consequência dos resultados, os autores estabeleceram uma lei de variação do módulo de elasticidade com a porosidade.

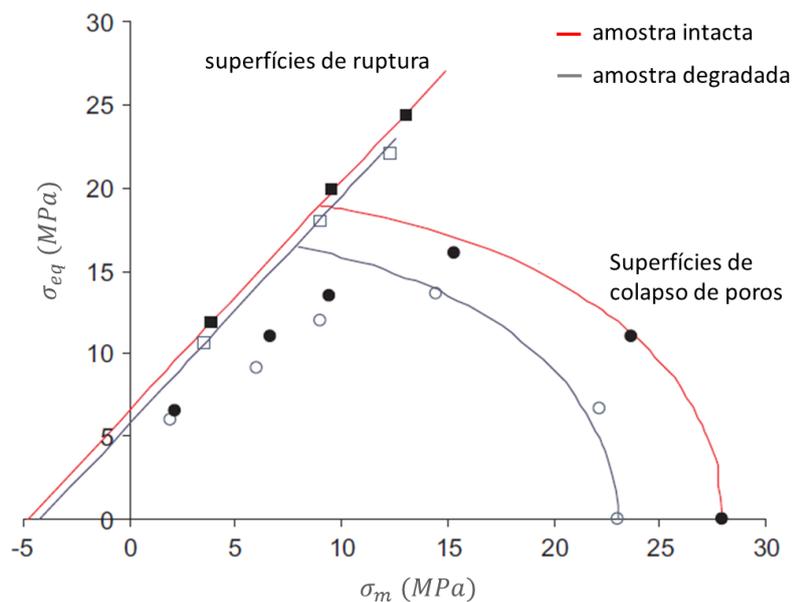


Figura 3.13. Comparação entre os comportamentos mecânicos (superfícies de ruptura e de colapso de poros) de amostras de rocha carbonática intacta e degradada quimicamente (adaptado de XIE *et al.*, 2011).

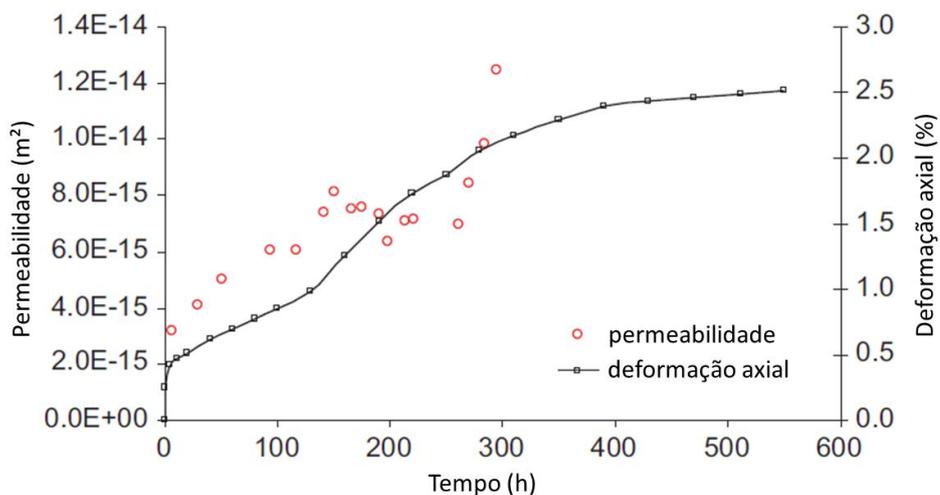


Figura 3.14. Variação da deformação axial e da permeabilidade da rocha durante um ensaio triaxial considerando degradação química (adaptado de XIE *et al.*, 2011).

Conforme constatado por Izgec *et al.* (2008), Xie *et al.* (2011) também observaram que a rocha não apresentou um processo de dissolução homogênea, de forma que a amostra pós-ensaiada apresentou canais de fluxo preferenciais (*wormholes*), conforme pode ser observado na Figura 3.15. Adicionalmente, Ergmann *et al.* (2010) afirmam que a formação dos canais preferenciais está condicionada à estrutura porosa inicial da rocha. Luquot & Gouze (2009) afirmam que, para reservatórios ricos em calcita, a dissolução não-uniforme é resultado da elevada reatividade apresentada pela calcita em ambientes ácidos.



Figura 3.15. Amostras de rocha carbonática após o ensaio triaxial: detalhe para a formação de canais de fluxo preferenciais (*wormholes*) (XIE *et al.*, 2011).

Além dos processos de dissolução, Luquot & Gouze (2009) também avaliaram a variação da permeabilidade devido à precipitação. Para as condições dos ensaios, a permeabilidade apresentou uma redução importante indicando um possível “entupimento” (*clogging*) do meio poroso.

Através de um estudo numérico envolvendo um esquema de acoplamento HMC iterativo (ABAQUS–STOMP–CO₂–R), Nguyen *et al.* (2016) apresentaram uma forma de computar os efeitos de precipitação/dissolução mineral nas propriedades mecânicas da rocha. De forma sucinta, a parcela mecânica é afetada pelas reações geoquímicas (acoplamento C–M) através do emprego da metodologia Eshelby–Mori–Tanka (vide Benveniste, 1987), a qual computa alterações nos parâmetros elásticos levando em consideração a variação micromecânica das frações minerais que compõem as rochas envolvidas. A

interação entre as parcelas química e mecânica ocorre da seguinte forma: as frações volumétricas provenientes do simulador de fluxo (STOMP-CO₂-R) são capturadas através da metodologia Eshelby-Mori-Tanka (sub-rotina implementada no ABAQUS), que por sua vez determina as propriedades elásticas resultantes desta nova configuração mineral. De acordo com os autores, não existe outra maneira, além da análise micromecânica, para determinar propriedades elásticas macroscópicas a partir das propriedades dos minerais constituintes das rochas.

Como pode ser constatado, grande parte dos trabalhos trata da degradação química da rocha. No entanto, as condições reais apresentam uma combinação entre dissolução e precipitação, de forma que a degradação por dissolução do meio pode ser compensada pela precipitação de outros minerais, dependendo das condições termodinâmicas do sistema (pH, disponibilidade de íons para formação do mineral, quantidade de CO₂ disponível, etc.).

No conhecimento do autor, não foi encontrada nenhum estudo experimental que empregasse o estudo combinado dos dois fenômenos para estabelecer de forma quantitativa a influência das reações geoquímicas no comportamento mecânico dos meios geológicos, de uma forma mais ampla.

No que se refere à inclusão dos efeitos químicos no comportamento mecânico da rocha (vertente do acoplamento C-M), é evidente a necessidade de emprego de relações empíricas ou experimentais para computar as variações das propriedades elásticas, bem como nos parâmetros de resistência da rocha. Assim, atrelada à metodologia de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativa desenvolvida, pode-se incorporar os conceitos do pseudo-acoplamento na vertente química de forma a tornar a interação fenomenológica mais realística. Adicionalmente, a incorporação de técnicas que relacionam a micromecânica com o comportamento macromecânico, conforme apresentado anteriormente, também se mostra promissora.

Por outro lado, pode ser percebido também que a influência dos efeitos químicos no comportamento mecânico (deformabilidade e resistência) é menos pronunciada quando comparada com a variação de propriedades petrofísicas, como a porosidade e a permeabilidade. Portanto, as evidências experimentais servem como justificativa para as hipóteses assumidas no item 3.4, onde somente a porosidade e a permeabilidade serão alteradas durante o processo iterativo químico.

4

Validação e aplicação das metodologias de acoplamento HM, THM e THMC iterativo

Uma vez definidas as metodologias iterativas de acoplamento hidro-mecânico (HM), termo-hidro-mecânico (THM) e termo-hidro-mecânico-químico (THMC), busca-se agora validá-las e aplicá-las de acordo com os casos de estudos apresentados nos itens a seguir.

4.1

Validação do esquema de acoplamento hidro-mecânico

O modelo adotado para as avaliações dos esquemas de acoplamento (HM e THM) foi baseado no reservatório idealizado por Dean *et al.* (2006) e utilizado por Inoue & Fontoura (2009b) e Lautenschläger (2014). A Figura 4.1 apresenta a geometria (em vistas superior, lateral e frontal) do modelo tridimensional de reservatório e rochas adjacentes, em unidades do sistema internacional (metro). O reservatório possui um poço produtor vertical localizado no centro, produzindo fluido monofásico a uma vazão constante de 7949.36 m³/dia (50000 barris/dia). O gradiente hidrostático adotado foi igual a 9,88 kPa/m e o gradiente de tensão vertical igual a 22,32 kPa/m, sendo os valores de tensão horizontal iniciais iguais a metade da vertical.

A malha de elementos finitos do reservatório, utilizada no simulador de tensões, é coincidente com o *grid* de diferenças finitas do simulador de fluxo GEM. A malha de elementos finitos do reservatório possui 11 elementos de 609,6 m na direção x, 11 elementos de 304,8 m na direção y e 5 elementos de 15,24 m na direção z. O modelo de reservatório apresenta 605 elementos/células e o modelo completo com rochas adjacentes (simulador de tensões – CHRONOS) apresenta 5292 elementos. A Figura 4.2 apresenta um panorama tridimensional da malha de elementos finitos do modelo completo (com destaque para o reservatório), e a Figura 4.3 apresenta o *grid* de diferenças finitas construído utilizando o simulador GEM. As propriedades dos materiais envolvidos na simulação estão apresentadas no Quadro 4.1.

As simulações comparativas foram conduzidas por um tempo de 1200 dias e as comparações foram realizadas através das variáveis pressão média no reservatório, pressão de poros e porosidade ao longo de uma trajetória passando pelo topo do reservatório, na região do poço ($1 < i < 11$, $j = 6$, $k = 1$) e deslocamento vertical no leito marinho (subsidência). A Figura 4.4 apresenta o ponto de aferição dos deslocamentos verticais no modelo de elementos finitos. Cabe ser ressaltado que as simulações realizadas neste item se referem a uma condição de fluxo monofásico representada por apenas um único componente, água. As análises contemplaram apenas simulações iterativas em duas vias, no caso das metodologias CHRONOS-GEM e CHRONOS-IMEX; análises em uma via não fazem parte do escopo desta tese.

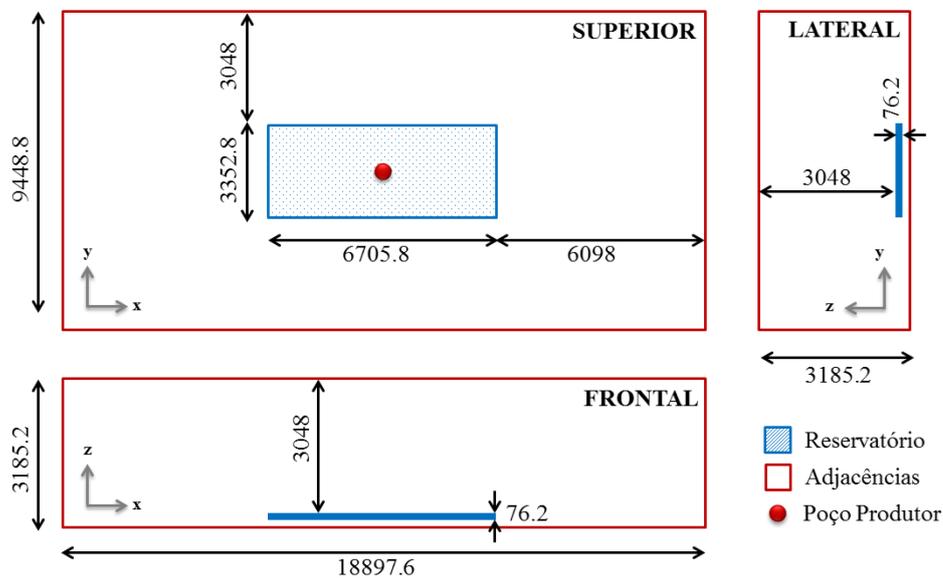


Figura 4.1. Modelo simplificado empregado para as validações dos esquemas de acoplamento hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico CHRONOS-GEM – baseado em Dean *et al.* (2006)

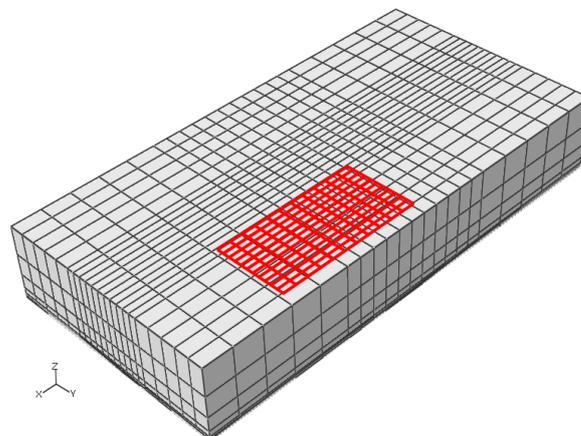


Figura 4.2. Vista tridimensional do modelo completo de elementos finitos (reservatório + rochas adjacentes) utilizado nas validações dos esquemas hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico

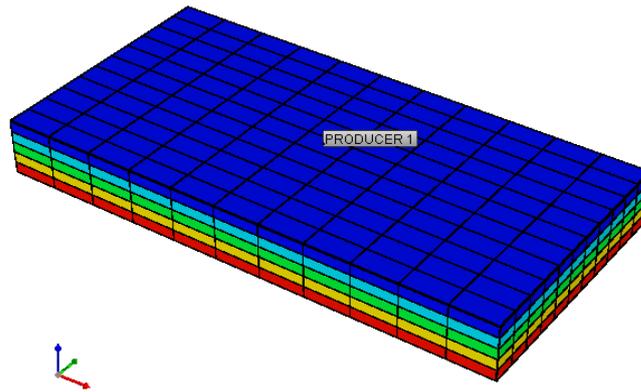


Figura 4.3. Panorama do modelo de validação (11 x 11 x 5) construído no simulador GEM

Os resultados obtidos com a metodologia proposta (CHR-GEM) foram comparados com os esquemas de acoplamento total (ABAQUS), acoplamento hidro-mecânico iterativo (CHR-IMEX) e com a simulação de fluxo convencional (GEM). Embora a metodologia proposta tenha sido idealizada considerando os simuladores ABAQUS e CHRONOS, os resultados apresentados neste capítulo foram confeccionados empregando apenas o simulador CHRONOS. Note que ao longo deste capítulo, os simuladores CHRONOS, ABAQUS e IMEX serão abreviados por CHR, ABQ e IMX, respectivamente.

Quadro 4.1. Propriedades utilizadas na validação da metodologia hidro-mecânica – baseado em Dean *et al.* (2006) e Lautenschläger (2014)

Propriedades	Valores	
	Sistema Internacional	Unidades de Campo
Viscosidade	0.001 Ns/m ²	1 cp
Peso específico do fluido	10 kN/m ³	62.4 lbf/ft ³
Compressibilidade do fluido	4.35x10 ⁻⁴ MPa ⁻¹	3x10 ⁻⁶ psi ⁻¹
Permeabilidade horizontal	1x10 ⁻⁹ m ²	100 mD
Permeabilidade vertical	1x10 ⁻¹⁰ m ²	10 mD
Porosidade	0.25	0.25
Compressibilidade do reservatório	4.83x10 ⁻² MPa ⁻¹	3.33x10 ⁻⁴ psi ⁻¹
Módulo de Young do reservatório	0.0689 GPa	1x10 ⁴ psi
Módulo de Young das rochas adjacentes	6.89 GPa	1x10 ⁶ psi
Coefficiente de Poisson	0.25	0.25

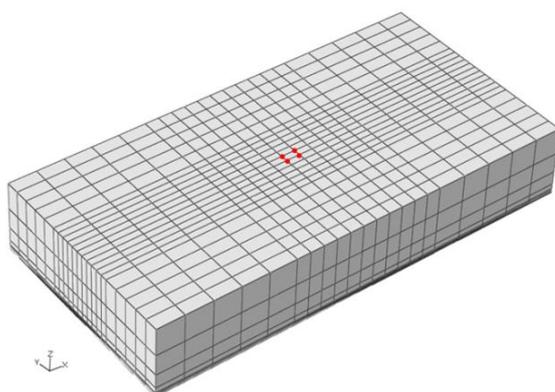


Figura 4.4. Pontos de aferição dos deslocamentos verticais no *overburden* para as análises comparativas envolvendo os esquemas de acoplamento HM e THM

A Figura 4.5 apresenta a comparação entre as pressões de poros médias no reservatório, após 1200 dias de produção, para as quatro condições estudadas.

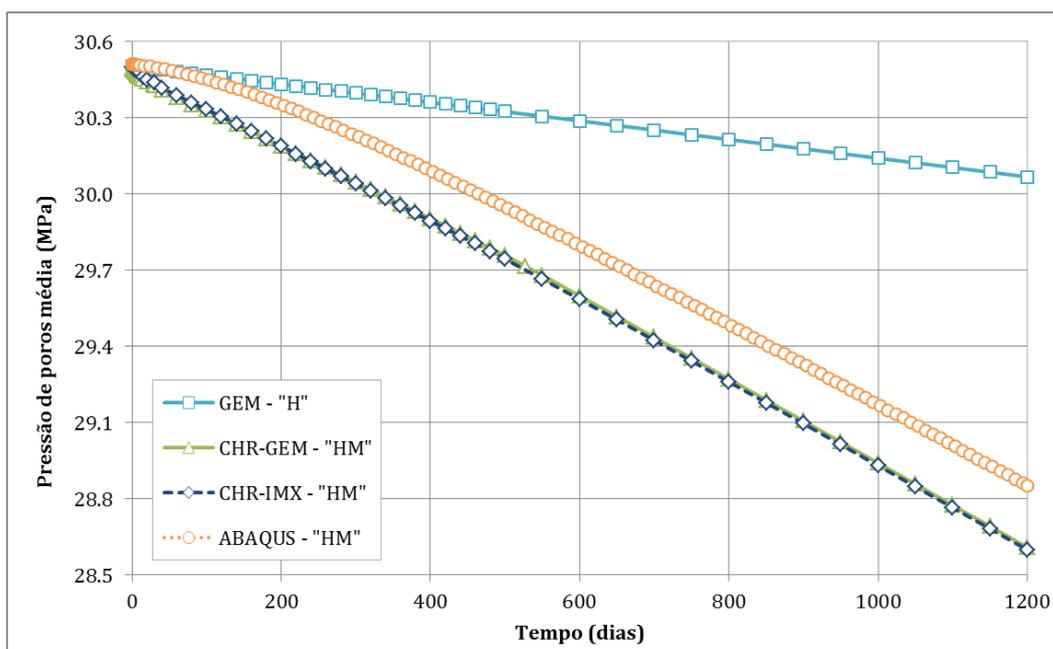


Figura 4.5. Variação temporal da pressão de poros média no reservatório para a condição de acoplamento hidro-mecânico

Pode ser observado que a resposta do acoplamento CHR-GEM em relação à pressão de poros média apresenta uma concordância satisfatória quando comparada com o resultado fornecido pela simulação hidro-mecânica totalmente acoplada (curva objetivo). Conforme já observado outrora e constatado nesta tese, a introdução do efeito mecânico na equação de conservação de massa (via parâmetros de acoplamento) configura uma maneira robusta e consistente de

representação do fenômeno hidro-mecânico, fato que pode ser observado claramente através do confronto das curvas, provenientes da metodologia iterativa, com a simulação de fluxo convencional (GEM). Além disso, observa-se também a excelente concordância entre os resultados dos acoplamentos iterativos CHR-GEM e CHR-IMX, evidenciando a versatilidade da metodologia de acoplamento iterativo proposta, podendo assim ser empregada satisfatoriamente através de um simulador multifásico multicomponente. Ainda em relação aos resultados apresentados na Figura 4.5, ao final dos 1200 dias, a pressão de poros média obtida via CHR-GEM foi **0.84%** inferior ao resultado obtido via acoplamento total. O acoplamento iterativo empregando o simulador composicional (CHR-GEM) apresentou uma diferença de **0.034%** em relação à implementação CHR-IMX.

A Figura 4.6 apresenta a comparação entre as pressões de poros ao longo do reservatório ao final do período de produção, considerando os quatro cenários estudados. A trajetória escolhida encontra-se na porção superior do reservatório na direção i ($1 < i < 11$), passando pelas coordenadas $j = 6$ e $k = 1$. Vale ser ressaltado que a pressão de poros foi coletada em cada célula nos modelos CHR-GEM, CHR-IMX e GEM, e nos nós do modelo no acoplamento total (ABAQUS), fato que confere a defasagem entre as tomadas de valores.

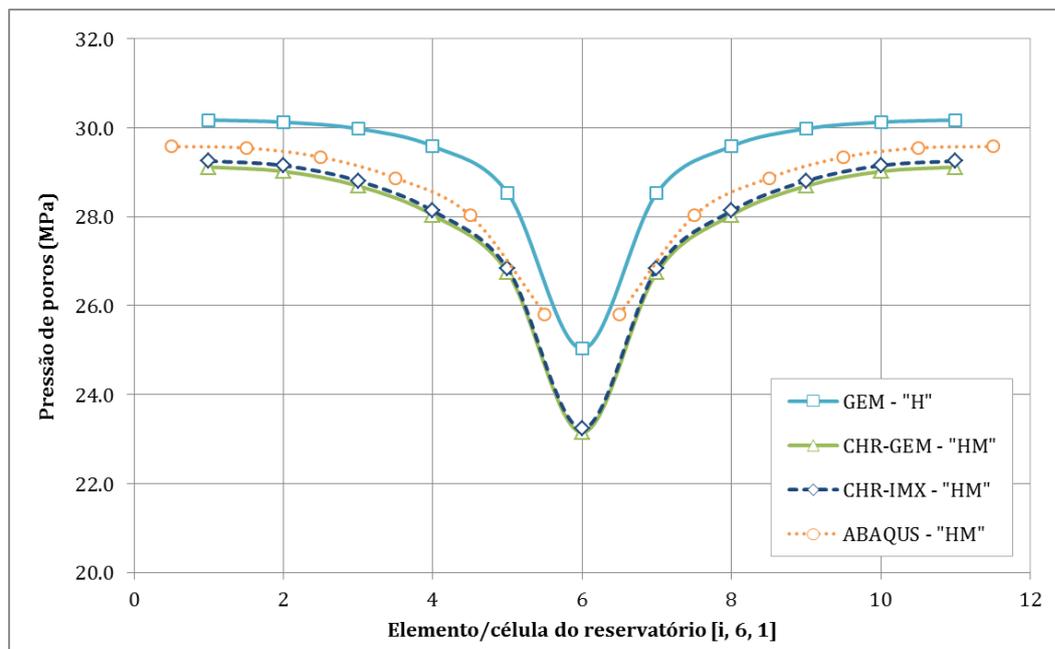


Figura 4.6. Pressão de poros no reservatório para a condição de acoplamento hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11$, $j = 6$, $k = 1$ após 1200 dias de análise

A escolha de uma trajetória de análise permite uma avaliação mais detalhada da resposta das simulações iterativas. Pode ser observada uma boa concordância entre os valores de pressão de poros ao longo da trajetória estudada, para ambos os esquemas de acoplamento iterativo apresentados (CHR-GEM e CHR-IMX) quando comparado com o esquema de acoplamento hidro-mecânico total. A diferença média encontrada, ao longo da trajetória avaliada, entre a resposta dos esquemas de acoplamento CHR-GEM e CHR-IMX foi igual a **0.39%**. Conforme constatado anteriormente, a resposta da pressão obtida via simulação hidráulica convencional apresentou um resultado bastante aquém da resposta real do reservatório.

Outra variável de interesse a ser comparada é a porosidade do reservatório após os 1200 dias de análise. Assim como para a pressão de poros, a porosidade foi aferida na mesma trajetória apresentada anteriormente. Através da análise da Figura 4.7 pode ser observado que a consideração do efeito geomecânico promove um menor decréscimo do valor da porosidade na região do poço produtor em contraste com a resposta puramente hidráulica. Em linhas gerais, este comportamento é condizente com a maior variação de pressão observada anteriormente, uma vez que uma menor variação de porosidade indica uma maior rigidez do sistema e, conseqüentemente, um maior gradiente de pressão para uma dada vazão aplicada.

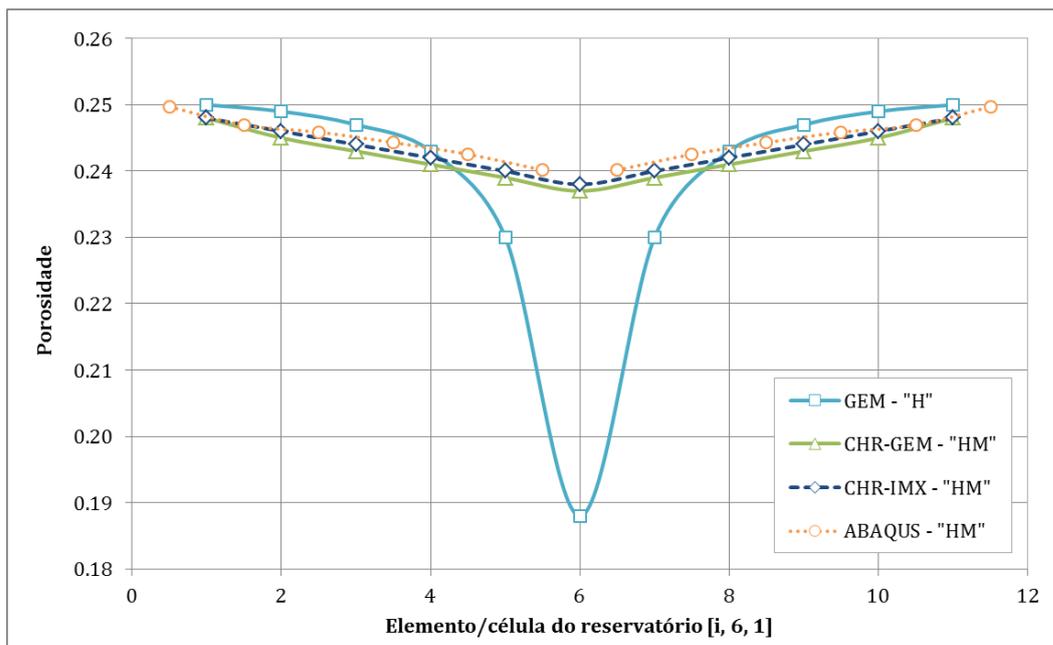


Figura 4.7. Porosidade no reservatório para a condição de acoplamento hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11, j = 6, k = 1$ após 1200 dias de análise

Comparativamente, podemos assumir como satisfatórios os resultados de porosidade frente aos resultados obtidos via acoplamento total (ABAQUS). Já em relação à comparação entre os esquemas iterativos (CHR-GEM e CHR-IMX) a diferença encontrada foi de **0.34%**.

Uma vez apresentada às análises relacionadas às variáveis de fluxo (pressão e porosidade), faz-se necessário verificar a resposta mecânica do reservatório. Para tal, aferiram-se os deslocamentos verticais na posição apresentada na Figura 4.4, os quais representam o fenômeno da subsidência do leito marinho (vide Figura 4.8). Cabe ser enfatizado que esta comparação foi efetuada apenas para três cenários (ABAQUS, CHR-GEM e CHR-IMX) uma vez que a simulação de fluxo convencional (GEM) não apresenta acoplamento mecânico. Conforme observado para as demais variáveis, a boa concordância dos resultados de deslocamento ressalta a qualidade da metodologia proposta em termos de uma análise hidro-mecânica. Ao final de 1200 dias, o erro relativo entre a simulação CHR-GEM e o acoplamento total foi da ordem de **8%**. O valor do erro é ligeiramente superior quando comparado com os resultados anteriores, no entanto, na opinião do autor, estão dentro dos limites aceitáveis para uma análise envolvendo a comunicação entre dois simuladores distintos, a qual exige uma série de troca de informações e processos (definidos no Capítulo 3). Adicionalmente, o erro é bastante similar ao valor encontrado para o esquema de acoplamento empregando o programa IMEX.

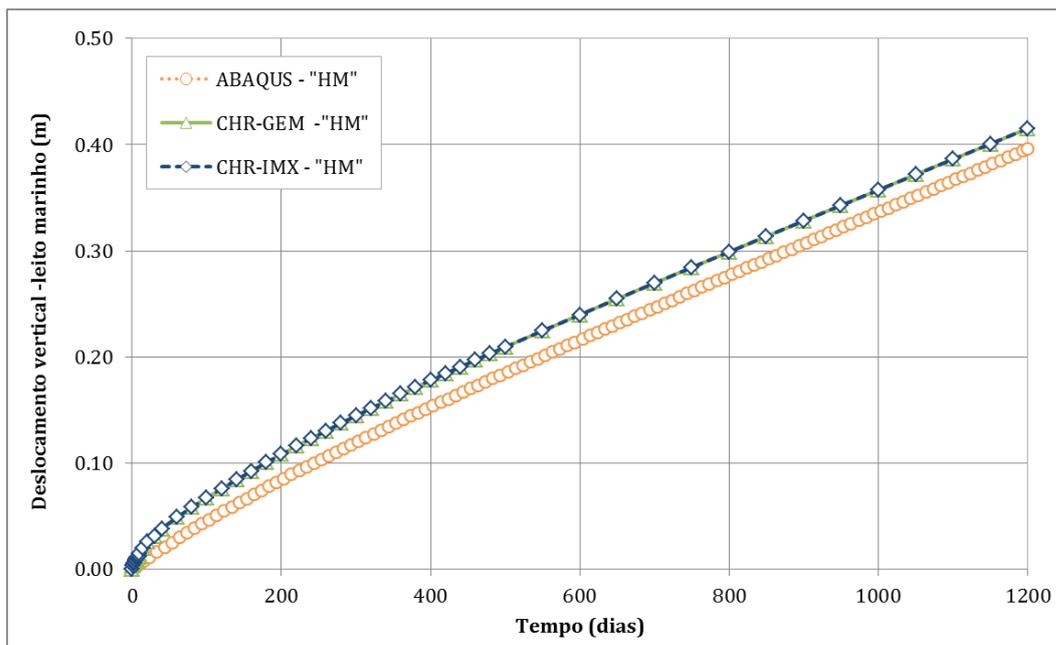


Figura 4.8. Subsidência do leito marinho para a condição de acoplamento hidro-mecânico após 1200 dias de análise

Ao final do processo de validação da implementação da metodologia hidro-mecânica empregando o simulador composicional GEM em conjunto com o simulador de elementos finitos CHRONOS, considerou-se que o emprego dos dois simuladores de forma iterativa representa o fenômeno hidro-mecânico de forma robusta e satisfatória, quando confrontado com os resultados do acoplamento total e acoplamento iterativo CHR-IMX. A inclusão de um simulador composicional no escopo da análise geomecânica amplia drasticamente o espectro de cenários disponíveis, uma vez que é permitida a inclusão de todas as funcionalidades inerentes a uma análise multifásica multicomponente (ainda que, por ora, envolva apenas os fenômenos hidráulicos e mecânicos), tornando assim, ainda mais realística a descrição dos fenômenos encontrados em campo. Conforme apresentado ao longo deste capítulo, a inserção do GEM como simulador de fluxo permitirá considerar os fenômenos térmicos e químicos em conjunto com os hidro-mecânicos devidamente estabelecidos neste item.

4.2

Validação do esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico

A validação da metodologia termo-hidro-mecânica foi realizada empregando o mesmo modelo apresentado no item 4.1, isto é, a geometria das rochas (reservatório e adjacentes), bem como as propriedades do fluido monofásico (água) foram mantidas idênticas. É necessário mencionar que o modelo apresenta um poço injetor de água (vazão de injeção igual a 50000 barris/dia) com temperatura diferente da temperatura inicial do reservatório. Naturalmente, por se tratar de uma análise envolvendo um fenômeno adicional (variante térmica) em conjunto com os efeitos hidro-mecânicos, outras variáveis foram incluídas, conforme definido a seguir.

Assim como foi realizado para as análises hidro-mecânicas, as simulações comparativas, deste item, foram conduzidas por um tempo de 1200 dias e as comparações foram realizadas através das variáveis pressão média no reservatório, pressão de poros, porosidade e temperatura ao longo de uma trajetória ($1 < i < 11$, $j = 7$, $k = 1$) e deslocamento vertical no leito marinho (expansão). Diferentemente do item anterior, o acoplamento CHR-IMX não será avaliado uma vez que o simulador IMEX não resolve a equação de conservação de energia. Portanto, as comparações estão concentradas apenas na resposta totalmente acoplada

(ABAQUS), a simulação termo-hidráulica convencional (GEM) e o acoplamento iterativo proposto (CHR-GEM). Conforme já mencionado, análises com acoplamento em uma via não fazem parte do escopo desta tese. As propriedades dos materiais envolvidos na simulação estão apresentadas no Quadro 4.2.

Quadro 4.2. Propriedades utilizadas na validação da metodologia termo-hidro-mecânica

Propriedades	Valores	
	Sistema Internacional	Unidades de Campo
Viscosidade	0.001 Ns/m ²	1 cp
Peso específico do fluido	10 kN/m ³	62.4 lbm/ft ³
Compressibilidade do fluido	4.35x10 ⁻⁴ MPa ⁻¹	3x10 ⁻⁶ psi ⁻¹
Permeabilidade horizontal	1x10 ⁻⁹ m ²	100 mD
Permeabilidade vertical	1x10 ⁻¹⁰ m ²	10 mD
Porosidade	0.25	0.25
Compressibilidade do reservatório	4.83x10 ⁻² MPa ⁻¹	3.33x10 ⁻⁴ psi ⁻¹
Módulo de Young do reservatório	0.0689 GPa	1x10 ⁴ psi
Módulo de Young das rochas adjacentes	6.89 GPa	1x10 ⁶ psi
Módulo Volumétrico do reservatório	0.046 GPa	6.7x10 ³ psi
Coefficiente de Poisson	0.25	0.25
Temperatura do reservatório	30 °C	86 °F
Temperatura do fluido de injeção	80 °C	176 °F
Coefficiente de expansão térmica da rocha	3.0x10 ⁻⁷ °C ⁻¹	1.7x10 ⁻⁷ °F ⁻¹
Coefficiente de expansão térmica do fluido	1.5x10 ⁻⁴ °C ⁻¹	8.4x10 ⁻⁵ °F ⁻¹
Calor específico da rocha	1.9x10 ⁻⁷ J/kg °C	1.9x10 ⁻¹¹ Btu/ft °F
Condutividade térmica da rocha	1.17 W/m °C	0.68 Btu/ft h °F

A Figura 4.9 apresenta a comparação entre as pressões de poros médias no reservatório, após 1200 dias de injeção, para as três condições estudadas. Pode ser observado que a resposta do acoplamento termo-hidro-mecânico iterativo (CHR-GEM) em relação à pressão de poros média apresenta uma concordância satisfatória quando comparada com o resultado fornecido pela simulação termo-hidro-mecânica totalmente acoplada (curva objetivo). A introdução das parcelas

mecânica e térmica na equação de conservação da massa (via parâmetros de acoplamento *porosidade* e *pseudo-compressibilidade*) confere a robustez necessária para que a curva atinja a função objetivo, neste caso o resultado fornecido pelo programa ABAQUS. Assim como constatado para o acoplamento hidro-mecânico, a simulação termo-hidráulica convencional apresenta um comportamento substancialmente diferente da resposta esperada. Ainda em relação aos resultados apresentados na Figura 4.9, ao final dos 1200 dias, a pressão de poros média obtida via CHR-GEM foi **0.32%** superior ao resultado obtido via acoplamento total. É válido ressaltar que a metodologia termo-hidro-mecânica empregada pelo ABAQUS foi avaliada segundo os conceitos geotécnicos (análise de uma coluna de adensamento termo-poroelástica) e consta no Apêndice C deste tese.

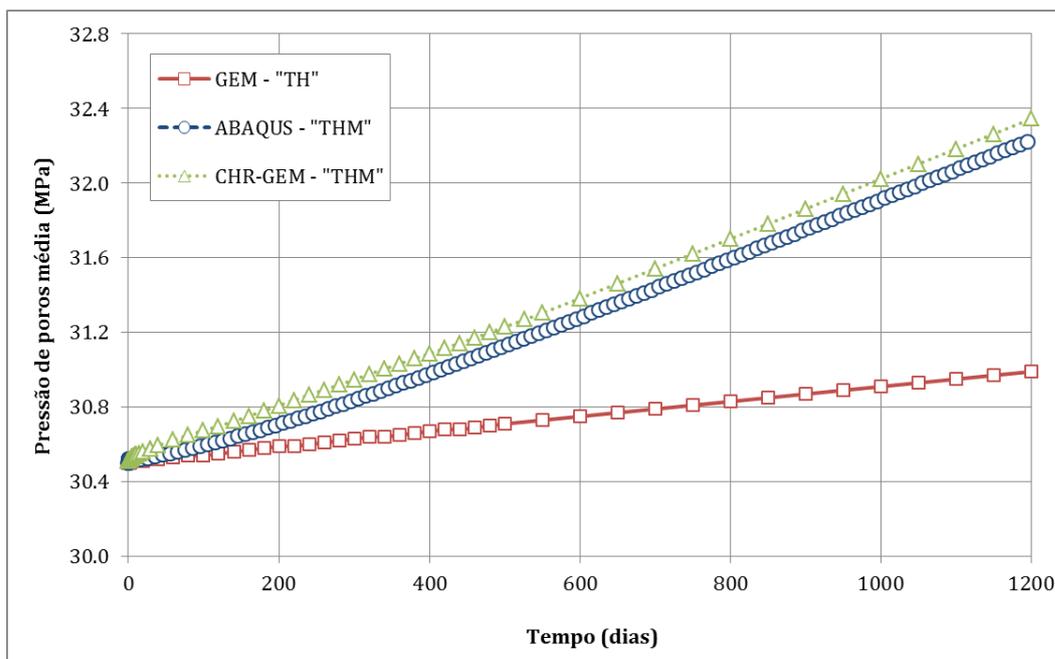


Figura 4.9. Variação temporal da pressão de poros média no reservatório para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico

A Figura 4.10 apresenta a comparação entre as pressões de poros ao longo do reservatório ao final do período de injeção, considerando os três cenários estudados. A trajetória escolhida encontra-se na porção superior do reservatório na direção i ($1 < i < 11$), passando pelas coordenadas $j = 7$ e $k = 1$. Vale ser ressaltado que a pressão de poros foi coletada em cada célula nos modelos CHR-GEM e GEM, e nos nós do modelo no acoplamento total (ABAQUS).

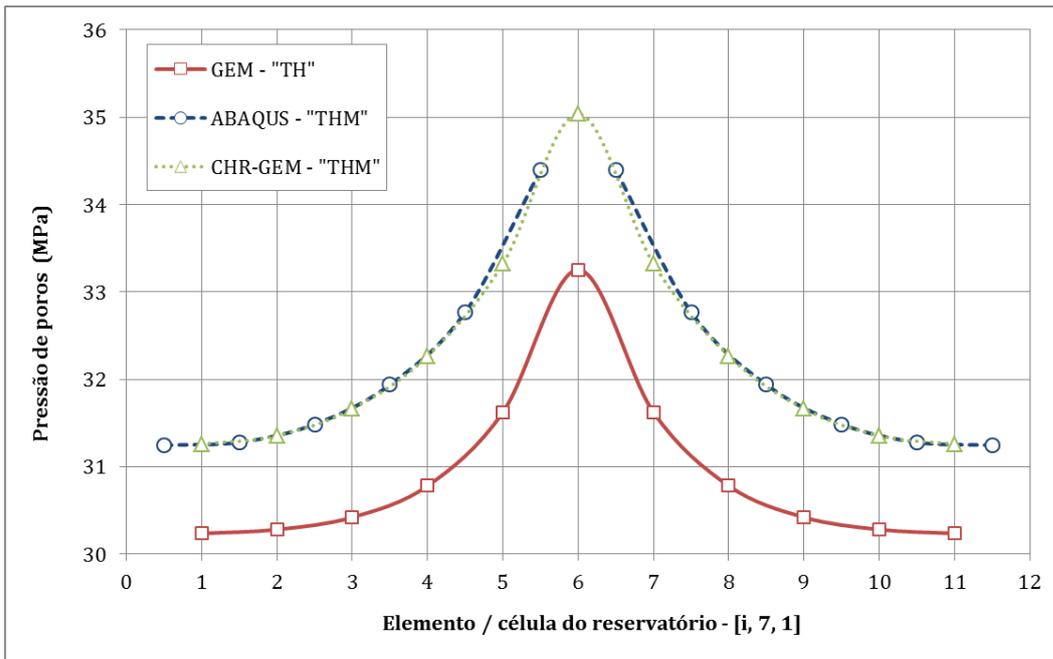


Figura 4.10. Pressão de poros no reservatório para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11, j = 7, k = 1$ após 1200 dias de análise

Conforme já mencionado, a escolha de uma trajetória permite uma avaliação mais detalhada da resposta da simulação iterativa. Pode ser observada uma excelente concordância entre os valores de pressão de poros ao longo da trajetória estudada quando comparado com o esquema termo-hidro-mecânico totalmente acoplado. Conforme já constatado na análise da pressão de poros média, a resposta da pressão obtida via simulação termo-hidráulica apresenta um resultado consideravelmente diferente da resposta totalmente acoplada do reservatório.

Além da variação da pressão de poros, avaliou-se também a porosidade do reservatório após os 1200 dias de análise. Assim como para a pressão de poros, a porosidade foi aferida na mesma trajetória apresentada anteriormente. Através da análise da Figura 4.11 pode ser constatado que a consideração do efeito geomecânico (neste caso representado pelo efeito combinado dos três fenômenos envolvidos) promoveu um menor acréscimo do valor da porosidade na região do poço injetor em contraste com a resposta termo-hidráulica. Paralelamente ao caso apresentado no item 4.1, este comportamento é condizente com a maior variação de pressão observada anteriormente, uma vez que uma menor variação de porosidade indica uma maior rigidez do sistema e, conseqüentemente, um maior gradiente de pressão para uma dada vazão aplicada. Além disso, a forma da curva também evidencia a influência da temperatura do fluido de injeção na resposta da variação da porosidade, uma vez que o coeficiente de expansão térmica do fluido

é três ordens de grandeza maior do que o coeficiente de expansão térmica dos sólidos. De maneira geral, podemos assumir como satisfatórios os resultados de porosidade frente aos resultados obtidos via acoplamento total (ABAQUS).

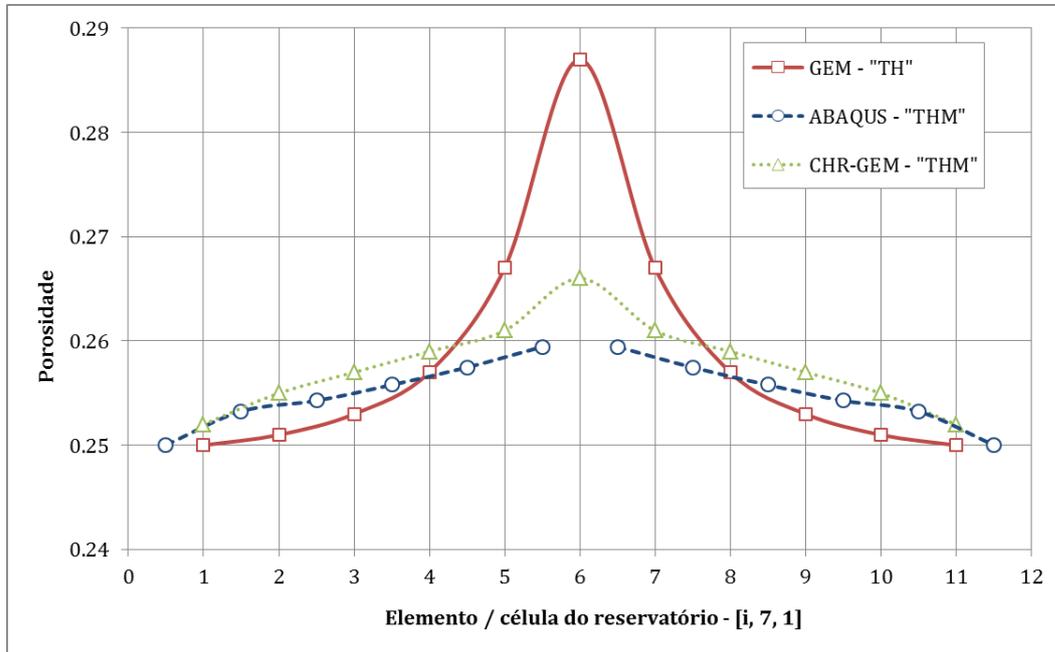


Figura 4.11. Porosidade no reservatório para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11, j = 7, k = 1$ após 1200 dias de análise

Adicionalmente às variáveis de fluxo apresentadas anteriormente, faz-se necessária a apresentação da distribuição da temperatura, variável fundamental da equação de conservação de energia. Seguindo a mesma filosofia da pressão de poros e porosidade, a temperatura também foi apresentada de acordo com a trajetória ($1 < i < 11, j = 7, k = 1$), conforme pode ser observado na Figura 4.12. Novamente, os resultados obtidos através do CHR-GEM apresentaram-se coerentes com o comportamento esperado, dado pela resposta totalmente acoplada. Pode ser notado também que a influência da temperatura, quando confrontados os resultados CHR-GEM e GEM, foi de fato menos expressiva quando comparada com a variação da pressão de poros (frente à injeção de água). Embora o resultado possa sugerir que o efeito térmico é menos relevante que o efeito mecânico na conservação da massa, vale lembrar que em situações onde os fluidos são descritos de forma composicional, podendo ser altamente sensíveis às variações em relação à pressão e temperatura, a inclusão de tais efeitos se faz fundamental para obtenção de uma resposta consistente.

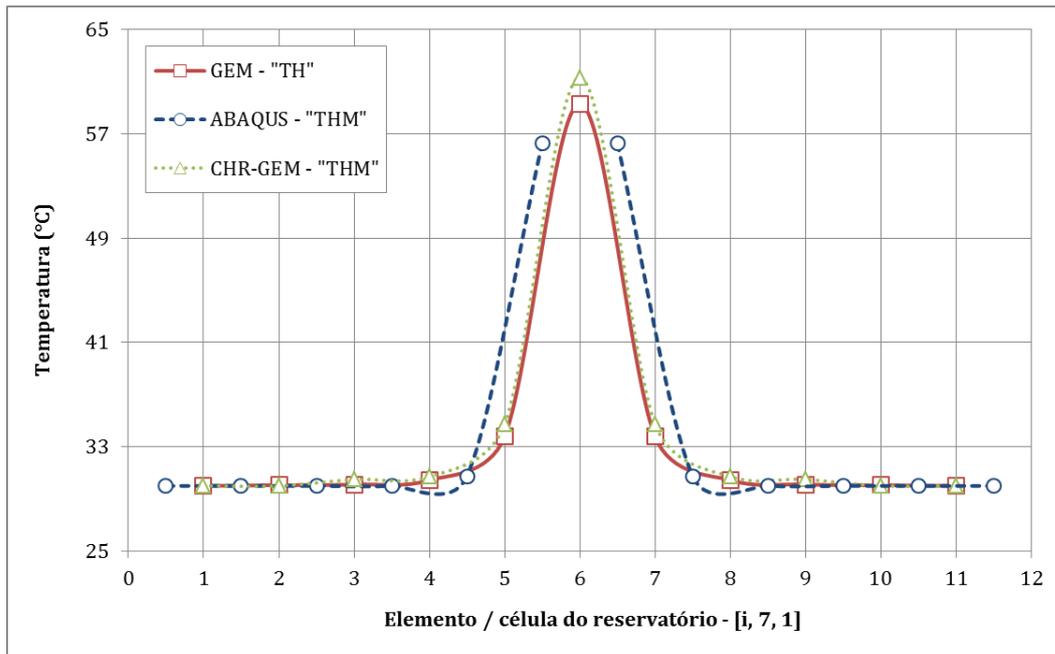


Figura 4.12. Temperatura no reservatório para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico – trajetória $1 < i < 11, j = 7, k = 1$ após 1200 dias de análise

Uma vez avaliada a resposta termo-hidráulica do reservatório, faz-se necessária a aferição da resposta mecânica, de forma a contemplar as variáveis fundamentais das três equações que regem o comportamento THM. Para tal, foi aferido o valor do soerguimento do leito marinho na posição apresentada na Figura 4.4, (vide Figura 4.13). Cabe ser enfatizada que esta comparação será efetuada apenas para dois cenários (ABAQUS e CHR-GEM), uma vez que a simulação hidro-térmica (GEM) não apresenta acoplamento mecânico. Conforme observado para as demais variáveis apresentadas anteriormente, a boa concordância dos resultados de deslocamento ressalta a qualidade da metodologia proposta em termos de uma análise termo-hidro-mecânica. Ao final de 1200 dias, o erro relativo entre a simulação CHR-GEM e o acoplamento total foi da ordem de **5.7%**. O valor do erro é similar ao encontrado na avaliação do esquema de acoplamento hidro-mecânico, de maneira que, na opinião do autor, está dentro dos limites aceitáveis para uma análise iterativa englobando três fenômenos distintos.

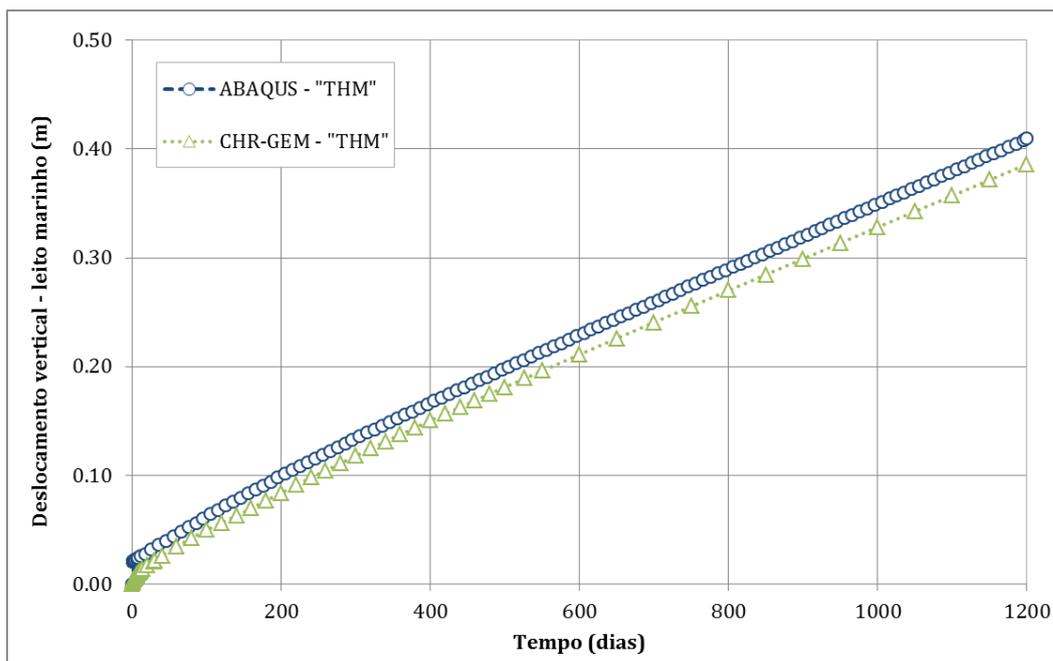


Figura 4.13. Expansão do leito marinho para a condição de acoplamento termo-hidro-mecânico após 1200 dias de análise

Ao final do processo de validação da implementação da metodologia termo-hidro-mecânica empregando o simulador composicional GEM em conjunto com o simulador de elementos finitos CHRONOS, considerou-se que o emprego dos dois simuladores de forma iterativa representa o fenômeno termo-hidro-mecânico de forma robusta e satisfatória, quando confrontado com os resultados do esquema totalmente acoplamento. A validação atingida ao final deste item permite a análise de uma gama bastante ampla de cenários, desde os estudos de processos de recuperação avançada de hidrocarbonetos (injeção de CO_2 e água) bem como a previsão do comportamento de aquíferos cujo objetivo seja a obtenção de energia geotérmica.

Devido à ausência de um caso simplificado de validação para a vertente química do esquema de acoplamento proposto, optou-se apenas por aplicá-la diretamente a um caso real, conforme explicitado no item 4.4.

4.3 Aplicação ao projeto In Salah, Argélia

Após o processo de avaliação da consistência das metodologias hidro-mecânica e termo-hidro-mecânica apresentada no item anterior, buscou-se aplicar o esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico iterativo para um caso real de armazenamento de CO_2 . Para tanto, foi escolhido o caso de campo de In Salah no

norte da África, Argélia. Os itens colocados a seguir visam descrever as características do campo, a idealização numérica do campo, bem como os resultados encontrados. Por se tratar de um campo amplamente estudado, as curvas de deslocamento real do terreno estão disponíveis na literatura e puderam ser confrontados com os resultados obtidos via acoplamento CHR-GEM.

4.3.1

Descrição geral do campo Krechba

O projeto, conhecido como *In Salah Gas Project*, foi formado através de um consórcio entre as empresas Statoil, BP e Sonatrach com o objetivo de armazenar o CO₂ produzido através da extração de gás natural (rico em dióxido de carbono) de campos próximos (Rutqvist *et al.*, 2010, Mathieson *et al.*, 2011, Ringrose *et al.*, 2013 e White *et al.*, 2014). A formação arenítica, local do armazenamento, faz parte do campo denominado Krechba. Um panorama geral do campo pode ser observado na Figura 4.14

O processo foi iniciado em 2004 e foi interrompido em 2011 devido a um possível fraturamento da rocha capeadora. O armazenamento foi idealizado através de três poços, denominados KB-501, KB-502 e KB-503, conforme apresentado na Figura 4.15. Durante o processo de injeção, observações do monitoramento sugeriram uma migração do CO₂ para a porção inferior da rocha capeadora. Adicionalmente, os dados também sugeriram que a integridade do armazenamento, de forma global, não havia sido comprometida. White *et al.* (2014) elenca as possíveis causas para a interrupção do programa: (i) exsudação através de falhas, (ii) fluxo através de fraturas pré-existentes e (iii) fraturamento da rocha capeadora. Esta última foi tomada como a mais provável de acordo com os autores supracitados. Ainda de acordo com White *et al.* (2014), o reservatório encontra-se a uma profundidade média de 1900 metros, apresenta espessura de 20 metros. A rocha capeadora apresenta uma espessura média de 950 metros e é formada por camadas intercaladas de baixa permeabilidade, formando por sua vez um ambiente de confinamento.

Um dado bastante valioso a respeito do projeto In Salah é a medição dos deslocamentos verticais via satélite, empregando a técnica InSAR (mais detalhes a respeito das técnicas envolvidas podem ser encontradas em Onuma & Ohkawa,

2009). Ao longo do período de injeção, foram confeccionados diversos mapas da região de armazenamento, conforme exemplificado na Figura 4.16 e Figura 4.17.

Devido à possibilidade de exsudação do CO₂ através da rocha capeadora, diversos estudos numéricos (Rutqvist *et al.*, 2011, Bissel *et al.*, 2011, Rinaldi & Rutqvist, 2013, White *et al.*, 2014 e Vilarrasa *et al.*, 2015) foram conduzidos visando a compreensão e previsão do possível fraturamento da rocha capeadora (relacionado ao aumento da pressão de poros) na região do poço injetor KB-502. Além dos estudos relacionados ao poço KB-502, outros dois estudos (Rutqvist *et al.*, 2010 e Preisig & Prévost, 2011) igualmente importantes foram conduzidos nos outros dois poços (KB-501 e KB-503), os quais não apresentaram problemas geomecânicos.

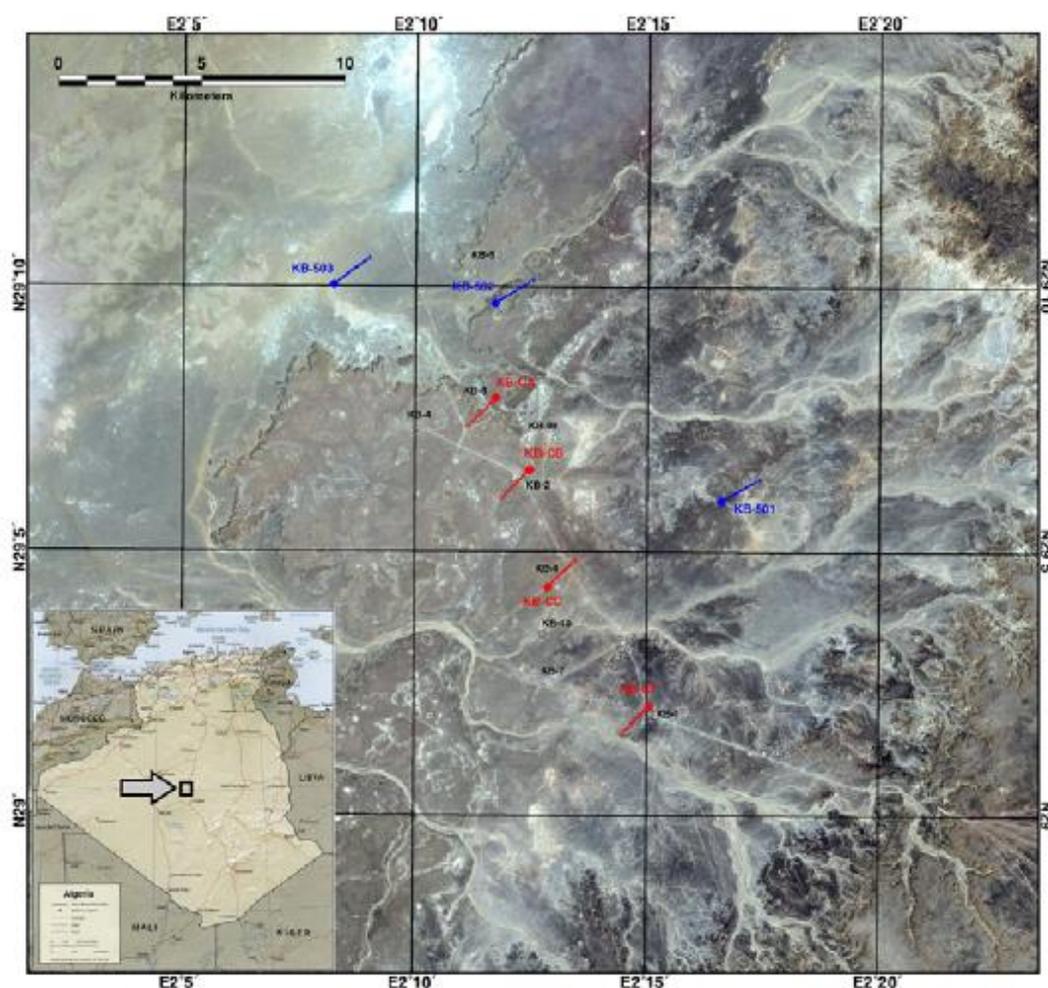


Figura 4.14. Panorama geral do projeto In Salah: linhas azuis correspondem aos poços injetores de CO₂ e as linhas vermelhas aos poços produtores de gás (Onuma & Ohkawa, 2009).

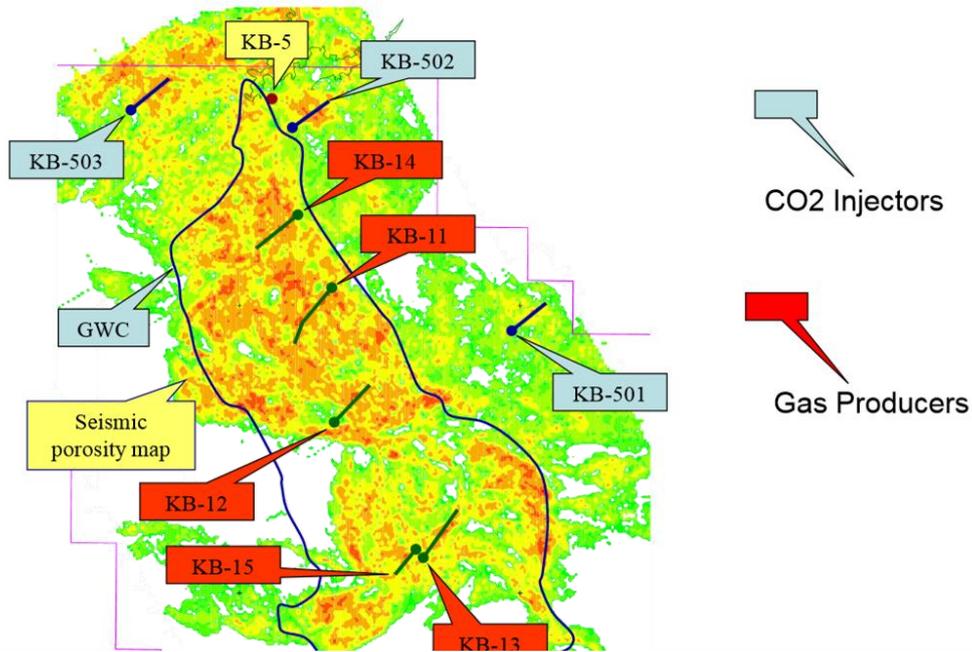


Figura 4.15. Projeto In Salah: localização dos poços injetores de CO₂ no campo de Krechba (modificado de Mathieson, 2013).

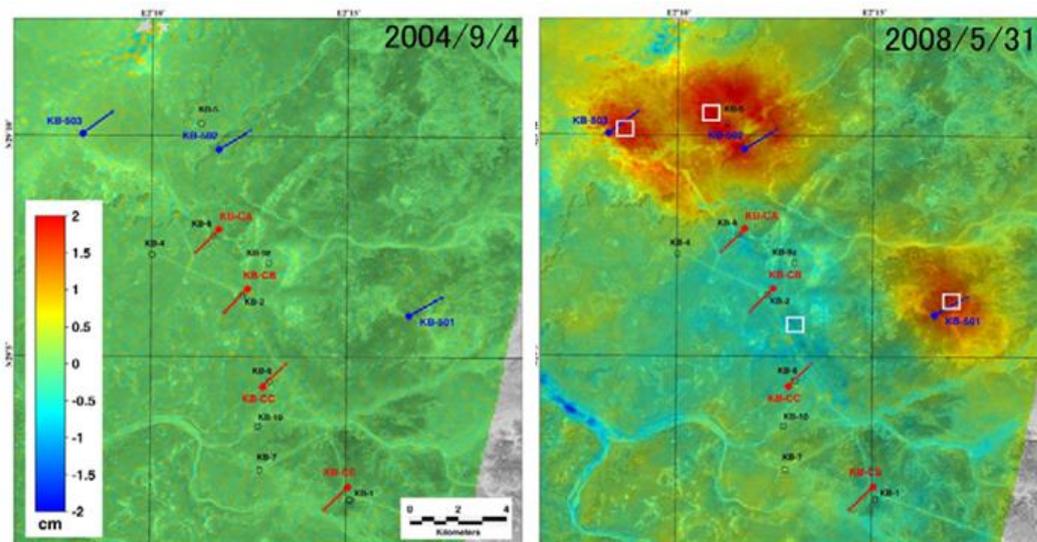


Figura 4.16. Projeto In Salah: mapa de deslocamentos verticais para duas datas distintas (2004 e 2008). Regiões vermelhas estão relacionadas aos poços injetores KB-501 – 503 (modificado Onuma & Ohkawa, 2009).

Paralelamente à busca pelas referências relacionadas ao comportamento do reservatório (aferições via satélite e previsões numéricas), o projeto In Salah carece de dados sobre os aspectos geoquímicos. McNab & Carrol (2011) e Trémosa *et al.* (2014) apresentam estudos geoquímicos do campo Krechba, no entanto, o primeiro teve como objetivo estudar a integridade da cimentação do poço frente à injeção de um fluido reativo (CO₂), enquanto que o último objetivou comparar diferentes bases de dados termodinâmicos de forma a computar suas

influências na resposta geoquímica global do campo. Considerando o exposto anteriormente aliado às discrepâncias dos dados encontrados nos trabalhos supracitados, não foi possível construir uma coletânea de dados de entrada necessários para a simulação THMC realística do reservatório. Vale ressaltar ainda que a escala temporal de observação das reações geoquímicas atinge a ordem de milhares de anos; portanto, visto que os dados aferidos em campo contemplam apenas um curto intervalo de tempo (entre 2004 e 2011), o emprego de uma análise THM foi considerado suficiente para avaliação deste campo.

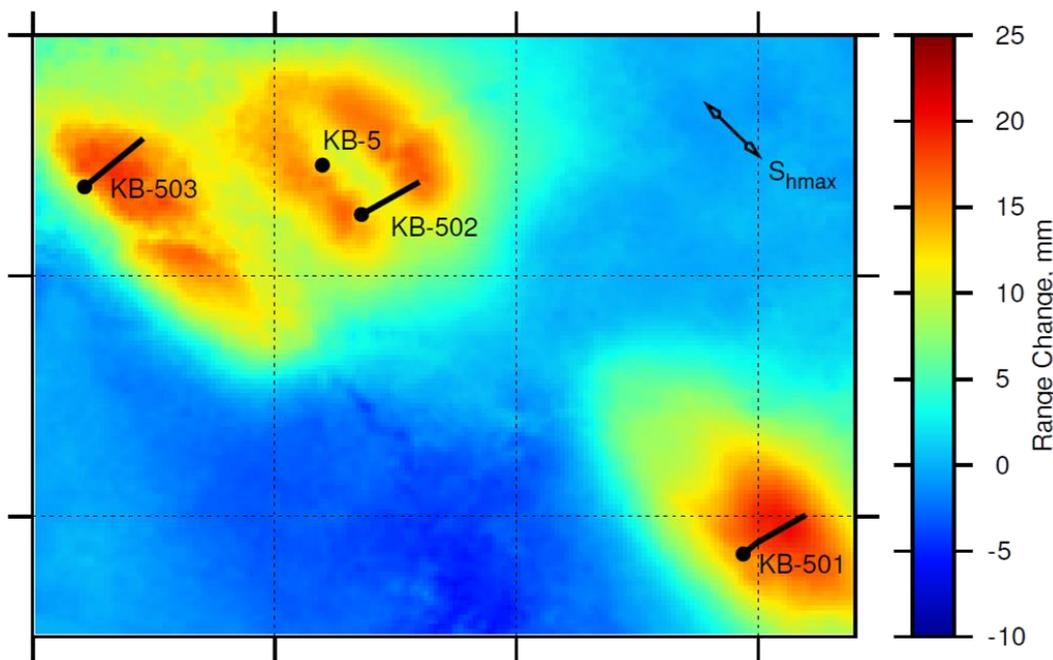


Figura 4.17. Projeto In Salah: mapa de deslocamentos verticais em 2010 na região dos poços injetores de CO_2 (Mathieson, 2013).

De posse de todas as referências e dados relacionados com projeto In Salah, idealizou-se um modelo termo-hidro-mecânico do campo de Krechba com foco na região do poço denominado KB-501. No que se refere ao objetivo da tese quanto à validação/aplicação das metodologias de acoplamento THM e THMC desenvolvidas, o confronto da resposta real do reservatório frente às simulações iterativas configura uma valiosa fonte de avaliação da qualidade e robustez das idealizações propostas no Capítulo 3.

4.3.2 Modelo numérico idealizado – THM

Uma vez definida a região do campo Krechba a ser analisada, parte-se para a idealização do modelo numérico, o qual é composto pelo reservatório, rochas

adjacentes e suas respectivas propriedades termo-hidro-mecânicas. Conforme mencionado anteriormente, este estudo visa reproduzir o comportamento mecânico (deslocamentos verticais) observado na superfície do terreno acima da região do poço injetor KB-501. Em termos de geometria e litologia, construiu-se um modelo tridimensional de diferenças finitas (GEM) e de elementos finitos (CHRONOS) baseado nos trabalhos de Rutqvist *et al.* (2010, 2011) e Rinaldi & Rutqvist (2011), conforme apresentado na Figura 4.18. As propriedades necessárias, apresentadas no Quadro 4.3, para a simulação foram baseadas em diversos trabalhos (Rutqvist *et al.*, 2010, 2011, Rinaldi & Rutqvist, 2011, Preisig & Prévost, 2011 e Vilarrasa *et al.*, 2015), uma vez que o caso não apresenta em uma fonte única todos os requisitos para uma simulação termo-hidro-mecânica. As curvas de permeabilidade relativa foram baseadas no trabalho de Vilarrasa *et al.* (2015).

O reservatório possui um poço injetor horizontal (de 1 km de extensão) localizado no centro, injetando dióxido de carbono a uma vazão constante de 4.25×10^5 m³/dia. O regime tensões para este campo é transcorrente, de forma que a tensão horizontal maior é igual a $1.12\sigma_v$ e a tensão horizontal menor igual a $0.69\sigma_v$.

A malha de elementos finitos do reservatório, utilizada no simulador de tensões, é coincidente com o *grid* de diferenças finitas do simulador de fluxo GEM. A malha de elementos finitos do reservatório possui 100 elementos de 100 m na direção x, 100 elementos de 100 m na direção y e 5 elementos de 4 m na direção z. O modelo de reservatório apresenta 50000 elementos/células e o modelo completo com rochas adjacentes (simulador de tensões – CHRONOS) apresenta 529200 elementos (20 x 20 x 4 km). A Figura 4.19 apresenta um panorama tridimensional da malha de elementos finitos do modelo completo (com destaque para o reservatório).

A simulação THM iterativa foi conduzida por um tempo de 1400 dias (dividida em 450 passos de tempo) com o objetivo de ser confrontada com a resposta aferida via InSAR e com dois resultados apresentados na literatura (Rutqvist *et al.*, 2010 e Preisig & Prévost, 2011). Adicionalmente à comparação dos deslocamentos verticais na projeção do poço injetor na superfície do terreno, curvas de pressão de poros também foram comparadas às respostas obtidas por Rutqvist *et al.* (2010). Cabe ser ressaltado que o fluido contido na rocha é composto

por um único componente (água). A interação entre o CO₂ e a água também foi levada em consideração neste modelo.

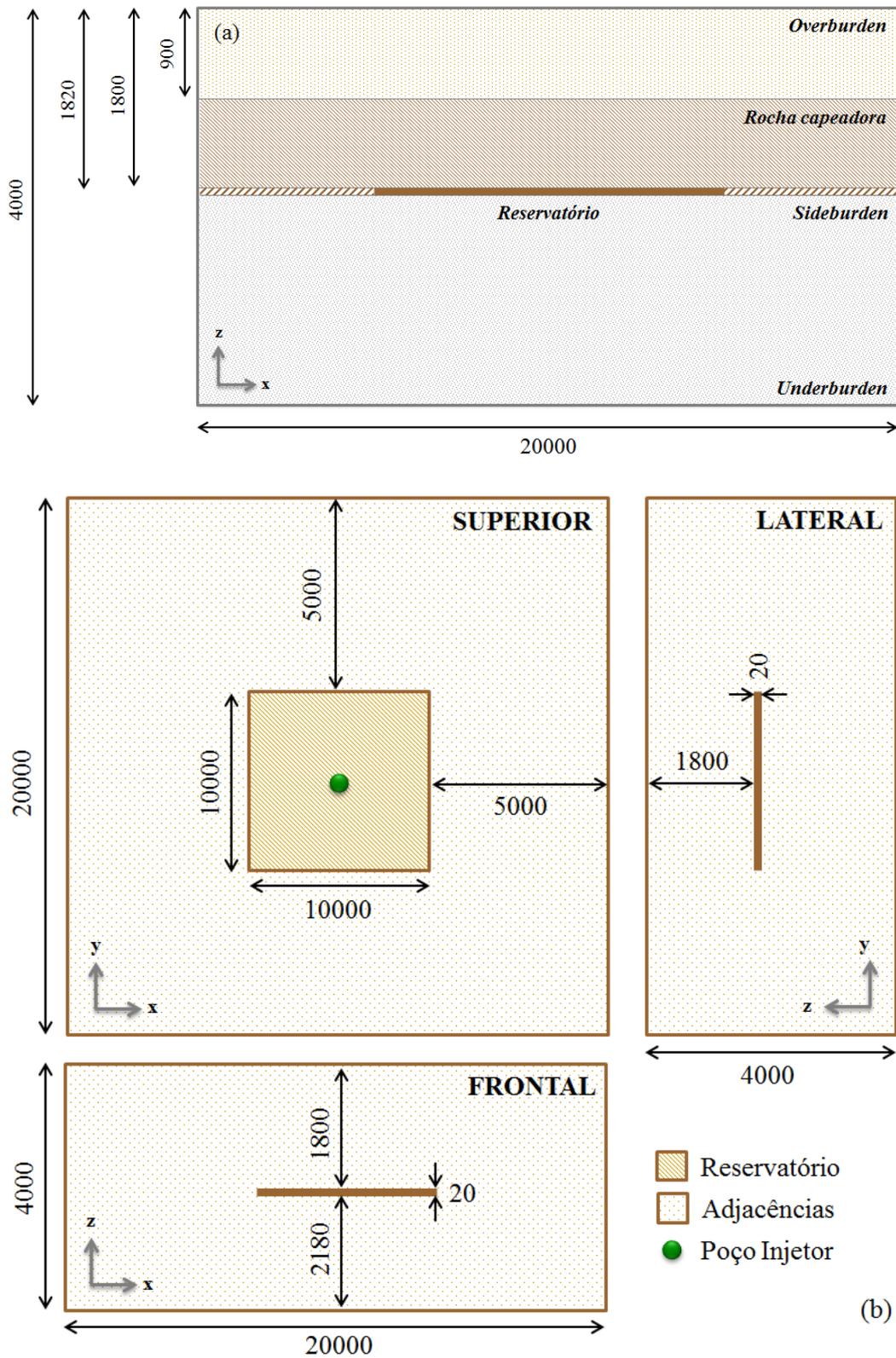


Figura 4.18. Modelo idealizado do campo Krechba (região do poço KB-501) para análise termo-hidro-mecânica empregando CHR-GEM: (a) litologia e (b) vistas da geometria adotada (metros)

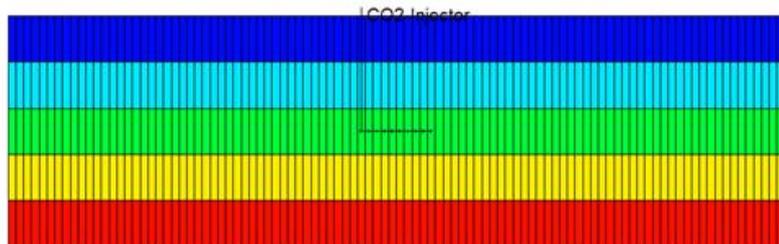
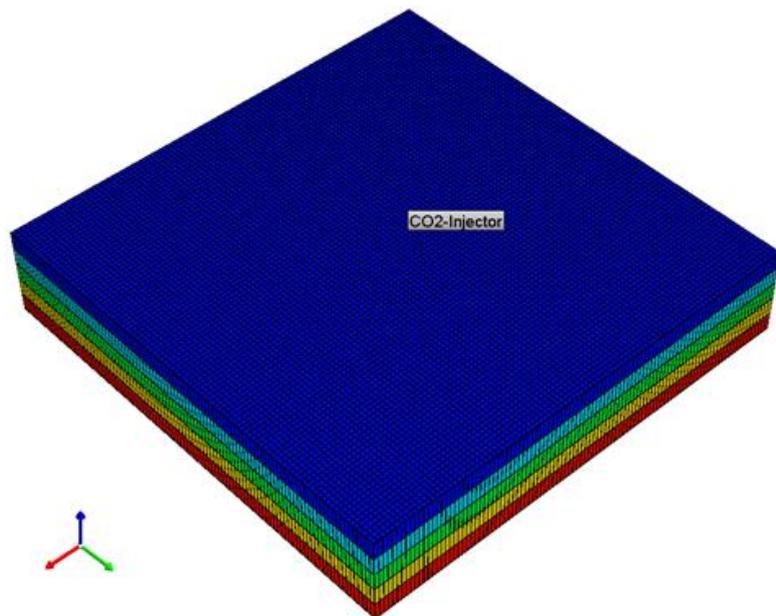
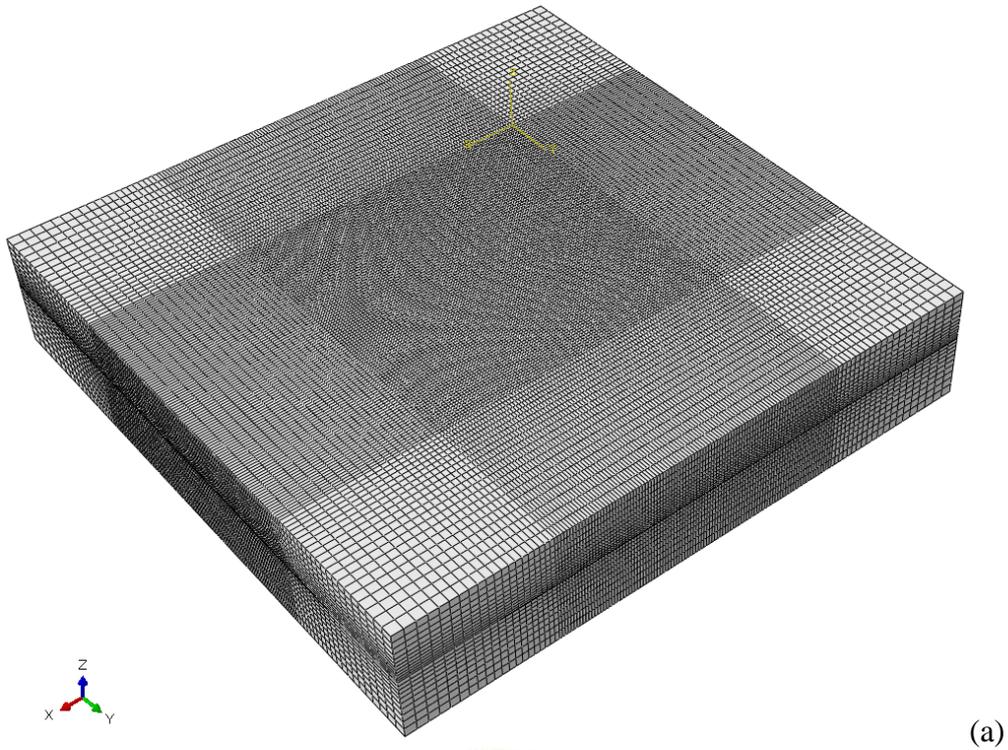


Figura 4.19. Vista tridimensional do modelo completo empregada na análise CHR-GEM termo-hidro-mecânica: (a) malha de elementos finitos e (b) *grid* de diferenças finitas com destaque para o poço injetor

Ainda em relação às camadas apresentadas no campo Krechba, o modelo foi dividido em quatro porções: *overburden* (0 – 900m), rocha capeadora (900 – 1800 m), reservatório (1800 – 1820 m) e *underburden* (1820 – 4000 m), conforme pode ser observado na Figura 4.18(a). As propriedades mecânicas das quatro entidades supracitadas estão dispostas no Quadro 4.3.

Quadro 4.3. Propriedades utilizadas na simulação termo-hidro-mecânica do projeto In Salah

Propriedades	Valores
	Sistema Internacional
Massa específica da água	1000.8 kg/m ³
Compressibilidade do fluido	7.1x10 ⁻⁷ kPa ⁻¹
Permeabilidade horizontal	1.3x10 ⁻¹⁴ m ²
Permeabilidade vertical	1.3x10 ⁻¹⁴ m ²
Porosidade	0.17
Módulo de Young do reservatório	6.0 GPa
Coefficiente de Poisson do reservatório	0.20
Módulo Volumétrico do reservatório	3.33 GPa
Módulo de Young do <i>overburden</i>	1.5 GPa
Coefficiente de Poisson do <i>overburden</i>	0.20
Módulo de Young da rocha capeadora	20.0 GPa
Coefficiente de Poisson da rocha capeadora	0.15
Módulo de Young do <i>underburden</i>	20.0 GPa
Coefficiente de Poisson do <i>underburden</i>	0.15
Módulo de Young do <i>sideburden</i>	6.0 GPa
Coefficiente de Poisson do <i>sideburden</i>	0.20
Temperatura do reservatório	95 °C
Temperatura do fluido de injeção – CO ₂	50 °C
Coefficiente de expansão térmica da rocha	1.0x10 ⁻⁵ °C ⁻¹
Coefficiente de expansão térmica do fluido	5.0x10 ⁻⁵ °C ⁻¹
Calor específico da rocha	890 J/kg °C
Condutividade térmica da rocha	2.5 W/m °C

É válido mencionar que as propriedades hidráulicas foram definidas apenas para o reservatório, de forma que o fluxo não é permitido através dos limites do reservatório. Os resultados encontrados estão apresentados no item a seguir.

4.3.3 Resultados da análise THM

Previamente à apresentação dos resultados, ressalta-se que as análises iterativas foram efetuadas em duas vias executando cada simulador (CHR e GEM) duas vezes por iteração, de forma a garantir a convergência da solução termo-hidro-mecânica. Portanto, para que a análise passasse para o próximo passo de tempo, foi necessário efetuar duas análises de elementos finitos e de fluxo.

A Figura 4.20 apresenta a comparação entre os deslocamentos verticais no terreno após os 1400 dias a injeção de CO₂. Em conjunto com a curva obtida via CHR-GEM iterativo, também são apresentadas as curvas obtidas via satélite (InSAR) e via duas metodologias de acoplamento (TOUGH-FLAC e DYNAFLOW). A metodologia de acoplamento iterativo empregada neste campo por Rutqvist *et al.* (2010) foi apresentada no Capítulo 2. A segunda análise THM confrontada (DYNAFLOW) foi conduzida por Preisig & Prévost (2011). Vale enfatizar que a análise apresentada nesta tese foi conduzida até 1400 dias, ao contrário dos demais trabalhos numéricos, de acordo com os dados do campo.

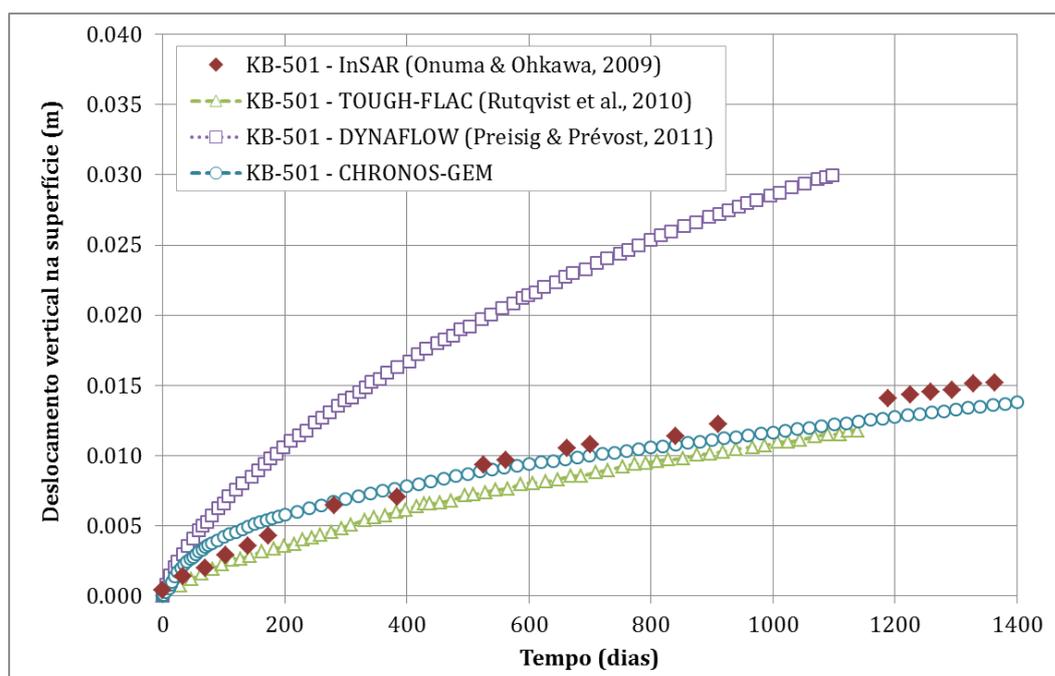


Figura 4.20. Deslocamento vertical na superfície (poço KB-501) como resposta ao armazenamento de CO₂ considerando um comportamento termo-hidro-mecânico do reservatório

Pode ser constatado pela análise da Figura 4.20 que o comportamento da curva de deslocamento vertical, obtido através do emprego do CHR-GEM iterativo, representa de maneira satisfatória os dados medidos em campo. De fato, este resultado evidencia, novamente, a acurácia e robustez da metodologia de acoplamento termo-hidro-mecânico idealizada. A introdução dos efeitos termo-mecânicos na equação de conservação de massa (via atualização da compressibilidade da rocha) aliada a atualização da porosidade permitiu garantir uma boa aproximação para a solução THM totalmente acoplada, a qual neste caso está representada pela resposta real do campo. Ainda em relação aos resultados apresentados na Figura 4.20, é válido mencionar que a ligeira discrepância entre a curva CHR-GEM e InSAR pode ser reduzida através do emprego de uma coletânea de dados única e realística em relação os dados encontrados em campo, isto é, parte das diferenças encontradas entre as curvas provavelmente está ligada ao fato da não utilização de um mesmo banco de dados. Além da curva de deslocamentos, confeccionou-se um perfil de deslocamentos verticais englobando toda a superfície do terreno e comparou-se com os resultados aferidos via InSAR, conforme apresentado na Figura 4.21.

A Figura 4.21(a) apresenta o perfil de deslocamentos verticais, obtidos por meio da tecnologia InSAR, na região de armazenamento (contemplando os três poços injetores existentes) para o ano de 2007; o retângulo destacado representa, aproximadamente, a área simulada neste trabalho (no entorno do poço KB-501). Similarmente, a Figura 4.21(b) apresenta o perfil de deslocamentos verticais obtido através da simulação termo-hidro-mecânica iterativa, destacando as curvas de isovalores de deslocamentos. Assim como constatado através da análise da Figura 4.20, o confronto entre os perfis de deslocamento verticais apresentou resultados bastante satisfatórios, enfatizando, novamente, a qualidade dos resultados obtidos empregando a metodologia de acoplamento desenvolvida. É possível notar algumas discrepâncias na forma geométrica do campo de deslocamentos, no entanto, tal fato está intimamente ligado às hipóteses de homogeneidade e isotropia dos parâmetros assumidas nesta análise. Constatou-se, também, que o perfil do terreno em 2007, obtido via CHR-GEM, também apresentou valores máximos equivalentes (aproximadamente 12 mm) aos encontrados no estudo numérico conduzido por Rutqvist *et al.* (2010).

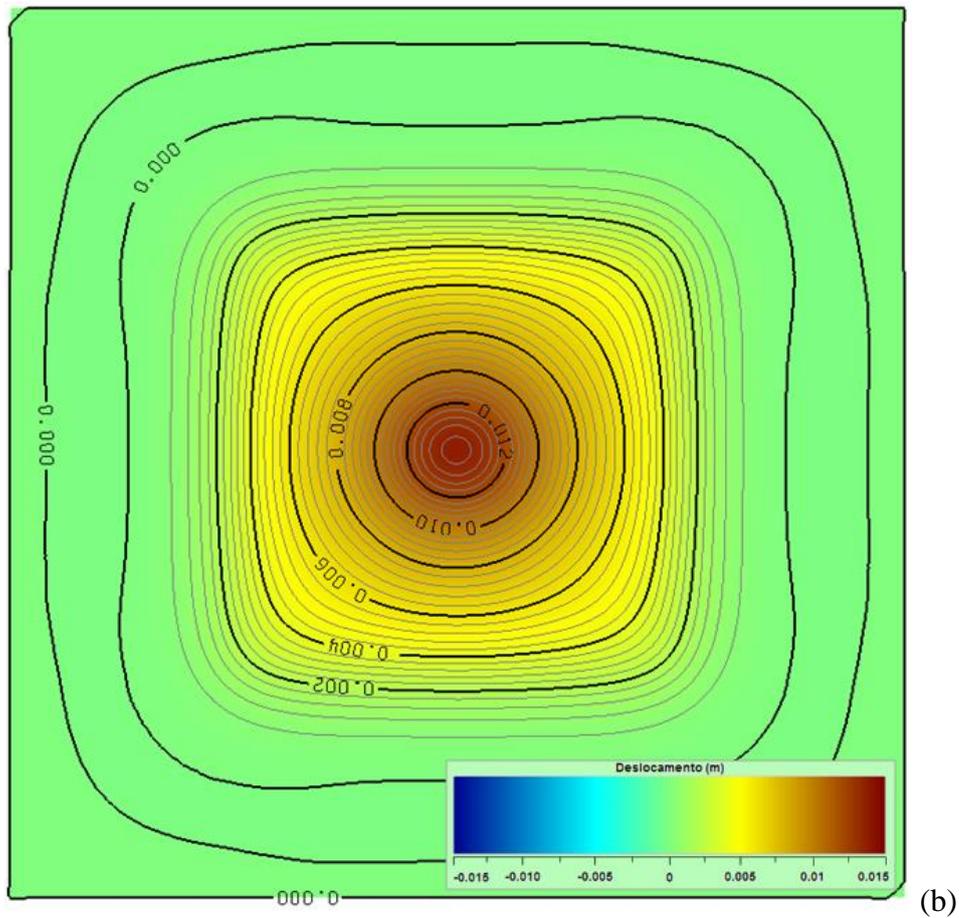
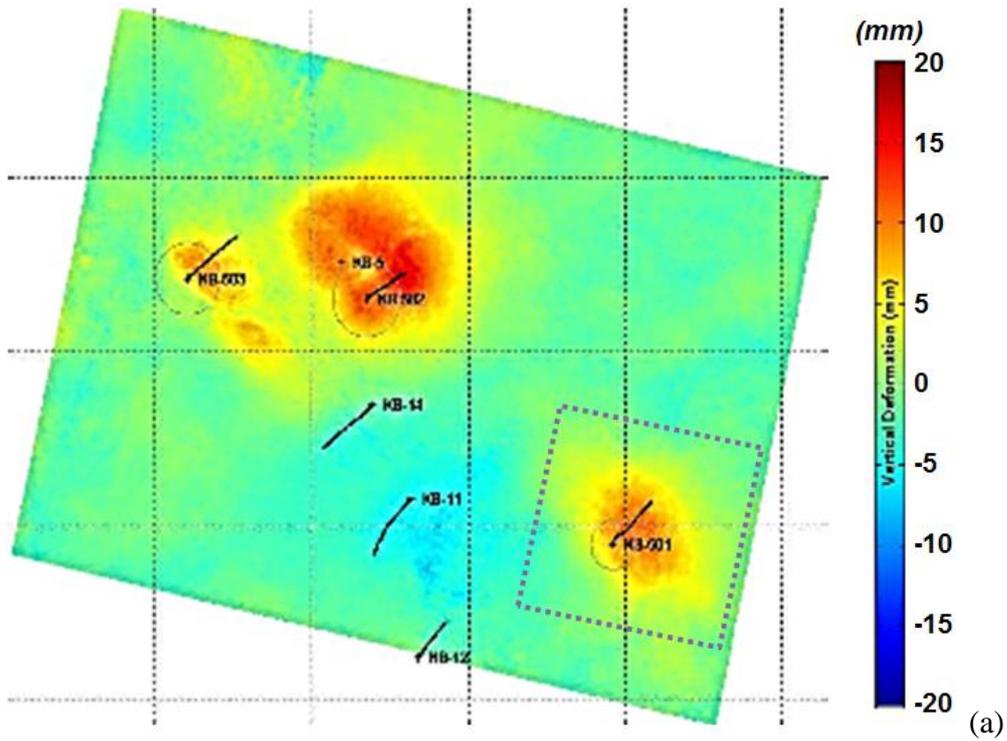


Figura 4.21. Mapas de deslocamentos verticais na superfície do terreno na região do poço injetor KB-501 após 1400 dias de injeção: (a) resposta obtida via InSAR (adaptado de Mathieson, 2013) e (b) resultado obtido via acoplamento iterativo CHR-GEM

Adicionalmente às curvas de deslocamentos, efetuou-se também a comparação da distribuição de pressão de poros, na porção central do modelo cruzando o poço, para dois tempos (30 dias e 1200 dias). Estes resultados foram comparados as curvas apresentados por Rutqvist *et al.* (2010). Tais resultados podem ser apreciados através da análise da Figura 4.22 e Figura 4.23.

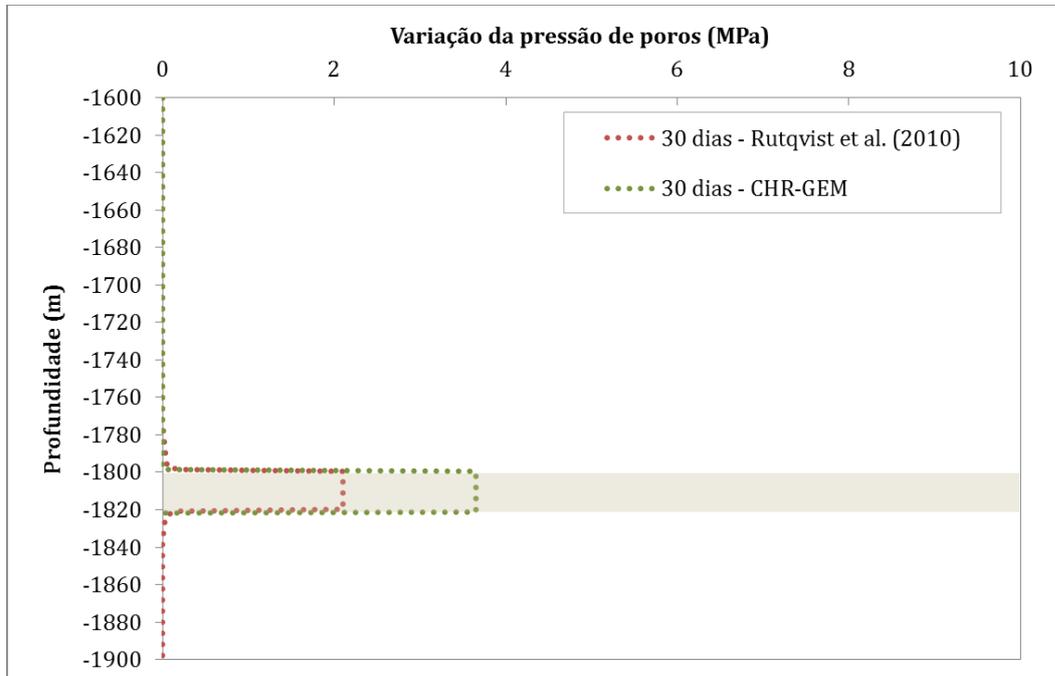


Figura 4.22. Comparação entre as distribuições de pressão de poros após 30 dias de injeção de CO₂ considerando o comportamento termo-hidro-mecânico do reservatório

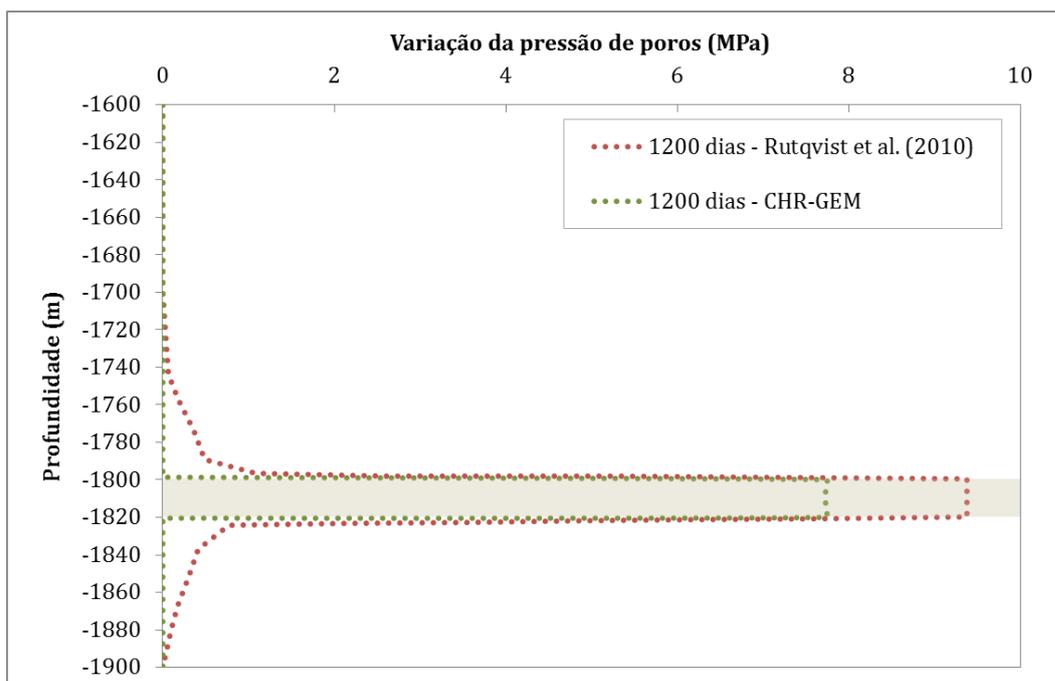


Figura 4.23. Comparação entre as distribuições de pressão de poros após 1200 dias de injeção de CO₂ considerando o comportamento termo-hidro-mecânico do reservatório

Embora as curvas de distribuição da variação de pressão de poros apresentem certa discrepância quantitativa, tais diferenças não são necessariamente maiores do que aquelas observadas no comportamento mecânico do reservatório (traduzido em termos do deslocamento vertical). Pelo contrário, tendo em vista a não utilização do mesmo banco de dados, é válido afirmar que os resultados são satisfatórios não somente em termos dos deslocamentos, mas também em termos de pressão de poros. Na região de interface entre o reservatório e as rochas adjacentes, os valores de pressão são diferentes uma vez que o modelo adotado por Rutqvist *et al.* (2010) atribuiu valores baixos de permeabilidade e porosidade, permitindo por sua vez, a possibilidade de ocorrência de fluxo de fluido, ao contrário do que foi considerado no modelo idealizado nesta tese.

Um aspecto que merece destaque quando se faz uso de metodologias de acoplamento iterativo é o tempo global de simulação. O emprego de dois simuladores distintos, os quais trocam informações entre si, apresenta um custo computacional elevado, uma vez que é preciso executá-los separadamente, além das rotinas relacionadas ao intercâmbio de informações (leitura e escrita de dados). Este fato é ainda mais evidente quando se utiliza um programa de elementos finitos como um dos elementos responsáveis pela execução do acoplamento.

A Figura 4.24 apresenta a duração dos processos envolvidos (análise de tensões – CHRONOS, análise de fluxo – GEM e intercâmbio de informações – HERMES) durante simulação do modelo apresentado anteriormente. Conforme mencionado, a análise foi dividida em 450 passos de tempo, sendo que a convergência foi estabelecida após 2 iterações entre o CHRONOS e o GEM. O tempo global da análise foi de **1837 minutos**, de forma que foi gasto 4.1 minutos por passo de tempo (aproximadamente 2 minutos por iteração). Através da análise da Figura 4.24 fica evidente que o crivo atual consiste no elevado custo computacional dos processos do HERMES (87% do processo), uma vez que o CHRONOS (implementado considerando paralelismo entre *GPUs* – vide Inoue & Fontoura (2011) e Inoue *et al.* (2015)) apresenta desempenho bastante similar ao simulador GEM. Cabe ressaltar que a versão do HERMES empregada nesta tese está implementada em *CPU*, ao contrário da versão mais atualizada (objeto de um projeto de P&D com a Petrobras), que foi idealizada em GPU visando reduzir

massivamente os custos dos processos de escrita/leitura de dados. Em linhas gerais, considerando modelos com elevado número de elementos (maiores que 400 mil), testes realizados com a nova versão do HERMES resultaram em uma redução do custo computacional da ordem de **30 vezes**.

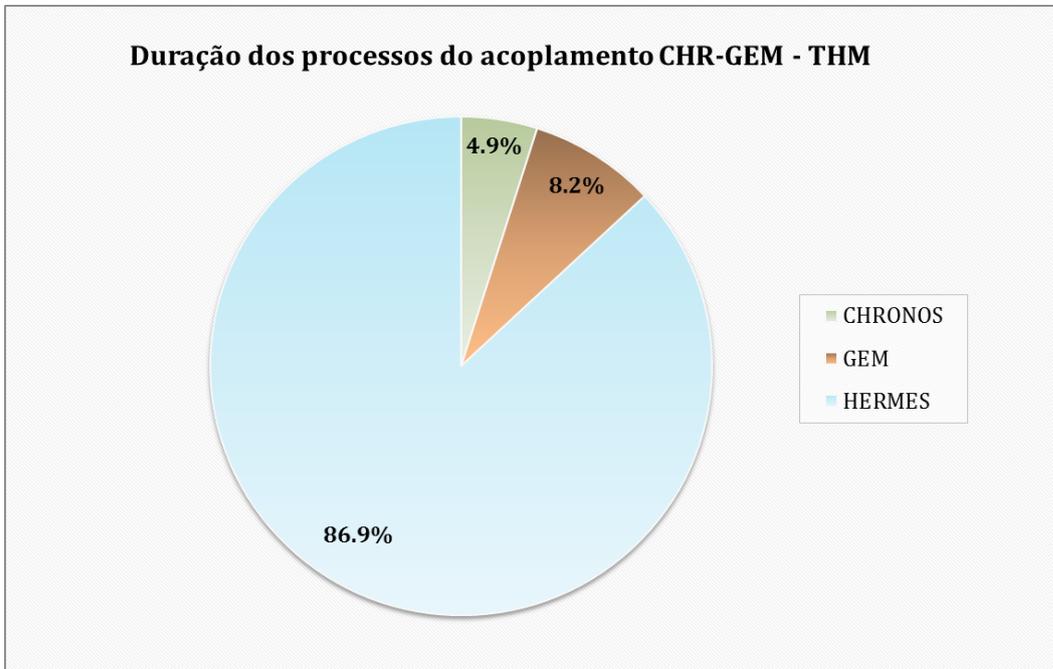


Figura 4.24. Duração dos processos envolvidos no acoplamento THM iterativo CHR-GEM para cada passo de tempo

Ao final da aplicação da metodologia termo-hidro-mecânica em uma situação realística, a qual apresenta aferições do comportamento mecânico do campo, pode ser concluído que o esquema de acoplamento idealizado representa uma ferramenta de análise precisa e robusta. Os resultados obtidos, quando confrontados com os dados do campo e as outras formulações, foram considerados satisfatórios. A validação das interações fenomenológicas através da simulação de situações reais promove uma maior confiança para aplicações futuras cujos objetivos possam estar relacionados, não somente a retroanálises, mas também com análises preditivas e de tomada de decisões quanto à segurança do armazenamento de dióxido de carbono.

4.4 Aplicação ao projeto Utsira, Noruega

Uma vez validada e aplicada satisfatoriamente a formulação termo-hidro-mecânica iterativa, objetiva-se incluir os efeitos geoquímicos, de maneira a

completar a metodologia proposta, isto é, o acoplamento termo-hidro-mecânico-químico. Para tanto, foi escolhido o caso do campo Sleipner localizado no Mar do Norte, na Noruega. Dentre os campos citados na literatura, o aquífero Utsira (empregado como rocha objetivo para o armazenamento) apresentou uma coletânea de dados consistente, principalmente no que se refere aos processos geoquímicos envolvidos entre rocha-fluido-CO₂. Os itens colocados a seguir visam descrever as características principais do campo, a idealização numérica do aquífero, bem como os resultados encontrados.

4.4.1 Descrição geral do aquífero Utsira

Segundo Korbol & Kaddour (1995), a motivação principal para criação de um programa de mitigação de emissões de gases nocivos à atmosfera foi iniciada com o intuito de reduzir as emissões de dióxido de carbono na atmosfera. Estabeleceu-se, portanto, um limite de 2.5% de CO₂ contido no gás comercializado (hidrocarboneto proveniente do campo Sleipner). Para atingir este objetivo, foram estudados os diversos aquíferos disponíveis e, dentre eles, foi escolhido o aquífero Utsira; o período de injeção do programa foi estabelecido, inicialmente, entre 1996 e 2020, atribuindo uma injeção de aproximadamente 1 Mt/ano. Os autores supracitados elencam como vantagens da formação Utsira: (i) aquífero raso – baixo custo, (ii) grande extensão, implicando em uma grande capacidade de armazenamento e (iii) rocha arenítica, a qual promove condições de injetividade favoráveis. Um panorama geral do campo pode ser observado na Figura 4.25.

De acordo com Baklid *et al.* (1996), a formação Utsira apresenta características como elevada permeabilidade (1 – 8 Darcy), espessura entre 150 e 250 metros, profundidade do topo em 800 metros, temperatura no topo de 37 °C e porosidade entre 0.35 e 0.40. A Figura 4.26 e Figura 4.27 apresentam a distribuição da porosidade ao longo do aquífero Utsira e a litologia da região de armazenamento, respectivamente, de acordo com o *British Geological Survey* (2002).

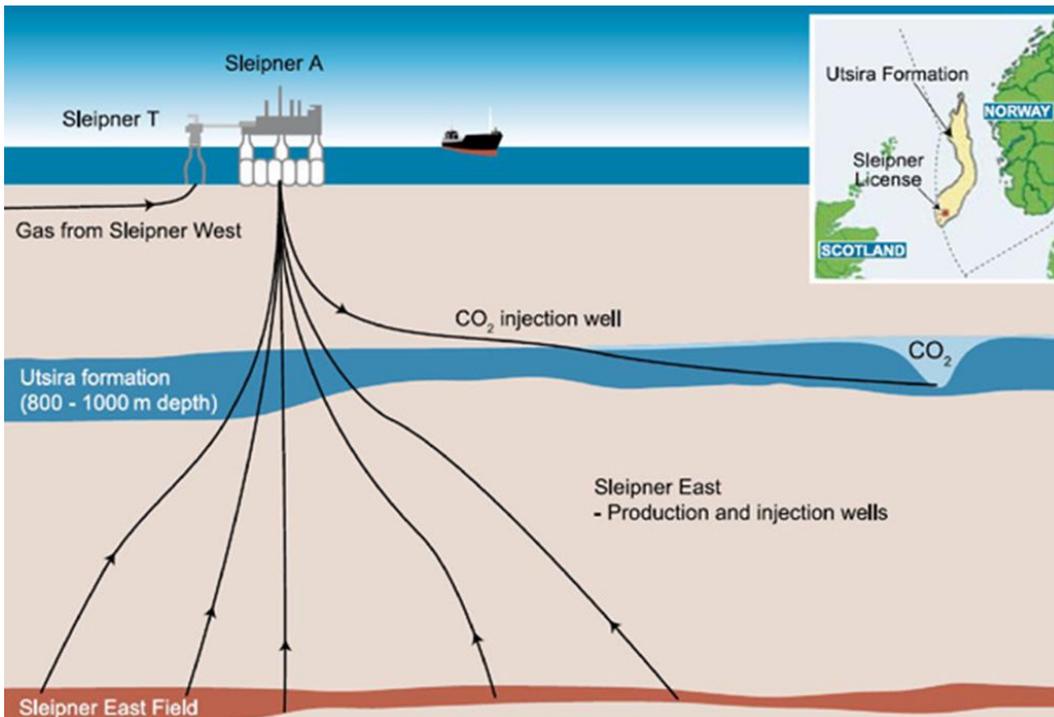


Figura 4.25. Panorama geral do campo Sleipner (produtor de gás) e da formação Utsira (local do armazenamento do CO₂) (IPCC, 2005).

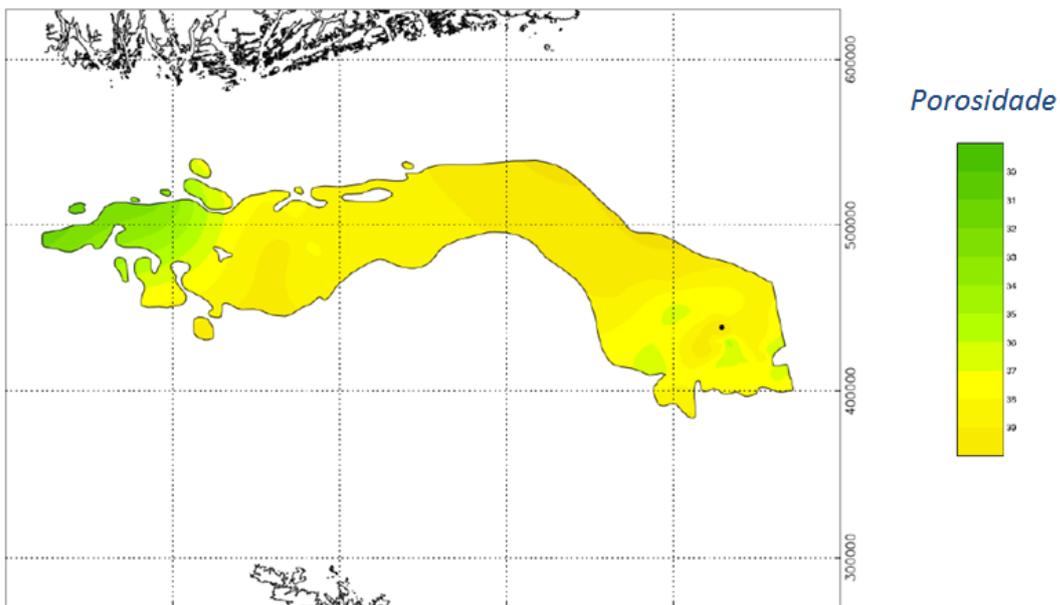


Figura 4.26. Faixa de porosidade da formação Utsira (adaptado de *British Geological Survey*, 2002).

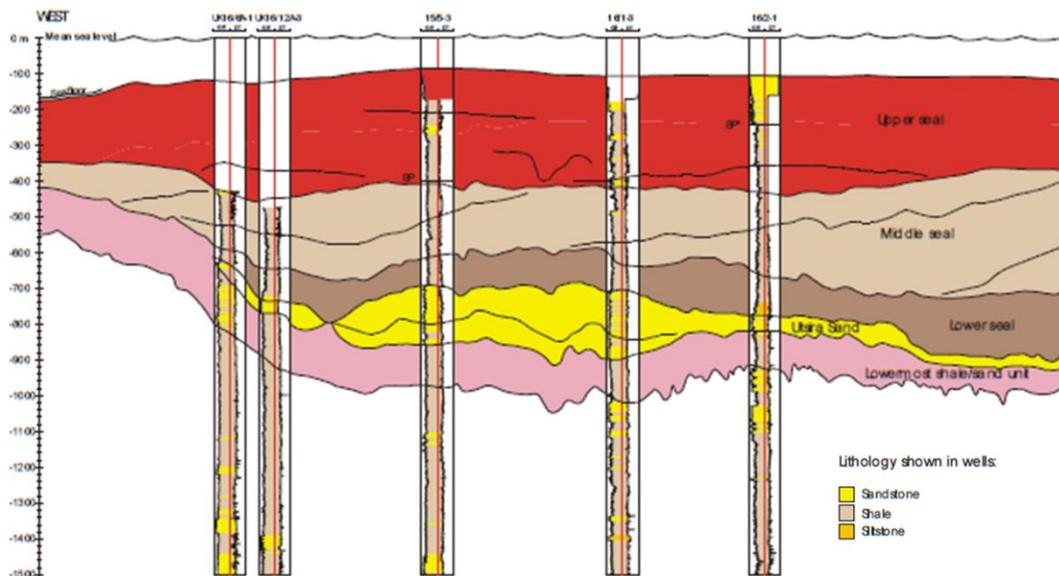


Figura 4.27. Litologia da região de armazenamento composta pelas rochas capeadoras e o aquífero Utsira (adaptado de *British Geological Survey*, 2002).

Conforme citado anteriormente, uma fonte de dados geológico-geoquímicos contendo uma descrição geológica detalhada das rochas presentes no aquífero Utsira (reservatório e rocha capeadora) pode ser encontrada no relatório técnico disponibilizado pelo *British Geological Survey* (2002). De forma geral, grande parte dos trabalhos encontrados na literatura apresentam estudos fundamentalmente geoquímicos (Frangeul *et al.*, 2004, Audigane *et al.*, 2007, Pham *et al.*, 2013). Associado a estes trabalhos, diversos programas foram empregados a fim de estudar os impactos das descrições das reações e mineralogia na resposta geoquímica global, por exemplo: TOUGHREACT, GEM e ECLIPSE 300. Em termos de análise da resposta geomecânica do aquífero (notadamente o fenômeno termo-hidro-mecânico-químico e suas variantes simplificadas), três estudos podem ser citados: Carcione *et al.* (2006), Chadwick *et al.* (2012) e Verdon *et al.* (2013). Ressalta-se que o primeiro trabalho foi único a apresentar um conjunto de propriedades mecânicas do campo com um todo. Embora as interações fenomenológicas, em um processo de armazenamento de CO₂, envolvam as quatro parcelas (THMC), os estudos supracitados não as levaram em consideração simultaneamente.

Assim como foi realizado para o projeto In Salah, buscou-se um conjunto de dados reais representativos da resposta do aquífero, frente ao longo processo de injeção. No entanto, estão disponíveis na literatura apenas medições sísmicas (com objetivo de observar o comportamento da pressão de poros). Em relação a

estes resultados, Chadwick *et al.* (2012) afirmam que a variação da pressão de poros, considerando o período de 20 anos varia entre 0.1 e 1.0 MPa, como função da compartimentalização do aquífero. Esta pequena variação da pressão de poros pode ser tomada como justificativa para o efeito pouco pronunciado das deformações no aquífero (VERDON *et al.*, 2013).

Portanto, levando em consideração a inexistência de aferições que representem todas as parcelas dos fenômenos envolvidos, as análises deste item foram concentradas na avaliação da distribuição da pressão de poros ao longo do aquífero (consequentemente a verificação dos valores de deslocamentos verticais), frente ao período de armazenamento analisado.

4.4.2 Modelo numérico idealizado – THMC

Em termos geométricos e litológicos, construiu-se um modelo tridimensional de diferenças finitas (GEM) e de elementos finitos (CHRONOS) baseado nos trabalhos de Frangeul *et al.* (2004), Carcione *et al.* (2006) e Chadwick *et al.* (2012), conforme apresentado na Figura 4.28. As propriedades necessárias, apresentadas no Quadro 4.4, para a simulação foram baseadas em diversos trabalhos (Frangeul *et al.*, 2004, Audigane *et al.*, 2006, 2007, Carcione *et al.*, 2006, Chadwick *et al.*, 2012 e Pham *et al.*, 2013), uma vez que o caso não apresenta em uma fonte única todos os requisitos para uma simulação termo-hidro-mecânica-química. Cabe ressaltar que as propriedades térmicas empregadas na construção do modelo foram idênticas àquelas empregadas no modelo do campo Krechba, uma vez que tais valores não foram mencionados explicitamente nos trabalhos supracitados.

O reservatório possui um poço injetor horizontal (de 38 metros de comprimento completado na última camada do aquífero) localizado no centro, injetando dióxido de carbono a uma vazão constante de 1.3×10^6 m³/dia. Devido à falta de dados relacionados às relações entre as tensões (única informação disponível é o regime de tensões – transcorrente), foram adotadas as mesmas relações apresentadas para o projeto In Salah, isto é, a tensão horizontal maior é igual a $1.12\sigma_v$ e a tensão horizontal menor igual a $0.69\sigma_v$.

A malha de elementos finitos do reservatório, utilizada no CHRONOS, é coincidente com o *grid* de diferenças finitas do simulador GEM. A malha de

elementos finitos do reservatório possui 100 elementos de 100 m na direção x, 100 elementos de 100 m na direção y e 5 elementos de 50 m na direção z. O modelo de reservatório apresenta 50000 elementos/células e o modelo completo com rochas adjacentes (simulador de tensões – CHRONOS) apresenta 392000 elementos (20 x 20 x 1.5 km). A Figura 4.29 apresenta um panorama tridimensional da malha de elementos finitos do modelo completo, bem como o reservatório e a localização do poço injetor.

Em relação às regiões apresentadas no aquífero Utsira, o modelo foi dividido em três entidades: *overburden* (0 – 800m), reservatório (800 – 1050 m) e *underburden* (1050 – 1500 m), conforme pode ser observado na Figura 4.28. As propriedades mecânicas das três formações supracitadas também estão dispostas no Quadro 4.4. Vale ressaltar que, embora o *overburden* possa ser dividido em três camadas distintas (vide Figura 4.27), a construção do modelo numérico foi idealizada considerando apenas uma camada geológica equivalente, uma vez que os parâmetros mecânicos, separados por litologia, não estão disponíveis na literatura. Em relação ao aquífero, Baklid *et al.* (1996) e Audigane *et al.* (2007) apresentaram a descrição do aquífero arenítico com intercalações de folhelho. Novamente, como foram encontradas somente propriedades mecânicas para uma descrição homogênea, o aquífero foi considerado como um material homogêneo e isotrópico, representado pelos parâmetros do arenito.

Em relação aos dados geoquímicos, cabe salientar que o fluido contido na rocha é composto por uma fração aquosa descrita por meio de sete componentes, conforme apresentado no Quadro 4.5. A escolha dos componentes, bem como suas respectivas concentrações iniciais e reações de equilíbrio químico (vide Quadro 4.6) foram baseadas nos trabalhos de Nghiem *et al.* (2004), Frangeul *et al.* (2004), Audigane *et al.* (2007) e Thibeau *et al.* (2007). O Quadro 4.7 resume as reações geoquímicas de precipitação/dissolução empregadas nas análises. A composição mineralógica, frações volumétricas da formação Utsira e os parâmetros das reações geoquímicas foram baseados, simplificada, nos trabalhos de Frangeul *et al.* (2004), Nghiem *et al.* (2004), Carcione *et al.* (2006) e Audigane *et al.* (2007) e estão contidas no Quadro 4.8. Neste modelo foi permitida a difusão molecular dos componentes da fase aquosa.

Em termos da análise numérica, a simulação THMC iterativa foi conduzida por um tempo de 1827 dias (dividida em 595 passos de tempo) com o objetivo de

ser confrontada com as observações relacionadas com a evolução da pressão e ausência de deslocamentos mensuráveis no aquífero, encontradas na literatura (Chadwick *et al.*, 2012 e Verdon *et al.*, 2013).

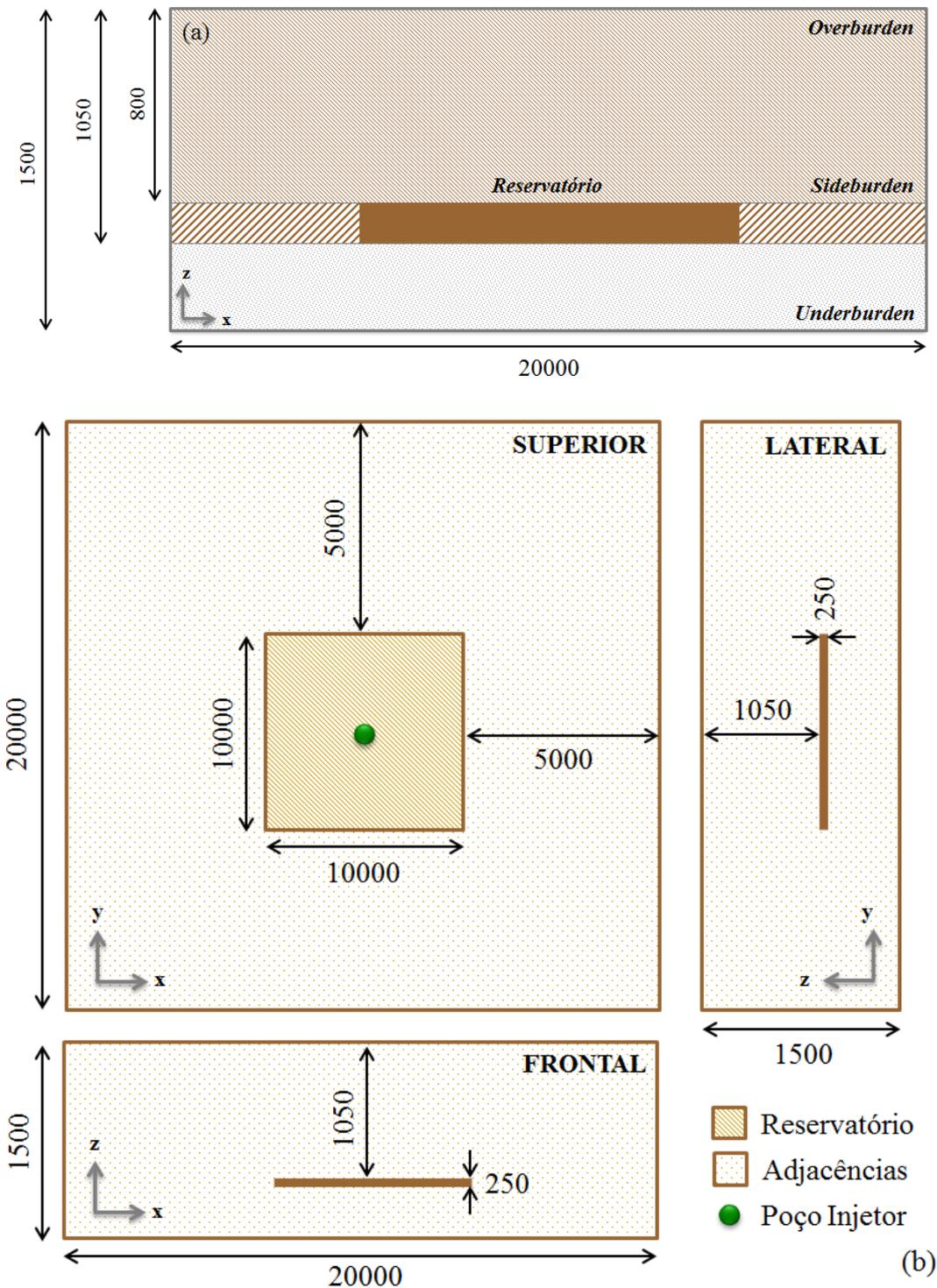
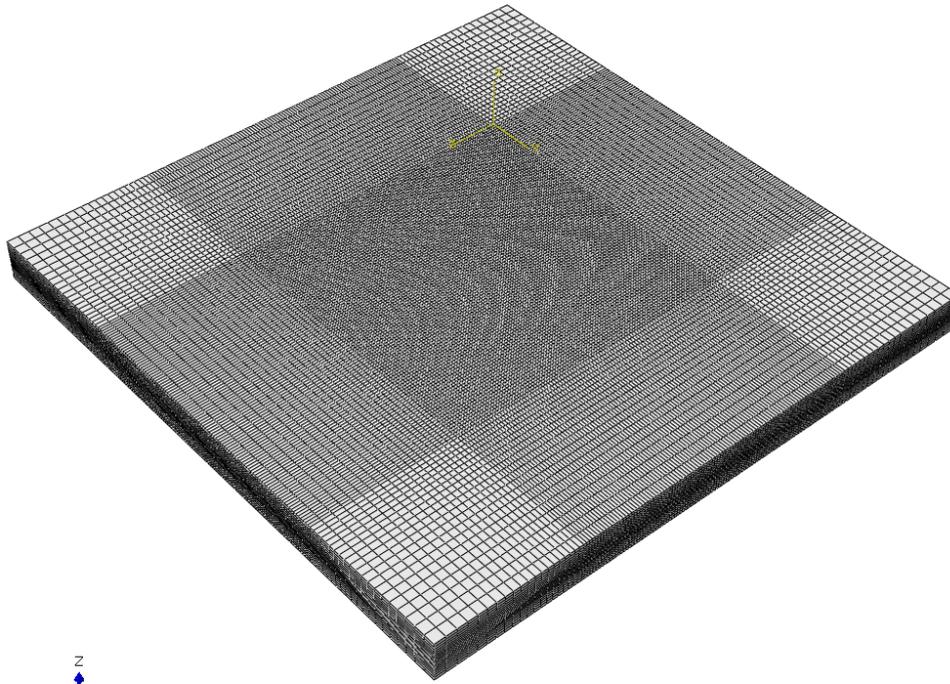
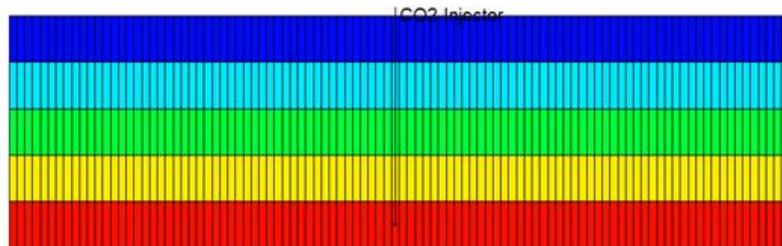
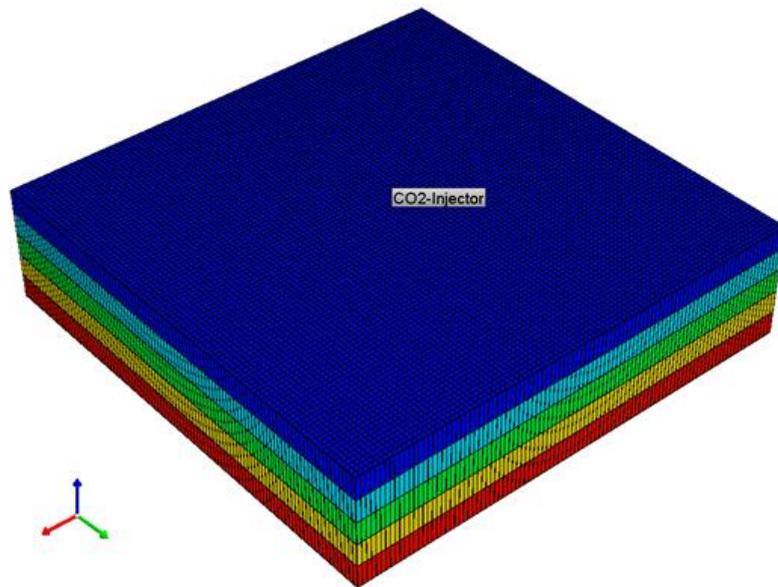


Figura 4.28. Modelo idealizado aquífero Utsira para análise termo-hidro-mecânica-química empregando CHR-GEM: (a) litologia e (b) vistas da geometria adotada (metros)



(a)



(b)

Figura 4.29. Vista tridimensional do modelo completo empregada na análise CHR-GEM termo-hidro-mecânica-química: (a) malha de elementos finitos e (b) *grid* de diferenças finitas com destaque para o poço injetor

Quadro 4.4. Propriedades utilizadas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento de CO₂ no aquífero Utsira

Propriedades	Valores
	Sistema Internacional
Massa específica da água	1000.8 kg/m ³
Compressibilidade do fluido	7.1x10 ⁻⁷ kPa ⁻¹
Permeabilidade vertical e horizontal	2.0x10 ⁻¹² m ²
Porosidade	0.37
pH (água)	7.0
Módulo de Young do reservatório	2.1 GPa
Coefficiente de Poisson do reservatório	0.24
Módulo Volumétrico do reservatório	1.33 GPa
Módulo de Young do <i>overburden</i>	1.88 GPa
Coefficiente de Poisson do <i>overburden</i>	0.29
Módulo de Young do <i>underburden</i>	3.28 GPa
Coefficiente de Poisson do <i>underburden</i>	0.42
Módulo de Young do <i>sideburden</i>	2.1 GPa
Coefficiente de Poisson do <i>sideburden</i>	0.24
Temperatura do reservatório	37 °C
Temperatura do fluido de injeção – CO ₂	48 °C
Coefficiente de expansão térmica da rocha	1.0x10 ⁻⁵ °C ⁻¹
Coefficiente de expansão térmica do fluido	5.0x10 ⁻⁵ °C ⁻¹
Calor específico da rocha	890 J/kg °C
Conductividade térmica da rocha	2.5 W/m °C

Note-se que, ao contrário dos estudos citados anteriormente, a validação/aplicação da metodologia THMC iterativa não pode ser efetuada de maneira direta (comparação com os dados apresentados pelo campo, como foi realizado com o projeto In Salah), uma vez existem apenas estudos e simulações do comportamento hidro-químico e termo-hidro-químico do aquífero. As comparações foram realizadas de maneira qualitativa, à luz das diversas observações e constatações disponíveis na literatura, conforme mencionado ao longo deste item.

Quadro 4.5. Concentrações iniciais dos componentes aquosos utilizadas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento no aquífero Utsira

Componente aquoso	Concentração (mol/kg H ₂ O)
H^+	1.0×10^{-7}
Ca^{+2}	9.12×10^{-5}
$SiO_{2(aq)}$	2.35×10^{-8}
Al^{+3}	2.32×10^{-11}
OH^-	5.46×10^{-7}
CO_3^{-2}	2.49×10^{-2}
HCO_3^-	1.17×10^{-5}

Quadro 4.6. Reações de equilíbrio químico empregadas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento no aquífero Utsira

Reações	Constantes de equilíbrio químico
$H_2O \rightleftharpoons H^+ + OH^-$	$\log(K_{eq}) = -13.26$
$CO_2 + H_2O \rightleftharpoons H^+ + HCO_3^{-2}$	$\log(K_{eq}) = -6.32$
$CO_2 + H_2O \rightleftharpoons 2H^+ + CO_3^{-2}$	$\log(K_{eq}) = -16.56$

Quadro 4.7. Reações geoquímicas consideradas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento no aquífero Utsira

Reações geoquímicas (precipitação/dissolução)
$Calcita + H^+ = Ca^{+2} + HCO_3^-$
$Caulinita + 6H^+ = 5H_2O + 2SiO_2 + 2Al^{+3}$
$Quartzo = SiO_2$

Quadro 4.8. Parâmetros das reações geoquímicas utilizadas na simulação termo-hidro-mecânica-química do projeto de armazenamento no aquífero Utsira

Reações	$\log(k_\beta)$	\hat{A}_β	$E_{\alpha,\beta}$	Fração volumétrica inicial
<i>Calcita</i>	-8.8	88	41870	0.0674
<i>Caulinita</i>	-13.0	17600	62760	0.0522
<i>Quartzo</i>	-13.9	7128	87500	0.7633

Assim como foi definido para os demais casos estudados nesta tese, as propriedades hidráulicas foram definidas apenas para o aquífero, de forma que o fluxo não é permitido além dos limites do modelo de diferenças finitas. Os resultados encontrados podem ser apreciados no item a seguir.

4.4.3 Resultados da análise THMC

Paralelamente ao projeto In Salah, salienta-se que as análises iterativas foram efetuadas em duas vias executando cada simulador (CHRONOS e GEM) duas vezes, garantindo assim a convergência da solução termo-hidro-mecânico-química.

Previamente à apresentação dos resultados, cabe mencionar que Chadwick *et al.* (2012) apresentaram resultados numéricos de evolução da pressão de poros em função da compartimentalização do aquífero, empregando o programa TOUGH. De forma geral, a variação de pressão está compreendida entre 0.1 e 1 MPa, na região do poço injetor, para um período de 5 anos. Os resultados discutidos pelos autores supracitados corroboram os resultados provenientes da sísmica 4D, os quais apresentaram uma variação de pressão de poros menor que 0.1 MPa (após 5 anos de injeção) para distâncias entre 500 e 4000 metros do poço injetor, sugerindo por sua vez, a ausência de barreiras de fluxo. A Figura 4.30 apresenta a distribuição do CO₂ (fração molar global) ao final do período definido (neste caso, 5 anos), levando em conta a análise termo-hidro-mecânica-química iterativa. Conforme esperado, o dióxido de carbono migrou para o topo do reservatório como resultado da diferença de massa específica, quando comparado com a água contida originalmente nos poros do aquífero. Pelo curto período de tempo analisado, o CO₂ como componente gasoso ainda encontra-se presente no

aquífero; fato também observado nas análises realizadas por Chadwick *et al.* (2012). Em termos de variação de pressão de poros, foram obtidos valores, no entorno do poço, entre 0.03 e 0.07 MPa, através da simulação iterativa CHR-GEM.

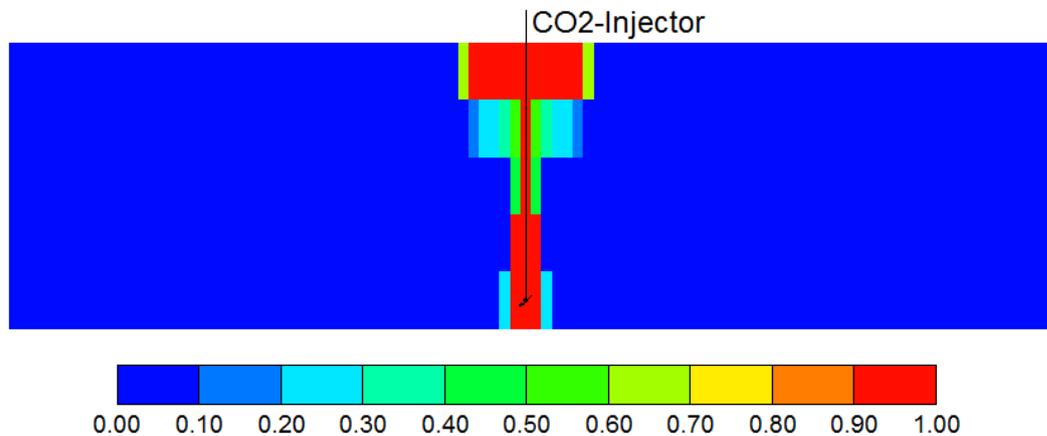


Figura 4.30. Distribuição espacial da fração molar do CO₂ para o aquífero Utsira resultante do emprego da análise termo-hidro-mecânica-química iterativa – seção transversal passando pelo poço injetor

Em termos da resposta mecânica, Chadwick *et al.* (2012) afirmam que a inexistência de eventos relacionados aos efeitos geomecânicos (soerguimento do leito marinho, fraturamento da rocha capeadora, dentre outros) suportam as evidências supracitadas a respeito da pequena variação da pressão de poros. Através de uma abordagem analítica simplificada, os autores supracitados estimaram a expansão do reservatório (para a variação pressão de poros medida via sísmica 4D igual a 0.1 MPa) como aproximadamente **0.8 milímetros**. Mapas de deslocamento vertical, obtidos tanto no topo do reservatório quanto no leito marinho, estão apresentados na Figura 4.31. Através da análise destes resultados, pode ser observado que, de fato, o soerguimento do reservatório/leito marinho apresentou valores relativamente pequenos, frente à injeção massiva de CO₂, sendo o valor máximo encontrado para o reservatório igual a **0.2 milímetros** e para o leito marinho igual a **0.16 milímetros**. Assim, estes resultados corroboram as constatações tomadas a partir da observação do comportamento real do campo. Ainda em relação ao comportamento mecânico do aquífero, Verdon *et al.* (2013) concluem que a pequena variação de pressão de poros, associada às excelentes propriedades de fluxo e extensão lateral do aquífero, configura uma situação ideal para o armazenamento de CO₂. No entanto, os autores também afirmam que é improvável que outros projetos de CCS apresentem condições tão favoráveis

quanto o caso do aquífero Utsira, ressaltando a necessidade de análises geomecânicas robustas como a que está sendo proposta neste estudo.

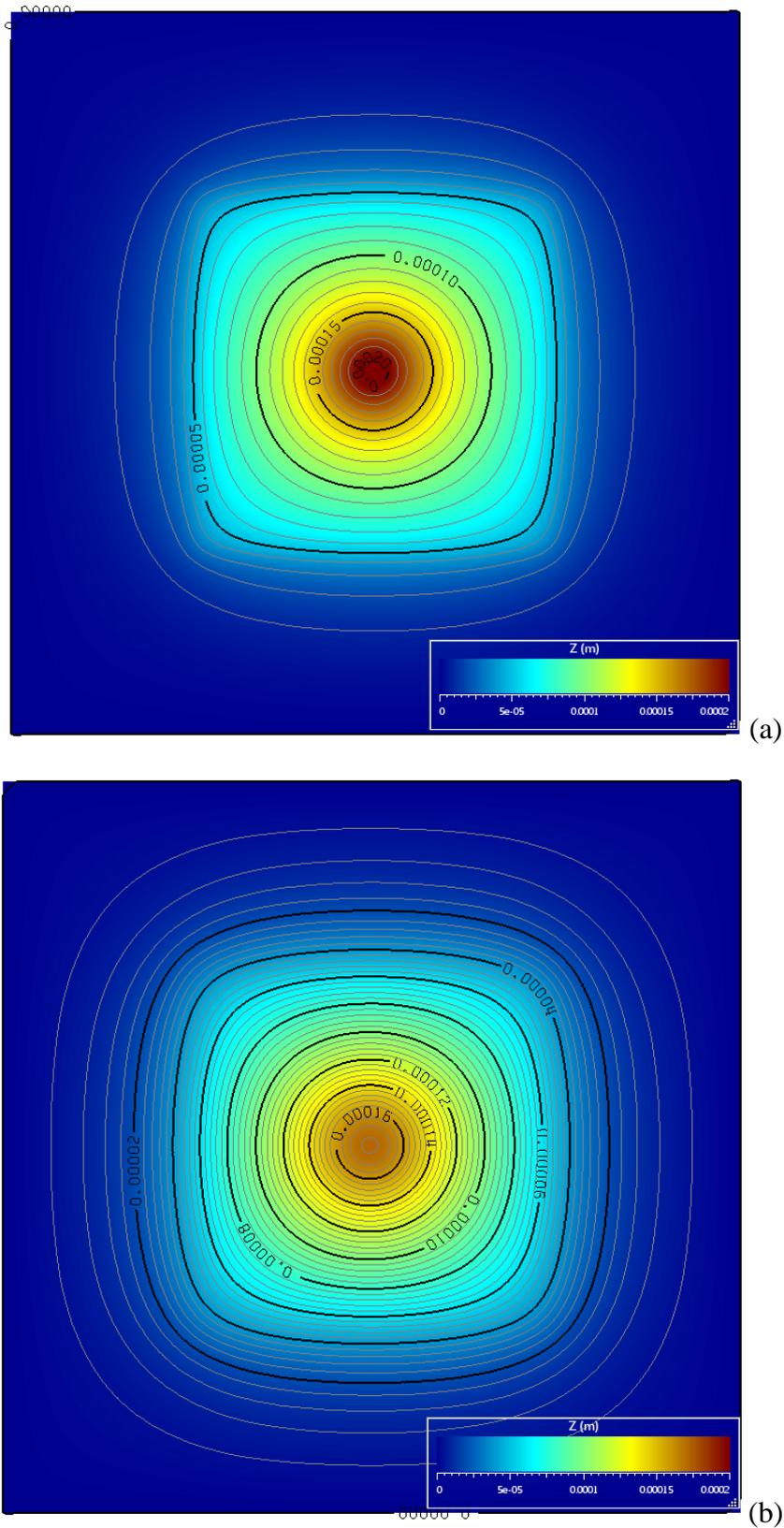


Figura 4.31. Mapas de deslocamentos verticais após 5 anos de injeção obtido via acoplamento CHR-GEM: (a) topo do reservatório e (b) superfície do leito marinho

A Figura 4.32 apresenta a duração dos processos envolvidos (análise de tensões – CHRONOS, análise de fluxo – GEM e intercâmbio de informações – HERMES) durante simulação envolvendo o acoplamento termo-hidro-mecânico-químico. Conforme mencionado anteriormente, a análise foi dividida em 595 passos de tempo, sendo que a convergência foi estabelecida após 2 iterações entre o CHRONOS e o GEM. Portanto, o tempo global da análise foi de **1320 minutos**, de forma que foi gasto 5.2 minutos por passo de tempo. Conforme já constatado para o caso anterior (projeto In Salah), o elevado custo computacional está contido nos processos do HERMES (70% do tempo da iteração), uma vez que o CHRONOS e o GEM apresentam desempenhos iguais a 8% e 23%, respectivamente. O emprego da nova versão do HERMES (paralelizado em GPU) pode tornar a análise mais atrativa em termos de aplicabilidade.

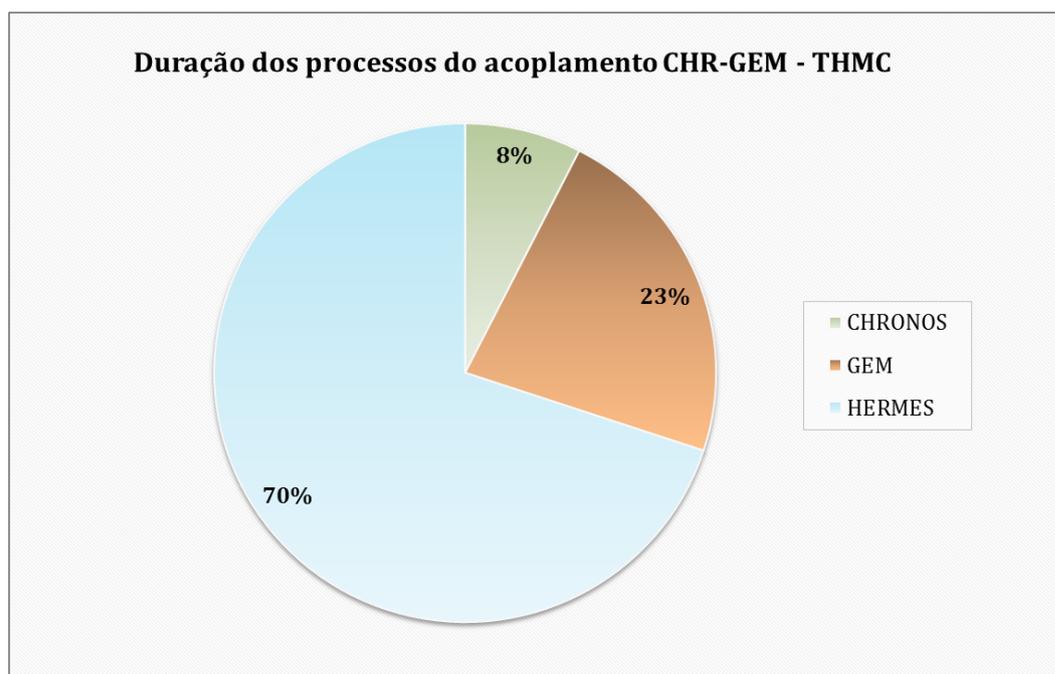


Figura 4.32. Duração dos processos envolvidos no acoplamento THMC iterativo CHR-GEM para cada passo de tempo

Ao final da aplicação da metodologia termo-hidro-mecânico-química em uma situação baseada em um caso real, a qual apresenta observações do comportamento hidro-mecânico do campo, pode ser concluído que o esquema de acoplamento idealizado representa uma ferramenta de análise versátil e robusta. Os resultados obtidos, quando confrontados com as observações e conclusões apresentadas na literatura, foram considerados satisfatórios, à luz dos dados disponíveis. Pelo curto período de tempo avaliado, não foram observadas

variações das propriedades do aquífero devido às reações de precipitação e dissolução mineral, uma vez que a escala temporal destas observações pode atingir milhares de anos. Assim, o confronto dos resultados obtidos, através do emprego de uma metodologia THMC iterativa, com observações em campo ainda carece de fontes confiáveis que permitam uma análise quantitativa global de todos os fenômenos envolvidos.

4.5 Discussão geral dos resultados

Após a obtenção de resultados satisfatórios associados aos processos de validação e aplicação das metodologias de acoplamento iterativo (HM, THM e THMC), fica evidente a necessidade de criação de um modelo padrão (*benchmark*) que tenha como propósito fundamental a verificação dos diversos esquemas de acoplamento desenvolvidos e publicados na literatura especializada, conforme apresentado no item 2.2. Em termos das interações entre os fenômenos térmicos, hidráulicos e mecânicos, a literatura apresenta uma vasta coletânea de casos que podem servir como fonte comparativa (vide projeto DECOVALEX, 2015). Por outro lado, tais casos estão normalmente relacionados a situações monofásicas, não envolvendo, necessariamente, a injeção de um fluido reativo como o dióxido de carbono. Tal fato ficou explícito na ausência de um caso para a validação do esquema THMC proposto nesta tese; embora a aplicação efetuada confirme os resultados promissores da metodologia. De certa maneira, a coletânea de dados compilada para a aplicação da metodologia THM no projeto In Salah pode servir como lastro para outros trabalhos que objetivem reproduzir o comportamento do campo Krechba.

Os estudos de retroanálise, de certa forma, têm se mostrado importantes para que os pesquisadores possam analisar a acurácia das diversas metodologias propostas. Em contrapartida, a idealização de modelos baseados em campos (e comportamentos) reais aumenta consideravelmente a complexidade das análises e gera, conseqüentemente, fontes de dúvida quanto aos parâmetros empregados. Esta dificuldade foi encontrada nesta tese, uma vez que para um mesmo caso, diversos autores assumiram hipóteses nem sempre congruentes. Neste contexto, Kolditz *et al.* (2012) apresentaram uma discussão a respeito dos processos envolvidos na criação de modelos padronizados (*benchmarks*) associados,

exclusivamente, ao processo de armazenamento geológico de CO₂. A discussão levantada pelos autores supracitados vem de encontro com as considerações feitas ao longo deste trabalho. Além disso, servem como incentivo para a colaboração com a iniciativa de criação de modelos que representem (em suas respectivas escalas – poço e campo) os fenômenos envolvidos de forma realística, à luz das técnicas/avanços computacionais atuais.

Como alternativa viável para transpor a barreira relacionada às diferentes escalas de tempo entre os efeitos geomecânicos (encontrados durante o processo de injeção de dióxido de carbono – fenômeno termo-hidro-mecânico) e as reações de precipitação/dissolução (processo de trapeamento mineral – fenômeno químico) menciona-se a construção/idealização de modelos baseados no projeto *CarbFix*. Este projeto apresentou resultados de precipitação mineral do CO₂ injetado na ordem de anos, representando uma escala de tempo compatível com a escala dos efeitos geomecânicos.

5 Considerações finais

Baseado nos resultados obtidos, bem como nas discussões realizadas ao longo desta tese, conclusões acerca das validações e aplicações dos esquemas de acoplamento hidro-mecânico, termo-hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico-químico iterativos puderam ser tomadas. Neste capítulo serão apresentadas as principais conclusões obtidas neste estudo, seguidas de sugestões para a continuidade desta pesquisa.

5.1 Conclusões

Esta tese teve como objetivo principal a idealização de uma metodologia de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico visando a simulação do armazenamento geológico de dióxido de carbono. Para tanto, fez-se necessária a imersão em diversas áreas do conhecimento como o armazenamento de CO₂, transporte reativo, simulação multifásica multicomponente, fenômenos acoplados em meios porosos, bem como suas várias vertentes fenomenológicas, de forma que fosse possível compreender o panorama geral onde esta tese está inserida. De acordo com os objetivos traçados no Capítulo 1, diversas conclusões puderam ser tomadas.

- Estado do conhecimento

Em termos da modelagem numérica do processo de armazenamento geológico de dióxido de carbono, existe uma literatura vasta tanto em termos de aplicação/previsão, quanto de estudos paramétricos, principalmente com relação à vertente geoquímica; para tanto, simuladores composicionais têm sido empregados ostensivamente. Aliado a isso, existem também estudos que têm visado, através do emprego de modelos acoplados, retroanalisar comportamentos encontrados em campo, principalmente aqueles relacionados aos efeitos geomecânicos. As formas de acoplamento, bem como os fenômenos considerados – termo/hidráulico/mecânico/químico – têm sido empregadas através de um espectro bastante amplo de combinações, a depender da fonte de dados disponível.

- Idealização de metodologias de acoplamento iterativo

A inclusão de simulador composicional GEM permitiu a consideração de outros dois fenômenos (térmico e químico) associados à interação hidro-mecânica já estabelecida pelo GTEP/PUC-Rio, através do emprego do programa IMEX. Assim, foram idealizados três esquemas de acoplamento iterativo, de forma a considerar os fenômenos hidro-mecânico, termo-hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico-químico. As estruturas dos esquemas foram criadas buscando garantir a versatilidade das aplicações de acordo com objetivo da análise e a coletânea de dados disponível. Além disso, buscou-se garantir a robustez e acurácia dos esquemas idealizados através de validações e aplicações em casos reais.

- Validação dos esquemas de acoplamento HM e THM

O emprego de casos simplificados para a validação dos esquemas de acoplamento hidro-mecânico e termo-hidro-mecânico iterativo, através da interação entre os simuladores CHRONOS e GEM, serviu como elemento balizador para a aferição da robustez e acurácia das idealizações propostas ao longo desta tese. Tanto o esquema HM quanto o THM apresentaram resultados satisfatórios quando confrontados com as respectivas soluções totalmente acopladas. Em uma esfera mais abrangente, o emprego de um esquema de acoplamento HM ou THM (via CHRONOS-GEM) permite a ampliação dos cenários de aplicação, ou seja, estudos de processos de recuperação avançada de hidrocarbonetos (injeção de CO₂ e água) e a previsão do comportamento de aquíferos cujo objetivo seja a obtenção de energia geotérmica.

- Aplicação dos esquemas THM e THMC iterativos em casos reais

A simulação de casos reais de armazenamento de CO₂ é de fundamental importância para a avaliação dos impactos das hipóteses assumidas, robustez da metodologia, precisão dos resultados e eficiência em termos de operacionalidade. De fato, a aplicação da metodologia THM para o caso do projeto In Salah apresentou resultados bastante satisfatórios quando confrontados com as respostas medidas em campo. A qualidade dos resultados promove uma maior confiança para aplicações futuras, cujos objetivos possam estar relacionados não somente com análises preditivas e de tomada de decisões quanto à segurança da estocagem de dióxido de carbono, mas também com análises relacionadas ao processo

combinado de armazenamento de CO₂ e recuperação avançada de hidrocarbonetos.

Em termos da análise envolvendo os quatro fenômenos utilizados nesta tese (THMC), a aplicação do CHRONOS-GEM para a previsão do comportamento do aquífero Utsira também apresentou resultados que corroboraram as observações realizadas em campo (em termos de variação de pressão poros e ausência de observação de deslocamentos). Pelas diferentes escalas temporais de influência entre os fenômenos termo-hidro-mecânico e químico, além da ausência de observações de campo quanto à resposta geoquímica (trapeamento do CO₂), as comparações completas envolvendo os quatro fenômenos não puderam ser realizadas. Tal aferição poderá ser realizada de forma integral através da simulação do armazenamento de CO₂ em situações nas quais os efeitos geomecânico e geoquímico ocorram em escalas de tempo similares, como reportado pelo projeto *CarbFix*.

No âmbito brasileiro, os esquemas de acoplamento envolvendo o CHRONOS e o GEM permitem, também, a aplicação para previsões da recuperação avançada de metano e extração de energia geotérmica; este último pouco explorado no cenário brasileiro. A obtenção de metano merece destaque uma vez que o Brasil apresenta um volume considerável de jazidas de carvão (em comparação com os países da América Latina) que podem ser exploradas associando à produção convencional técnicas avançadas de recuperação, como a injeção de CO₂.

- Processo de padronização de modelos de validação/aplicação

Adicionalmente às conclusões qualitativas acerca dos resultados obtidos através das validações/aplicações dos esquemas de acoplamento iterativos idealizados, pode ser constatada ao longo do desenvolvimento deste trabalho uma lacuna no que diz respeito a modelos padronizados (*benchmark*) visando a simulação do processo de estocagem geológica de CO₂ envolvendo a interação total entre os fenômenos térmico, hidráulico, mecânico e químico. A confiabilidade técnica e pública quanto a aceitação dos projetos de armazenamento de CO₂ passam, essencialmente, por intensivos processos de testes, discussões das hipóteses simplificadoras, idealizações de modelos numéricos e metodologias de análise. A rede de pesquisa relacionada ao CCS

deve fazer uso dos conhecimentos acumulados, em termos de padronização, por iniciativas de sucesso, como por exemplo: projeto DECOVALEX, que visa a compreender e modelar processos THM e THMC em meios geológicos associados à disposição de rejeitos radioativos.

5.2 Sugestões para sequenciamento da pesquisa

Tendo em vista todas as hipóteses e análises efetuadas ao longo desta tese, diversas sugestões podem servir como lastro para pesquisas futuras visando a continuidade dos assuntos abordados neste trabalho. Portanto, como complementação dos estudos apresentados nesta tese, temos:

- a) aplicação do esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico iterativo com o objetivo de armazenar CO₂ em rochas basálticas, objeto de estudo do projeto *CarbFix*;
- b) aplicação e avaliação da resposta do esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico iterativo em outros cenários de interesse como: extração de energia geotérmica, recuperação avançada de gás em jazidas de carvão e disposição de rejeitos radioativos em meios porosos;
- c) aplicação do esquema de acoplamento termo-hidro-mecânico-químico em reservatórios de petróleo visando a recuperação avançada de hidrocarbonetos associada ao armazenamento geológico de CO₂;
- d) idealização de um esquema de submodelagem para avaliar o comportamento da rocha capeadora/poço frente à injeção massiva de dióxido de carbono;
- e) readequação das metodologias de acoplamento termo-hidro-mecânica e termo-hidro-mecânica-química visando a aplicação em reservatórios fraturados;
- f) inclusão, de maneira robusta, de uma metodologia para considerar a influência das reações geoquímicas na resposta mecânica do meio poroso (acoplamento químico-mecânico), levando em consideração os efeitos associados ao processo de *water-weakening*;
- g) consideração do acoplamento mecânico-térmico na equação de transporte de energia;

- h) aplicação da metodologia de acoplamento termo-hidro-mecânico no processo de injeção de água fria visando o estudo de indução de fraturas em rochas carbonáticas;
- i) introdução do comportamento mecânico real da rocha, através de leis constitutivas, objetivando a realização de análises de tensões detalhadas no meio poroso.

6

Referências bibliográficas

Albuquerque, R. A. C. (2014). *Simulação de fluxo e tensões em reservatórios aplicada a casos reais*. Rio de Janeiro: Dissertação de Mestrado – PUC-Rio.

Albuquerque, R. A. C., Fontoura, S. A. B., Inoue, N., Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L., Meurer, G. B. (2014). *A first approach to an integrated gocad workflow for reservoir geomechanics*. 34th GOCAD MEETING, França.

Albuquerque, R.A.C., Fontoura, S. A. B, Inoue, N., Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L. (2013). *A data preprocessing workflow to promote real reservoir hydromechanical coupling*. XXXIV Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering.

Angus, D. A., Verdon, J.P., Fisher, Q., Kendall, J-M., Segura, J. M., Kristiansen, T.G., Crook, A. J. L., Skachkov, S., Yu, J., Dutko, M. (2011). Integrated fluid-flow, geomechanic and seismic modelling for reservoir characterisation. *Recorder – Official publication of the Canadian Society of Exploration Geophysicists*, **36**(5):26–35.

Aradóttir, E. S. P., Sigurdardóttir, H., Sigfússon, B., Gunnlaugsson, E. (2011). CarbFix: a CCS pilot project imitating and accelerating natural CO₂ sequestration. *Greenhouse Gas Science and Technology* **1**:105–118.

Araújo, E. M. P. (2005). *Modelo acoplado termo-químico-poroelástico para a análise da estabilidade de poços em folhelhos*. Tese de Doutorado em Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Brasil.

Aubry D. & Modaressi A. (1996). *GEFDYN. Manuel scientifique*. Paris: École Centrale Paris LMSS-Mat.

Aubry D., Chouvet D., Modaressi A., Modaressi H. (1986). *GEFDYN: Logiciel d'analyse de comportement mécanique des sols par éléments finis avec prise en compte du couplage sol-eau-air*. Manuel scientifique. Paris: École Centrale Paris LMSS-Mat.

Audigane, P., Gaus, I., Czernichowski-Lauriol, I., Pruess, K., Xu, T. (2007). Two-dimensional reactive transport modeling of CO₂ injection in a saline aquifer at the Sleipner site, North Sea. *American Journal of Science* **307**:974 – 1008.

Audigane, P., Gaus, I., Pruess, K., Xu, T. (2006). *A long term 2D vertical modelling study of CO₂ storage at Sleipner (North Sea) using TOUGHREACT*. TOUGH Symposium.

Bachaud, P., Berne, P., Renard, F., Sardin, M., Leclerc, J. P. (2011). Use of tracers to characterize the effects of a CO₂-saturated brine on the petrophysical properties of a low permeability carbonate caprock. *Chemical Engineering Research and Design*, **89**:1817–1826.

Bachu, S (2000). Sequestration of CO₂ in geological media: criteria and approach for site selection in response to climate change. *Energy Conversion & Management*, **41**:953-970.

Bachu, S., Gunter W. D. (1999). *Storage capacity of CO₂ in geological media in sedimentary basins, with application to the Alberta basin*. Proceedings of the 4th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT-4), Switzerland.

Bai, M., Abousleiman, Y. (1997). Thermoelastoplastic coupling with application to consolidation. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **21**:121–132.

Bai, M., Elsworth, D. (1994). Modeling of subsidence and stress-dependent hydraulic conductivity for intact and fractured porous media. *Journal of Rock Mechanics and Rock Engineering*, **27**(4):209 – 234.

Baker, L. E., Pierce, A. C., Luks, K. D. (1982). Gibbs Energy Analysis of Phase Equilibria. *Society of Petroleum Engineers Journal*, **Oct**:731-742.

Baklid, A., Korbøl, R., Owren, G.A. (1996). *Sleipner vest CO₂ disposal, CO₂ injection into a shallow underground aquifer*. SPE Annual Technical Conference, United States of America.

Bear, J. & Corapcioglu, M. Y. (1981). A mathematical model for consolidation in a thermoelastic aquifer due to hot water injection or pumping. *Water Resources Research*, **17**(3):723-736.

- Bear, J. (1988). *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover, New York.
- Beck, B., Cunha, P., Ketzer J. M., Machado, H., Rocha, P. S., Zancan, F., Almeida, A. S., Pinheiro, D. Z. (2011). The current status of CCS development in Brazil. *Energy Procedia*, **4**:6148–6151.
- Belotserkovets, A. & Prevost, J. H. (2011). Thermoporoelastic response of a fluid-saturated porous sphere: An analytical solution. *International Journal of Engineering Science*, **49**: 1415–1423.
- Bemer, J., Lombard, J. M. (2010). From injectivity to integrity studies of CO₂ geological storage – Chemical alteration effects on carbonates petrophysical and geomechanical properties. *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP*, **65**:445–459.
- Bethke, C. M. (1996). *Geochemical reaction modeling*. Oxford University Press, New York.
- Benveniste, Y., (1987). A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials. *Mechanics of Materials*. **6**(2), 147–157.
- Bielinski, A. (2007). *Numerical simulation of CO₂ sequestration in geological formations*. Ph.D. Thesis, Universität Stuttgart, Alemanha.
- Biot, M. A. (1941). A general theory of three-dimensional consolidation. *Journal of Applied Physics*, **12**(1):155–164.
- Biot, M. A. (1956). General solution of the equations of elasticity and consolidation for a porous material. *Journal of Applied Mechanics*, **55**:91–96.
- Biot, M. A. (1956). Thermoelasticity and irreversible thermodynamics. *Journal of Applied Physics*, **27**(3):240–253.
- Biot, M. A. (1977). Variational Lagrangian-thermodynamics of non-isothermal finite strains mechanics of porous solids and thermomolecular diffusion. *International Journal of Solids Structures*, **27**:579–597.
- Biot, M. A., Willis, D. G. (1957). The elastic coefficients of the theory of consolidation. *Journal of Applied Mechanics*, **24**:594–601.
- Bissell, R. C., Vasco, D. W., Atbi, M., Hamdani, M., Okwelegbe, M., Goldwater, M. H. (2011). A full field simulation of the In Salah gas production and CO₂

storage project using a coupled geo-mechanical and thermal fluid flow simulator. *Energy Procedia* **4**:3290–3297.

Booker, J. R. & Savvidou, C. (1985). Consolidation around a heat source. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **9**:173–184.

Bower, K. M. & Zyvoloski, G. (1997). A numerical model for thermo-hydro-mechanical coupling in fractured rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, **34**(8):429–442.

Brasil. (2016). Presidência da República. *Brazil at COP22*. Disponível em: < http://www.brazilgovnews.gov.br/news/fact-sheet-cop22_en_nov16_final.pdf >. Acesso em: 20 dez. 2016.

Bunger, A. (2007). *Theoretical analysis of a shale ball subjected to chemoporomechanical loading*. Meeting Society's Challenges and Demands – Proceedings first Canada–U.S. Rock Mechanics Symposium 2007, 1691–1699.

Bunger, A. (2010). The Mandel–Cryer effect in chemoporoelectricity. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **34**:1479–1511.

Cappa, F. & Rutqvist, J. (2010). Modeling of coupled deformation and permeability evolution during fault reactivation induced by deep underground injection of CO₂. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, **5**:336–346.

Cappa, F. & Rutqvist, J. (2011). Impact of CO₂ geological sequestration on the nucleation of earthquakes. *Geophysical Research Letters*, **38**:336–346.

Carcione, J. M., Picotti, S., Gei, D., Rossi, G. (2006). Physics and seismic modeling for monitoring CO₂ storage. *Pure and Applied Geophysics* **163**:175–207.

Chadwick, R. A., Kirby, G. A., Holloway, S., Gregersen, U., Johannessen, P. N., Zweigel, P., Arts, R. (2002). *Saline aquifer CO₂ storage (SACS2). Final Report: Geological characterisation (work area 1)*. British Geological Survey Commissioned Report, CR/02/153C.

Chadwick, R. A., Williams, G. A., Williams, J. D. O., Noy, D. J. (2012). Measuring pressure performance of a large saline aquifer during industrial-scale

CO₂ injection: The Utsira Sand, Norwegian North Sea. *International Journal of Greenhouse Gas Control* **20**:2–26.

Chan, T. Khair, K., Vuillod, E. (1995). Generic study of coupled T-H-M processes of nuclear waste repositories as near-field initial boundary value problems (BMT2). *Developments in Geotechnical Engineering – Coupled thermo-hydro-mechanical processes of fractured media*, **79**:281–307.

Charlez, Ph. A. (1991). *Rock mechanics: Theoretical fundamentals – vol. 1*. Éditions Technip.

Charlez, Ph. A. (1997). *Rock mechanics: Petroleum applications – vol. 2*. Éditions Technip.

Chen, G., Chenevert, M. E., Sharma, M. M., Yu, M. (2003). A study of wellbore stability in shales including poroelastic, chemical, and thermal effects. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **38**(3-4):167–176.

Chen, Z., Huan, G., Ma, Y. (2006). *Computational methods for multiphase flows in porous media*. Computational Science and Engineering Series, vol. 2.

Cheng, A. H. D., Detournay, E. (1988). On singular equations and fundamental solutions of poroelasticity. *International Journal of Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **12**: 552–572.

Chiaramonte, L. (2008). *Geomechanical characterization and reservoir simulation of a CO₂ sequestration project in a mature oil field, Teapot Dome, WY*. Ph.D. Thesis, Stanford University, United States of America.

CMG. (2010). *GEM: advanced compositional and GHG reservoir simulator – User's guide*, versão 2010.

Costa, I. V. L. (2009). *Análise de potencial técnico do sequestro geológico de CO₂ no setor petróleo no Brasil*. Dissertação de Mestrado em Planejamento Energético, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.

Coussy, O. (2004). *Poromechanics*. John Wiley & Sons.

Coussy, O., Ulm, F. -J. (1996). Creep and plasticity due to chemical-mechanical couplings. *Applied Mechanics*, **66**:523–535.

- Cryer, C. W. (1963). A comparison of the three-dimensional consolidation theories of Biot and Terzaghi. *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, **XVI**(4): 401–412.
- Dean, R. H., Gai, X., Stone, C. M., and Mikoff, S. E. (2006). A comparison of techniques for coupling porous flow and geomechanics. *Society of Petroleum Engineers Journal*, **11**(1):132–140.
- DECOVALEX (2015). *Projeto Decovalex – Fase 2012 – 2015*. Disponível em: <http://www.decovalex.org/index.html>.
- Dempsey, D., Kelkar, S., Pawar, R., Keating, E., Coblenz, D. (2014). Modeling caprock bending stresses and their potential for induced seismicity during CO₂ injection. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, **22**:223–236.
- Denbigh, K. G. (1971). *The Principles of Chemical Equilibrium with applications in chemistry and chemical engineering*. Cambridge University press, 3rd ed.
- Detournay, E. (1995). *Coupled thermo-hydro-mechanical processes in rock mechanics, with applications to the petroleum industry*. 8th International Congress on Rock Mechanics, Tokyo.
- Detournay, E., Sarout, J., Tan, C., Caurel, J. (2005). *Chemoporoelastic parameter identification of a reactive shale*. IUTAM Symposium on Physicochemical and Electromechanical Interactions in Porous Media Solid Mechanics and Its Applications, **125**:125–132.
- Ducellier, A., Seyedi D., Foerster, E. (2011). A coupled hydromechanical fault model for the study of the integrity and safety of geological storage of CO₂. *Energy Procedia*, **4**:5138–5145.
- Egermann, P., Bekri, S., Vizika, O. (2010). An integrated approach to assess the petrophysical properties of rocks altered by rock/fluid interactions (CO₂ injection). *Petrophysics*, **51**:32–40.
- Ekbote, S.; Abousleiman, Y. (2005). Porochemoelastical solution for an inclined borehole in a transversely isotropic formation. *Journal of Engineering Mechanics*, **131**(5): 522–533.

Ertekin, T. (1978). *Numerical simulation of the compaction-subsidence phenomena in a reservoir for two-phase nonisothermal flow* PhD Thesis – The Pennsylvania State University.

Ertekin, T., Abou-Kassem, J. H., King, G. R. (2001). *Basic applied reservoir simulation. SPE Textbook Series vol. 7.*

Faust, C. R. & Mercer, J. W. (1977). *Theoretical analysis of fluid flow and energy transport in hydrothermal systems. Open File Rep. 77-60*, US Geological Survey.

Faust, C. R. & Mercer, J. W. (1979). Geothermal reservoir simulation, 1 – Mathematical models for liquid and vapor-dominated hydrothermal systems. *Water Resources Research*, **15**:23–30.

Fernandes, F. A. N, Pizzo, S. M., Moraes Jr, D. (2006). *Termodinâmica Química*. 1° ed., Universidade Federal do Ceará.

Fontoura, S. A. B, Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L., Inoue, N., Albuquerque, R.A.C., Gonçalves, C.J., Alcure, M. (2013). *Workflow for wellbore integrity analysis during reservoir development*. Offshore Technology Conference Brasil.

Fontoura, S. A. B., Inoue, N., Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L. (2013). *Applications of partial fluid-mechanical coupling in the reservoir geomechanics scope*. 47th U.S. Rock Mechanics / Geomechanics Symposium.

Frangéul, J., Nghiem, L., Caroli, E., Thibeau, S. (2004). *Sleipner/Utsira CO₂ geological storage: full field flow and geochemical coupling to assess the long term fate of the CO₂*. American Association of Petroleum Geologists Annual Conference.

Frind, E. O. (1995). *Groundwater modeling (numerical methods)*. Lecture notes from the Department of Earth Sciences - University of Waterloo, Canada.

Frydman, M., Fontoura, S. A. B., Pastor, J. A. S. C. (2003). Finite element formulation of a coupled chemical-hydro-mechanical model for shales. Applications of computational mechanics in geotechnical engineering. 4th International Workshop, Brazil.

- Gajo, A., Loret, B. (2003). Finite element simulations of chemo-mechanical coupling in elastic–plastic homoionic expansive clays. *Computer Methods in Applied Mechanics Engineering*. **192**:3489–3530.
- Gens, A., Guimarães, L. N., Fernández, A. M., Olivella, S., Sánchez, M. (2008). *Coupled analysis of chemo-mechanical processes*. Thermo-Hydromechanical and Chemical Coupling in Geomaterials and Applications: 3rd International Symposium GeoProc'2008.
- Ghassemi, A., Diek, A. (2002). Porothermoelasticity for swelling shales. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **34**(1-4):123–135.
- Ghassemi, A., Diek, A. (2003). Linear chemo-poroelasticity for swelling shales: theory and application. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **38**(3-4): 199–212.
- Ghassemi, A., Tao, Q., Diek, A. (2009). Influence of coupled chemo-poro-thermoelastic processes on pore pressure and stress distributions around a wellbore in swelling shale. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **67**:57–64.
- Ghassemi, A., Wolfe, G., Diek, A., Roegiers, J.-C. (1999). A chemo-mechanical model for borehole stability. *Rock Mechanics for Industry*, 239–246
- Gislason, S. R., S. R., Broecker, W. S., Gunnlaugsson, E., Snæbjörnsdóttir, S., Mesfin, K. G., Alfredsson, H. A., Aradóttir, E. S., B. Sigfusson, Gunnarsson, I., Stute, M., Matter, J. M., Arnarson, M. Th., Galeczka, I. M., Gudbrandsson, S., Stockman, G., Wolff-Boenisch, D., Stefansson, A., Ragnheidardóttir, E., Flaathen, T., Gysia, A. P., Olssen, J., Didriksen, K., Stippe, S., Menez B., Oelkers, E.H. (2014). Rapid solubility and mineral storage of CO₂ in basalt. *Energy Procedia* **63**:4561–4573.
- Godec, M., Koperna, G., Gale, J. (2014). CO₂-ECBM: a review of its status and global potential. *Energy Procedia* **63**:5858–5869.
- Gor, G. Y., Prévost, J. H. (2013). Effect of CO₂ injection temperature on caprock stability. *Energy Procedia* **37**:3727–3732.

Gouze, P., Luquot, L. (2011). X-ray microtomography characterization of porosity, permeability and reactive surface changes during dissolution. *Journal of Contaminant Hydrology*, **120–121**:45–55.

Guimarães, L. J. N. (2002). *Análisis multi-componente no isoterma em medio poroso deformable no saturado*. PhD Thesis – Universitat Politècnica de Catalunya.

Harvey, A. H. (1996). Semiempirical correlation for Henry's Constants over large temperature ranges. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, **42**(5):1491-1494.

Heidug, W. K., Wong, S.-W. (1996). Hydration swelling of water-absorbing rocks: a constitutive model. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **20**:403–430.

Herzog, H. J., Drake E. M., Adams, E. E. *CO₂ capture, reuse, and storage technologies for mitigating global climate change*. Final Report, DOE n° DE-AF22-96PC01257, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge.

Heyberger, A., Mercier, A. (2005). *CO₂ capture and geological storage*. Geoscience Issues.

Hitchon, B. (1996). *Aquifer disposal of carbon dioxide: Hydrodynamic and mineral trapping – proof of concept*. Geoscience Publishing.

Hou, M. Z., Gou, Y., Rutqvist, J. (2010). *Integration of the codes FLAC3D and TOUGHREACT for THMC coupled geo-process simulations in reservoirs*. 72nd EAGE Conference & Exhibition incorporating SPE EUROPEC 2010.

IEA (1997). Technical responses to climate change. International Energy Agency.

IEA (2007). IEA Greenhouse Gas R&D Programme (IEA GHG), “Environmental assessment for CO₂ capture and storage”.

Iglesias, R. S., Ketzer, J. M., Melo, C. L., Heeman, R., Machado, C. (2014). Carbon capture and geological storage in Brazil: an overview. *Greenhouse Gas Science and Technology*, **5**:119–130.

Incropera, F. P., Dewitt, D. P., Bergman, T. L., Lavine, A. S. (2007). *Fundamentals of heat and mass transfer*. John Wiley & Sons, England.

Inoue, N., Albuquerque, R. A. C., Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L., Fontoura, S. A. B. (2014). *Model building and computational processing applied to reservoir geomechanics*. VI Brazilian Symposium of Rock Mechanics – SBMR 2014 – Rock Mechanics for Natural Resources and Infrastructure. Goiânia.

Inoue, N., Fontoura, S. A. B. (2011). *Finite element method on GPU*. XXXII CILAMCE, Minas Gerais.

Inoue, N., Fontoura, S. A. B., Albuquerque, R. A. C., Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L. (2015). *Speeding up a Finite Element Computation on GPU*. GPU Technology Conference – GTC 2015. Silicon Valley, San Jose, California, USA.

Inoue, N., Fontoura, S. A. B., Righetto, G. L., Lautenschläger, C. E. R., Ribeiro, E. J. B, Souza, A. L. S. (2011). *Assessment of the geomechanical effects in a real reservoir*. 45th ARMA Symposium, California.

Inoue, N., Fontoura, S. A. B., Righetto, G. L., Lautenschläger, C. E. R., Ribeiro, E. J. B, Souza, A. L. S., Meurer, G. B. (2011). *Assessment of different numerical methodologies applied to reservoir geomechanics*. XXXII CILAMCE. Minas Gerais.

Inoue, N., Fontoura, S. A. B., Righetto, G. L., Lautenschläger, C. E. R., Albuquerque, R. A. C., Meurer, G. B., Souza, A. L. S. (2014). *Reservoir geomechanics workflow*. ARMS8 – 8th Asian Rock Mechanics Symposium. Sapporo.

Inoue, N.; Fontoura, S. A. B. (2009). *Answers to some questions about the coupling between fluid flow and rock deformation in oil reservoirs*. SPE/EAGE Reservoir Characterization and Simulation Conference.

Inoue, N.; Fontoura, S. A. B. (2009). *Explicit coupling between flow and geomechanical simulators*. Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering – COUPLED PROBLEMS, Italy.

IPCC (2005). *IPCC special report on Carbon dioxide capture and storage*. Intergovernmental Panel on Climate Change. Prepared by working Group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change, Cambridge University Press.

IPCC (2013). *Climate change 2013: The physical science basis*. Intergovernmental Panel on Climate Change. Prepared by working Group I of the Intergovernmental Panel on Climate Change.

Izgec, O., Demiral, B., Bertin, H., Akin, S. (2008). CO₂ injection into saline carbonate aquifer formations I: laboratory investigations. *Transport in Porous Media*, **72**:1–24

Jing, L. Tsang, C. F., Stephansson, O. (1995). DECOVALEX — An international co-operative research project on mathematical models of coupled THM processes for safety analysis of radioactive waste repositories. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics*, **32(5)**:389–398.

Ketzer, J. M., Machado, C. X., Rockett, G. C., Iglesias, R. S. (organisers). (2014). *Brazilian Atlas of CO₂ Geological Storage*. EDIPUCRS, Porto Alegre.

Kharaka, Y. K., Gunter, W. D., Aggarwal, P. K., Perkins, E., DeBRAal, J. D. (1989). *SOLMINEQ 88: a computer program for geochemical modeling of water-rock reactions*. United States Geological Survey Water-Resources Investigations Report 88-4227.

Kolditz, O., Bauer, S., Bilke, L., Böttcher, N., Delfs, J. O., Fischer, T., Görke, U. J., Kalbacher, T., Kosakowski, G., McDermott, C. I., Park, C. H., Radu, F., Rink, K., Shao, H., Shao, H. B., Sun, F., Sun, Y. Y., Singh, A. K., Taron, J., Walther, M., Wang, W., Watanabe, N., Wu, Y., Xie, M., Xu, W., Zehner, B. (2012). OpenGeoSys: an open-source initiative for numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THM/C) processes in porous media. *Energy Conversion and Management*, **36(6–9)**:509–512.

Kolditz, O., Bauer, S., Beyer, C., Böttcher, N., Dietrich, P., T., Görke, U. J., Kalbacher, T., Park, C. H., Sauer, U., Schütze, C., F., Shao, H., Singh, A. K., Taron, J., Wang, W., Watanabe, N. (2012). A systematic benchmarking approach for geologic CO₂ injection and storage. *Environmental Earth Sciences*, **67**:613–632.

Korbol, R. & Kaddour, A. (1995). Sleipner vest CO₂ disposal – injection of removed CO₂ into the Utsira formation. *Energy Conversion and Management*, **36(6–9)**:509–512.

Lanru, J., Xiating, F. (2003). Numerical modeling for coupled thermo-hydro-mechanical and chemical processes (THMC) of geological media — International and Chinese experiences. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, **22(10)**:1704–1715.

Lautenschläger, C. E. R. (2014). *Efeitos do desenvolvimento de reservatórios sobre a integridade de poços de petróleo: uma análise parcialmente acoplada e multi-escala*. Rio de Janeiro: Tese de Doutorado – PUC-Rio.

Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L., Albuquerque, R. A. C., Inoue, N., Fontoura, S. A. B. (2014). *Effects of reservoir development on the well casing behavior*. EUROCK 2014 – The 2014 ISRM International Symposium in Rock Mechanics and Rock Engineering: Structures on and in rock masses.

Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L., Inoue, N., Fontoura, S. A. B. (2011). *Avaliação numérica do comportamento geomecânico de reservatórios considerando acoplamento hidromecânico*. 6° PDPETRO.

Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L., Inoue, N., Fontoura, S. A. B. *Advances on partial coupling in reservoir simulation: a new scheme of hydromechanical coupling*. 2013 North Africa Technical Conference & Exhibition. 2013.

Lautenschläger, C. E. R., Righetto, G. L., Inoue, N., Fontoura, S. A. B. (2013). *Influence of fluid-mechanical coupling in gas generation in undersaturated petroleum reservoirs*. V Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering – COUPLED PROBLEMS.

Lewis, R. W. & Schrefler, B. A. (1998). *The finite element method in the static and dynamic deformation and consolidation in porous media*. John Wiley & Sons – 2° ed.

Lewis, R. W., Majorana, C. E., Schrefler, B. A. (1986). A coupled finite element model for the consolidation of nonisothermal elastoplastic porous media. *Transport in porous media*, **1**:155–178.

Lewis, R. W., Nithiarasu, P., Seetharamu, K. N. (2004). *Fundamentals of the finite element method for heat and fluid flow*. John Wiley & Sons, England.

Lewis, R. W., Roberts, P. J., Schrefler, B. A. (1989). Finite element modeling of two-phase heat and fluid flow in deforming porous media. *Transport in porous media*, **4**:319–334.

Lewis, R. W., Schrefler, B. A. (2000). *The finite element method in the static and dynamic deformation and consolidation of porous media*. 2^a ed. London, England. John Wiley & Sons.

Lewis, R. W., Sukirman, Y. (1993). Finite element modelling for simulating the surface subsidence above a compacting hydrocarbon reservoir. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **18**:619–639.

Lewis, R. W., Sukirman, Y. (1993). Finite element modelling of three-phase flow in deforming saturated oil reservoirs. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **17**:577–598.

Li, Y., Nghiem, L. (1986). Phase equilibria of oil, gas and water/brine mixtures from a cubic equation of state and Henry's law. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, **June**:486-496

Lima, V. (2010). *Armazenamento geológico de CO₂ em aquíferos salinos: reatividade química em selos e rochas reservatório da bacia do Paraná*. Tese de Doutorado em Engenharia e Tecnologia de Materiais, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul.

Lindeberg, E., Bergmo, P. (2003). *The long-term fate of CO₂ injected into an aquifer*. 6th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies I – II: 489-494

Loret, B., Hueckel, T., Gajo, A. (2003). Chemo-mechanical coupling in saturated porous media: elastic–plastic behaviour of homoionic expansive clays. *International Journal of Solids and Structures*, **39**:2773–2806.

Luquot, L., Gouze, P. (2009). Experimental determination of porosity and permeability changes induced by massive injection of CO₂ into carbonate reservoirs. *Chemical Geology*, **265**:148–159

Lynch, T., Fisher, Q., Angus, D. A., Lorinczi, P. (2013). Investigating stress path hysteresis in a CO₂ injection scenario using coupled geomechanical-fluid flow modelling. *Energia Procedia*, **31**:3833–3841.

Machado, C. X., Ketzer, J. M., Rockett, G. C., Centeno, C. I. (2010). *Brazilian atlas on CO₂ capture, transport and geological storage: developing methodology*. Rio Oil & Gas Expo and Conference, Rio de Janeiro.

Machado, C. X., Rockett, G. C., Ketzer, J. M. (2013). Brazilian renewable carbon capture and geological storage map: Possibilities for the Paraná Basin. *Energy Procedia*, **37**:6105–6111.

Marçon, D. R. (2009). *Modelagem numérica da injeção de CO₂ em aquíferos salinos: investigação dos parâmetros relevantes para otimizar o armazenamento em projetos de CCS – Carbon Capture and Storage*. Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Brasil.

Marini, L. (2007). *Geological Sequestration of Carbon Dioxide: Thermodynamics, Kinetics and Reaction Path Modeling*. (Developments in Geochemistry 11). Elsevier, New York.

Mateo, J. (2014). Comunicação pessoal em 14/05/2014.

Mathieson, A. S. (2013). *In Salah CO₂ storage project: monitoring experience*. Apresentação disponível em <https://www.spe-uk.org/aberdeen/knowledgefiles/In%20Salah%20Gas%20CO2%20Project%20Overview%20SPE%20June%202013pdf.pdf>.

Mathieson, A. S., Midgley, J., Wright, I. W., Saoula, N., Ringrose, P. S. (2011). In Salah CO₂ Storage JIP: CO₂ sequestration monitoring and verification technologies applied at Krechba, Algeria. *Energy Procedia* **4**:3596–3603.

Matter, J. M., Broecker, W. S., Stute, M., Gislason, S. R., Oelkers, E. H., Stefánsson, A., Wolff-Boenisch, D., Gunnlaugsson, E., Axelsson, G., Björnsson, G. (2009). Permanent Carbon Dioxide Storage into Basalt: The CarbFix Pilot Project, Iceland. *Energy Procedia* **1**: 3641–3646.

Matter, J. M., Broecker, W. S., Gislason, S. R., D., Gunnlaugsson, E. H., Stute, M., Sigurdardóttir, H., Stefánsson, A., Alfreðsson, H. A., Aradóttir, E. S. P., Axelsson, G., Sigfússon, B., Wolff-Boenisch, E. (2011). The CarbFix Pilot Project – Storing Carbon Dioxide in Basalt. *Energy Procedia* **4**: 5579–5585.

Matter, J. M., Stute, M., Snæbjörnsdóttir, S. Ó., Oelkers, E. H., Gislason, S. R., Aradóttir, E. S. P., Sigfússon, B., Gunnarsson, I., Sigurdardóttir, H., Gunnlaugsson, E., Axelsson, G., Alfreðsson, H. A., Wolff-Boenisch, D., Mesfin, K., Taya, D. F. R., Hall, J., Dideriksen, K., Broecker, W. S. (2016). Rapid carbon mineralization for permanent disposal of anthropogenic carbon dioxide emissions. *Science* **352**(6291): 1312–1314.

McNab, W. W., Carroll, S. A. (2011). Wellbore integrity at the Krechba carbon storage site, In Salah, Algeria: 2. Reactive transport modeling of geochemical interactions near the cement–formation interface. *Energy Procedia* **4**:5195–5202.

Mehl, A. (2009). *Estudo do equilíbrio de fases de hidrocarbonetos e CO₂ supercrítico*. Tese de Doutorado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.

Melo, L. M. P. (2012). *Análise numérico-experimental de rochas carbonáticas sintéticas submetidas à injeção de um fluido reativo*. Dissertação de Mestrado em Engenharia Civil, Universidade Federal de Pernambuco, Brasil.

Nghiem, L. X., Aziz, K., Li, Y. K. (1983). A robust iterative method for flash calculations using the Soave-Redlich-Kwong or Peng-Robinson equation of state. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 521-530.

Nghiem, L. X., Li, Y. K. (1984). Computation of multiphase equilibrium phenomena with an equation of state. *Fluid Phase Equilibria*, **17**:77-95.

Nghiem, L., Sammon, P., Grabenstetter, J. and Ohkuma, H. (2004). *Modeling CO₂ storage in aquifers with a fully-coupled geochemical EOS compositional simulator*. In Proceedings XIV Symposium on Improved Oil Recovery.

Nghiem, L., Shrivastava, V., Kohse, B. (2011). *Modeling aqueous phase behavior and chemical reactions in compositional simulation*. SPE Reservoir Simulation Symposium, Estados Unidos da América.

Nguyen, M. T., Bemer, J., Dormieux, L. (2011). *Micromechanical modeling of carbonate geomechanical properties evolution during acid gas injection*. 45th U.S. Mechanics/Geomechanics Symposium, San Francisco.

Nguyen, B. A., Hou, Z., Bacon, D., Murray, C. J., White, M. D. (2016). Three-dimensional modeling of the reactive transport of CO₂ and its impact on

geomechanical properties of reservoir rocks and seals. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, **46**:100–115.

Nield, D. A. & Bejan, A. (2006). *Convection in porous media*. 3rd ed., Springer.

Olivella, S. (1995). *Nonisothermal multiphase flow of brine and gas through saline media*. Ph.D. Thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, Espanha.

Olivella, S. P., Carrera, A., Gens, A., Alonso, E. E. (1994). Nonisothermal multiphase flow of brine and gas through saline media. *Transport in porous media*, **15**:271–293.

Olivella, S. P., Gens, A., Carrera, A., Alonso, E. E. (1995). Numerical formulation for a simulator (CODE_BRIGTH) for the coupled analysis of saline media. *Engineering Computations*, **13**:87–112.

Omuna, T., Ohkawa, S. (2009). Detection of surface deformation related with CO₂ injection by DInSAR at In Salah, Algeria. *Energy Procedia*, **1**:2177–2184.

Pao, W. K. S., Lewis, R. W., Masters, I. (2001). A fully coupled hydro-thermo-poro-mechanical model for black oil reservoir simulation. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **25**:1229–1256.

Peaceman, D. W. (1977). *Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*, Elsevier Scientific Publishing Company.

Pham, V. T. H., Riis, F., Gjeldvik, I. T., Halland, E. K., Tappel, I. M., Aagaard, P. (2013). Assessment of CO₂ injection into the south Utsira-Skade aquifer, the North Sea, Norway. *Energy* **55**:529–540.

Preisig, M., Prévost, J. H. (2011). Coupled multi-phase thermo-poromechanical effects. Case study: CO₂ injection at In Salah, Algeria. *International Journal of Greenhouse Gas Control* **5**:1055–1064.

Prévost, J. H. (1981). Consolidation of an elastic porous media. *Journal of Engineering Mechanics Division – ASME*, **EM1**: 169-186.

PTRC. (2015). *Weyburn-Midale project*. Petroleum Technology Research Center. Acessado em 16/06/2015.

Qajar, J., François, N., Arns, C. (2012). *Micro-tomographic characterization of dissolution-induced local porosity changes including fines migration in carbonate rock*. SPE EOR Conference at Oil and GasWest Asia, 117–134.

Righetto, G. L. (2012). *Simulação hidromecânica de reativação de falhas em reservatórios de petróleo: abordagens por interações de contato e plasticidade*. Rio de Janeiro: Dissertação de Mestrado – PUC-Rio.

Righetto, G. L., Lautenschläger, C. E. R., Albuquerque, R. A. C., Inoue, N., Fontoura, S. A. B. (2014). *A smart way to build geomechanical models and analyze casing collapse during the petroleum field development*. 48th U.S. Rock Mechanics / Geomechanics Symposium.

Righetto, G. L., Lautenschläger, C. E. R., Inoue, N., Fontoura, S. A. B. (2013). *Analysis of the hydromechanical behavior of fault zones in petroleum reservoirs*. EUROCK 2013 – The 2013 ISRM International Symposium: Rock Mechanics for Resources, Energy, and Environment.

Righetto, G. L., Lautenschläger, C. E. R., Inoue, N., fontoura, S. A. B. (2013). *Application of partial hydromechanical coupling methodology in a fault reactivation analysis*. International Workshop on Geomechanics and Energy – The Ground as Energy Source and Storage.

Rinaldi, A. P., Rutqvist, J. (2013). Modeling of deep fracture zone opening and transient ground surface uplift at KB-502 CO₂ injection well, In Salah, Algeria. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 12:155–167.

Ringrose, P. S., Atbi, M., Mason, D., Espinassous, Myhrer, Ø., Iding, M., Mathieson, A., Wright, I. (2009). Plume development around well KB-502 at the In Salah CO₂ storage site. *EAGE First Break – CO₂ Sequestration* 27:85–89.

Ringrose, P. S., Mathieson, A. S., Wright, I. W., Selama, F., Hansen, O., Bissell, R. C., Saoula, N., Midgley, J. (2013). The In Salah CO₂ storage project: lessons learned and knowledge transfer. *Energy Procedia* 37: 6226–6236.

Roberts, P. J., Lewis, R. W., Carradori, G., Peano, A. (1987). An extension of the thermodynamic reservoir domain of a geothermal reservoir simulator. *Transport in porous media*, 2:397–420 (technical note).

Rockett, G. C., Machado, C. X., Ketzer J. M., Centeno C. I. (2011). The CARBMAP project: Matching CO₂ sources and geological sinks in Brazil using geographic information system. *Energy Procedia*, **4**:2764–2771.

Román, M. (2011). Carbon capture and storage in developing countries: A comparison of Brazil, South Africa and India. *Global Environmental Change*, **21**:391-401.

Rosa, A. J., Carvalho, R. S., Xavier, J. A. D. (2006). *Engenharia de Reservatórios de Petróleo*. Interciência, Brasil.

Roshan, H., Rahman, S. S. (2011). A fully coupled chemo-poroelastic analysis of pore pressure and stress distribution around a wellbore in water active rocks. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, **44**:199–210.

Rueda, J. C., Noreña, N. V., Oliveira, M. F. F., Roehl, D. (2014). Numerical models for detection of fault reactivation in oil and gas fields. *ARMA 2014 – 48th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*, United States of America.

Rutqvist, J. (2011). Status of the TOUGH-FLAC simulator and recent applications related to coupled fluid flow and crustal deformations. *Computers & Geosciences*, **37**:739–750.

Rutqvist, J., Birkholzer, J. T., Cappa, F., Tsang, C. F. (2007). Estimating maximum sustainable injection pressure during geological sequestration of CO₂ using coupled fluid flow and geomechanical fault slip analysis. *Energy Conversion and Management*, **48**:1798–1807.

Rutqvist, J., Birkholzer, J. T., Tsang, C. F. (2008). Coupled reservoir geomechanical analysis of the potential for tensile and shear failure associated with CO₂ injection in multilayered reservoir-caprock systems. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, **45**:132–143.

Rutqvist, J., Cappa, F., Rinaldi, A., Godano, M. (2014). Modeling of induced seismicity and ground vibrations associated with geologic CO₂ storage, and assessing their effects on surface structures and human perception. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, **24**:64–77.

Rutqvist, J., Liu, H. H., Vasco, D. W., Pan, L., Kappler, K., Majer, E. (2011). Coupled non-isothermal, multiphase fluid flow, and geomechanical modeling of

ground surface deformations and potential for induced micro-seismicity at the In Salah CO₂ storage operation. *Energy Procedia* **4**:3542–3549.

Rutqvist, J., Vasco, D. W., Myer, L. (2010). Coupled reservoir-geomechanical analysis of CO₂ injection and ground deformations at In Salah, Algeria. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, **4**:225–230.

Rutqvist, J., Wu, Y. S., Tsang, C. F., Bodvarsson, G. (2002). A modeling approach for analysis of coupled multiphase fluid flow, heat transfer and deformation in fractured porous rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, **39**: 429–442.

Samier, P.; Onaisi, A.; Fontaine, G. (2003). *Coupled analysis of geomechanics and fluid flow in reservoir simulation*. In: SPE Reservoir Simulation Symposium, Texas.

Sandler, S. I. (1989). *Chemical and Engineering Thermodynamics*. John Wiley & Sons, 2nd ed., New York.

Santos, A. M. S. (1992). *Modelos numéricos de transferência de calor e de massa com aplicação à secagem*. Tese de Doutorado – Universidade do Porto.

Shaughnessy, E. J., Katz, I. M., Schaffer, J. P. (2005). *Introduction to fluid mechanics*. Oxford University Press, United States of America.

Schiozer, D. J. (1989). Estudo de um modelo composicional para simulação de reservatórios. Dissertação de Mestrado em Engenharia de Petróleo, Universidade Estadual de Campinas, Brasil.

Schrefler, B. A. (1984). *The finite element method in soil consolidation (with applications to surface subsidence)*. PhD Thesis – University College of Swansea.

Settari A.; Walters, D. (2001). *Advances in coupled geomechanical and reservoir modeling with applications to reservoir compaction*. In: SPE Reservoir Simulation Symposium, Texas.

Silva, J. N. C. (2011). *Estudo do equilíbrio de fases de hidrocarbonetos, água e dióxido de carbono*. Dissertação de Mestrado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.

- Solórzano-Zavala, M., Barragán-Aroche, F., Bazúa, E. R. (1996). Comparative study of mixing rules for cubic equations of state in the prediction of multicomponent vapor-liquid equilibria. *Fluid Phase Equilibria*, **122**:99-116.
- Steeffel, C. I., DePaolo, D. J., Lichtner, P. C. (2005). Reactive transport modeling: an essential tool and a new research approach for the Earth sciences. *Earth and Planetary Science Letters*, **240**(3-4):539-558.
- Streit, J. E. & Hillis, R. R. (2004). Estimating fault stability and sustainable fluid pressures for underground storage of CO₂ in porous rock. *Energy*, **29**:1445–1456.
- Tao, Q., Ghassemi, A., Diek, A. (2005). *A chemo-poro-thermoelastic model for stress/pore pressure analysis around a wellbore in shale*. Alaska Rocks 2005 – 40th U.S. Symposium on Rock Mechanics: Rock Mechanics for Energy, Mineral and Infrastructure Development in Northern Regions, USA.
- Tarek, A. (2010). *Reservoir engineering handbook*. Elsevier, 4th ed.
- Torp, T. A. & Brown, K. R. (2004). *CO₂ underground storage cost as experienced at Sleipner and Weyburn*. 7th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, Canada.
- Torp, T.A. & Gale, J. (2002). Demonstrating storage of CO₂ in geologic reservoirs: The Sleipner and SACS projects. *Energy*, **29**:1361-1369.
- Tran, D.; Nghiem, L.; Buchanan, L. (2009). *Aspect of coupling between petroleum reservoir flow and geomechanics*. In: 43rd US Rock Mechanics Symposium, 2009, North Carolina.
- Tran, D.; Settari, A.; Nghiem, L. (2002). *New iterative coupling between a reservoir simulator and a geomechanics module*. In: SPE/ISRM Rock Mechanics Conference, Texas.
- Trémosa, J., Castillo, C., Vong, C. Q., Kervévan, C., Lassin, A., Audigane, P. (2014). Long-term assessment of geochemical reactivity of CO₂ storage in highly saline aquifers: application to Ketzin, In Salah and Snøhvit storage sites. *International Journal of Greenhouse Gas Control* **20**:2–26.
- Tsang, C. F. (1987). *Coupled processes associated with nuclear waste repositories*. Academic Press, New York.

Verdon, J. P., Kendall, J. M., Stork, A. L., Chadwick, A., White, D. J., Bissell, R. C. (2013). Comparison of geomechanical deformation induced by megatonne-scale CO₂ storage at Sleipner, Weyburn, and In Salah. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **110**(30):E2762–E2771.

Vilarrasa, V. (2012). *Thermo-hydro-mechanical impacts of carbon dioxide (CO₂) injection in deep saline aquifers*. Ph.D. Thesis, Technical University of Catalonia, Spain.

Vilarrasa, V., Bolster, D., Dentz, M., Olivella, S., Carrera, J. (2010a). Effects of CO₂ compressibility on CO₂ storage in deep saline aquifers. *Transport in Porous Media*, **85**:619–639.

Vilarrasa, V., Bolster, D., Olivella, S., Carrera, J. (2010b). Coupled hydromechanical modeling of CO₂ sequestration in deep saline aquifers. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, **4**:910–919.

Vilarrasa, V., Carrera, J. (2015). Geologic carbon storage is unlikely to trigger large earthquakes and reactivate faults through which CO₂ could leak. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, PNAS **112**(19):5938–5943.

Vilarrasa, V., Olivella, S., Carrera, J. (2011). Geomechanical stability of the caprock during CO₂ sequestration in deep saline aquifers. *Energy Procedia*, **4**:5306–5313.

Vilarrasa, V., Olivella, S., Carrera, J., Rutqvist, J. (2014). Long term impacts of cold CO₂ injection on the caprock integrity. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, **24**:1–13.

Vilarrasa, V., Rutqvist, J., Rinaldi, A. P. (2015). Thermal and capillary effects on the caprock mechanical stability at In Salah, Algeria. *Greenhouse Gas Science and Technology* **5**:449–461.

Vilarrasa, V., Silva, O., Carrera, J., Olivella, S. (2013). Liquid CO₂ injection for geological storage in deep saline aquifers. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, **14**:84–96.

Walas, S. M. (1988). *Phase Equilibria in Chemical Engineering*. Butterworth Publishers.

Wang, H. F. (2000). *Theory of linear poroelasticity, with applications to geomechanics and hydrogeology*. New Jersey, USA. Princeton University Press

Watanabe, N. (2011). *Finite element method for coupled thermo-hydro-mechanical processes in a discretely fractured and non-fractured porous media*. Dr.-Ing. Thesis – Technische Universität Dresden.

White, J. A., Chiamonte, L., Ezzedine, S., Foxall, Hao, Y., Ramirez, A., McNab, W. (2014). Geomechanical behavior of the reservoir and caprock system at the In Salah CO₂ storage project. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **24**(111):8747–8752.

Wilson, G. (1968). *A modified Redlich-Kwong equation of state, application to general physical data calculations*. American Institute of Chemical Engineers National Meeting, United States of America.

Wojtacki, K., Lewandowska, J., Gouze, P., Lipkowski, A. Numerical computations of rock dissolution and geomechanical effects for CO₂ geological storage. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **39**:482–506.

Xie, S. Y., Shao J. F., Xu W. Y. (2011). Influence of chemical degradation on mechanical behaviour of a limestone. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, **48**:741–747.

Xu, T., Preuss, K. (1998). *Coupled modeling of non-isothermal multi-phase flow, solute transport and reactive chemistry in porous and fractured media: 1. model development and validation*. Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, Berkeley (LBNL-42050).

Yamamoto, S., Miyoshi, S., Sato, S., Suzuki, K. (2013). Study on geomechanical stability of the aquifer-caprock system during CO₂ sequestration by coupled hydro-mechanical modelling. *Energy Procedia*, **37**:3989–3996.

Yaquetto, N. P. R. (2011). *Avaliação de esquemas de acoplamento na simulação de reservatórios de petróleo*. Rio de Janeiro: Dissertação de Mestrado – PUC-Rio.

Zhou, X., Ghassemi, A. (2009). Finite element analysis of coupled chemo-poro-thermo-mechanical effects around a wellbore in swelling shale. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, **46**:769–778.

Zhou, Y. (1998). *Thermo-hydro-mechanical models for saturated and unsaturated porous media*. Ph.D Thesis – University of Manitoba.

Zienkiewicz, O. C., Chan, A. H. C. (1984). Coupled problems and their numerical solutions - Chapter 4. *Numerical Methods in Coupled Systems*, John Wiley and Sons, 139–176.

Zienkiewicz, O. C., Chan, A. H. C., Pastor, M., Schrefler, B. A., Shiomi, T. (1999). *Computational geomechanics with special reference to earthquake engineering*. John Wiley & Sons–1° ed.

Zienkiewicz, O. C., Shiomi, T. (1984). Dynamic behavior of saturated porous media: The generalized Biot formulation and its numerical solution. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **8**:71–96.

Zimmerman, R. W. (2000). Coupling in poroelasticity and thermoelasticity. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, **37**:79–87.

Apêndice A

Simulação de fluxo composicional

Em um modelo de fluxo composicional, diversos componentes de hidrocarbonetos podem ser utilizados para representar a composição dos fluidos presentes no reservatório. De maneira geral, um modelo composicional baseia-se em um balanço molar de cada um dos componentes que compõe o sistema de hidrocarbonetos (SCHIOZER, 1989). As equações apresentadas a seguir se referem a um processo isotérmico e que não existe transferência de massa entre as fases água e hidrocarbonetos (vapor e líquido). Devido à transferência de massa entre as fases, a conservação de massa na fase não é garantida, portanto as equações devem ser escritas em termos de conservação total de componente, conforme apresentado a seguir. Para a fase de hidrocarbonetos, podemos escrever que:

$$\nabla \cdot (\rho_o x_m \mathbf{v}_o + \rho_g y_m \mathbf{v}_g) + q_m = \frac{\partial}{\partial t} [\phi z_m (\rho_o S_o + \rho_g S_g)] \quad (\text{A.1})$$

onde x_m é a fração molar do componente m na fase líquida, y_m é a fração molar do componente m na fase gasosa e z_m é a fração molar do componente m . A Equação (A.1) é válida para $m = 1, 2, \dots, n_c$ sendo n_c o número de componentes presentes no hidrocarboneto.

Adicionalmente ao conjunto de equações (n_c) gerado a partir da Equação (A.1), são necessárias relações auxiliares de forma a descrever completamente o problema. Os dois conjuntos de equações auxiliares podem ser divididos em: restrições algébricas e equações de equilíbrio.

- **Restrições algébricas**

As restrições algébricas envolvem as definições de fração molar, saturação e pressão capilar de cada uma das fases. Portanto, as relações supracitadas estão apresentadas a seguir.

$$\sum_{m=1}^{n_c} x_m = \sum_{m=1}^{n_c} y_m = \sum_{m=1}^{n_c} z_m = 1 \quad (\text{A.2})$$

$$S_w + S_o + S_g = 1 \quad (\text{A.3})$$

$$p_{c_{ow}} = p_o - p_w \quad (\text{A.4})$$

$$p_{c_{go}} = p_g - p_o \quad (\text{A.5})$$

- **Equações de equilíbrio**

A transferência de massa entre as fases é caracterizada pela variação da distribuição da massa de cada componente nas fases líquida e vapor. Geralmente, estas duas fases são assumidas em estado de equilíbrio. Esta hipótese é razoável uma vez que a transferência de massa entre as fases ocorre muito mais rápido do que o fluxo de fluido no meio poroso. Conseqüentemente, a distribuição de cada componente de hidrocarboneto nas duas fases está sujeito à condição de equilíbrio termodinâmico, a qual é dada pela minimização da energia livre de Gibbs para um sistema composicional (CHEN *et al.*, 2006). Assim, a condição de equilíbrio termodinâmico entre as fases líquida (óleo) e vapor (gás) exige a igualdade de fugacidades para cada componente (m), logo:

$$f_{mo} = f_{mg} \quad (\text{A.6})$$

Além disso, temos as condições de equilíbrio relacionadas ao balanço de materiais das fases óleo e gás, ou seja,

$$z_m = Lx_m + Vy_m \quad (\text{A.7})$$

$$L = \frac{\rho_o S_o}{\rho_o S_o + \rho_g S_g} \quad (\text{A.8})$$

$$V = \frac{\rho_g S_g}{\rho_o S_o + \rho_g S_g} \quad (\text{A.9})$$

onde L é a fração molar do líquido e V é a fração molar do gás.

Deve ser ressaltado que algumas variáveis apresentadas no equacionamento do problema de fluxo composicional, Equação (A.2), devem ser calculadas a

partir das equações de equilíbrio líquido–vapor. De maneira geral, utiliza-se o método *flash* para cálculo do equilíbrio das frações molares dos componentes e das fases. Este método será sucintamente apresentado no próximo item.

Em relação às equações apresentadas, pode ser observado que o número de equações que devem ser resolvidas é dependente do número de componentes presentes na fase hidrocarboneto. De forma ainda mais geral, Peaceman (1977) descreve um sistema de equações que envolvem não somente a distribuição dos componentes entre as fases gás e óleo, mas também que um componente (como o CO₂) possa ser dissolvido na fase água. Assim, são necessárias $3n_c + 15$ equações para determinar todas as variáveis do problema que rege o fluxo multifásico multicomponente em meios porosos.

- **Cálculo *flash***

Cálculos *flash* são parcelas fundamentais em simulações de reservatórios quando objetiva-se determinar quantidades (em mols) de hidrocarbonetos coexistindo nas fases líquido e gás (TAREK, 2010). Considerando um sistema de hidrocarbonetos a uma temperatura e pressão específicas, os cálculos *flash* podem determinar:

- a) mols da fase gás;
- b) mols da fase líquida;
- c) composição da fase líquida;
- d) composição da fase gás.

Assim, o cálculo *flash* é um método iterativo que estima a constante de equilíbrio (K_m) e as frações molares de um sistema através do conhecimento das composições totais (z_m) bem como da temperatura e pressão.

A constante de equilíbrio, para um sistema multicomponente, é definida como a relação entre as frações molares do componente na fase líquida (x_m) e vapor (y_m). A determinação de K_m pode ser realizada através de diferentes correlações, as quais visam prever o comportamento de uma solução real. Diversas correlações em diversos níveis de complexidade são apresentadas em Tarek (2010) e podem ser consultadas com maior detalhe.

De maneira global, os simuladores composicionais como o GEM, fazem uso das chamadas equações de estado (EOS) para a determinação do comportamento real de fluidos considerando grandes faixas de variação de pressão e temperatura.

Aspectos gerais a respeito das equações de estado podem ser encontrados no Apêndice B. O objetivo deste item é relacioná-las com a solução do problema de fluxo composicional apresentado anteriormente.

Conforme mencionado, parte do número de expressões necessárias para tornar o sistema de equações determinado está relacionada ao equilíbrio líquido-vapor. Retomando o conceito de fugacidade (f), ou seja, potencial de transferência do componente entre as fases, temos a seguinte igualdade no equilíbrio termodinâmico:

$$f_{mL} = f_{mV} \quad (\text{A.10})$$

onde f_{mL} e f_{mV} são as fugacidades do componente m nas fases líquida e vapor respectivamente. Além da fugacidade, por conveniência, utiliza-se também o coeficiente de fugacidade (ϕ), dado pela seguinte equação (SANDLER, 1989):

$$\phi = \frac{f}{P} \quad (\text{A.11})$$

Considerando uma mistura de m componentes, a relação pode ser estendida usando as frações molares do líquido (x_m) e do vapor (y_m):

$$\phi_{mL} = \frac{f_{mL}}{P \cdot x_m} \quad (\text{A.12})$$

$$\phi_{mV} = \frac{f_{mV}}{P \cdot y_m} \quad (\text{A.13})$$

onde f é a fugacidade e P é a pressão. Assim como a fugacidade de cada componente m deve ser igual para ambas as fases, isto é, no equilíbrio termodinâmico a transferência de massa entre as fases é nula, logo podemos afirmar, a partir da Equação (A.10), que:

$$\phi_{mL} = \phi_{mV} \quad (\text{A.14})$$

A partir das Equações (A.10), (A.12) e (A.13), temos:

$$\phi_{mL} \cdot P \cdot x_m = \phi_{mV} \cdot P \cdot y_m \quad (\text{A.15})$$

Logo,

$$\phi_{mL} \cdot x_m = \phi_{mV} \cdot y_m \quad (\text{A.16})$$

De posse da relação apresentada na Equação (A.16), podemos definir a constante de equilíbrio líquido-vapor (K_m), conforme segue:

$$K_m = \frac{y_m}{x_m} = \frac{\phi_{mL}}{\phi_{mV}} \quad (\text{A.17})$$

A obtenção do equilíbrio termodinâmico líquido-vapor está condicionada à determinação das fugacidades dos componentes em cada fase. Portanto, após a apresentação dos conceitos fundamentais, é possível estabelecer os passos envolvidos no cálculo *flash*. O procedimento apresentado a seguir foi desenvolvido por Nghiem *et al.* (1983). Através da combinação da definição de constante de equilíbrio, Equação (A.17), e das Equações (A.12) e (A.5), temos:

$$x_m = \frac{z_m}{1 + V(K_m - 1)} \quad (\text{A.18})$$

e

$$y_m = \frac{z_m K_m}{1 + V(K_m - 1)} \quad (\text{A.19})$$

A partir da Equação (A.2) podemos escrever que:

$$g(V) = \sum_{m=1}^{n_c} y_m - \sum_{m=1}^{n_c} x_m = 0 \quad (\text{A.20})$$

Considerando as Equações (A.18) – (A.20) temos:

$$g(V) = \sum_{m=1}^{n_c} \frac{z_m(K_m - 1)}{1 + V(K_m - 1)} = 0 \quad (\text{A.21})$$

Se F_m é a relação entre as fugacidades, logo:

$$F_m = \frac{f_{mL}}{f_{mV}} \quad (\text{A.22})$$

No equilíbrio é válida a relação apresentada na Equação (A.10), portanto:

$$F_m - 1 = 0 \quad (\text{A.23})$$

A Equação (A.23) pode ser escrita de outra maneira, conforme segue.

$$K_m = \frac{\phi_{mL}}{\phi_{mV}} = \frac{\left(\frac{f_{mL}}{P \cdot x_m}\right)}{\left(\frac{f_{mV}}{P \cdot y_m}\right)} = F_m \frac{y_m}{x_m} \quad (\text{A.24})$$

Uma vez que os valores de K_m são obtidos, V pode ser obtido através da Equação (A.21) e as frações molares (x_m e y_m) são determinadas a partir das equações (A.18) e (A.19), respectivamente.

O processo para a determinação de K_m é iterativo, sendo assim se faz necessária uma estimativa inicial. Segundo Nghiem *et al.* (1983), Shiozer (1989) um valor inicial pode ser atribuído através da relação empírica proposta por Wilson (1968), conforme segue:

$$K_m = \frac{1}{P_{rm}} e \left[5.373(1 + w_m) \left(1 - \frac{1}{T_{rm}} \right) \right] \quad (\text{A.25})$$

onde P_{rm} e T_{rm} são as pressão e temperatura reduzida do componente, respectivamente e w_m é o fator acêntrico do componente m .

Assim, o novo valor de K_m é obtido através da relação entre os coeficientes de fugacidades calculados dependentemente da equação de estado escolhida. Schiozer (1989) explicita o coeficiente de fugacidade para as equações de estado de Peng-Robinson (PR) e Soave-Redlich-Kwong (SRK), respectivamente, conforme apresentado a seguir. Todas as variáveis envolvidas estão descritas no Apêndice B, no item relacionado às equações de estado.

$$\ln \phi_m = \frac{b_m}{b} (Z - 1) - \ln(Z - B) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left[\frac{2 \sum_i x_i a_{mi}}{a} - \frac{b_m}{b} \right] \ln \left[\frac{Z + (\sqrt{2} + 1)B}{Z - (\sqrt{2} - 1)B} \right] \quad (\text{A.26})$$

$$\ln \phi_m = \frac{b_m}{b} (Z - 1) - \ln(Z - B) - \frac{A}{B} \left[\frac{2 \sum_i x_i a_{mi}}{b} - \frac{b_m}{b} \right] \ln \left(1 + \frac{B}{Z} \right) \quad (\text{A.27})$$

A convergência do cálculo *flash* está condicionada a satisfazer o seguinte critério:

$$\sum_{m=1}^{n_c} (F_m - 1)^2 < \varepsilon \quad (\text{A.28})$$

onde ε é a tolerância estabelecida.

O fluxograma para a determinação do equilíbrio líquido-vapor através de equação de estado está apresentado na Figura A.1. Uma vez que o equilíbrio é atingido, as massas específicas e viscosidades de cada uma das fases podem ser determinadas.

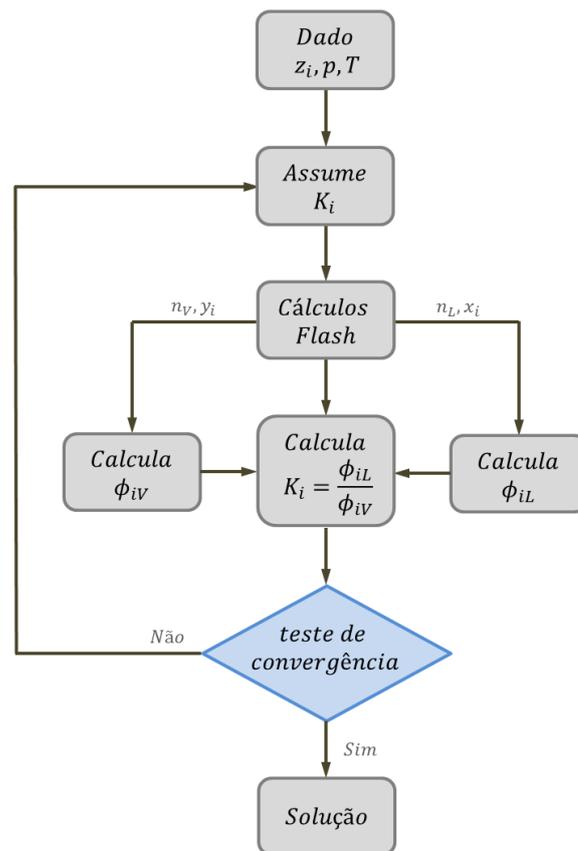


Figura A.1. Fluxograma para a determinação constante de equilíbrio por equação de estado (adaptado de TAREK, 2010)

Além da situação de equilíbrio na fase hidrocarboneto, Tarek (2010) apresenta as equações relacionadas ao equilíbrio líquido-vapor para um sistema trifásico, isto é, sistema composto por água-hidrocarboneto. Tais equações não serão apresentadas neste texto, uma vez que o objetivo é fornecer uma visão geral a respeito do tema.

Apêndice B

Considerações sobre a termodinâmica química

A termodinâmica é o estudo das mudanças no estado ou condição de substâncias devido a mudanças na sua energia interna (SANDLER, 1989). Aliando este conceito à química, é possível estabelecer os princípios fundamentais para a compreensão dos processos pelos quais misturas podem ser separadas ou reagir entre si (FERNANDES *et al.*, 2006).

De forma geral, a energia de um processo pode se manifestar de diferentes formas, como por exemplo, energia cinética, potencial e interna. A energia cinética diz respeito à mobilidade das moléculas do sistema. A energia potencial se refere à posição do sistema em relação a um campo de forças (geralmente o gravitacional). Já a energia interna se refere aos movimentos e forças intermoleculares dos constituintes do sistema.

Em relação ao escoamento de fluidos em meios porosos, um conceito relacionado à primeira lei da termodinâmica tem caráter fundamental, isto é, o balanço de energia. No balanço de massa, como o próprio nome sugere, a massa de um sistema não pode ser perdida nem criada. Embora possam existir reações químicas que transformam reagentes em produtos, a massa total do sistema é uma quantidade conservativa. As equações de conservação de massa empregadas em análises de reservatórios foram discutidas no Capítulo 3.

- **Comportamento de substâncias**

Inicialmente serão apresentados alguns conceitos sobre a determinação de propriedades de substâncias puras para posteriormente estendê-los para o caso de misturas.

Segundo Fernandes *et al.* (2006) as propriedades de substâncias puras relacionam-se entre si através de equações denominadas equações de estado (EOS). A equação de estado mais simples é conhecida como Lei dos Gases Ideais e se aplica aos gases que não apresentam interações moleculares significativas (baixas pressões e temperaturas). A relação entre as propriedades pode ser determinada a partir da seguinte equação de estado (SANDLER, 1989):

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad (\text{B.1})$$

onde P é a pressão, V é o volume molar, n é o número de moles, R é a constante universal dos gases e T é a temperatura.

A Figura B.1 apresenta o comportamento de uma substância pura em um digrama pressão-volume (PV). As linhas contínuas do diagrama delimitam regiões nas quais diferentes fases coexistem em equilíbrio (sólido/líquido, líquido/vapor e sólido/vapor) a uma dada temperatura e pressão. O ponto 'c', proveniente da isoterma crítica, indica o ponto crítico (máxima pressão e temperatura) onde uma substância pura pode existir em equilíbrio líquido/vapor.

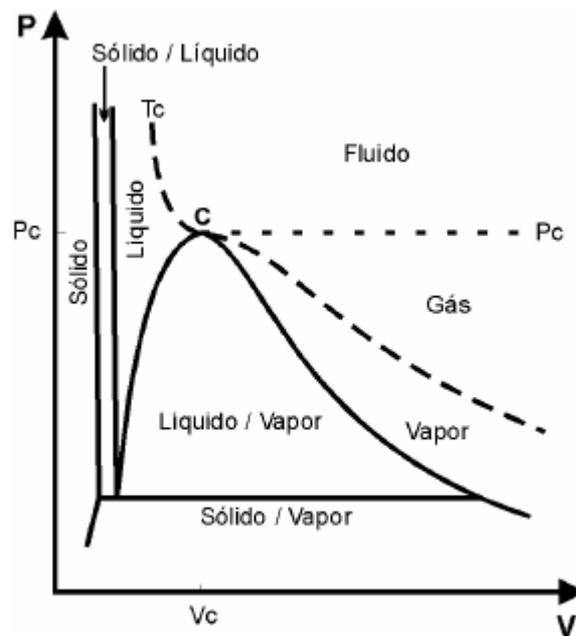


Figura B.1. Diagrama PV para uma substância pura (Fernandes *et al.*, 2006)

Além da isoterma crítica (T_c), podem ser estabelecidas outras isotermas, tanto abaixo quanto acima desta, conforme pode ser observado na Figura B.2. A Figura B.2(a) apresenta a isoterma $T > T_c$ onde pode ser observado que não existe mudança de fase da substância, uma vez que ela permanece na fase vapor. Por outro lado, quando $T < T_c$ estas isotermas apresentam três regiões distintas. Para pressões elevadas, a declividade da curva PV é bastante acentuada caracterizando o estado líquido do fluido. Assim que a curva encontra a região de equilíbrio líquido/vapor (domo) é dito que a fase líquida está saturada. O ponto salientado em laranja corresponde à pressão de saturação, isto é, o valor de pressão de mudança da fase líquida para a fase vapor. Todos os pontos entre os pontos

laranja e azul correspondem a todas as combinações possíveis de mistura líquido/vapor, desde 100% líquido (ponto laranja) até 100% vapor (ponto azul).

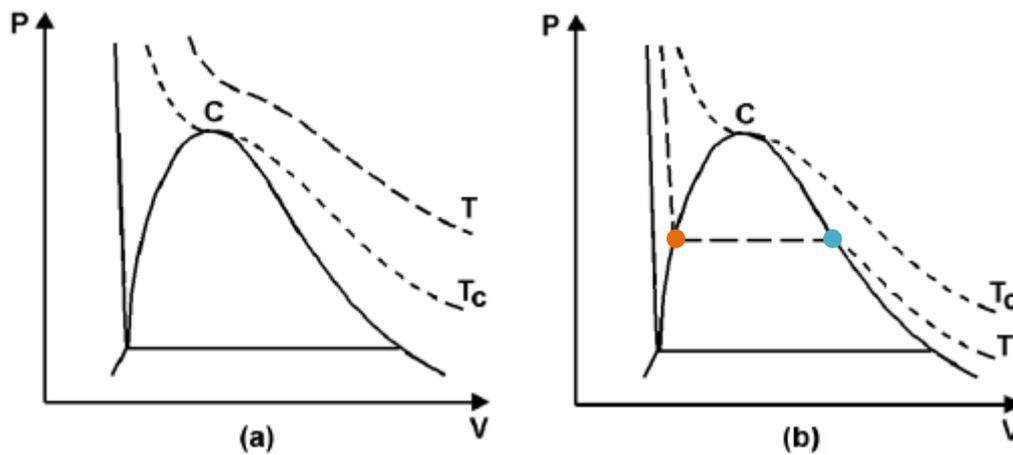


Figura B.2. Isothermas para: (a) $T > T_c$ e (b) $T < T_c$ (Fernandes *et al.*, 2006)

A seguir serão apresentadas as equações de estado que objetivam determinar as propriedades de fluidos levando em consideração dados de PVT (pressão/volume/temperatura).

- **Equações de estado cúbicas**

De maneira sucinta, serão apresentadas as equações de estado mais usadas no âmbito da Engenharia de Petróleo. Uma discussão mais detalhada a respeito pode ser encontrada em Sandler (1989).

Conforme já discutido no item anterior, a Equação (B.1) pode ser aplicada somente para gases ideais. Assim, tornou-se necessário desenvolver equações de estado que levassem em consideração sistemas com condições distantes das condições ideais, como elevadas pressões e temperaturas, uma vez que as interações moleculares passam a ter efeito considerável.

Uma das primeiras equações de estado volumétricas que apresentou resultados satisfatórios para o comportamento PVT das fases vapor e líquido foi proposta por van der Waals (1873) (SANDLER, 1989):

$$P = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a}{V^2} \quad (\text{B.2})$$

onde P é a pressão, V é o volume molar, R é a constante universal dos gases, T é a temperatura, a e b são constantes que podem ser determinadas a partir de dados de ponto crítico da substância em questão.

Apesar da importância do trabalho desenvolvido por van der Waals, a Equação (B.2) não fornece resultados precisos na previsão de transição entre líquido e vapor (SANDLER, 1989). Assim, novas equações de estado foram desenvolvidas com o intuito de melhorar tais estimativas, como por exemplo, Redlich-Kwong (1949), Soave-Redlich-Kwong (1972) e Peng-Robinson (1976). Cabe ressaltar que para as equações de estado apresentadas, T_c , P_c e ω se referem a temperatura crítica, pressão crítica e fator acêntrico, respectivamente.

Redlich-Kwong (1949)

$$P = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a}{\sqrt{T} \cdot V(V + b)} \quad (\text{B.3})$$

onde:

$$a = 0.42748 \cdot \frac{R^2 \cdot T_c^{2.5}}{P_c} \quad (\text{B.4})$$

$$b = 0.08664 \cdot \frac{R \cdot T_c}{P_c} \quad (\text{B.5})$$

Soave-Redlich-Kwong (1972)

$$P = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b)} \quad (\text{B.6})$$

onde:

$$b = 0.08664 \cdot \frac{R \cdot T_c}{P_c} \quad (\text{B.7})$$

$$a(T) = a(T_c) \alpha(T_c, \omega) \quad (\text{B.8})$$

$$a(T_c) = 0.42747 \cdot \frac{R^2 \cdot T_c^2}{P_c} \quad (\text{B.9})$$

$$\alpha(T_c, \omega) = \left[1 + m \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad (\text{B.10})$$

$$m = 0.37464 + 1.54226 \cdot \omega - 0.26992 \cdot \omega^2 \quad (\text{B.11})$$

Peng-Robinson (1976)

$$P = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b)} \quad (\text{B.12})$$

onde:

$$b = 0.07780 \cdot \frac{R \cdot T_c}{P_c} \quad (\text{B.13})$$

$$a(T) = a(T_c) \alpha(T_c, \omega) \quad (\text{B.14})$$

$$a(T_c) = 0.45724 \cdot \frac{R^2 \cdot T_c^2}{P_c} \quad (\text{B.15})$$

$$\alpha(T_c, \omega) = \left[1 + m \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad (\text{B.16})$$

$$m = 0.37464 + 1.54226 \cdot \omega - 0.26992 \cdot \omega^2 \quad (\text{B.17})$$

De forma resumida, podemos escrever as três equações de estado apresentadas anteriormente utilizando o conceito de fator de compressibilidade (z).

$$z = \frac{P \cdot V}{R \cdot T} \quad (\text{B.18})$$

$$RK (1949) \quad z^3 - z^2 + (A - B - B^2)z - AB = 0 \quad (\text{B.19})$$

$$SRK (1972) \quad z^3 - z^2 + (A - B - B^2)z - AB = 0 \quad (\text{B.20})$$

$$PR (1976) \quad z^3 - (1 - B)z^2 + (A - 3B^2 - 2B)z - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad (\text{B.21})$$

Para a equação de *RK* (1949):

$$A = \frac{a \cdot P}{\sqrt{T} \cdot (R \cdot T)^2} \quad (\text{B.22})$$

$$B = \frac{b \cdot P}{R \cdot T} \quad (\text{B.23})$$

Para as equações de *SRK* (1972) e *PR* (1976):

$$A = \frac{a \cdot P}{(R \cdot T)^2} \quad (\text{B.24})$$

$$B = \frac{b \cdot P}{R \cdot T} \quad (\text{B.25})$$

As equações de estado de Redlich-Kwong (1949), Soave-Redlich-Kwong (1972) e Peng-Robinson (1976) representam de forma razoável o comportamento de hidrocarbonetos nas regiões de líquido e vapor e de algumas outras substâncias puras na região de vapor (SANDLER, 1989). De fato, as equações de *PR* (1976) e *SRK* (1972) fazem parte do pacote de modelagem *PVT* (*WinProp*) do grupo CMG (*Computer Modelling Group*).

As equações de estado cúbicas (B.19, B.20 e B.21), tanto em termos de fator de compressibilidade quanto de volume molar, podem apresentar uma ou três raízes quando resolvidas dependendo do número de fases. Segundo Nghiem *et al.* (1984), na região bifásica, o maior valor de raiz corresponde ao fator de compressibilidade do vapor, enquanto que o menor valor positivo corresponde ao fator de compressibilidade do líquido.

- **Regras de mistura**

As equações de estado apresentadas no item anterior se referem, a princípio, a substâncias puras. Sendo assim, é necessário introduzir parâmetros para que tais equações possam ser aplicadas para misturas, como é o caso encontrado nas simulações de engenharia de reservatórios. Segundo Solórzano-Zavala *et al.* (1996), as regras de mistura têm com objetivo tornar as equações de estados

capazes de determinar o comportamento de misturas e o prever o equilíbrio líquido-vapor (ELV).

Segundo Mehl (2009) as equações de estado podem ser adaptadas para uso em misturas, uma vez que visam levar em consideração efeitos como a diferença entre o tamanho, estrutura e polaridade entre as moléculas dos diversos compostos que constituem a mistura. Voltando para as equações de estado apresentadas anteriormente, quando o fluido é considerado como uma substância formada por uma mistura multicomposta, os parâmetros $a(T)$ e b se tornam dependentes da composição e da interação entre os componentes que formam a mistura.

Em linhas gerais, uma regra de mistura deve ter as seguintes características:

- a) simplicidade;
- b) poucos parâmetros;
- c) ser independente da divisão dos componentes
- d) prever satisfatoriamente ELV de misturas binárias e multicomponentes;
- e) prever satisfatoriamente ELV de misturas não polares e não ideais;
- f) prever satisfatoriamente propriedades como entalpia e entropia;
- g) prever satisfatoriamente ELL e ELLV.

Mesmo com a grande dificuldade em atender todas as características supracitadas, Solórzano-Zavala *et al.* (1996) afirmam que estas características devem ser buscadas de forma a expandir a aplicação das equações de estado cúbicas. Maiores detalhes a respeito do estudo comparativo detalhado entre diversas regras de mistura disponíveis na literatura aplicados a diversos sistemas podem ser encontrado no trabalho publicado pelos autores.

Embora existam diversas regras de mistura, a regra mais empregada é denominada regra de mistura clássica ou de van der Waals, cujas equações estão apresentadas a seguir (NGHIEM *et al.*, 1984):

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j a_{ij} \quad (\text{B.26})$$

$$b = \sum_i x_i b_i \quad (\text{B.27})$$

sendo que:

$$a_{ij} = (1 - k_{ij})\sqrt{a_i a_j} \quad (\text{B.28})$$

onde k_{ij} é o parâmetro de interação binária obtido a partir do ajuste de dados experimentais de pressão de bolha quando se considera uma mistura composta por hidrocarbonetos.

A determinação destes parâmetros para misturas de hidrocarbonetos e CO₂ e hidrocarbonetos, água e CO₂ podem ser encontradas nos trabalhos de Mehl (2009) e Silva (2011), respectivamente.

- **Equilíbrio de fases**

Os avanços nos métodos de recuperação avançada de hidrocarbonetos implicam na necessidade de métodos para a previsão satisfatória do equilíbrio de fases. Por muito tempo, o comportamento dos fluidos que compõe o reservatório foi considerado apenas função da pressão e da temperatura. No entanto, em reservatórios de gás condensado e óleo volátil, existe a necessidade de incorporação dos efeitos composicionais de forma a avaliar o equilíbrio de fases. Tais efeitos também são necessários em processos de recuperação avançada, como injeção de CO₂ (BAKER *et al.*, 1982).

Aliada as equações de estado, o equilíbrio de fases deve satisfazer três condições, descritas a seguir (BAKER *et al.*, 1982, WALAS, 1988, SANDLER, 1989). Considerando um sistema isotérmico e isobárico, primeiramente, o balanço de materiais deve ser preservado. Além disso, o potencial químico (μ) e a energia livre de Gibbs (G) para cada componente devem ser iguais em todas as fases. As equações que definem o potencial químico e a energia livre de Gibbs estão apresentadas nas Equações (B.29 e B.30) respectivamente.

$$\mu_i = \frac{\partial G}{\partial n_i} \quad (\text{B.29})$$

$$G = H - T \cdot S \quad (\text{B.30})$$

onde n_i é o número de mols do componente i , H é a entalpia, T é a temperatura e S é a entropia do sistema.

Considerando o equilíbrio termodinâmico líquido-vapor para um sistema com i componentes, o critério adotado corresponde à minimização da energia livre de Gibbs (potencial químico) conforme segue (SCHIOZER, 1989):

$$\mu_{iL} = \mu_{iV} \rightarrow \frac{\partial G}{\partial n_{iL}} = \frac{\partial G}{\partial n_{iV}} \quad (\text{B.31})$$

Sabendo que a soma dos números de mols do componente i nas fases líquida e vapor resulta no número de mols do componente i , pode ser mostrado que (SCHIOZER, 1989):

$$n_{iL} + n_{iV} = n_i \quad (\text{B.32})$$

$$\frac{\partial G}{\partial n_{iL}} = -\frac{\partial G}{\partial n_{iV}} = \bar{G}_{iL} - \bar{G}_{iV} \quad (\text{B.33})$$

onde \bar{G}_{iL} é a energia livre parcial molar de Gibbs do componente i na fase líquida e \bar{G}_{iV} é a energia livre parcial molar de Gibbs do componente i na fase vapor.

Como a energia livre de Gibbs ou mesmo o potencial químico são difíceis de serem calculados, normalmente faz-se uso de uma variável auxiliar denominada fugacidade (f) que é proporcional à energia livre de Gibbs (MARINI, 2007). Portanto, reescrevendo a Equação (B.31), temos:

$$f_{iL} = f_{iV} \quad (\text{B.34})$$

onde f_{iL} e f_{iV} são as fugacidades do componente i nas fases líquida e vapor respectivamente. Além da fugacidade, por conveniência, utiliza-se também o coeficiente de fugacidade (ϕ), dado pela seguinte equação (SANDLER, 1989):

$$\phi = \frac{f}{P} \quad (\text{B.35})$$

Considerando uma mistura de i componentes, a relação pode ser estendida usando as frações molares do líquido (x_i) e do vapor (y_i):

$$\phi_{iL} = \frac{f_{iL}}{P \cdot x_i} \quad (\text{B.36})$$

$$\phi_{iV} = \frac{f_{iV}}{P \cdot y_i} \quad (\text{B.37})$$

onde f é a fugacidade e P é a pressão. Assim como a fugacidade de cada componente i deve ser igual para ambas as fases, isto é, no equilíbrio termodinâmico a transferência de massa entre as fases é nula, logo podemos afirmar, a partir da Equação (B.34), que:

$$\phi_{iL} = \phi_{iV} \quad (\text{B.38})$$

Para o caso de misturas, o coeficiente de fugacidade de cada componente pode ser calculado a partir da Equação (B.39), (SANDLER, 1989).

$$\ln \phi_i = \ln \frac{f_i}{P x_i} = \int_{\infty}^V \left[\frac{RT}{V} - N \left(\frac{\partial P}{\partial N_i} \right) \right] dV - \ln Z \quad (\text{B.39})$$

A partir das Equações (B.34), (B.36) e (B.37), temos:

$$\phi_{iL} \cdot P \cdot x_i = \phi_{iV} \cdot P \cdot y_i \quad (\text{B.40})$$

Logo,

$$\phi_{iL} \cdot x_i = \phi_{iV} \cdot y_i \quad (\text{B.41})$$

De posse da relação apresentada na Equação (B.41), podemos definir a constante de equilíbrio líquido-vapor (K_m), conforme segue:

$$K_m = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\phi_{iL}}{\phi_{iV}} \quad (\text{B.42})$$

- **Equilíbrio de fases – lei de Henry**

A determinação do equilíbrio de fases para misturas compostas por hidrocarbonetos, água (ou água salgada) e gás apresenta um ingrediente extra em relação às misturas compostas por óleo de gás, apresentadas no item anterior. Segundo Li & Nghiem (1986), o cálculo do equilíbrio de fases entre misturas de óleo e gás pode ser realizada a partir de EOS cúbicas, no entanto, existe a necessidade de consideração da solubilidade do gás na fase aquosa, a qual pode ser feita a partir da lei de Henry. Assim, conforme afirmam Fernandes *et al.* (2006), a lei de Henry é a forma mais utilizada para efetuar o cálculo da fugacidade de gases ou sólidos em mistura com um líquido e apresenta boa precisão quando tais componentes dissolvidos na fase líquida estão em concentrações diluídas. As equações que definem a lei de Henry e a fugacidade de um componente da fase gás dissolvido na fase aquosa estão apresentadas, respectivamente, a seguir.

$$\ln H_i = \ln H_i^* + \frac{V_i(p - p^*)}{RT} \quad (\text{B.43})$$

$$f_{iw} = y_{iw} \cdot H_i \quad (\text{B.44})$$

onde H_i é a constante de Henry do componente i , H_i^* é constante de Henry para uma dada pressão de referência (p^*) para o componente i , V_i é o volume parcial molar do componente i , R é a constante universal dos gases, T é a temperatura, y_{iw} é a fração molar do componente i na fase aquosa e f_{iw} é a fugacidade do componente i na fase aquosa.

Os valores para a constante de Henry podem ser determinados a partir de dados experimentais de solubilidade (LI & NGHIEM, 1986) ou através de tabelas disponíveis na literatura, conforme apresentado por Harvey (1996). Os autores supracitados também desenvolveram uma metodologia para considerar o efeito da salinidade da água, analisando assim, não somente o equilíbrio termodinâmico da mistura água-óleo-gás, mas também o caso mais geral encontrado nos campos de petróleo, isto é, mistura água salgada-óleo-gás. Os detalhes a respeito da metodologia estão descritos no referido trabalho e não serão explicitados neste Apêndice. Vale ser ressaltado que os desenvolvimentos realizados por Li & Nghiem (1986) fazem parte do simulador de reservatórios que será empregado nas simulações composicionais, conforme abordado ao longo desta Tese.

- **Equilíbrio químico**

O equilíbrio químico tem caráter fundamental na termodinâmica uma vez que é um dos pilares do equilíbrio termodinâmico. A ocorrência do equilíbrio químico é evidenciada quando todas as reações químicas no sistema se completaram ou atingiram o ponto de equilíbrio dinâmico, de maneira que nenhuma mudança estequiométrica possa ser macroscopicamente mensurada.

De forma geral, uma equação química para um sistema fechado pode ser descrita de uma forma generalizada a partir da Equação (B.45) (DENBIGH, 1971).

$$\sum_i v_i M_i = 0 \quad (\text{B.45})$$

onde v_i é o coeficiente estequiométrico da reação química ($v_i < 0$ para reagentes e $v_i > 0$ para produtos) e M_i é o símbolo químico das espécies envolvidas na reação. Analogamente a Equação (B.45), a condição de equilíbrio químico para uma única reação, apresentada por Denbigh (1971), é obtida a partir da troca as espécies químicas envolvidas (M_i) pelo potencial químico (μ_i).

$$\sum_i v_i \mu_i = 0 \quad (\text{B.46})$$

Outra constante que merece destaque é a constante de equilíbrio da reação (K_P) que pode ser expressa de diversas formas, dentre elas para reações envolvendo gases, como:

$$K_P \equiv \prod_i p_i^{v_i} \quad (\text{B.47})$$

A discussão a respeito do equilíbrio químico apresentada aqui é apenas uma ideia geral e sucinta cujo objetivo é introduzir alguns conceitos importantes para os tópicos abordados no decorrer deste trabalho. Maiores formalidades sobre os princípios do equilíbrio químico podem ser encontrados em Denbigh (1971).

Apêndice C

Validação da metodologia termo-hidro-mecânica do ABAQUS

Toda a discussão relacionada à formulação do acoplamento termo-hidro-mecânica foi baseada nos trabalhos de Biot (1941), Schrefler (1984) e Lewis *et al.*, (1986), conforme foi amplamente discutido ao longo do Capítulo 3. De forma geral, a implementação das novas formulações e métodos de análise acoplada em problemas de geotecnia, notadamente os fenômenos hidro-mecânicos ou termo-hidro-mecânicos, convergem para um mesmo caso de validação, isto é, a reprodução do comportamento de uma coluna de adensamento (poroelástica ou termo-poroelástica).

Considerando os resultados expostos nos itens 4.1 e 4.2, onde foi empregado o programa de elementos finitos ABAQUS para validação das metodologias de acoplamento HM e THM interativos, faz-se necessária a validação prévia da própria formulação totalmente acoplada considerada no ABAQUS. É válido mencionar que as validações dos esquemas de acoplamento iterativo, apresentadas nos itens supracitados, não foram computadas via reprodução dos resultados da coluna de adensamento, uma vez que os problemas de geomecânica do petróleo são idealizados iniciando o processo de carregamento pela variação de pressão de poros (resposta à produção/injeção de fluidos) e não devido a um carregamento, como ocorre comumente na Engenharia Geotécnica.

Portanto, a seguir é apresentado o modelo bidimensional utilizado por Lewis *et al.* (1986), para a avaliação termo-hidro-mecânica. O Quadro C.1 apresenta as propriedades empregadas para a realização das análises. O modelo THM consiste de uma coluna de material poroso permeável, na qual é aplicado um carregamento externo de 1 Pa e uma temperatura inicial de 50 °C na superfície, conforme apresentado na Figura C.1. O ponto de avaliação das variáveis de interesse (nó 37 destacado em vermelho) está apresentado também na Figura C.1.

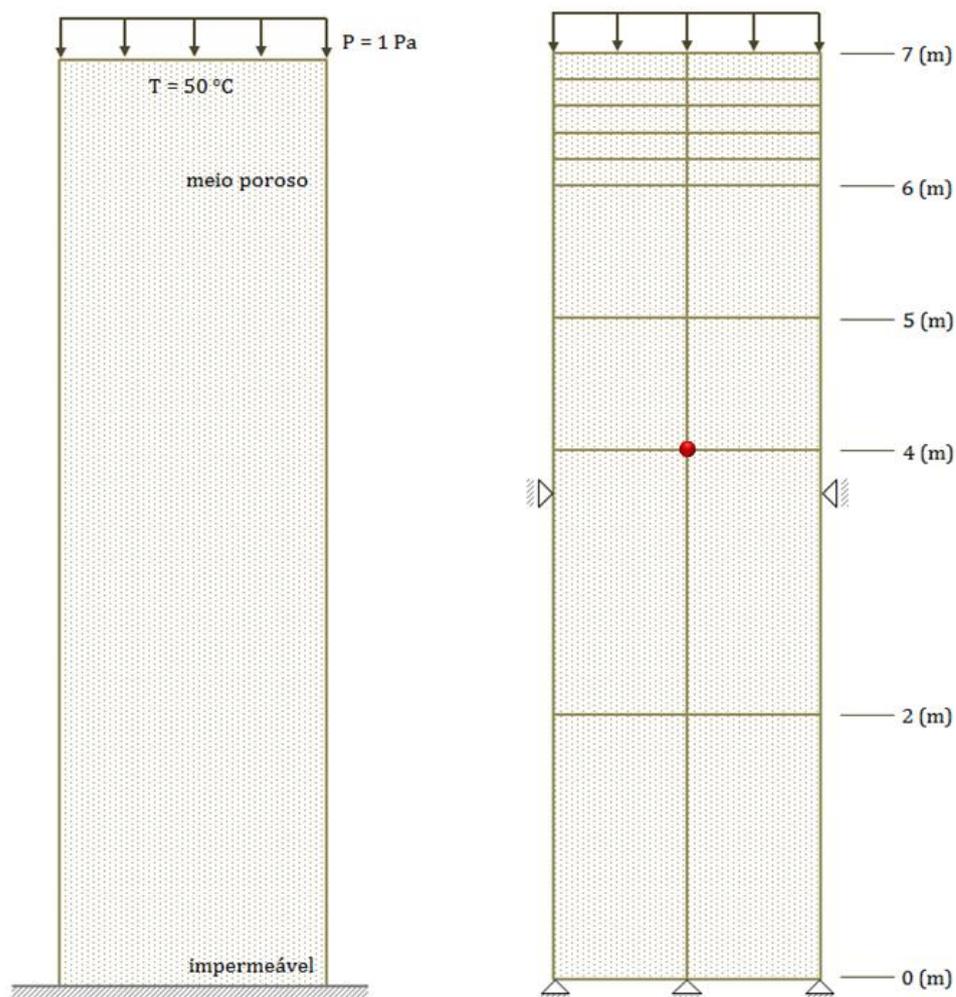


Figura C.1. Idealização e modelo numérica da coluna de adensamento termo-poroelástica empregada na avaliação da formulação do programa ABAQUS

Quadro C.1. Propriedades utilizadas na simulação da coluna de adensamento termo-poroelástica

Propriedades	Valores
	Sistema Internacional
Massa específica da água	1000 kg/m ³
Condutividade hidráulica	4.0x10 ⁻⁶ m/s
Porosidade	0.20
Módulo de Young do meio poroso	6.0x10 ³ Pa
Coefficiente de Poisson do meio poroso	0.40
Temperatura da superfície	50 °C
Coefficiente de expansão térmica do meio poroso	3.0x10 ⁻⁷ °C ⁻¹
Calor específico do meio poroso	40 J/kg °C
Condutividade térmica do meio poroso	0.20 W/m °C

A Figura C.2 apresenta o excesso de pressão de poros gerado pela combinação dos carregamentos (mecânico e térmico) para o ponto de avaliação estabelecido em função do tempo da análise (100000 segundos). Pode ser observado o bom ajuste entre a simulação totalmente acoplada obtido pelo ABAQUS e a formulação apresentada por Lewis *et al.* (1986), a qual serviu como lastro para os desenvolvimentos metodológicos desta tese.

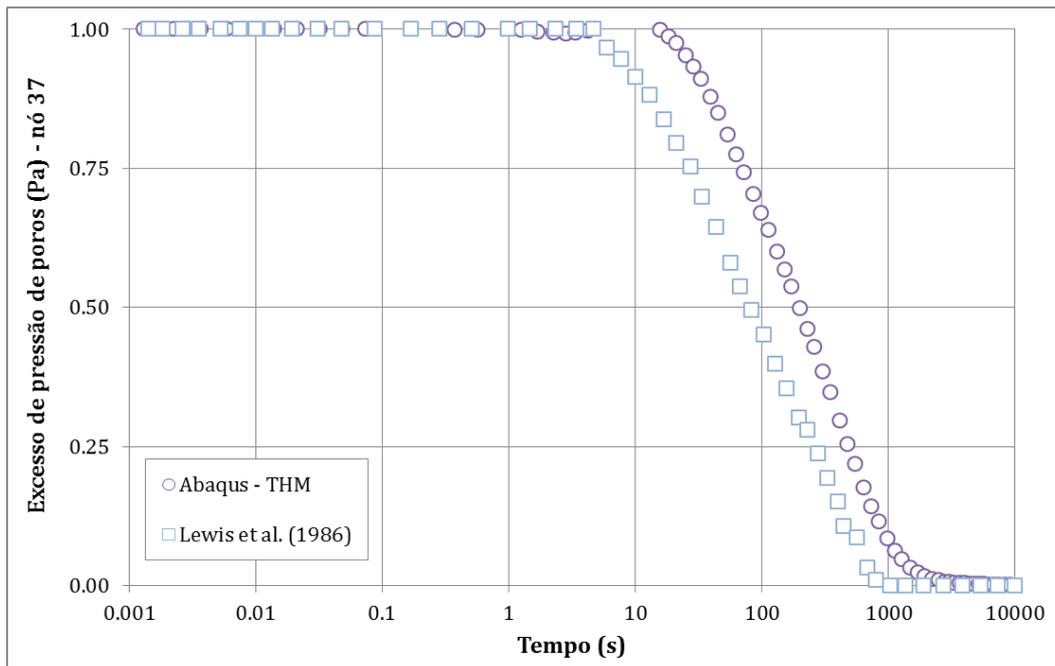


Figura C.2. Comparações entre as dissipações do excesso de pressões de poros considerando diferentes formulações termo-hidro-mecânicas

Adicionalmente, a Figura C.3 apresenta a variação temporal da temperatura no meio poroso, gerada pela condição de contorno térmica, para o ponto de avaliação estabelecido. Pode ser constatado, em concordância com o excesso de pressão de poros, um bom ajuste entre as diferentes simulações termo-hidro-mecânicas.

De maneira a completar a análise dos três fenômenos envolvidos, parte-se para a aferição dos deslocamentos na superfície da coluna frente aos carregamentos envolvidos. No caso particular dos deslocamentos verticais, foram plotadas as curvas para a coluna poroelástica (soluções obtidas pelo ABAQUS – HM e Noorishad & Tsang, 1996) em conjunto com os resultados obtidos via ABAQUS – THM e as formulações de Aboustit *et al.* (1982) e Lewis *et al.* (1986). As curvas estão apresentadas na Figura C.4.

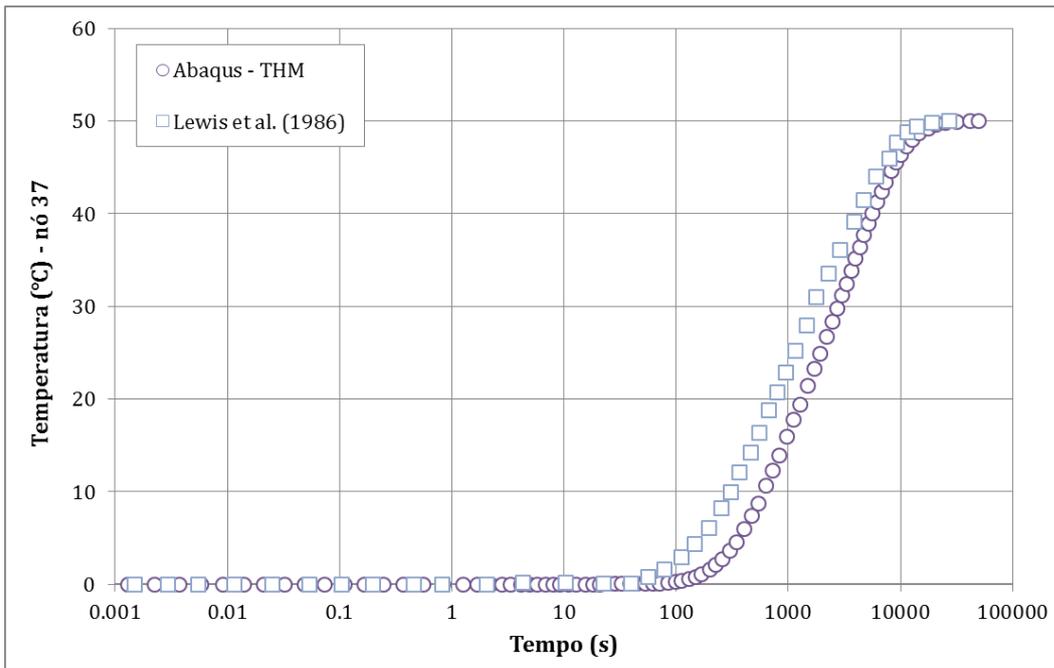


Figura C.3. Comparações entre as evoluções temporais da temperatura considerando diferentes formulações termo-hidro-mecânicas

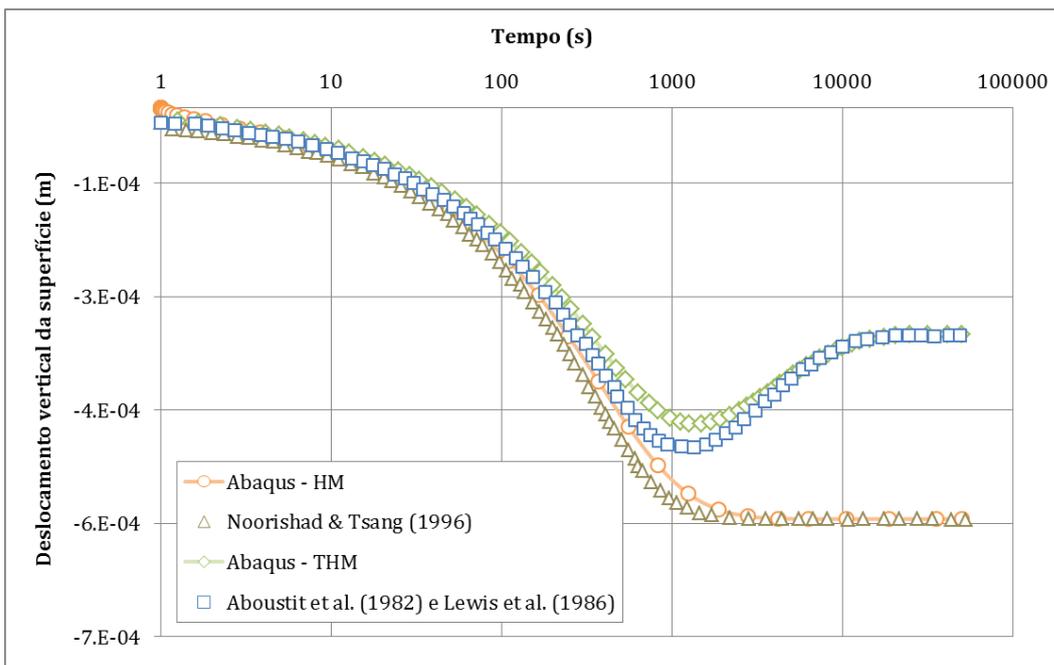


Figura C.4. Comparações entre os deslocamentos da superfície considerando diferentes formulações hidro-mecânicas e termo-hidro-mecânicas

Por meio das simulações apresentadas neste apêndice, pode ser concluído que a formulação implementada no programa ABAQUS representa satisfatoriamente os fenômenos de interesse, idealizados à luz dos desenvolvimentos apresentados por Schrefler (1984) e Lewis *et al.* (1986). Portanto, o emprego do ABAQUS para fins de validações metodológicas é considerado válido e consistente com os objetivos desta tese.