



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA  
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

PEDRO LUCAS SOARES PEREIRA

**APLICAÇÃO DE FERRAMENTAS DE CÓDIGO ABERTO PARA ANÁLISE DE  
IMAGENS DE MICROTOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA NO ESTUDO DE PE-  
TROFÍSICA DIGITAL**

Recife

2023



**CARACTERIZAÇÃO E SIMULAÇÃO DE RESERVATÓRIOS, ENERGIAS RENOVÁVEIS  
E BIOTECNOLOGIA AMBIENTAL**

Apoio



Gestão



PEDRO LUCAS SOARES PEREIRA

**APLICAÇÃO DE FERRAMENTAS DE CÓDIGO ABERTO PARA ANÁLISE DE  
IMAGENS DE MICROTOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA NO ESTUDO DE PE-  
TROFÍSICA DIGITAL**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do grau em Bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Ramiro Brito Willmersdorf

Recife

2023

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,  
através do programa de geração automática do SIB/UFPE

Pereira, Pedro Lucas Soares.

Aplicação de ferramentas de código aberto para análise de imagens de microtomografia computadorizada no estudo de petrofísica digital / Pedro Lucas Soares Pereira. - Recife, 2023.

65 p. : il., tab.

Orientador(a): Ramiro Brito Willmersdorf

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Tecnologia e Geociências, Engenharia Mecânica - Bacharelado, 2023.

Inclui referências, apêndices.

1. Petrofísica digital. 2. Simulação computacional. 3. Caracterização de rochas reservatório. I. Willmersdorf, Ramiro Brito. (Orientação). II. Título.

620 CDD (22.ed.)



Universidade Federal de Pernambuco  
Departamento de Engenharia Mecânica Centro de  
Tecnologia e Geociências- CTG/EEP



ATA DE SESSÃO DE DEFESA DE  
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO – TCC2

Ao 22.º dia do mês de setembro do ano de dois mil e vinte e três, às 14:00 horas, de forma virtual através da plataforma google meet, reuniu-se a banca examinadora para a sessão pública de defesa do Trabalho de Conclusão de Curso em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Pernambuco, intitulado Aplicação de ferramentas de código aberto para análise de imagens de microtomografia computadorizada no estudo de petrofísica digital, elaborado pelo aluno Pedro Lucas Soares Pereira, matrícula 20170016557, composta pelos avaliadores Prof. Ramiro Brito Willmersdorf (orientador), Prof. Fabio Santana Magnani (avaliador) e Prof. José Antônio Barbosa (avaliador). Após a exposição oral do trabalho, o candidato foi arguido pelos componentes da banca que em seguida reuniram-se e deliberaram pela sua **aprovação**, atribuindo-lhe a média **9,0**, julgando-o aprovação 9,0 apto ( x ) / inapto ( ) à conclusão do curso de Engenharia Mecânica. Para constar, redigi a X presente ata aprovada por todos os presentes, que vai assinada pelos membros da banca.

Orientador: Prof. Ramiro Brito Willmersdorf Nota: 9,0

Assinatura \_\_\_\_\_

Avaliador Interno: Prof. Fabio Santana Magnani Nota: 9,0

Assinatura \_\_\_\_\_

Avaliador Externo: Prof. José Antônio Barbosa Nota: 9,0

Assinatura \_\_\_\_\_

Recife, 22 de setembro de 2023.

Prof. Marcus Costa de Araújo  
Coordenador de Trabalho de Conclusão de curso - TCC  
Curso de Graduação em Engenharia Mecânica – CTG/EEP-UFPE

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus devo tudo que sou, e tudo que faço. Durante toda a graduação, e vida, é Ele quem me sustenta. Assim, primeiramente, gostaria de agradecer a Ele.

Agradeço a minha família, em especial a minha mãe Eliane, minha irmã Elynara e ao meu padrasto Sérgio por todo apoio e suporte durante essa fase da minha vida e por terem acreditado em mim, até quando nem eu mesmo acreditei. Apesar da distância entre Pernambuco e Alagoas, eu tinha certeza de que sempre poderia contar com vocês.

Aos meus amigos de curso, em especial à Anna Beatriz (Bia), por compartilhar momentos, não só no meio acadêmico como também no meio pessoal, desde o primeiro período e estar sempre a me motivar a ser o melhor como pessoa e profissional. Saiba que é totalmente recíproco.

Agradeço ao meu orientador Ramiro Willmersdorf por todo o apoio, disponibilidade e paciência ao longo desses 3 anos me acompanhando desde a iniciação científica ao trabalho de conclusão de curso (TCC). Admiro-o profissional e pessoalmente.

Por fim, gostaria de agradecer o suporte oferecido por toda a equipe do PRH 48.1, em especial Allan Albuquerque e professor Antonino. Programa pelo qual foi possível o desenvolvimento deste trabalho. Como também a Agência Nacional de Petróleo, Gás e Biocombustíveis como órgão de incentivo a pesquisa nesta área tão vasta.

## RESUMO

Conhecer as características petrofísicas das rochas, como porosidade e permeabilidade, representa um papel fundamental na previsão do fluxo de fluidos em meios porosos. É de grande interesse para empresas do setor petrolífero ter o planejamento para o desenvolvimento de novos campos de petróleo. Isso inclui a escolha da quantidade e localização dos poços de produção e injeção, a determinação das taxas ideais de injeção de fluidos e produção de líquidos, as datas de perfuração e ativação de poços de injeção e produção, e a programação para o descomissionamento do campo. A simulação computacional do fluxo em meios porosos é a principal ferramenta para prognosticar o desempenho de diversos sistemas naturais de grande relevância econômica, tais como reservatórios de petróleo e sistemas de energia geotérmica. A qualidade dos resultados da simulação do fluxo em meios porosos, assim como qualquer outro tipo de simulação, depende da qualidade da avaliação das propriedades físicas dos meios estudados. Para este projeto, as propriedades de interesse são a porosidade e permeabilidade das rochas do reservatório calculadas com uma abordagem computacional. Em primeiro lugar, foram criadas amostras sintéticas com geometrias simples, para treinamento com as técnicas de simulação e verificação das ferramentas, como o programa OpenFOAM, para mecânica dos fluidos computacional e ParaView, para visualização. Os resultados da simulação foram comparados com *benchmarks* da literatura. Após isso, foi usado o software PoreFOAM para calcular a permeabilidade absoluta de amostras de microtomografia de rochas reais, disponíveis na internet, com dimensões razoáveis que exigiam recursos computacionais relativamente baixos. Foi utilizada a medida estatística do Coeficiente de Variação (COV), como forma de analisar as variações entre os resultados obtidos no *script* do OpenFOAM (poreFOAM), com os dados de referência. Por fim foram realizadas simulações que necessitaram de alto custo computacional com amostras de rochas de dimensões maiores, para isso foi utilizado o Cluster computacional do grupo de pesquisa PADMEC. Foram realizados estudos para a verificação da adequação dos tamanhos das amostras como elementos representativos de volume. Verificou-se que problemas deste porte são extremamente caros computacionalmente. Verificou-se também que há uma grande variabilidade nos valores calculados pelo poreFOAM em relação aos valores reportados na literatura, demonstrando que este problema ainda merece investigação.

**Palavras-chave:** Petrofísica digital; Simulação computacional; Caracterização de rochas reservatório.

## ABSTRACT

The knowledge of the petrophysical characteristics of rocks, such as the porosity and permeability, plays a key role in predicting fluid flow in porous media. It is of great interest to companies in the oil sector for the development and operation of oil fields. This includes choosing the quantity and location of production and injection wells, determining optimal fluid injection and liquid production rates, drilling and activation dates of injection and production wells, and scheduling for field decommissioning. The computer simulation of flow in porous media is the main tool to predict the performance of several natural systems of great economic relevance, such as oil reservoirs and geothermal energy systems. The quality of the results of the flow simulation in porous media, as well as any other type of simulation, depends on the quality of the evaluation of the physical properties of the studied media. The main objective of this project was to implement open source tools for digital rock physics, the computation of these properties through direct flow simulation. Initially, microstructures with simple geometric shapes were simulated with OpenFOAM and visualized with ParaView, to verify the operation and to acquaint the user with these open source tools. After that, microtomography samples of rock structures, of reasonable dimensions that required lower computational resources were used to compute the absolute permeability with the poreFOAM open source tool. Finally, simulations were performed that required high computational cost with rock samples of larger dimensions, for this purpose the Computational Cluster of the PADMEC research group was used. An study on the appropriate size for the representative element volume was also done. There was a large variability on the comparison of the poreFOAM results and the published benchmark results, showing that the use of these tools requires additional study.

**Keywords:** Digital petrophysics; Computer simulation; Characterization of reservoir rocks.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Microtomografia computadorizada de uma amostra de afloramento Bentheimer, e seção transversal. Amostra com diâmetro de aproximadamente 5 mm e resolução da imagem de 6,7 micrômetros.....	8
Figura 2 –	Fluxo de trabalho para estabelecer as propriedades da rocha REV para a primeira classe de rochas não convencionais (arenito de gás e carbonatos).....	11
Figura 3 –	Os campos de fluxo calculados em: (a) uma amostra de areia; (b) arenito Bentheimer; e (c) calcário Portland.....	12
Figura 4 –	Interface gráfica Salome.....	14
Figura 5 –	Módulo <i>Geometry</i> Salome.....	15
Figura 6 –	Módulo <i>Mesh</i> Salome.....	16
Figura 7 –	Extração de subamostra no Tomviz: (a) Amostra 400x400x400, (b) Sub-amostra 100x100x100.....	17
Figura 8 –	Interface do Paraview.....	20
Figura 9 –	Conexão via terminal.....	23
Figura 10 –	Conexão paraview e cluster.....	24
Figura 11 –	Conexão bem-sucedida.....	24
Figura 12 –	Fluxograma da metodologia.....	25
Figura 13 –	Interface gráfica Salome 9.6.0 e Microestrutura Senoidal.....	27
Figura 14 –	Base e topo da Microestrutura.....	28
Figura 15 –	Paredes da Microestrutura.....	28
Figura 16 –	Parâmetros da microestrutura senoidal.....	29
Figura 17 –	Microestruturas reproduzidas: (a) seção transversal circular, (b) seção transversal quadrada, (c) seção transversal triangular, (d) seção transversal em hexagrama e (f) seção transversal variando senoidalmente.....	30
Figura 18 –	Microestrutura 200 micrômetros (valor característico): Campo de Pressões.....	31
Figura 19 –	Microestrutura 400 micrômetros (valor característico): Campo de Velocidades.....	32

Figura 20 – Microestrutura 200 micrômetros (valor característico): Campo de Pressões.....	32
Figura 21 – Amostra A1: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.	37
Figura 22 – Amostra Berea: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.....	37
Figura 23 – Amostra F42A: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.....	38
Figura 24 – Amostra LV60A: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.....	38
Figura 25 – Amostra S1: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades...	38
Figura 26 – Corte F42A: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.....	39
Figura 27 – Vetores de Fluxo S1: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.....	39
Figura 28 – S9: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.....	42
Figura 29 – Corte S9: (a) Campo de Velocidade, (b) Campo de Pressões.....	43
Figura 30 – LV60C: (a) Campo de Pressões, (b) Corte com Campo de Velocidades.....	43
Figura 31 – F42B: (a) Campo de Pressões, (b) Vetores com Campo de Velocidades.....	43
Figura 32 – S3: (a) Campo de Pressões, (b) Vetores com Campo de Pressões.....	44
Figura 33 – Bentheimer: (a) Amostra 100x100x100, (b) Amostra 200x200x200, (c) Amostra 300x300x300.....	45
Figura 34 – Extrair amostra: arquivo de entrada.....	53
Figura 35 – Extrair amostra: ferramenta de extração.....	54
Figura 36 – Extrair amostra: limites da amostra.....	54
Figura 37 – Extrair amostra: salvar arquivo.....	55

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Dados das microestruturas. Comprimento característico em micrometros.....	30
Tabela 2 –	Condições de contorno.....	31
Tabela 3 –	Resultados das permeabilidades computadas.....	33
Tabela 4 –	Propriedades das amostras selecionadas.....	35
Tabela 5 –	Propriedades das amostras como dados de saída do simulador. Permeabilidade em miliDarcy e Velocidade de Darcy em m/s.....	35
Tabela 6 –	Coeficiente de variação para a porosidade.....	36
Tabela 7 –	Coeficiente de variação para a permeabilidade.....	36
Tabela 8 –	Dados e propriedades das amostras. Permeabilidade em mili-darcy e Resolução em micrometros.....	39
Tabela 9 –	Dados das amostras no cluster. Permeabilidade em milidarcy, Velocidade de Darcy em metros por segundo e Tempo de Simulação em horas.....	40
Tabela 10 –	Coeficiente de variação para a porosidade.....	40
Tabela 11 –	Coeficiente de variação para a permeabilidade.....	41
Tabela 12 –	Porosidade para dimensões distintas da microestrutura.....	44

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO.....</b>	<b>4</b>
<b>1.1</b>	<b>Objetivos.....</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....</b>	<b>7</b>
<b>2.1</b>	<b>Propriedades de Amostras de Rochas.....</b>	<b>7</b>
<b>2.2</b>	<b>Cálculo da Permeabilidade.....</b>	<b>9</b>
<b>2.3</b>	<b>Modelagem de Estrutura de Poros.....</b>	<b>10</b>
<b>2.4</b>	<b>Métodos Numéricos: Escoamento em Meios Porosos.....</b>	<b>11</b>
<b>2.4.1</b>	<i>Ferramentas Computacionais.....</i>	<i>13</i>
<b>2.4.1.1</b>	<b>Software Salome 9.5.0.....</b>	<b>13</b>
2.4.1.1.1	Módulo <i>Geometry</i> .....	14
2.4.1.1.2	Módulo <i>Mesh</i> .....	15
<b>2.4.1.2</b>	<b>Software TomViz.....</b>	<b>16</b>
<b>2.4.1.3</b>	<b>PoreFOAM.....</b>	<b>17</b>
2.4.1.3.1	Arquivo de Entrada.....	17
2.4.1.3.2	Executando as Simulações.....	17
2.4.1.3.3	Resultados de Simulação e Visualização.....	18
2.4.1.3.4	Principais Solucionadores.....	19
2.4.1.3.4.1	<i>voxelToFoam (Par)</i> .....	19
2.4.1.3.4.2	<i>icoNSFoam</i> .....	19
2.4.1.3.4.3	<i>iPotentialFoam</i> .....	19
2.4.1.3.4.4	<i>calc_distributions</i> .....	19
2.4.1.3.4.5	<i>FOAM2Voxel</i> .....	20
<b>2.4.1.4</b>	<b>Paraview.....</b>	<b>20</b>
<b>2.4.1.5</b>	<b>Cluster Computacional.....</b>	<b>21</b>
2.4.1.5.1	SSH – Secure Shel.....	21
2.4.1.5.2	Gerenciador de Recursos – SLURM.....	22
2.4.1.5.3	Visualização Remota.....	22
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA.....</b>	<b>25</b>
<b>3.1</b>	<b>Fluxograma do Desenvolvimento.....</b>	<b>25</b>
3.1.1	<i>Instalação do Programa PoreFOAM</i> .....	25
3.1.2	<i>Execução dos Modelos de Imagem de Microtomografia</i> .....	25

3.1.3	<i>Conversão dos Dados de Benchmark.....</i>	26
3.1.4	<i>Estudo de Desempenho em Paralelo.....</i>	26
<b>4</b>	<b>RESULTADOS.....</b>	<b>26</b>
<b>4.1</b>	<b>Validação do Solucionador Numérico Através de Comparação com Dados de Benchmark.....</b>	<b>26</b>
4.1.1	<i>Modelagem das Amostras no Salome 9.6.0.....</i>	27
4.1.2	<i>Microestruturas Geométricas.....</i>	29
4.1.3	<i>Simulação Numérica.....</i>	30
<b>4.2</b>	<b>Simulação de Fluxo em Escala de Poros para Caracterizar Amostras de Rocha por Microtomografia.....</b>	<b>34</b>
4.2.1	<i>Visualização através do Paraview.....</i>	37
<b>4.3</b>	<b>Simulação no Cluster.....</b>	<b>39</b>
4.3.1	<i>Visualização no Paraview.....</i>	42
4.3.2	<i>Análise do Menor Volume Representativo.....</i>	44
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES.....</b>	<b>46</b>
	<b>REFERÊNCIAS.....</b>	<b>48</b>
	<b>APÊNDICES.....</b>	<b>53</b>

## 1 INTRODUÇÃO

O conhecimento das propriedades petrofísicas das rochas, como a porosidade e a permeabilidade, é um dos fatores mais importantes para a previsão do escoamento dos fluidos em meios porosos. A simulação computacional do escoamento em meios porosos é a principal ferramenta para previsão de desempenho de vários sistemas naturais de enorme importância econômica, como reservatórios de petróleo e sistemas de energia geotérmica (LYONS et al., 2016; ZHANG et al., 2004).

Em particular e de grande interesse para todas as operadoras da indústria do petróleo, todo o planejamento do desenvolvimento de novos campos de petróleo, por exemplo, a escolha da quantidade e localização dos poços produtores e injetores, a determinação das taxas ótimas de injeção de fluidos e produção de líquidos, as datas de perfuração e ativação de poços injetores e produtores e até mesmo a programação para abandono do campo são realizados atualmente com o auxílio da simulação computacional de reservatórios, baseada em modelos que dependem do conhecimento, entre muitos outros fatores, da porosidade e permeabilidade das rochas do reservatório.

A qualidade dos resultados da simulação do escoamento em meios porosos depende, como qualquer outro tipo de simulação, da qualidade da avaliação das propriedades físicas dos meios estudados. No contexto deste projeto, as propriedades de interesse são a porosidade e permeabilidade das rochas do reservatório. Há várias técnicas diferentes para a avaliação dessas propriedades, tanto experimentais (XING et al., 2015), quanto computacionais (KROTKIEWSKI et al., 2011), sendo que este projeto se dedica à implementação de técnicas computacionais apenas. Na área de petrografia digital, alguns autores dedicaram-se a elaborar e tornar disponíveis *benchmarks* para aferição da qualidade de métodos e implementações propostas (ANDRÄ et al., 2013; ANDRÄ et al., 2013; SAXENA et al., 2017).

Dentre as técnicas, os ensaios de microtomografia computacional são menos usuais, pois os microtomógrafos são equipamentos caros e sofisticados. No entanto, esta estratégia apresenta uma grande vantagem em relação à reconstrução a partir de imagens bidimensionais, pois os modelos gerados correspondem diretamente à rocha analisada, e não são apenas estatisticamente correlacionados, a partir de hipóteses sobre distribuições de tamanhos e conectividades de poros, como no caso

anterior. Dessa forma, quando possível, tal estratégia conduz a resultados que apresentam melhor concordância com os resultados experimentais baseados em medições de fluxo (MANDZHIEVA, 2017). Portanto, essa é a tecnologia preferida para a determinação da permeabilidade absoluta de amostras de rochas para uso em simulação computacional de reservatórios, quando disponível.

O objetivo principal deste trabalho é utilizar um conjunto de ferramentas para petrofísica digital, baseada em software de código aberto (*open source*), nos sistemas computacionais do grupo PADMEC. Visa a criação, obtenção, instalação e aquisição de *know-how* sobre a operação, de ferramentas computacionais para a determinação de propriedades das rochas como a porosidade e permeabilidade, através de simulação computacional, analisar o seu desempenho computacional e propor alternativas para que estas análises possam ser realizadas mais rapidamente.

Como principal resultado, é esperado obter um sistema integrado de software, que permita a estimativa de propriedades petrofísicas de rochas a partir de imagens tomográficas tridimensionais, instalado e operando no cluster de alto desempenho do grupo PADMEC, com desempenho computacional adequado que permite a obtenção de resultados em prazos compatíveis com a prática da engenharia de reservatórios.

## 1.1 Objetivos

O objetivo deste trabalho é disponibilizar ferramentas *open source* para petrofísica digital e examinar o seu desempenho, bem como sugerir modificações para aprimorá-las, com o intuito de tornar seu uso mais eficiente. Para tanto foram estabelecidos como objetivos específicos:

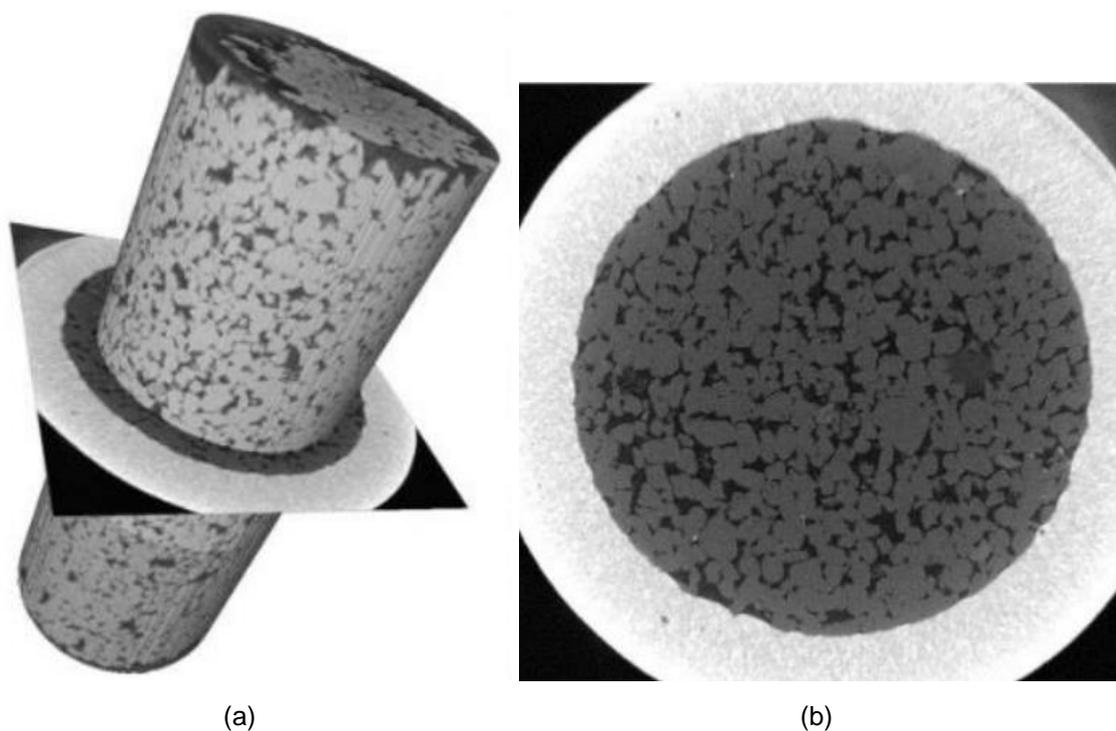
- a) Estudar aspectos da engenharia de petróleo e propriedades das rochas de reservatório;
- b) Utilizar ferramentas de visualização científicas;
- c) Calcular o escoamento em rochas porosas com a utilização de programas de simulação computacional;
- d) Utilizar base de dados públicas com imagens tomográficas;
- e) Executar simulações no cluster computacional do grupo PADMEC usando o sistema SLURM;
- f) Avaliar os resultados computacionais.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 Propriedades de Amostras de Rochas

A determinação de propriedades de rochas a partir de imagens, tanto bidimensionais quanto tridimensionais, não é algo recente. Todavia, torna-se cada vez mais viável e interessante devido ao aumento exponencial da capacidade computacional disponível. Uma revisão bibliográfica recente (BERG et al., 2017), primeiramente classifica as informações disponíveis sobre um reservatório de petróleo como aquelas provenientes da superfície, que tem uma cobertura muito grande, porém, com baixa resolução. Também há aquelas provenientes dos poços, como mostrado na Figura 1, que tem resolução muito maior, contudo, uma cobertura restrita. Nessa categoria está a análise dos testemunhos de poços, que podem fornecer informações que chegam na escala dos poros, que é a escala de interesse deste projeto. Além disso, o mesmo trabalho classifica a análise de testemunhos em *Conventional Core Analysis* (CCA), ou petrofísica básica, e *Special Core Analysis* (SCAL), ou petrofísica avançada. A CCA visa determinar propriedades como a porosidade e a permeabilidade absoluta, enquanto a SCAL visa determinar propriedades mais complexas como a permeabilidade relativa, pressão capilar e propriedades elétricas.

Figura 1 – Microtomografia computadorizada de uma amostra (a) de afloramento Bentheimer, e seção transversal (b). Amostra com diâmetro de aproximadamente 5 mm e resolução da imagem de 6,7 micrômetros.



Fonte: BERG et al., (2017)

A petrofísica digital visa fornecer informações equivalentes às aquelas obtidas da CCA e SCAL, porém, por ser fortemente baseada em simulação computacional, aproxima-se mais da simulação de reservatórios do que da análise convencional de testemunhos. Essa mesma revisão indicou que três classes diferentes de propriedades podem ser obtidas com a petrofísica digital (BERG et al., 2017). A primeira classe, que é o objeto deste projeto, depende essencialmente da avaliação com acurácia suficiente da estrutura tridimensional de poros da amostra, e corresponde às propriedades obtidas pela CCA, porosidade e permeabilidade. As outras duas classes correspondem aos efeitos de interação entre os fluidos e os fluidos e a rocha, simples e complexas, e levam à determinação de propriedades como a pressão capilar e permeabilidade relativa, que não serão consideradas neste projeto.

## 2.2 Cálculo da Permeabilidade

Em 1856, Henry Darcy (DARCY, 1856) investigou o fluxo de água através de uma coluna de areia e descobriu que a força motriz e o transporte de fluidos obedecem à seguinte relação

$$-\frac{dp}{dx} = \mu K u \quad (2.1)$$

ou na forma vetorial

$$-\nabla p = \mu \mathbf{K} \mathbf{u} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

onde  $\nabla p$  é o gradiente de pressão,  $\mu$  a viscosidade do fluido,  $\mathbf{K}$  tensor de permeabilidade e  $\mathbf{u}$  a velocidade superficial, que representa o fluxo de fluido volumétrico por unidade de área macroscópica do meio poroso.

A Equação (2.2) é conhecida como lei de Darcy e forma uma base para modelar o transporte de fluidos em meios porosos. Em aplicações onde as velocidades dos fluidos são baixas, como movimentos de águas subterrâneas e petróleo, a lei de Darcy descreve bem o transporte de fluidos em meios porosos. No entanto, em aplicações onde as velocidades do fluido são altas, o transporte do fluido previsto pela lei de Darcy geralmente se afasta consideravelmente das medições. Foi demonstrado por muitos investigadores (WHITAKER, 1986; AURIAULT et al., 1987; BEAR, 1988) que a lei de Darcy realmente representa a equação do momento para o fluxo de Stokes calculado sobre um volume elementar representativo (REV), implicando que a lei de Darcy se aplica apenas aos casos em que o fluxo intersticial, ou seja, o fluxo através dos poros de um meio poroso pode ser modelado como fluxo de Stokes.

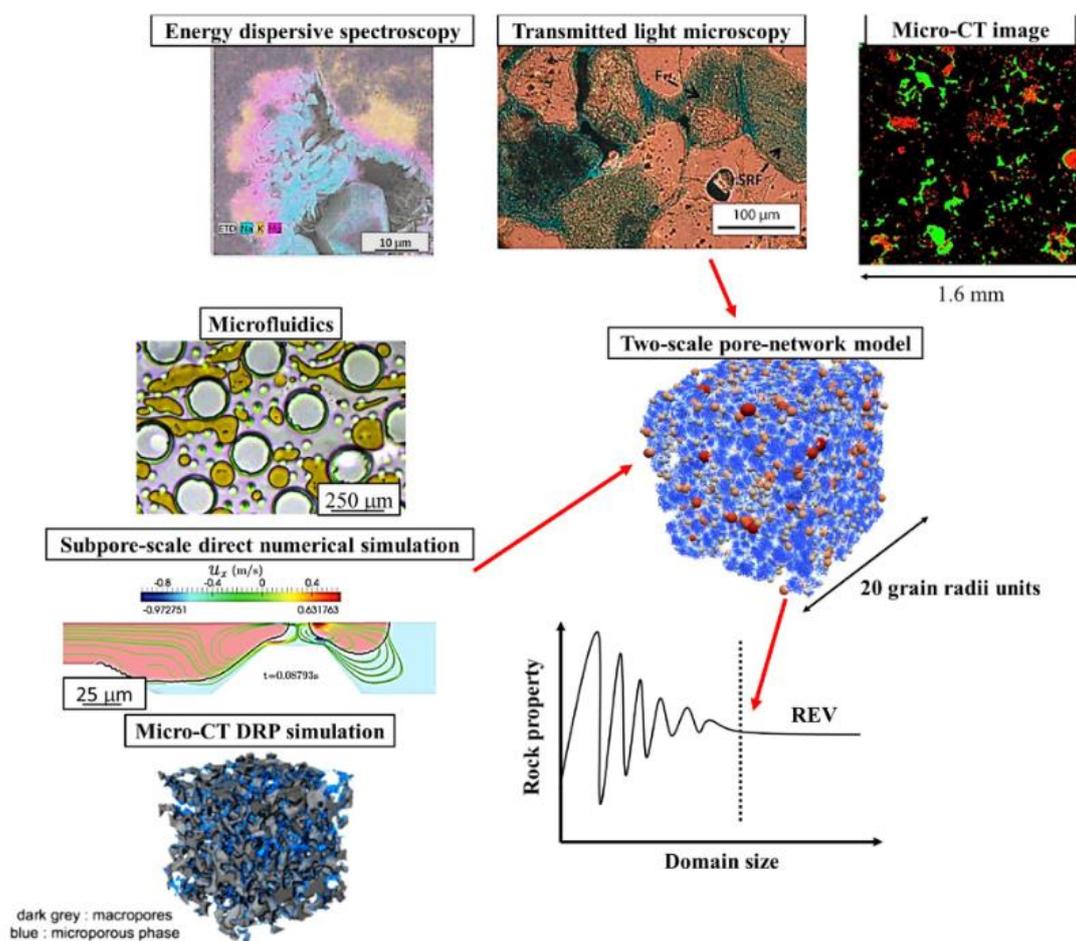
### 2.3 Modelagem de Estrutura de Poros

A criação de um modelo de estrutura de poros tridimensional inicialmente era feita a partir de imagens bidimensionais e os modelos tridimensionais construídos sinteticamente usando correlações estatísticas (MANDZHIEVA, 2017; BERG et al., 2017), devido à preponderância do imageamento bidimensional no workflow normal da indústria e dos custos associados ao imageamento tridimensional. No entanto, o imageamento bidimensional ainda poder ser vantajoso em algumas situações específicas (BERG et al., 2017). A principal técnica moderna para imageamento bidimensional é a petrografia de luz transmitida, complementada com técnicas como MED, EDS e EDX. Como um método interessante, complementar à criação de modelos tridimensionais para definição da estrutura de poros e solução de equações de transporte, inteligência artificial pode ser usada para classificar e identificar litofácies (MESHALKIN et al., 2018). Trabalhos recentes mostram que o imageamento bidimensional pode ser importante inclusive na determinação de propriedades petrofísicas em reservatórios não convencionais (MEHMANI et al., 2020), e que técnicas inovadoras continuam a ser desenvolvidas para o imageamento bidimensional (BENAVIDES et al., 2020).

A modelagem da estrutura de poros tridimensional pode ser realizada a partir de imagens tomográficas devidamente tratadas. Essa estrutura pode ser usada de duas formas distintas. Uma alternativa consiste na criação de um modelo de poros localizados no espaço tridimensional, interconectados por conexões nas quais a resistência ao escoamento se dá pela presença de gargalos e a tortuosidade da conexão, determinados a partir do pós-processamento das imagens tridimensionais, como visto na Figura 2. Esses modelos são então resolvidos como um problema clássico de escoamento em redes hidráulicas (MEHMANI et al., 2020; MARCKE et al., 2010). Uma alternativa consiste em gerar um modelo computacional tridimensional que simula diretamente o escoamento na geometria dos poros e usar algum método numérico, para solução do escoamento de fluidos nos microcanais criados pela estrutura porosa (BERG et al., 2017; MEHMANI et al., 2020). Não é imediatamente óbvio qual é o modelo contínuo apropriado para o escoamento do fluido em microcanais (RAJAGOPAL, 2007), mas a literatura confirma que o modelo de Stokes, que considera um fluido incompressível e viscoso em um escoamento no qual os efeitos da inércia não são

importantes, fornece resultados que concordam suficientemente bem com os resultados experimentais, pelo menos para o cálculo de permeabilidade absoluta (PHELAN JR et al., 2005). Em particular, a literatura mostra que, exceto em casos particulares, não é necessário considerar o modelo de Stokes-Brinkmann no escoamento dentro dos poros, na maioria dos casos (KROTKIEWSKI et al., 2011).

Figura 2 – Fluxo de trabalho para estabelecer as propriedades da rocha REV para a primeira classe de rochas não convencionais (arenito de gás e carbonatos).



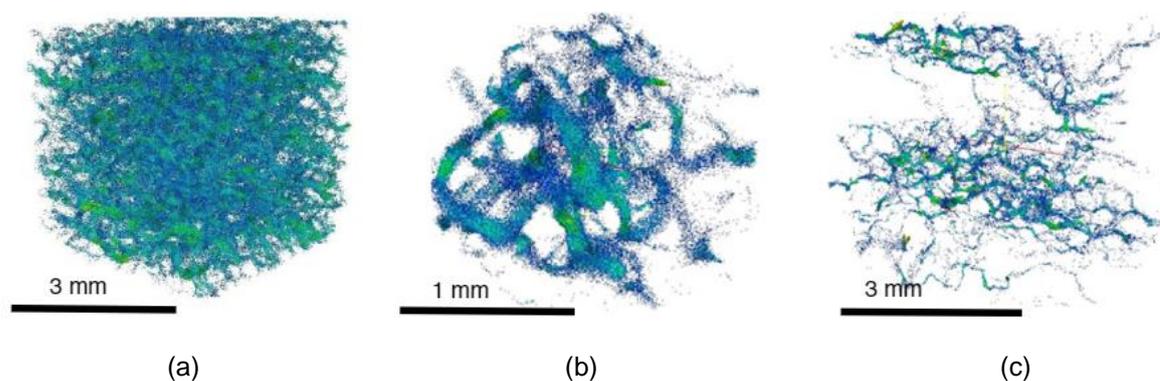
Fonte: MEHMANI et al., (2020)

## 2.4 Métodos Numéricos: Escoamento em Meios Porosos

Vários métodos numéricos têm sido usados para calcular o escoamento dentro da estrutura porosa com uma rede de microcanais, como mostrado na Figura 3. É bastante claro que os métodos têm que ser adaptáveis a geometrias muito complexas.

Devido a isso e à relativa simplicidade de implementação, o método Lattice-Boltzmann é popular nesta aplicação.

Figura 3 – Os campos de fluxo calculados em: (a) uma amostra de arenito; (b) arenito Bentheimer; e (c) calcário Portland.



Fonte: RAEINI et al., (2014)

Neste trabalho, foi aplicado um método de volumes finitos, devido ao bom desempenho computacional e ao bom conhecimento dos pesquisadores envolvidos no projeto com sua implementação em computadores de alto desempenho. A permeabilidade absoluta é uma propriedade que é representada fisicamente por um tensor simétrico e definido positivo (BEAR, 1988). Portanto, é necessário que o procedimento de cálculo implementado garanta essa propriedade (PILLER et al., 2009). É interessante observar que técnicas recentes permitem obter soluções com resolução em subescala da malha para algumas propriedades calculadas, o que permite usar imagens com resolução menor, logo, mais econômicas (SAXENA et al., 2019).

Para uma funcionalidade equivalente à SCAL, é necessário considerar o escoamento bifásico dentro da estrutura porosa (RAEINI et al., 2014). É interessante notar muitas similaridades entre o que é proposto neste trabalho com outras áreas de interesse de nosso grupo de pesquisa, como por exemplo o escoamento em reservatórios fraturados e na aplicação de técnicas de EOR (SUZUKI et al., 2019; CRANDALL et al., 2010; JAFARI et al., 2020). A simulação na escala porosa pode também ajudar a identificar quando o modelo de Darcy se torna pouco adequado para modelar o escoamento em um meio poroso sob condições específicas (MULJADI et al., 2016).

### 2.4.1 Ferramentas Computacionais

As atividades neste projeto foram desenvolvidas com base em softwares já disponíveis com as etapas de instalação e execução de programas, obtenção de dados, familiarização com ferramentas, execução de análises e comparação com resultados da literatura.

Dessa forma, o referido projeto não previu a aquisição direta de imagens tomográficas, de modo que foi executado apenas com imagens publicamente disponíveis. Em linhas gerais, foi implementado no cluster computacional de alto desempenho um sistema para determinação da permeabilidade absoluta de amostras usando o sistema publicamente disponível desenvolvido no *Imperial College* (IMPERIAL COLLEGE LONDON, 2023), poreFOAM.

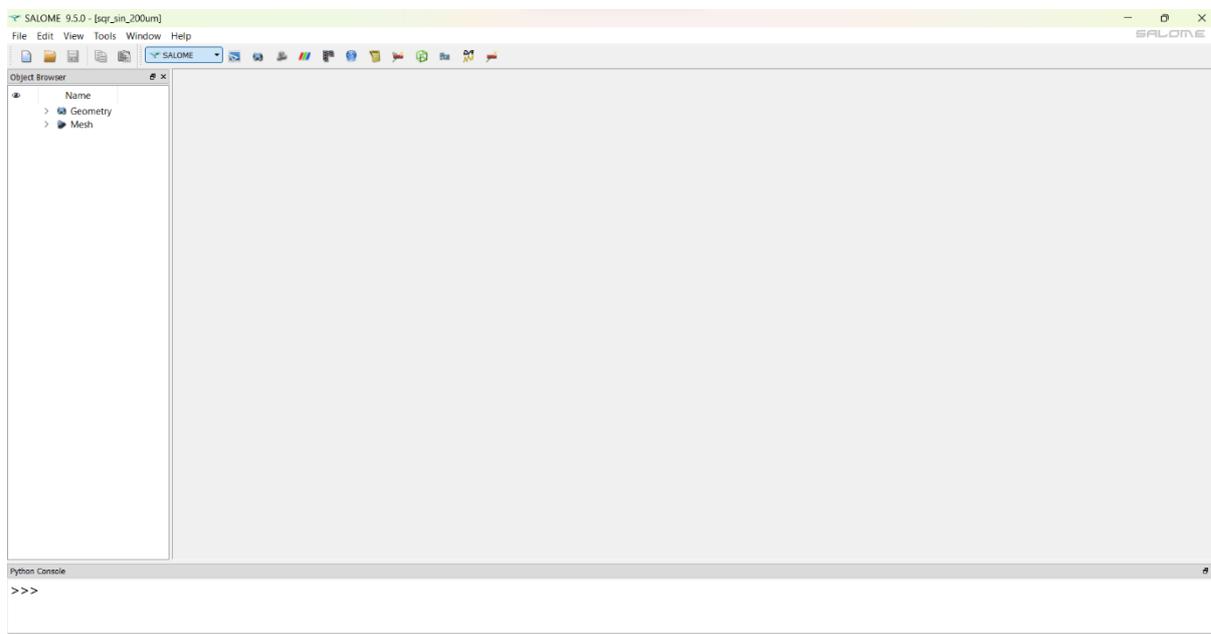
#### 2.4.1.1 Software Salome 9.5.0

Este programa foi usado para gerar microestruturas com geometrias simples para testes iniciais do sistema. Baseia-se em uma arquitetura aberta e flexível feita de componentes reutilizáveis disponíveis como software livre.

A modelagem numérica de um problema físico, o desenvolvimento de soluções e a sua integração no processo de design são frequentemente tratados em ambientes CAD específicos. Nesse contexto, o SALOME representa uma opção de aplicação genérica baseada em CAD para simulação digital. Sua interface gráfica é mostrada na Figura 4.

Como uma plataforma de integração CAD/CAE, ele fornece ferramentas para modelagem 3D (construção bottom-up, importação, cura), visualização, gerenciamento de esquemas computacionais e pós-processamento. Além disso, é adaptado para integração de componentes personalizados como interfaces CAD, geradores de malha e solucionadores de elementos finitos com pré-processadores específicos.

Figura 4 – Interface gráfica Salome.

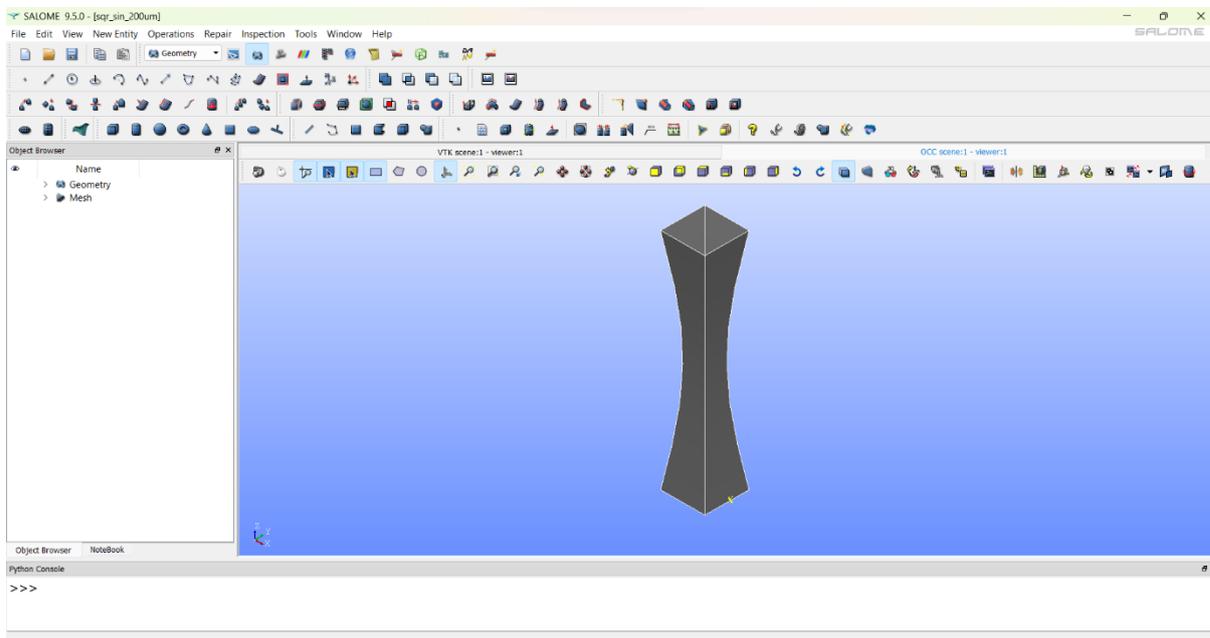


Fonte: Autoria Própria.

#### 2.4.1.1.1 Módulo *Geometry*

O módulo de geometria do SALOME destina-se a importação e exportação de modelos geométricos (nos formatos IGES, BREP, STEP, STL, XAO e VTK), construção de objetos geométricos utilizando uma ampla gama de funções (Figura 5), visualização de objetos geométricos no visualizador OCC, transformação e otimização de objetos geométricos utilizando diversos algoritmos, e visualização de informações sobre estes objetos geométricos usando ferramentas de medição.

É possível definir parâmetros através de variáveis predefinidas no notebook SALOME, uma interface em *Python*, onde grande parte das funcionalidades do módulo de geometria estão disponíveis.

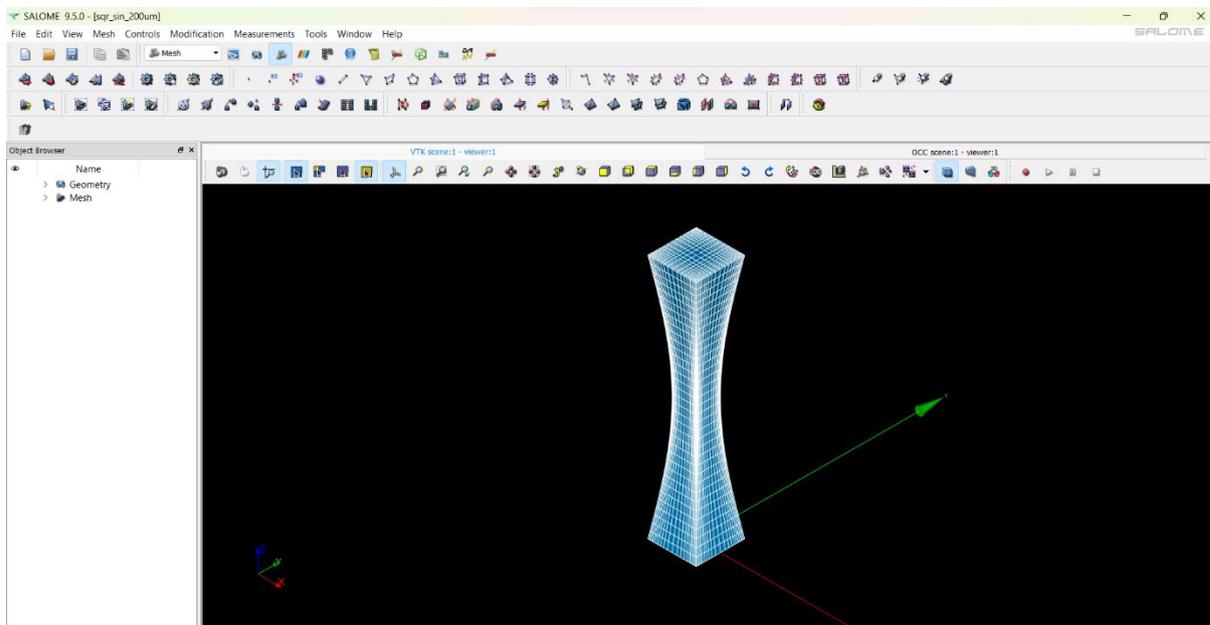
Figura 5 – Módulo *Geometry* Salome.

Fonte: Autoria própria.

#### 2.4.1.1.2 Módulo *Mesh*

O módulo *Mesh* do SALOME é destinado a criação de malhas de diferentes maneiras, mesclando modelos geométricos previamente criados ou importados pelo componente Geometria, bottom-up, utilizando operações de edição de malha, especialmente extrusão e revolução, pela geração da malha 3D a partir da malha 2D (esta última pode ser importada ou criada manualmente). Como também a importação e exportação de malhas em diversos formatos (Figura 6), modificação de malhas com uma vasta gama de operações dedicadas, criação de grupos de elementos de malha, filtrar entidades de malha (nós ou elementos) usando a funcionalidade Filtros para criar grupos e aplicar modificações de malha e visualização das malhas no visualizador VTK e assim obter informações sobre a malha e seus objetos.

É possível utilizar as variáveis predefinidas no notebook Salome para definir parâmetros de operações e quase todas as funcionalidades do módulo *mesh* são acessíveis através da interface Python do módulo.

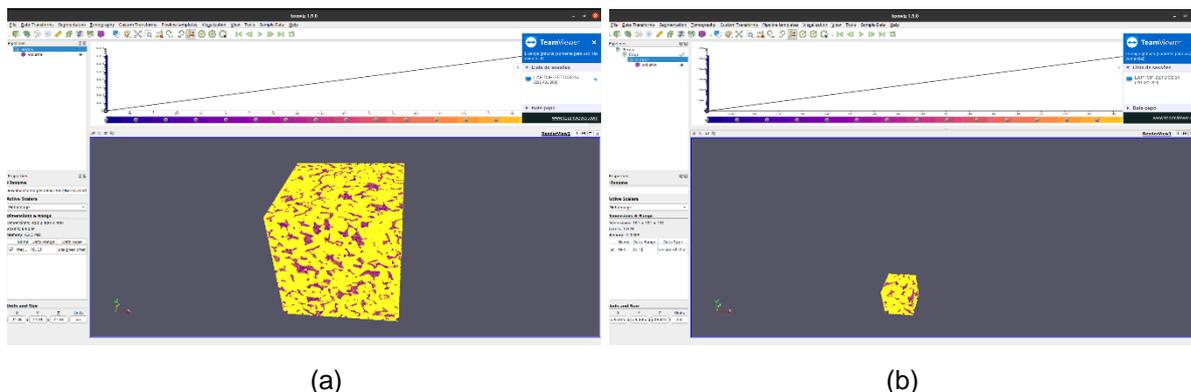
Figura 6 – Módulo *Mesh* Salome.

Fonte: Autoria própria.

#### **2.4.1.2 Software TomViz**

O projeto Tomviz é um aplicativo multiplataforma e de código aberto para processamento, visualização e análise de dados tomográficos 3D. Este programa foi utilizado para visualizar amostras obtidas da internet e recortar sub-amostras (Figura 7) de uma determinada amostra digital. Ele é composto por etapas de processamento de dados, desde a reconstrução até a visualização e a análise de dados 3D. O aplicativo Tomviz é adaptado para visualizar dados de tomografia eletrônica e pode utilizar grandes quantidades de memória e recursos de processamento necessários para renderizar, manipular e analisar tomogramas 3D volumosos.

Figura 7 – Extração de subamostra no Tomviz: (a) Amostra 400x400x400, (b) Sub-amostra 100x100x100.



Fonte: Autoria própria.

### 2.4.1.3 PoreFOAM

O PoreFOAM (POREFOAM, 2023) é baseado em um programa que implementa o método dos volumes finitos para CFD. Foi desenvolvido de forma que pode realizar simulações de fluxo monofásico em imagens microtomografia de meios porosos. O pacote PoreFOAM consiste em aplicativos de pré-processamento, processamento e pós-processamento, em códigos C++ padrão, bem como aplicativos escritos usando OpenFOAM. O mesmo grupo de pesquisa que fornece esse programa também fornece uma quantidade razoável de exemplos que foram usados para verificar o código.

#### 2.4.1.3.1 Arquivo de Entrada

Os arquivos de entrada necessários são: um arquivo de cabeçalho de entrada, uma imagem micro-CT, que pode estar em ascii (o sufixo deve ser *.dat*) ou binária, bruto compactado gzip, para o qual o sufixo do arquivo deve ser *.raw.gz* ou um arquivo *.tif* 3D. O arquivo de cabeçalho está em formato *.mhd*, que é um padrão compatível com Paraview e Fiji (ImageJ com plugins), com comandos adicionais opcionais de manipulação de imagem específicos do pacote PoreFOAM.

#### 2.4.1.3.2 Executando as Simulações

Um arquivo de entrada de amostra é fornecido, que é um arquivo de cabeçalho *ascii* que deve ser usado em combinação com uma imagem micro-CT, como aquelas disponíveis no site da *Imperial College Pore-scale*.

Para executar uma simulação de fluxo monofásico em uma imagem micro-CT, primeiro o arquivo de cabeçalho deve ser preparado, depois deve ser copiado em um diretório onde haja espaço em disco suficiente, os resultados da simulação 3D podem ocupar espaços em disco da ordem de centenas de GB, dependendo do tamanho da imagem.

A mesma abordagem pode ser usada para executar a simulação em arquivos *ascii*, com o sufixo do arquivo *.dat*. Então deve-se substituir “XXX.raw” pelo nome do arquivo *ascii*, XXX.dat, ou definir a palavra-chave *BinaryData* como False no arquivo *.mhd*.

#### 2.4.1.3.3 Resultados de Simulação e Visualização

Após a execução dos scripts de simulação, os resultados serão salvos em um subdiretório dentro de um diretório com o mesmo nome da imagem micro-CT (sem o sufixo), que inclui os arquivos de log de aplicações individuais, os resultados da simulação OpenFOAM e os campos de pressão e velocidade, convertido em arquivos de imagem *tif*, *.dat (ascii)* ou formato *.raw*.

No formato binário, os campos de velocidade e pressão são escritos em números de ponto flutuante *small endian* de 32 bits. Eles podem ser abertos em softwares de processamento de imagens. Neste trabalho foi utilizado o Paraview (PARAVIEW, 2023).

Os parâmetros e resultados da simulação Openfoam são salvos dentro de uma pasta chamada Openfoam “case”, que inclui subdiretórios chamados “*constant*” e “*system*” e em muitos outros diretórios “*time*” que possuem números de ponto flutuante como seus nomes. Para visualizar os arquivos Openfoam, pode-se usar o Paraview e abrir o arquivo *system/controlDict*.

A permeabilidade e a porosidade efetiva (conectada) são relatadas em um arquivo com prefixo *summary\_* na pasta do caso. As distribuições de velocidade e o fator de formação também são calculados e gravados no mesmo arquivo. Essencialmente, a principal diferença em relação aos códigos fornecidos pelo Openfoam é o

tratamento da condição limite de não deslizamento para melhorar a precisão da previsão de permeabilidade.

#### 2.4.2.3.4 Principais Solucionadores

Listamos alguns dos programas utilitários utilizados no poreFOAM, e uma breve descrição de sua função.

##### 2.4.1.3.4.1 *voxelToFoam (Par)*

Este programa converte arquivos *.raw/.tif/.am* para o formato OpenFOAM, usado para simulação de fluxo monofásico. Ele também executa tarefas simples de processamento de imagens, como corte e limite. Além disso, ele rotula as partes desconectadas da imagem e mantém apenas o maior caminho conectado (para evitar falha do solucionador linear).

##### 2.4.1.3.4.2 *icoNSFoam*

Este programa é um solucionador de fluxo monofásico, responsável pela simulação do fluxo final, cujos resultados são processados para o cálculo da permeabilidade. É uma versão simplificada do solucionador de fluxo bifásico, onde a principal diferença com os solucionadores de fluxo monofásico OpenFOAM é a implementação das condições de contorno e o acoplamento pressão-velocidade.

##### 2.4.1.3.4.3 *iPotentialFoam*

É um simulador de escoamento potencial que é utilizado para inicialização de pressão e velocidade para melhorar a convergência de simulações. Seu uso é opcional, mas é eficaz quando o número de Reynolds é baixo e a imagem é uma imagem de microtomografia de uma rocha porosa.

##### 2.4.1.3.4.4 *calc\_distributions*

Programa para pós-processamento, calcula porosidade e permeabilidade efetivas, fator de formação e distribuições de velocidade.

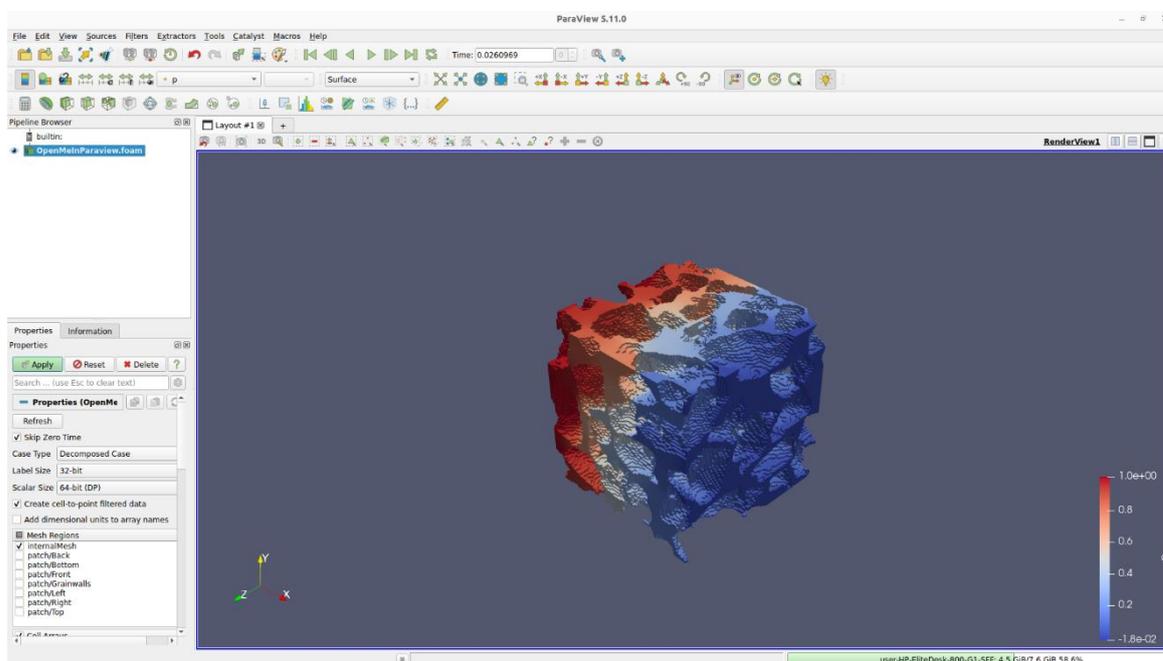
#### 2.4.1.3.4.5 FOAM2Voxel

Solucionador de pós-processamento, converte resultados de simulação Openfoam em arquivos .dat, .raw e .tif.

#### 2.4.1.4 Paraview

O Paraview é um aplicativo de código aberto para visualização de dados 2D/3D, com capacidade de processamento de bilhões de células não estruturadas e mais de um trilhão de células estruturadas. Os usuários do Paraview podem criar visualizações para analisar seus dados usando técnicas qualitativas e quantitativas. Na Figura 8 é apresentada sua flexível e intuitiva interface gráfica.

Figura 8 – Interface do Paraview.



Fonte: Autoria própria.

O aplicativo que geralmente é associado ao Paraview é um pequeno aplicativo cliente construído sobre uma grande quantidade de bibliotecas que fornecem ao

Paraview a sua funcionalidade. O Paraview vem com um aplicativo *pvpython* que permite automatizar a visualização e pós-processamento com scripts Python.

Uma biblioteca do Paraview *Server* fornece a camada de abstração necessária para executar visualizações paralelas e interativas. Isso exige grande quantidade das exigências computacionais no aplicativo cliente em relação a maioria dos problemas de quando o Paraview está sendo executado em paralelo. O *Visualization Toolkit* (VTK) fornece algoritmos básicos de visualização e renderização.

#### **2.4.1.5 Cluster Computacional**

O cluster é composto por um conjunto de computadores interligados por uma rede de alta velocidade. Normalmente nos referimos a estes computadores como “nós”. No caso do Zumbi, estes nós têm praticamente a mesma configuração. No Zumbi temos dois tipos de nó: nós computacionais e o nó de login.

As simulações computacionais são executadas nos nós computacionais e o nó de login é usado para acessar o cluster pela internet. Os clientes remotos acessam diretamente apenas o nó de login. Este nó deve ser usado para todo o desenvolvimento, para o qual são transmitidos os dados e se tem acesso aos resultados. Como também pode ser realizada a edição de arquivos e execução de programas no cluster.

O acesso ao sistema é feito de forma remota, via internet, a partir de computadores clientes, que podem ser desktops, *laptops*, telefones, tablets, por meio de algum software que implemente um sistema de comunicação, como o Secure Shel (o qual utilizamos neste projeto).

Na configuração original, o cluster computacional do grupo PADMEC possuía 17 nós computacionais, cada um com dois processadores de 16 núcleos e 2.2 GHz de frequência de base, com 128 GB de memória RAM e aproximadamente 30 TB de armazenamento de disco. Infelizmente, ao longo dos anos, devido à escassez de recursos para manutenção do sistema, os nós computacionais foram saindo de operação e ao final deste projeto apenas um nó estava em operação.

##### 2.4.1.5.1 SSH – Secure Shel

O Secure Shell, ssh, é um protocolo de comunicação que permite ao usuário se autenticar com um computador remoto criptografando suas credenciais e o tráfego entre o cliente e o computador remoto. Isto permite que informações sejam transmitidas de maneira sigilosas, como senhas, dados e programas, de forma completamente segura, por uma rede na qual qualquer um pode examinar o tráfego que se passa. Inúmeros programas implementam o protocolo ssh, no linux o mais usual é o OpenSSH.

#### 2.4.1.5.2 Gerenciador de Recursos – SLURM

Este gerenciador de recursos permite que usuários possam executar programas, simultaneamente, em um cluster sem que haja interferência. Cada processador de um nó computacional é alocado a um usuário por vez.

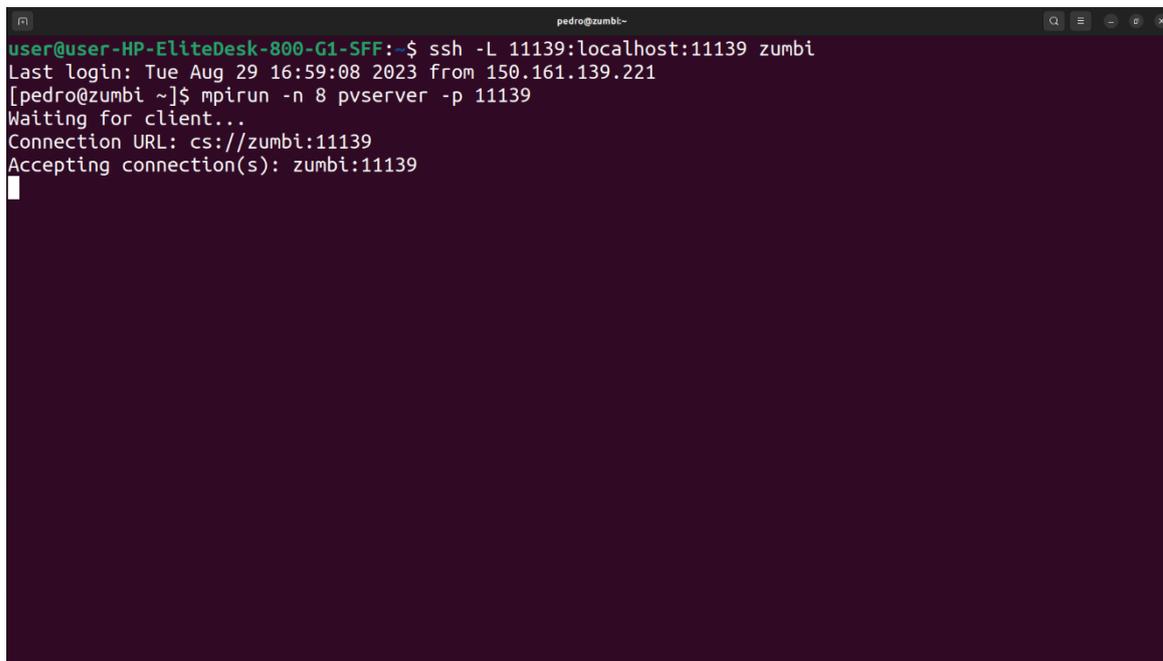
O SLURM permite se examine quais processadores estão disponíveis e que os aloque para determinada atividade. Caso os recursos solicitados não estejam disponíveis imediatamente, a solicitação do usuário fica em uma fila de espera, e são executadas assim que estes se tornam disponíveis.

#### 2.4.1.5.3 Visualização Remota

As imagens usadas neste trabalho possuíam até 1000 voxels. Visualizar resultados deste porte exige um custo computacional alto, em torno de 128 GB de memória, o que não está normalmente disponível nas estações de trabalho dos pesquisadores.

Isto pode ser resolvido realizando a visualização remota, mantendo os resultados no cluster e executando um servidor de visualização potencialmente em um nó de login. Para executar a visualização remota no pós-processamento é necessário fazer outra conexão entre o nó computacional e o nó de login. Na Figura 9 é mostrado o terminal no computador cliente utilizando o protocolo de comunicação Secure Shell, referenciando a máquina local (*localhost*) e o número de processadores alocados para essa atividade.

Figura 9 – Conexão via terminal.

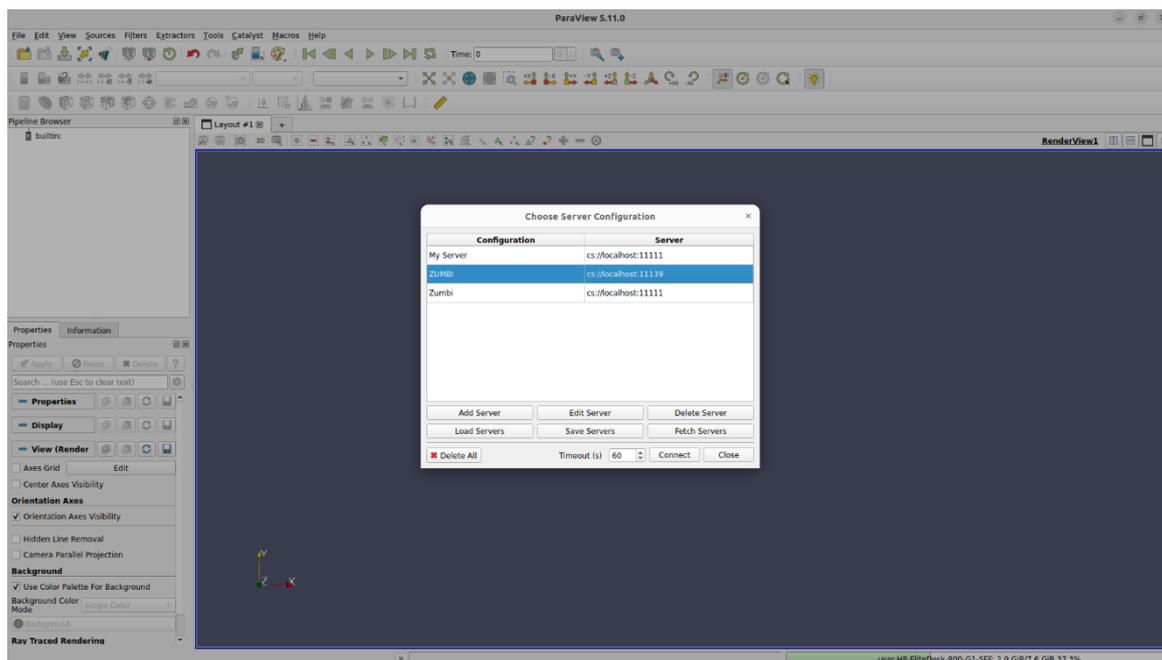


```
pedro@zumbi~  
user@user-HP-EliteDesk-800-G1-SFF:~$ ssh -L 11139:localhost:11139 zumbi  
Last login: Tue Aug 29 16:59:08 2023 from 150.161.139.221  
[pedro@zumbi ~]$ mpirun -n 8 pvserver -p 11139  
Waiting for client...  
Connection URL: cs://zumbi:11139  
Accepting connection(s): zumbi:11139
```

Fonte: Autoria própria.

Por fim, é necessário executar o Paraview localmente e adicionar o servidor remoto informando o endereço do servidor de visualização e sua porta de conexão, como mostrado na Figura 10.

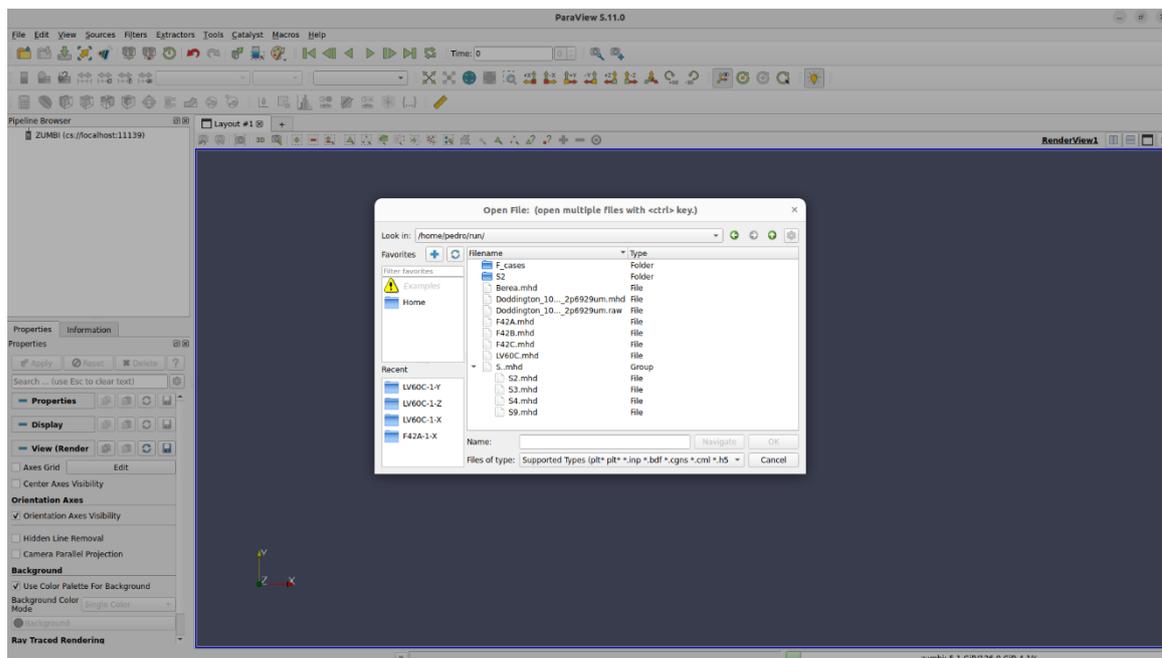
Figura 10 – Conexão paraview e cluster.



Fonte: Autoria própria.

Após conectar é possível visualizar todos os diretórios criados no cluster, onde estão arquivos de visualização utilizados no Paraview, Figura 11.

Figura 11 – Conexão bem-sucedida.



Fonte: Autoria própria.

## 3 METODOLOGIA

### 3.1 Fluxograma do Desenvolvimento

A metodologia deste trabalho, como mostrado no fluxograma (Figura 12), consistiu em, inicialmente, instalar o programa poreFOAM em nosso cluster computacional seguida da execução dos modelos fornecidos junto com o programa para verificação de sua operação, e análise da eficiência dos resultados obtidos.

Figura 12 – Fluxograma da metodologia.



Fonte: Autoria própria.

#### 3.1.1 Instalação do Programa PoreFOAM

Inicialmente, o programa foi compilado no Ubuntu 20.04, instalado em um computador com 16GB RAM, e um processador AMD Ryzen 3500, com 6 núcleos de 3950 MHz. Neste computador é possível rodar modelos de até 450x450x450 voxels com tempo médio de simulação de doze horas.

Para os modelos maiores, tipicamente 1000x1000x1000 voxels, ou para rodar os modelos com um tempo de simulação menor, foi instalado o programa no *cluster*.

#### 3.1.2 Execução dos Modelos de Imagem de Microtomografia

As amostras de microestruturas selecionadas para este estudo foram predominantemente arenitos. Com dimensões que variam de 300 a 1000 voxels, onde os modelos de dimensões maiores, que exigem maior disponibilidade computacional, foram submetidos a simulações apenas no cluster. Para as demais amostras foram

realizadas as simulações em um Desktop com características computacionais inferiores, mas que era suficiente para o desenvolvimento das atividades.

### 3.1.3 Conversão dos Dados de Benchmark

Foi estudada a necessidade da conversão dos dados de benchmark fornecidos (ANDRÄ et al., 2013; SAXENA et al., 2017) para que fossem processados pelo sistema poreFOAM, e, em caso positivo, seria escrito um programa de conversão para esses modelos. Os *benchmarks* seriam executados no sistema e assim verificada a qualidade desta implementação. No entanto, este trabalho conseguiu ser desenvolvido sem a necessidade de conversão dos dados.

### 3.1.4 Estudo de Desempenho em Paralelo

Os estudos de desempenho em paralelo do sistema são realizados a fim de determinar a eficiência computacional do sistema e o tamanho máximo dos problemas que são tratáveis em prazos de desenvolvimento compatíveis com a prática da engenharia. E assim, finalmente, identificar potenciais melhorias no sistema para definir atividades para a continuação do projeto.

## 4 RESULTADOS

### 4.1 Validação do Solucionador Numérico Através de Comparação com Dados de Benchmark

Uma das etapas mais importantes para simular as propriedades da rocha (por exemplo, permeabilidade, elasticidade, condutividade elétrica) é comparar o solucionador numérico com base na verdade conhecida, por exemplo, soluções de referência analítica ou padrões de propriedades da rocha previamente calculados e validados independentemente.

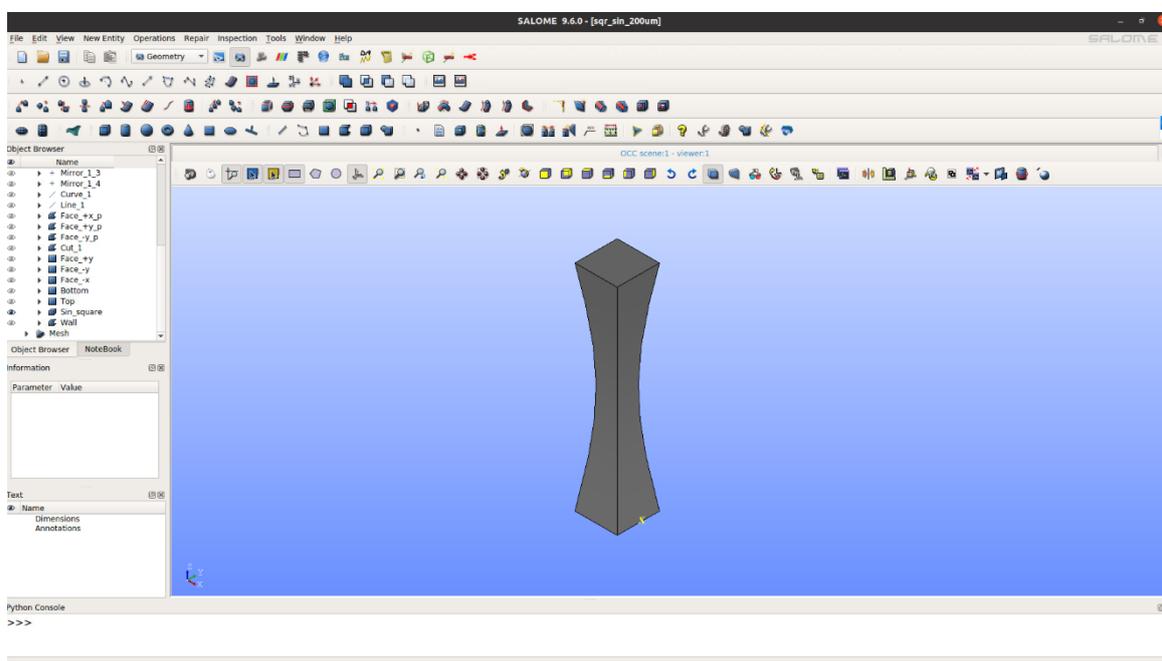
Foram criadas 15 microestruturas com geometrias determinísticas simples, cuja permeabilidade ou é calculável analiticamente ou foi determinada computacionalmente, a partir do estudo de referências numéricas (SAXENA, 2017) para o cálculo

da permeabilidade incompressível absoluta (monofásica) usando microestruturas que incluem um conjunto de tubos com formas e diâmetros transversais variados com diâmetro constante e variando senoidalmente. Cada microestrutura tem dimensões de  $1024 \times 1024 \times 1024$  voxels, com cada voxel tendo dimensão de aproximadamente 1 micrometro foram modeladas com o software SALOME 9.6.

#### 4.1.1 Modelagem das Amostras no Salome 9.6

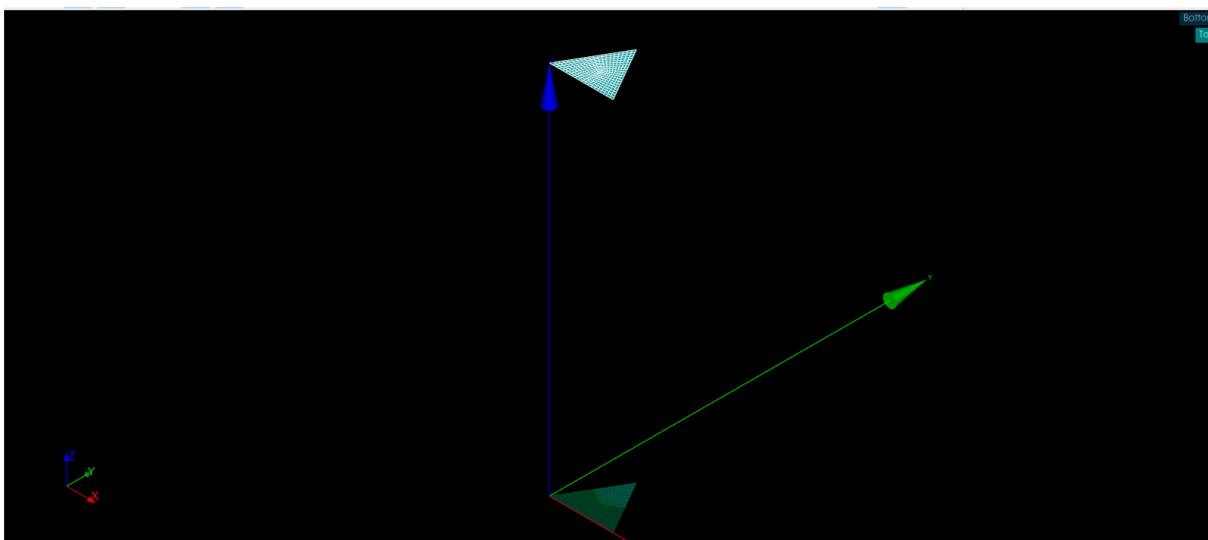
As partes das microestruturas, foram construídas separadamente com a função *shape*, base, topo e paredes. Por meio da ferramenta *compound*, é possível unir várias partes do modelo e criar uma forma composta, como o próprio nome sugere. Na Figura 13 podemos visualizar a interface gráfica do Salome, e a microestrutura senoidal de base quadrada. E nas Figuras 14 e 15, ver as formas separadamente, base e topo, e as paredes após a criação da malha com a ferramenta *Mesh*.

Figura 13 – Interface gráfica Salome 9.6.0 e Microestrutura Senoidal.



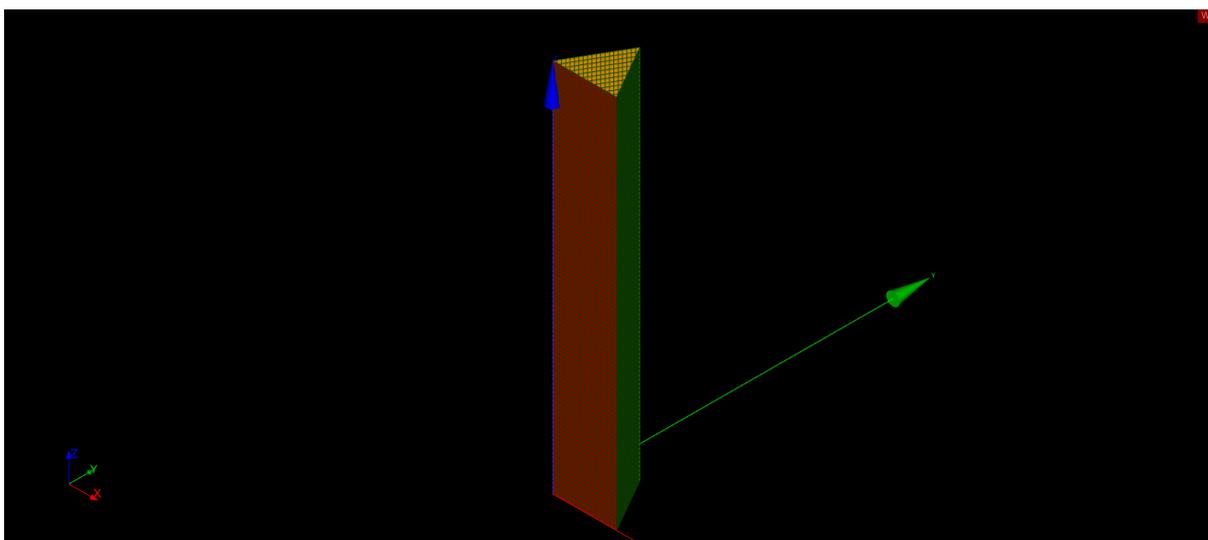
Fonte: Autoria própria.

Figura 14 – Base e topo da Microestrutura.



Fonte: Autoria própria.

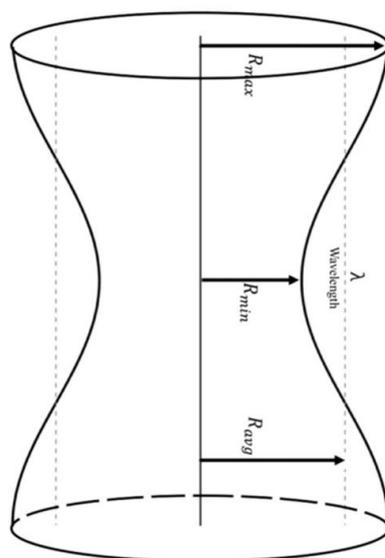
Figura 15 – Paredes da Microestrutura.



Fonte: Autoria própria.

Para modelagem das amostras senoidais foi considerado o raio máximo (Figura 16) como o comprimento característico da microestrutura, e o raio mínimo definido como metade do raio máximo. Fixados os pontos de raio mínimo e máximo a partir do eixo central da amostra, foi gerada uma linha curva que os interligassem. Para a construção da parede da microestrutura bastou rotacionar a curva em torno do eixo Z.

Figura 16 – Parâmetros da microestrutura senoidal.



Fonte: SAXENA et al., (2019).

#### 4.1.2 Microestruturas Geométricas

Dados das microestruturas são listados na Tabela 1, e estas são descritas como:

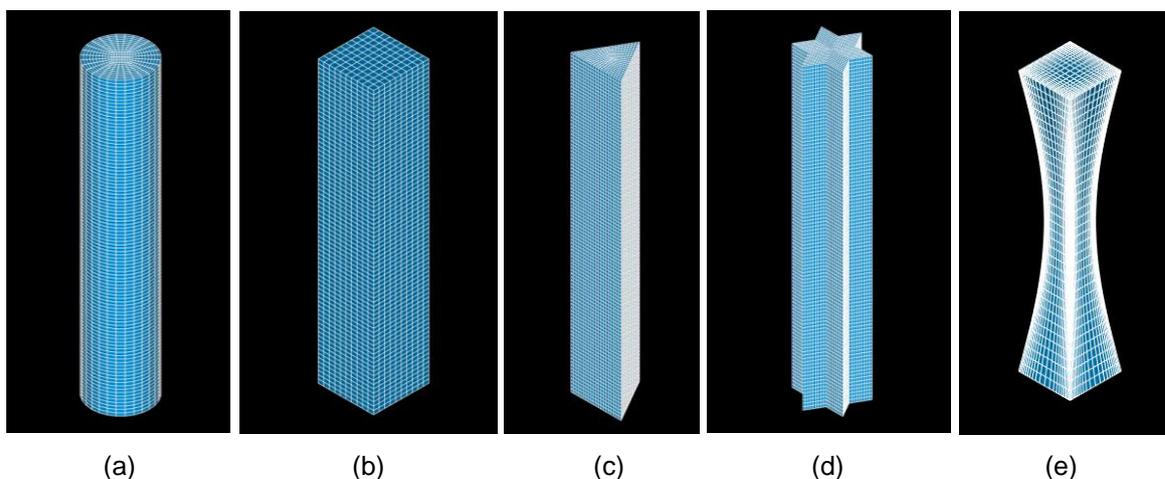
- Quatro estruturas 3D (tridimensionais) cada uma permeada por um único tubo de seção transversal circular (SC) que é perpendicular à direção do fluxo (Fig. 17a). Estas são estruturas tridimensionais cuja seção transversal não muda na terceira dimensão.
- Três estruturas 3D cada uma permeada por um único tubo de seção transversal quadrada (SQ) que é perpendicular à direção do fluxo (Fig. 17b).
- Três estruturas 3D cada uma permeada com um único tubo de seção transversal triangular equilátero (ST) que é perpendicular à direção do fluxo (Fig. 17c).
- Duas estruturas 3D que são permeadas com um único tubo de seção transversal hexagrama (SH) que são perpendiculares à direção do fluxo (Fig. 17d).
- Três estruturas 3D cada uma permeada com um único tubo de seção transversal quadrada variando sinusoidalmente (SQS) que é perpendicular à direção do fluxo (Fig. 17e).

Tabela 1 – Dados das microestruturas. Comprimento característico em micrometros.

Microestruturas	Comprimento Característico	Nº de Elementos da Malha
SC (100)	100	36482
SC (200)	200	75580
SC (400)	400	145486
SC (800)	800	72759
SQ (200)	200	11080
SQ (400)	400	22245
SQ (800)	800	37260
ST (200)	200	37050
ST (400)	400	68886
ST (800)	800	110514
SH (200)	200	61242
SH (400)	400	156750
SH (800)	800	61242
SQS (200)	200	21304
SQS (400)	400	21304
SQS (800)	800	21304

Fonte: Autoria própria

Figura 17 – Microestruturas reproduzidas: (a) seção transversal circular, (b) seção transversal quadrada, (c) seção transversal triangular, (d) seção transversal em hexagrama e (f) seção transversal variando senoidalmente.



Fonte: Autoria própria.

#### 4.1.3 Simulação Numérica

Estudamos as soluções calculadas usando o mecanismo numérico Open-FOAM. Assim, foram definidas as condições de contorno para as variáveis pressão e velocidade do fluxo através das microestruturas, Tabela 2.

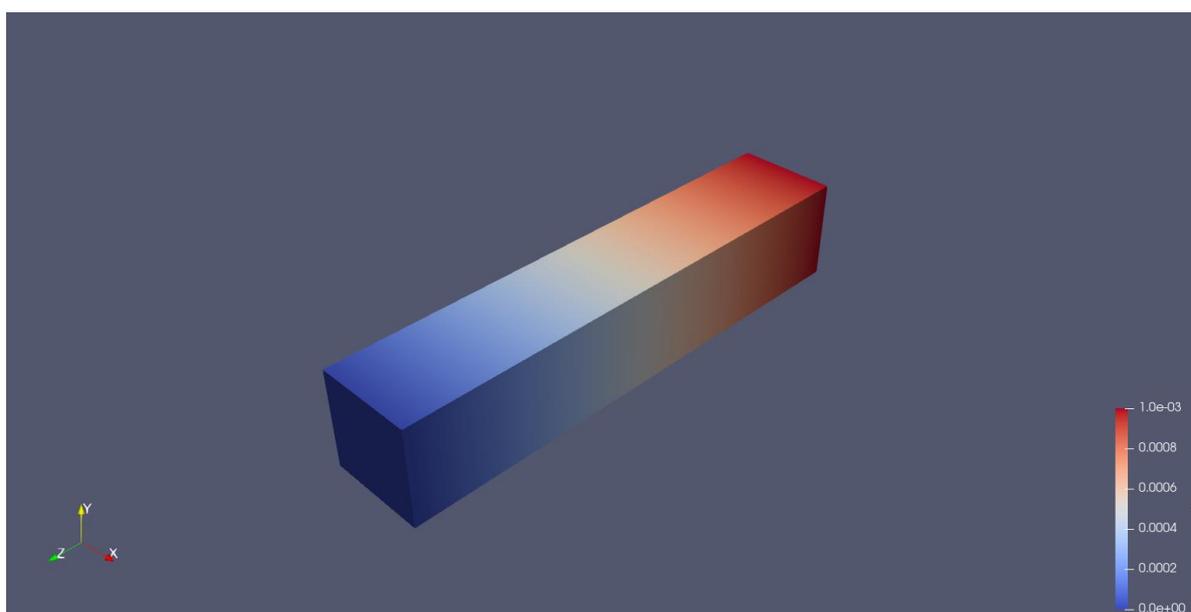
Tabela 2 – Condições de contorno.

Variável	Condição
Pressão (base)	1 Pascal
Pressão (topo)	Nula
Velocidade (base)	Zero Gradiente
Velocidade (topo)	Zero Gradiente
Velocidade (paredes)	Não Deslizamento

Fonte: Autoria própria.

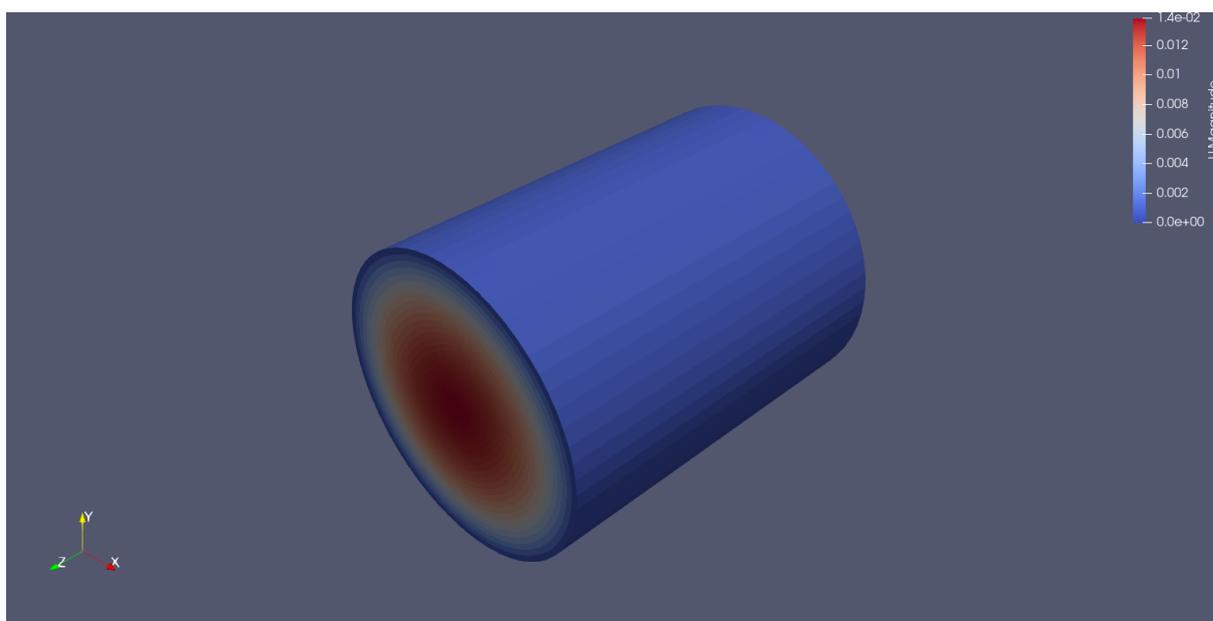
A partir da ferramenta de visualização científica Paraview, foi possível entender o comportamento do fluxo ao longo da amostra por meio dos valores de pressão e velocidade (Fig. 18-20) obtidos durante a simulação numérica. A magnitude da pressão é maior na base da amostra, e diminui gradativamente. Já o comportamento da velocidade de maneira distinta, varia de forma radial, do centro da microestrutura para as laterais, onde a magnitude é zero.

Figura 18 – Microestrutura 200 micrômetros (valor característico): Campo de Pressões.



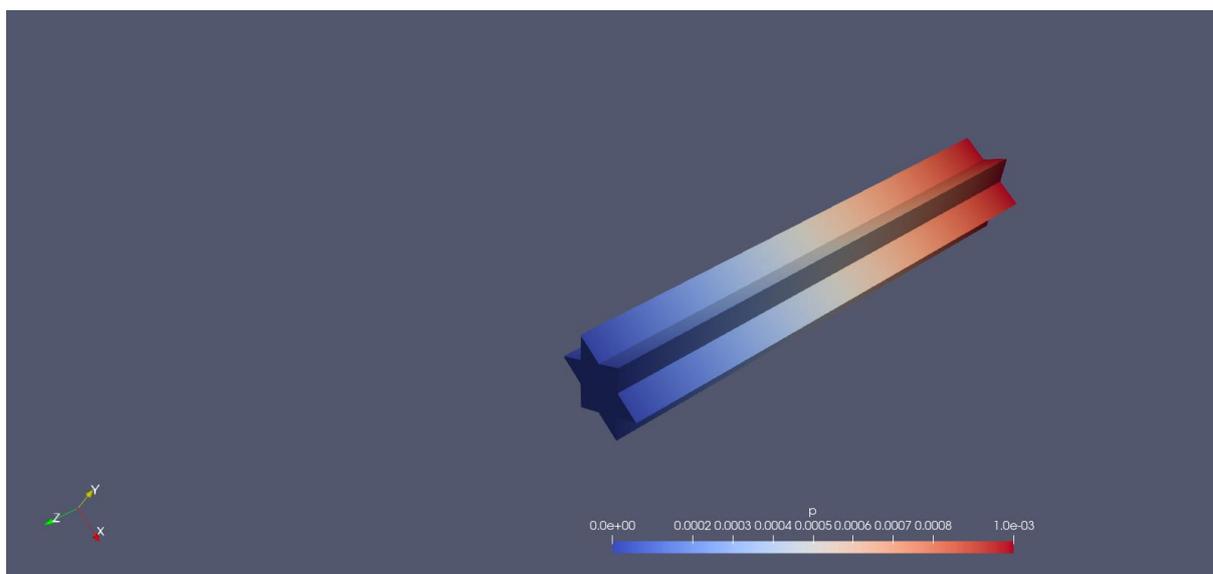
Fonte: Autoria própria.

Figura 19 – Microestrutura 400 micrômetros (valor característico): Campo de Velocidades.



Fonte: Autoria própria.

Figura 20 – Microestrutura 200 micrômetros (valor característico): Campo de Pressões.



Fonte: Autoria própria.

A permeabilidade absoluta monofásica das 15 microestruturas foi comparada a calculada usando vários solucionadores numéricos (SAXENA et al., 2019) que serão descritos individualmente. Essas abordagens numéricas podem ser amplamente agrupadas em cinco categorias. A primeira categoria é dos solucionadores do Método Lattice-Boltzmann (LBM). O LBM resolve uma forma discreta de mesoescala da

equação de Boltzmann, que se reduz à equação de Navier-Stokes no limite do número de Mach baixo.

Os solucionadores da segunda categoria são os solucionadores de Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) que normalmente resolvem equações físicas discretizadas em um esquema euleriano operando em uma malha de elementos finitos. Os solucionadores de terceira categoria são Navier-Stokes Solvers (VBS) diretos baseados em voxel, que resolvem as equações de Stokes e Navier-Stokes usando a chamada abordagem de volume finito baseada na transformada rápida de Fourier (FFT).

A quarta categoria é a dos Solucionadores Semi-Analíticos (SAS), que executam cálculos rápidos baseados em soluções analíticas de aumento de escala. Os solucionadores do tipo SAS não resolvem o conjunto completo de equações físicas, mas se concentram em como as mudanças microestruturais afetam a propriedade da rocha em questão.

Por fim, a quinta categoria é a do modelo empírico do tipo Kozeny-Carman (EMP), que opera na distribuição do tamanho dos poros, levando a resultados rápidos e espera-se que seja o menos preciso de todos os outros solucionadores.

O fluxo do fluido é calculado computacionalmente, e considerado como uniforme ao longo de toda a face. Dessa forma, foi usada a Lei de Darcy para o cálculo da permeabilidade. Apresentamos os dados de permeabilidade dos solucionadores na Tabela 3, listados juntamente com informações da simulação com o solver estudado neste trabalho, o OpenFOAM.

Tabela 3 – Resultados das permeabilidades computadas em Darcy.

<b>Microestruturas</b>	<b>OpenFOAM</b>	<b>LBM</b>	<b>CFD</b>	<b>VBS-1</b>	<b>SAS</b>
<b>SC (100)</b>	2293	3359	2314	-	-
<b>SC (200)</b>	37039	39178	37483	36688	35510
<b>SC (400)</b>	588688	584530	604420	591572	537750
<b>SC (800)</b>	9346673	-	9700600	9495162	8601000
<b>SQ (200)</b>	55659	56987	54336	53365	51800
<b>SQ (400)</b>	872608	809759	869380	853258	776740
<b>SQ (800)</b>	13841116	-	13910000	13647788	12372000
<b>ST (200)</b>	4687	4819	4573	4479	4389
<b>ST (400)</b>	74650	76996	73797	72258	66250
<b>ST (800)</b>	1191613	-	1192600	1167569	1061970

<b>SH (200)</b>	7438	8003	7624	7453	7302
<b>SH (400)</b>	120142	126751	122420	119771	109850
<b>SH (800)</b>	1903881	-	1975300	1933211	1758480
<b>SQS (200)</b>	9958	9404	8410	9524	9950
<b>SQS (400)</b>	105560	144077	141	147254	162760
<b>SQS (800)</b>	9036600	1677840	-	2091728	2636000

Fonte: Autoria própria.

É visto que existe uma boa concordância geral entre diferentes solucionadores para tubos com formato de seção transversal ideal. É esperado que a discordância, ou seja, a variabilidade, entre as soluções numéricas aumente com o aumento da complexidade do espaço poroso.

#### **4.2 Simulação de Fluxo em Escala de Poros para Caracterizar Amostras de Rocha por Microtomografia**

As cinco rochas digitais selecionadas para este estudo possuem uma faixa de tamanho de grão de 3,85 a 10,002  $\mu\text{m}$  e faixa de porosidade de 19,6% a 42,9%.

Essas amostras foram selecionadas porque abrangem uma variedade de composições e texturas (DONG, 2007). Nesta seção, descrevemos o conjunto de amostras para fornecer contexto geológico de cada formação. Esta descrição petrológica testifica comparações entre as amostras e fornece orientação para a segmentação de suas características.

A rocha da formação Berea é um arenito com uma resolução de aproximadamente 5,345  $\mu\text{m}$ , com uma porosidade de 19,6%. A análise de difração de raios X (XRD) sugere que essas rochas consistem principalmente de quartzo, mas contêm alguma dolomita além de minerais argilosos.

A rocha siliciosa (A1) faz parte do grupo de rochas sedimentares constituídas, principalmente, por quartzo. Essa formação tem um tamanho de grão médio de aproximadamente 3,85  $\mu\text{m}$ , com uma porosidade de 42,9%. As amostras S1, LV60A e F42A, assim como Berea, são arenitos resultantes da compactação e litificação de material granular. Suas resoluções são de 8,683  $\mu\text{m}$ , 10,002  $\mu\text{m}$  e 9,996  $\mu\text{m}$ , respectivamente. E suas porosidades de 14,1%, 37,7% e 33%, respectivamente. São

listadas algumas propriedades das amostras como dimensão, porosidade e permeabilidade média, na Tabela 4.

Tabela 4 – Propriedades das amostras selecionadas. Dimensões em voxels.

<b>Amostras</b>	<b>Dimensões</b>	<b>Porosidade (%)</b>	<b>Permeabilidade Média (md)</b>
<b>S1</b>	300x300x300	14,1	1678
<b>A1</b>	300x300x300	42,9	7220
<b>Berea</b>	400x400x400	19,6	1286
<b>LV60A</b>	450x450x450	37,7	35300
<b>F42A</b>	450x450x450	33	59000

Fonte: DONG, (2007).

O pacote PoreFOAM é adequado para conduzir simulações de fluxo de escala de poros. Ele atua diretamente no espaço poroso da rocha, e usa essencialmente os solucionadores de fluxo do OpenFOAM, simulando o fluxo de Navier-Stokes no espaço poroso de imagens  $\mu$ CT binarizadas/segmentadas, aplicando um gradiente de pressão constante de 1 Pascal na direção do fluxo da estrutura binária, usando uma malha estruturada que é gerada automaticamente pelo pacote de *script* do PoreFOAM.

Para as microestruturas de referência, também foram calculadas a velocidade total do fluxo de Darcy e o números de Reynolds, listados na Tabela 5.

Tabela 5 – Propriedades das amostras como dados de saída do simulador. Permeabilidade Média em miliDarcy e Velocidade de Darcy em m/s.

<b>Amostra</b>	<b>Porosidade Efetiva</b>	<b>Permeabilidade</b>	<b>Velocidade de Darcy</b>	<b>Número de Reynolds</b>
<b>S1</b>	0,147731	2,56379	$2,92342 \cdot 10^{-6}$	$4,68093 \cdot 10^{-6}$
<b>A1</b>	0,427551	9,95192	$2,55932 \cdot 10^{-5}$	$8,07381 \cdot 10^{-5}$
<b>Berea</b>	0,202644	1,13271	$2,09822 \cdot 10^{-6}$	$2,23311 \cdot 10^{-6}$
<b>LV60A</b>	0,371887	38,1058	$3,77209 \cdot 10^{-5}$	$2,32851 \cdot 10^{-4}$

<b>F42A</b>	0,329809	51,6911	$5,11997 \cdot 10^{-6}$	$3,68108 \cdot 10^{-4}$
-------------	----------	---------	-------------------------	-------------------------

Fonte: Autoria própria.

Para todas as estruturas rochosas houve uma boa concordância geral para a porosidade com um coeficiente de variação de 0,004 a 3,282% (Tabela 6).

Tabela 6 – Coeficiente de variação para a porosidade.

<b>Amostra</b>	<b>COV (%)</b>
<b>S1</b>	3,282
<b>A1</b>	0,239
<b>Berea</b>	2,341
<b>LV60A</b>	0,982
<b>F24A</b>	0,004

Fonte: Autoria própria.

Para estruturas rochosas do tipo Berea, notamos que existe uma boa concordância geral entre o solucionador em estudo e o valor de referência, com um coeficiente de variação, para a permeabilidade calculada de 8,96% (Tabela 7). Com a rocha siliciosa A1 e o arenito S1 há uma variabilidade moderada com o COV calculado de 22,49% e 29,53%. Já para as outras amostras de arenito LV60A e F42A, 5,4%, 9,33%, respectivamente.

Tabela 7 – Coeficiente de variação para a permeabilidade.

<b>Amostra</b>	<b>COV (%)</b>
<b>S1</b>	29,53
<b>A1</b>	22,49
<b>Berea</b>	8,96
<b>LV60A</b>	5,4

F24A

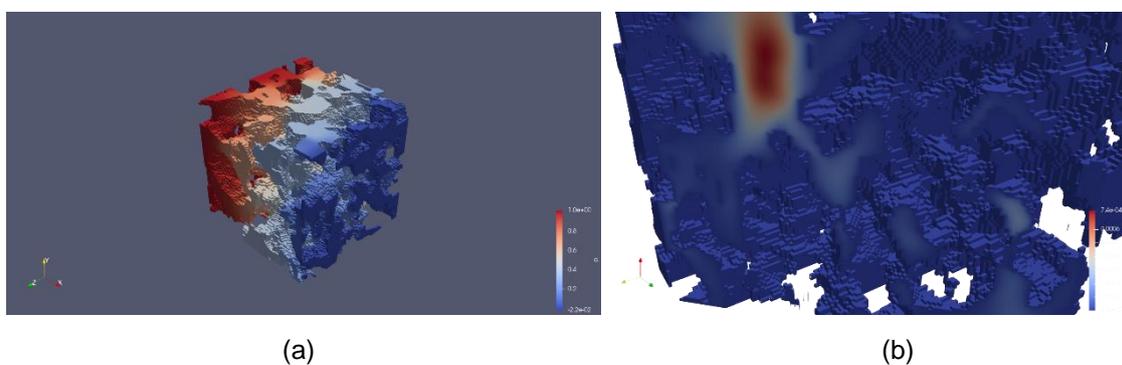
9,33

Fonte: Autoria própria.

#### 4.2.1 Visualização através do Paraview

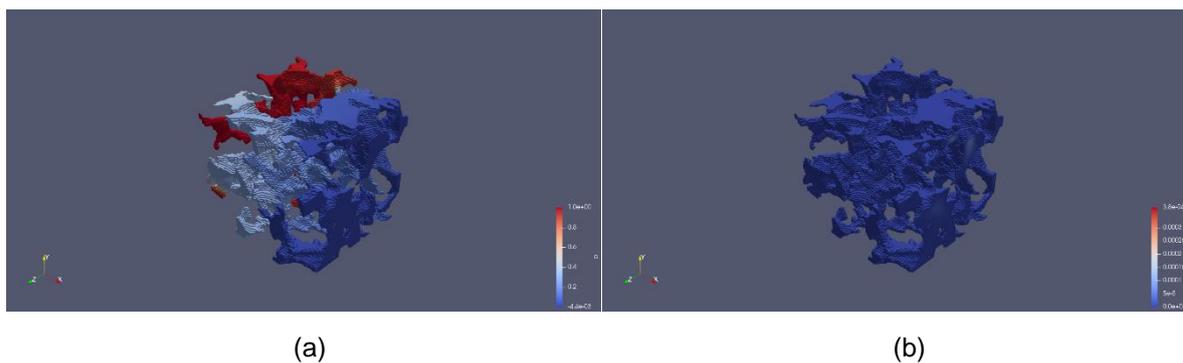
Com a ferramenta de visualização científica Paraview, foi possível observar o comportamento do fluxo ao longo da amostra por meio dos valores de pressão e velocidade (Fig. 21-25) obtidos durante a simulação numérica.

Figura 21 – Amostra A1: (a) Campo de Pressões, (b) Aproximação na Rede de Poros, Campo de Velocidades.



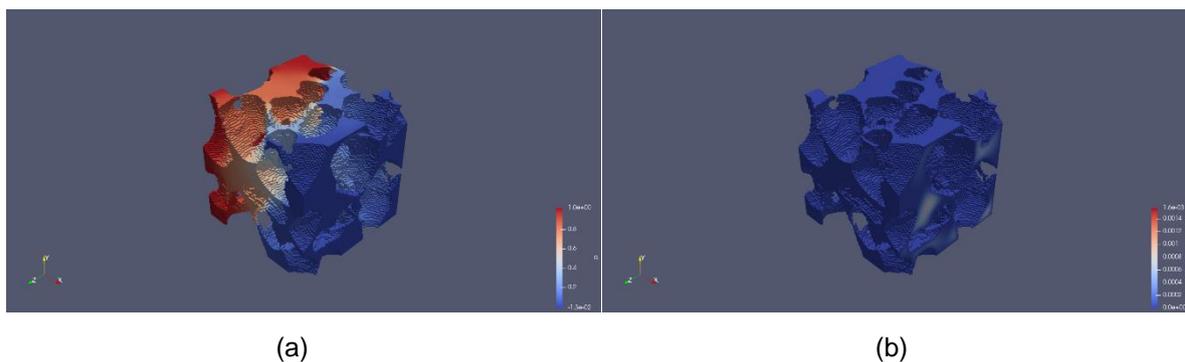
Fonte: Autoria própria.

Figura 22 – Amostra Berea: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.



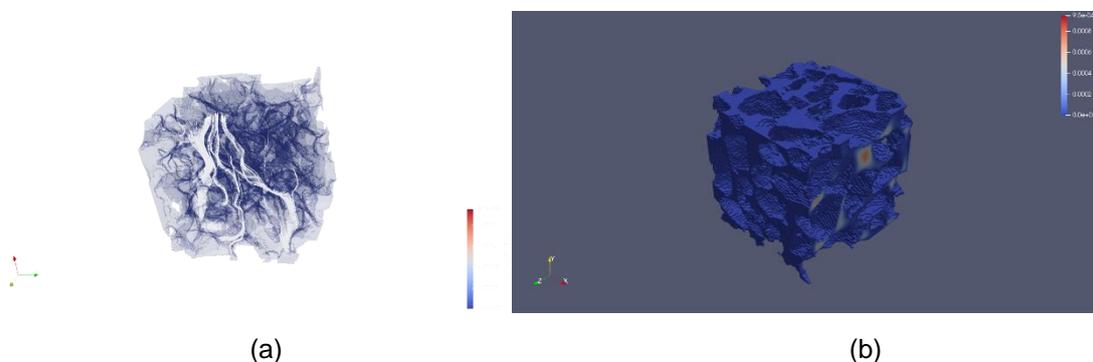
Fonte: Autoria própria

Figura 23 – Amostra F42A: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.



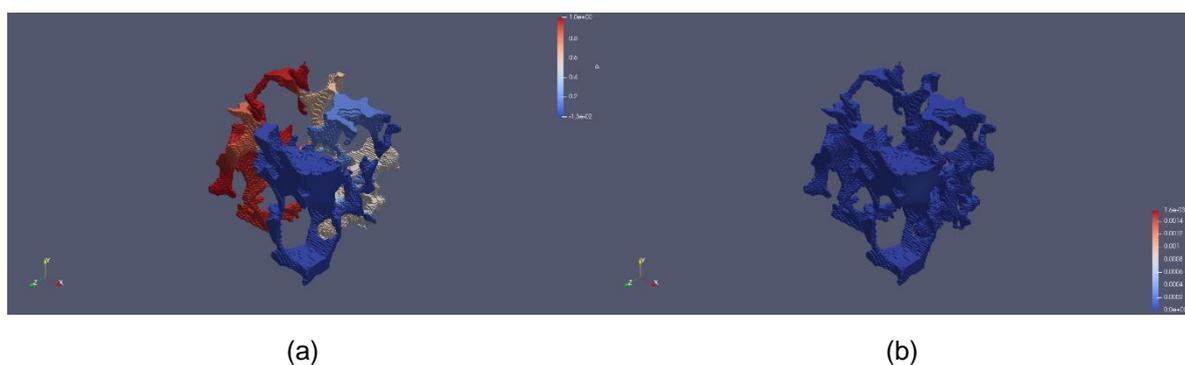
Fonte: Autoria própria.

Figura 24 – Amostra LV60A: (a) Trajetória do Fluido, (b) Campo de Velocidades.



Fonte: Autoria própria.

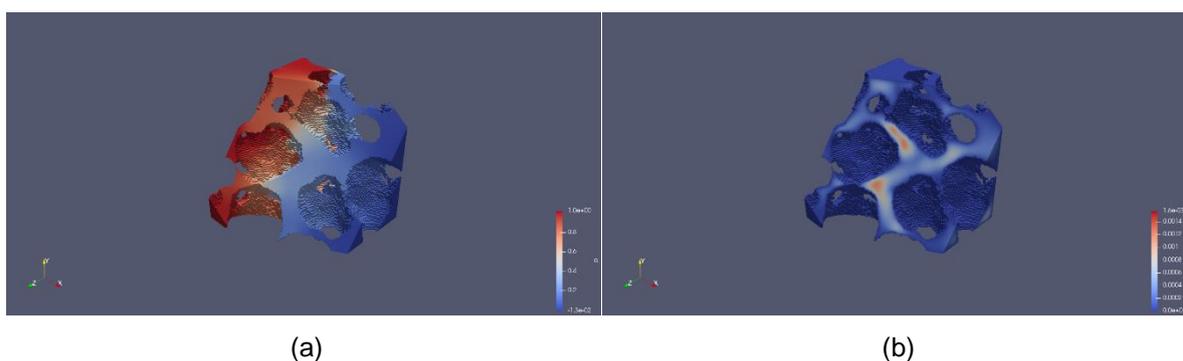
Figura 25 – Amostra S1: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.



Fonte: Autoria própria.

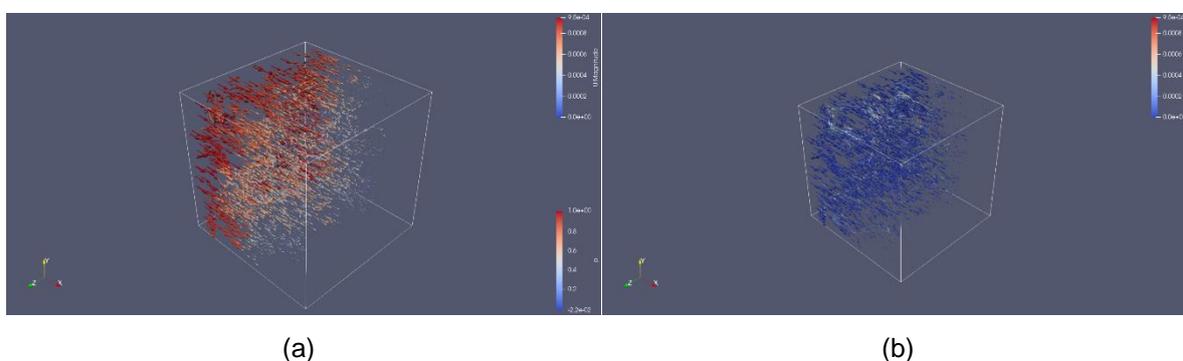
Foram geradas formas auxiliares de visualização dos campos de pressão e velocidade para compreender os efeitos do fluxo no interior da amostra através de cortes (Fig. 26). Como também é possível obter uma visualização do fluxo por meio de vetores orientados pela velocidade e direção do fluxo, e sua magnitude sendo a pressão ou a própria velocidade (Fig. 27).

Figura 26 – Corte F42A: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.



Fonte: Autoria própria.

Figura 27 – Vetores de Fluxo S1: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.



Fonte: Autoria própria.

### 4.3 Simulação no Cluster

No poreFOAM foi simulado o fluxo monofásico e implementadas as condições de contorno para o gradiente da pressão de 1 Pascal, fluxo nulo nas faces laterais, e o acoplamento pressão-velocidade. Os detalhes das imagens usadas (RAEINI et al., 2017; DONG, 2007) são mostrados na Tabela 8.

Tabela 8 – Dados e propriedades das amostras. Permeabilidade em miliDarcy e Resolução em micrometros.

	<b>Dimensões</b>	<b>Resolução</b>	<b>Porosidade</b>	<b>Permeabilidade Média</b>
<b>A1</b>	300x300x300	3,85	42,9	16,78
<b>S2</b>	300x300x300	4,956	24,6	3,898
<b>S3</b>	300x300x300	9,1	16,9	0,224
<b>S4</b>	300x300x300	8,96	17,1	0,259
<b>S9</b>	300x300x300	3,398	22,2	2,224
<b>LV60C</b>	450x450x450	10,002	37,2	19,40

<b>F42A</b>	450x450x450	9,996	33	59,00
<b>F42B</b>	450x450x450	10,002	33,3	52,30
<b>F42C</b>	450x450x450	10,002	33,1	50,40
<b>Bentheimer</b>	1000x1000x1000	3,0035	21,62	3,548

Fonte: RAENI, (2017); DONG, (2007).

Em cada simulação foram utilizados 8 processadores, e os resultados obtidos estão na Tabela 9.

Tabela 9 – Dados das amostras no cluster. Permeabilidade em mDarcy, Velocidade de Darcy em metros por segundo e Tempo de Simulação em horas.

<b>Amostras</b>	<b>Porosidade</b>	<b>Permeabilidade</b>	<b>Velocidade de Darcy</b>	<b>N° de Reynolds</b>	<b>Tempo de Simulação</b>
<b>Bentheimer</b>	0,21626	3,5149	$1,170 \cdot 10^{-6}$	$2,194 \cdot 10^{-6}$	21:56:05
<b>A1</b>	0,42784	9,1427	$7,915 \cdot 10^{-6}$	$2,393 \cdot 10^{-5}$	03:26:15
<b>S9</b>	0,22112	3,2186	$3,157 \cdot 10^{-6}$	$5,664 \cdot 10^{-6}$	03:32:12
<b>S4</b>	0,16294	0,4696	$1,747 \cdot 10^{-7}$	$1,197 \cdot 10^{-7}$	01:08:10
<b>S3</b>	0,16488	0,6243	$2,286 \cdot 10^{-7}$	$1,807 \cdot 10^{-7}$	01:08:49
<b>S2</b>	0,24580	4,9883	$3,355 \cdot 10^{-6}$	$7,493 \cdot 10^{-6}$	01:25:37
<b>LV60C</b>	0,36825	32,629	$7,249 \cdot 10^{-6}$	$4,141 \cdot 10^{-5}$	08:22:36
<b>F42C</b>	0,32874	53,925	$1,198 \cdot 10^{-5}$	$8,798 \cdot 10^{-5}$	09:14:12
<b>F42B</b>	0,33229	56,760	$1,261 \cdot 10^{-5}$	$9,501 \cdot 10^{-5}$	11:34:59
<b>F42A</b>	0,32177	59,189	$1,315 \cdot 10^{-5}$	$1,012 \cdot 10^{-4}$	09:43:00

Fonte: Autoria própria.

Para todas as estruturas rochosas houve uma boa concordância geral entre o solucionador em estudo e os valores de referência, com um coeficiente de variação para a porosidade variando de 0 a 3,4307% (Tabela 10).

Tabela 10 – Coeficiente de variação para a porosidade.

<b>Amostra</b>	<b>COV (%)</b>
<b>Bentheimer</b>	0
<b>A1</b>	0,1980

<b>S2</b>	0,0057
<b>S3</b>	1,7794
<b>S4</b>	3,4307
<b>S9</b>	0,2872
<b>LV60C</b>	0,7260
<b>F42A</b>	1,8011
<b>F42B</b>	0,1700
<b>F42C</b>	0,4930

Fonte: Autoria própria.

Dentre as estruturas rochosas, seis delas apresentaram um coeficiente de variação extremamente elevado para a permeabilidade (Tabela 11). No entanto, a amostra Bentheimer de dimensões 1000x1000x1000 obteve um dos menores COV de 0,667%. Como também as três amostras F42A, F42B e F42C, apresentaram coeficientes abaixo de 6%.

Tabela 11 – Coeficiente de variação para a permeabilidade.

<b>Amostra</b>	<b>COV (%)</b>
<b>Bentheimer</b>	0,6627
<b>A1</b>	41,665
<b>S2</b>	17,351
<b>S3</b>	66,734
<b>S4</b>	40,877
<b>S9</b>	25,843
<b>LV60C</b>	35,939

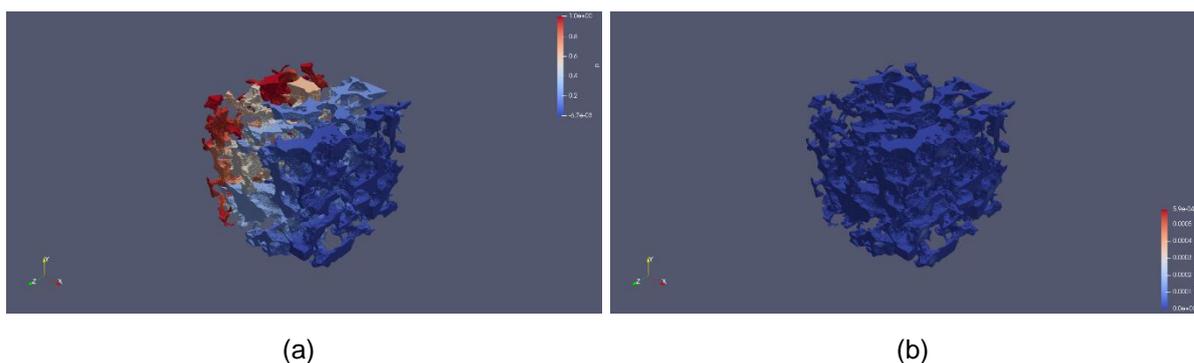
<b>F42A</b>	0,2261
<b>F42B</b>	5,7834
<b>F42C</b>	4,7784

Fonte: Autoria própria.

#### 4.3.1 Visualização no Paraview

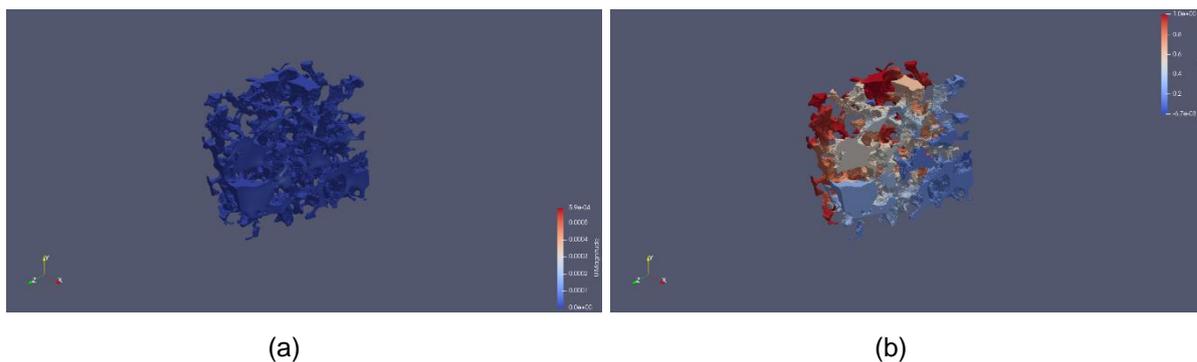
Através da utilização da ferramenta de visualização científica Paraview, conseguimos deduzir o comportamento do fluxo ao longo da amostra através da análise dos dados e pressão e velocidade obtidos durante a simulação numérica. O comportamento previsto e evidenciado nas Figuras abaixo (28 a 32) é que a pressão ao longo da amostra varia, tendo seu valor mais alto na base da microestrutura, onde inicia o fluxo de escoamento. Já o comportamento da velocidade se detém a valores mais expressivos no interior da amostra, como é visto nas figuras em corte transversal da microestrutura rochosa. Uma forma auxiliar de visualização é por meio de vetores. Nas Figuras 31b e 32b, os vetores são orientados no sentido do fluxo do escoamento, e suas magnitudes mostram a velocidade e pressão, respectivamente.

Figura 28 – Amostra S9: (a) Campo de Pressões, (b) Campo de Velocidades.



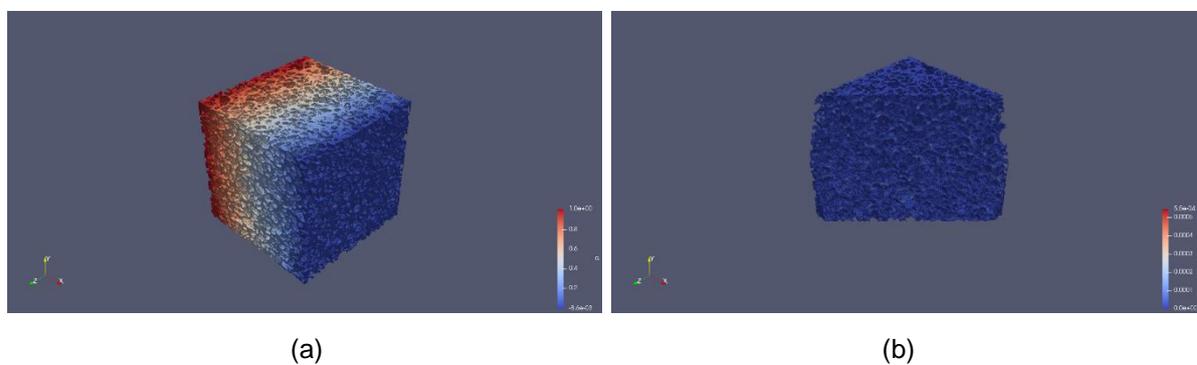
Fonte: Autoria própria.

Figura 29 – Corte Amostra S9: (a) Campo de Velocidade, (b) Campo de Pressões.



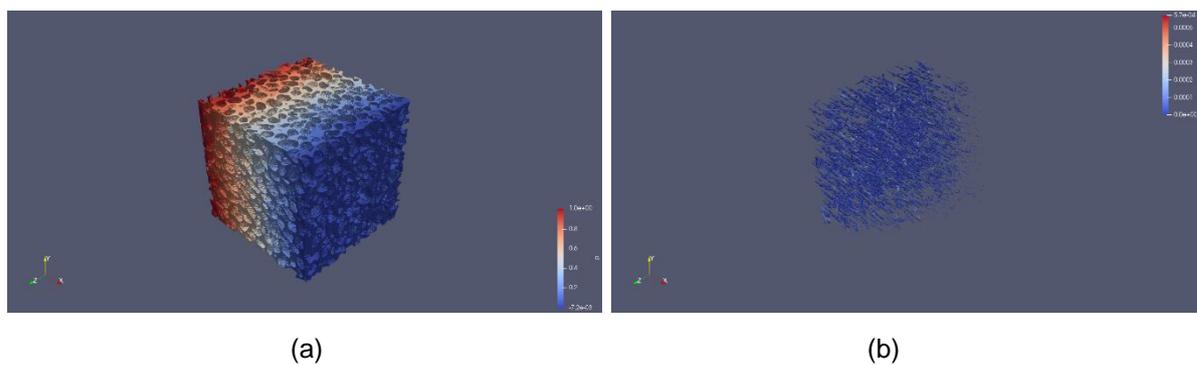
Fonte: Autoria própria.

Figura 30 – Amostra LV60C: (a) Campo de Pressões, (b) Corte com Campo de Velocidades.



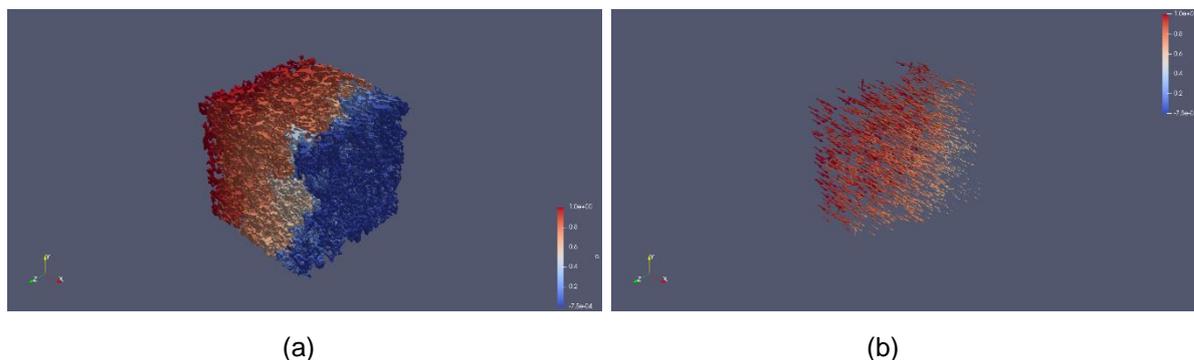
Fonte: Autoria própria.

Figura 31 – Amostra F42B: (a) Campo de Pressões, (b) Vetores com Campo de Velocidades.



Fonte: Autoria própria.

Figura 32 – Amostra S3: (a) Campo de Pressões, (b) Vetores com Campo de Pressões.



Fonte: Autoria própria.

#### 4.3.2 Análise do Menor Volume Representativo

Foram realizadas simulações a partir da extração de diferentes dimensões do modelo de rocha Bentheimer (1000x1000x1000) com o intuito de analisar qual volume representativo mínimo em que as propriedades da amostra se manteriam constantes em relação a dimensão característica do modelo. Assim, caso haja estabilização das propriedades com volumes menores, não necessitará processar modelos de dimensões maiores que requerem um alto custo computacional. Na Tabela 12 são mostrados os valores da permeabilidade média de acordo com a dimensão característica da amostra.

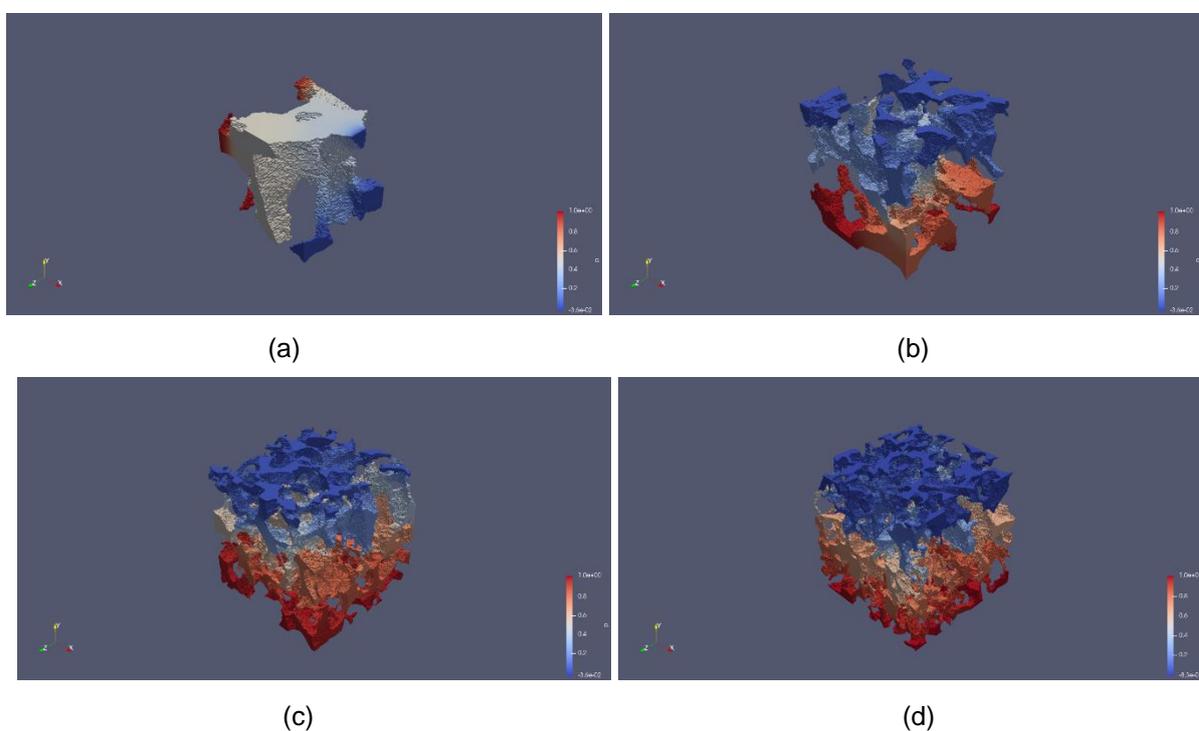
Tabela 12 – Permeabilidade, em miliDarcy, para dimensões distintas da amostra Bentheimer.

<b>Dimensões</b>	<b>Permeabilidade</b>
<b>100x100x100</b>	5,74936
<b>200x200x200</b>	4,09914
<b>300x300x300</b>	3,17965
<b>400x400x400</b>	2,90737
<b>600x600x600</b>	3,05659
<b>700x700x700</b>	3,11738
<b>800x800x800</b>	3,13666
<b>1000x1000x1000</b>	3,13597

Fonte: Autoria própria.

Como esperado que a amostra de menor dimensão característica (100x100x100) apresentasse maior valor de permeabilidade, desde que o volume de poros representasse uma parte significativa do volume total da estrutura. Em relação à estabilidade da propriedade, vimos que a partir da dimensão 700x700x700 não há uma variação significativa, então este seria um tamanho razoável. Na Figura 33 visualizamos 4 subamostras de dimensões 100 voxels, 200 voxels, 300 voxels e 400 voxels, caracterizadas pelo gradiente de pressão ao longo da microestrutura.

Figura 33 – Amostra Bentheimer: (a) 100x100x100, (b) 200x200x200, (c) 300x300x300 (d) 400x400x400.



Fonte: Autoria própria.

## 5 CONCLUSÕES

Este estudo apresenta de forma introdutória uma comparação entre dados de benchmark extraídos a partir de vários solucionadores, incluindo Lattice-Boltzmann, dinâmica de fluidos computacional, baseada em voxel, semi-analítica e empírica no contexto de meios porosos, com o software CFD de distribuição livre OpenFOAM. Concluímos que existe uma boa concordância geral entre diferentes solucionadores utilizados no estudo de benchmark em microestruturas menos complexas, o que nos possibilitou avançar para a fase seguinte do projeto e utilizar o solucionador em amostras de microtomografia de modelos de rocha. Vale ressaltar que, como esperado, há certa discordância, entre as soluções numéricas, com o aumento da complexidade do espaço poroso.

Devemos notar que as cinco rochas incluídas na segunda etapa deste estudo estão entre os materiais geológicos mais recorrentes em trabalhos anteriores. E para validar nosso estudo foi utilizado um coeficiente de variação (COV), medida estatística que expressa a variabilidade relativa dos dados em relação à média, que nesse caso são os dados de estudos anteriores. Em três das cinco amostras, o COV para a permeabilidade apresentou valores aceitáveis inferior a 10% de variação, e nas outras duas amostras, que são as de menor dimensão, valores abaixo de 30%. Já para a porosidade, os valores obtidos apresentaram ótima concordância com os dados de referência, com um COV entre 0,004 a 3,282%.

Na etapa seguinte foram avaliadas as propriedades de amostras em dimensões maiores que acarretariam um custo computacional elevado, justificando a utilização do Cluster. Para a porosidade, o COV variou entre 0 e 3,4307%. E para a permeabilidade, dentre as dez estruturas rochosas, seis delas apresentaram COV extremamente elevados chegando a 66,734%.

Conclui-se que para a caracterização de amostras de rocha por microtomografia, o programa poreFOAM bons resultados na maioria dos casos, sendo que foram detectadas discrepâncias importantes que estão sendo investigadas.

A simulação direta com o programa poreFOAM, no entanto, para problemas de grande porte, é extremamente cara computacionalmente, tanto em termos de tempo de execução, que pode ser de vários dias em um computador paralelo, quanto em

termos de memória, para problemas de grande porte, praticamente exigindo a execução em sistemas paralelos para a obtenção de resultados em tempos curtos.

A principal limitação deste sistema é o grande custo computacional, então a principal sugestão é a implementação de técnicas para aumentar a velocidade da simulação. Podemos sugerir, entre outras, o uso de técnicas em multiescala e multifísica, uso de técnicas de inteligência artificial e uso de GPUs como técnicas a serem investigadas.

## REFERÊNCIAS

ANDRÄ H. et al. Digital rock physics benchmarks. **Part I: Imaging and segmentation, Computers & Geosciences**. No 50, p. 25–32, 2013.

ANDRÄ H. et al. Digital rock physics benchmarks. **Part II: Computing effective properties, Computers & Geosciences**. No 50, p. 33–43, 2013.

**ANP**. Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, despacho nº 1.146 DE 23.12.2019 - DOU 24.12.2019. Disponível em: <https://atosofici-ais.com.br/anp/despacho-n-1146-2019->. Acessado em: 29 mar. 2023.

AURIAULT J. L.; BORNE L., CHAMBON R. 1985. **Dynamics of Porous Saturated Media, Checking of the Generalized Law of Darcy**. J. Acoust. Soc. Am. 77, 1641–1650.

BEAR J. **Dynamics of Fluids in Porous Media**, Elsevier, New York. 1972.

BELOZEROV I. Experimental determination of porosity and permeability properties of terrigenous reservoirs for creation and validation of a digital core model. **Arctic Environmental Research**. Vol. 18, No 4, p. 141–147, 2018. Disponível em:

BENAVIDES F.; LEIDERMANA R.; SOUZA A.; CARNEIRO G.; AZEREDO R. B. V. Pore size distribution from NMR and image based methods: A comparative study. **Journal of Petroleum Science and Engineering**. No 184, 106321, 2020.

BERG C. F.; LOPEZ O.; BERLAND H. Industrial applications of digital rock technology. **Journal of Petroleum Science and Engineering**. No 157, p.131–147, 2017.

CRANDALL D.; AHMADI G.; SMITH D. H. Computational Modeling of Fluid Flow through a Fracture in Permeable Rock. **Transport in Porous Media**. Vol. 84, p. 493–510, 2010.

DANDEKAR A. Y. *Petroleum Reservoir Rock and Fluid Properties*. **CRC Press**. 2013. Disponível em:

DARCY, H. **Les fontaines publiques de la ville de Dijon**. Paris, Dalmont, 1856.

DONG, H. **Micro-CT Imaging and Pore Network Extraction**. Imperial College London, 2007.

**IMPERIAL COLLEGE LONDON**. Imperial is a global top ten university with a world-class reputation in science, engineering, business and medicine. Disponível em: <http://www.imperial.ac.uk/earth-science/research/research-groups/perm/research/pore-scale-modelling/software/>. Acessado em: 29 mar. 2023.

JAFARI A.; HASANI M.; HOSSEINI M.; GHARIBSHAHI R. Application of CFD technique to simulate enhanced oil recovery processes: current status and future opportunities. **Petroleum Science**. No. 17, 434–456, 2020.

KROTKIEWSKI M.; LIGAARDEN I. S.; LIE K.; SCHMID D. W. On the Importance of the Stokes-Brinkmann Equations for Computing Effective Permeability in Carbonate Karst Reservoir. **Communications in Computational Physics**. Vol. No 5, p. 1315-1332, 2011. Disponível em:

LYONS W. C.; PLISGA G. J.; LORENZ M. D. *Standard Handbook of Petroleum and Natural Gas Engineering (Third Edition)*. **Gulf Professional Publishing**. Chap 7. Pages 7-1-7-55, 2016. Disponível em:

MANDZHIEVA R. **Introduction to digital core analysis: 3D reconstruction, numerical flow simulations and pore network modelling**. 2017. Dissertation. Norwegian University of Science and Technology, Department of Geoscience and Petroleum.

MEHMANI A.; KELLY S.; TORRES-VERDÍN C. Leveraging digital rock physics workflows in unconventional petrophysics: A review of opportunities, challenges, and

benchmarking. **Journal of Petroleum Science and Engineering**. No 190, p. 107083, 2020.

MEHMANI A.; VERMA R.; PRODANOVIĆ M. Pore-scale modeling of carbonates. **Marine and Petroleum Geology**. No 114, 104141, 2020.

MESHALKIN Y.; KOROTEEV D.; POPOV E.; CHEKHONIN E.; POPOV Y. Robotized petrophysics: Machine learning and thermal profiling for automated mapping of lithotypes in unconventional. **Journal of Petroleum Science and Engineering**. No 167, p. 944–948, 2018.

MULJADI B. P.; BLUNT M. J.; RAEINI A. Q.; BIJELJIC B. The impact of porous media heterogeneity on non-Darcy flow behaviour from pore-scale simulation. **Advances in Water Resources**. No 95, p. 329–340, 2016.

**OPENFOAM**. OpenFOAM is free, open source software for CFD from the OpenFOAM Foundation. 2023. Disponível em: <https://openfoam.org>. Acessado em: 29 mar. 2023.

**PARAVIEW**. Unleash the Power of ParaView. 2023. Disponível em: <https://www.paraview.org>. Acessado em 29 mar. 2023.

PHELAN JR F. R.; HUDSON S. D.; HANDLER M. D. Fluid dynamics analysis of channel flow geometries for materials characterization in microfluidic devices. **Rheologica Acta**. No. 45, p. 59–71, 2005.

PILLER M.; SCHENA G.; NOLICH M.; FAVRETTO S.; RADAELLI F.; ROSSI E. Analysis of Hydraulic Permeability in Porous Media. **High Resolution X-ray Tomography to Direct Numerical Simulation**. No 80, p. 57–78, 2009.

RAEINI A. Q.; BIJELIJC B.; BLUNT M. J. Generalized network modeling: Network extraction as a coarse-scale discretization of the void space of porous media. Department of Earth Science and Engineering, **Imperial College London**, 2017.

RAEINI A. Q.; BLUNT M. J.; BIJELJIC B. Direct simulations of two-phase flow on micro-CT images of porous media and upscaling of pore-scale forces. **Advances in Water Resources**. No 74, p. 116–126, 2014.

RAJAGOPAL K. R. On a Hierarchy of Approximate Models For Flows Of Incompressible Fluids Through Porous Solids. **Mathematical Models and Methods in Applied Sciences**. Vol. 17, No. 2, p. 215–252, 2007.

**SCHOLARPEDIA**. Finite Volume method. 2023. Disponível em: [http://scholarpedia.org/article/Finite\\_volume\\_method](http://scholarpedia.org/article/Finite_volume_method). Acessado em: 12 de set de 2023.

SAXENA N. et al. References and benchmarks for pore-scale flow simulated using micro-CT images of porous media and digital rocks. **Advances in Water Resources**. No 109, p. 211–235, 2017.

SAXENA N.; HOWS A.; HOFMANN R.; FREEMAN J.; APPEL M. Estimating Pore Volume of Rocks from Pore-Scale Imaging. **Transport in Porous Media**. No 129, p. 403–412, 2019.

SUZUKI A.; MINTO J. M.; WATANABE N.; HORNE R. N. Contributions of 3D Printed Fracture Networks to Development of Flow and Transport Models. **Transport in Porous Media**. No129, p. 485–500, 2019.

VAN MARCKE P.; VERLEYE B.; CARMELIET J.; ROOSE D.; SWENNEN R. An Improved Pore Network Model for the Computation of the Saturated Permeability of Porous Rock. **Transport in Porous Media**. No 85, p. 451–476, 2010.

VERSTEEG H. K.; MALALASEKERA W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics. **The Finite Volume Method**. 2007

WHITAKER S. Flow in Porous-Media: A Theoretical derivation of Darcy's-Law. **Transport in Porous Media**. No 1, p. 3-25. 1986.

XING H.; LIU Y.; GAO J.; CHEN S. Recent Development in Numerical Simulation of Enhanced Geothermal Reservoirs. **Journal of Earth Science**. Vol. 26, No. 1, p. 028–036, 2015. Disponível em:

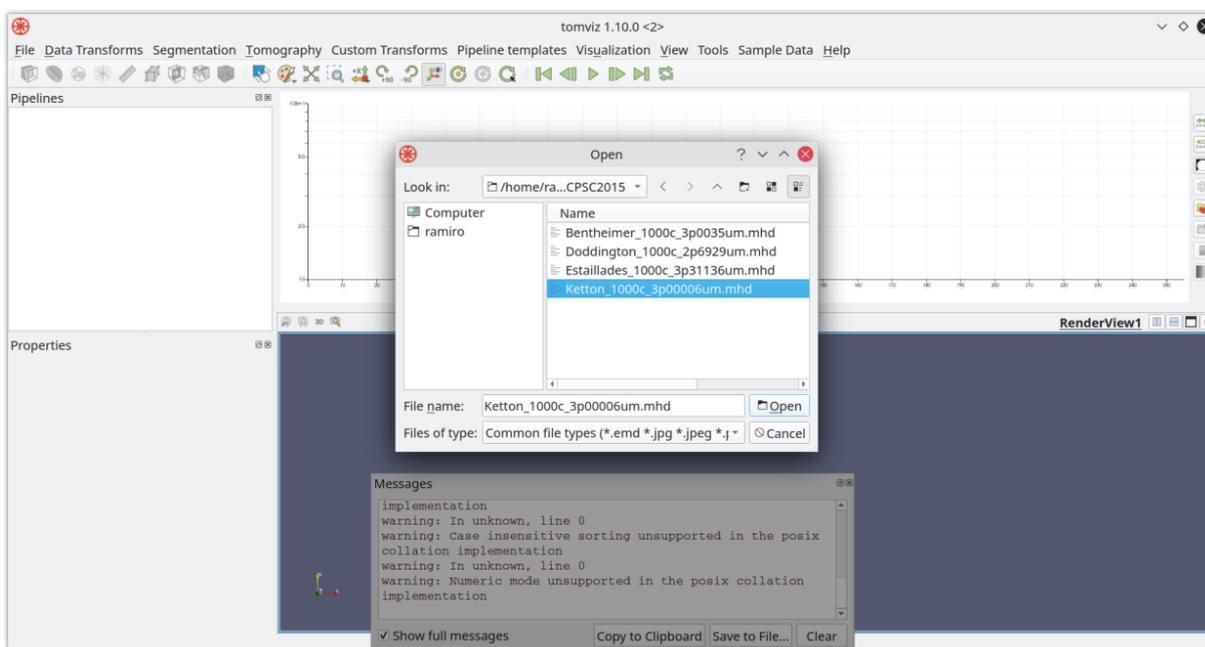
ZHANG L.; BRYANT S. L.; JENNINGS J. W.; PARUCHURI Jr. R.; ARBOGAST T. J. Multiscale Flow and Transport in Highly Heterogeneous Carbonates. *In*: SPE Annual Technical Conference and Exhibition, 2004, Houston, Texas. **Anais [...]**. Texas: SPE, 2004.

## APÊNDICES

### APÊNDICE A – EXTRAÇÃO DE SUBAMOSTRA COM O TOMVIZ

Com o Tomviz é possível selecionar uma amostra de um outro bloco definido por um arquivo *.mhd* e um arquivo *.raw*. Temos que abrir o arquivo *.mhd* como arquivo de entrada no Tomviz (Figura 34).

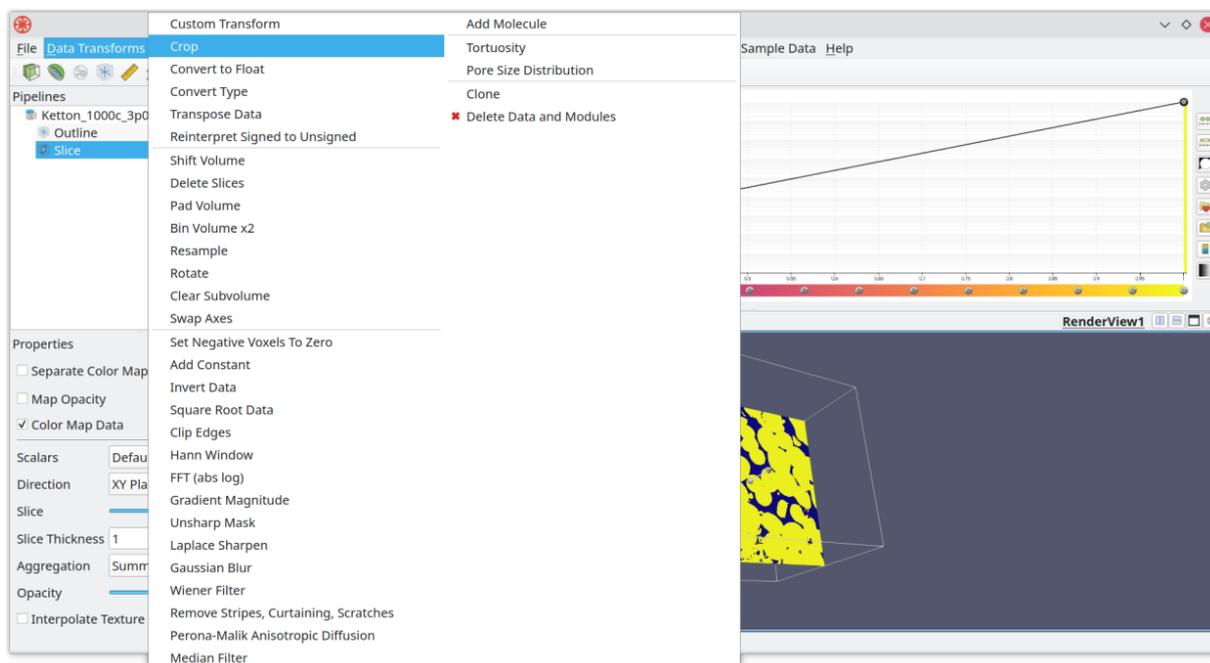
Figura 34 – Extrair amostra: arquivo de entrada.



Fonte: Autoria própria.

Em seguida, selecionar a ferramenta *Data Transforms – Crop*, na barra superior do programa (Figura 35).

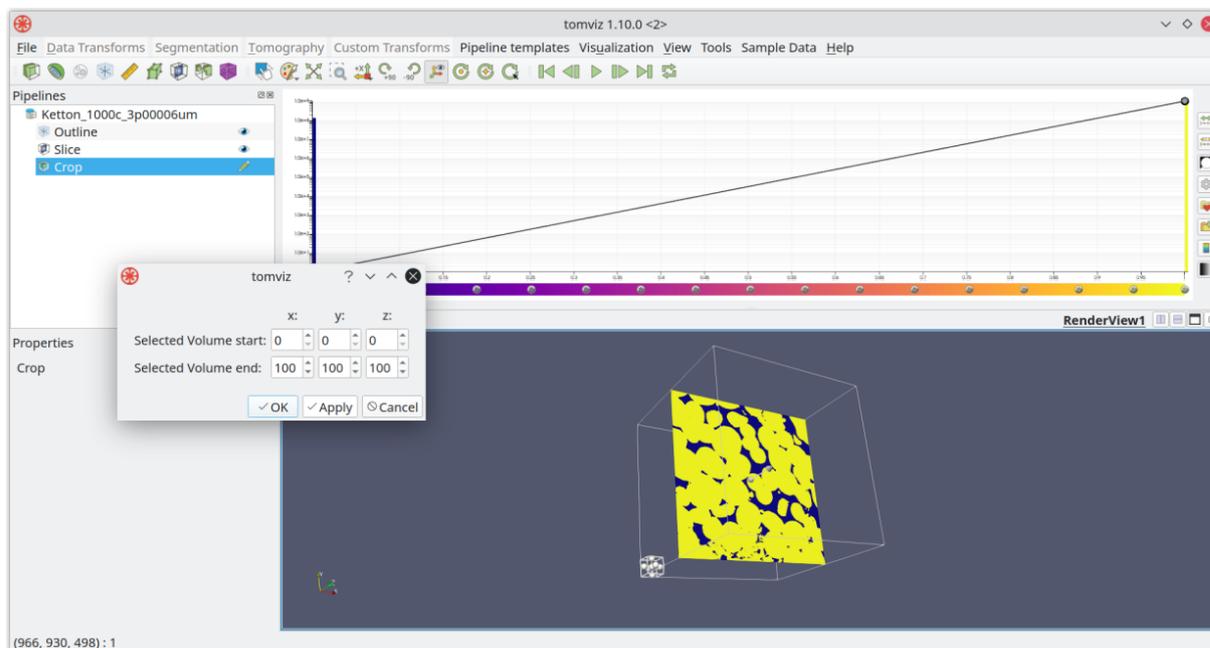
Figura 35 – Extrair amostra: ferramenta de extração.



Fonte: Autoria própria.

O próximo passo é informar os limites (em voxels) da amostra. No caso, 100x100x100, começando na origem (Figura 36).

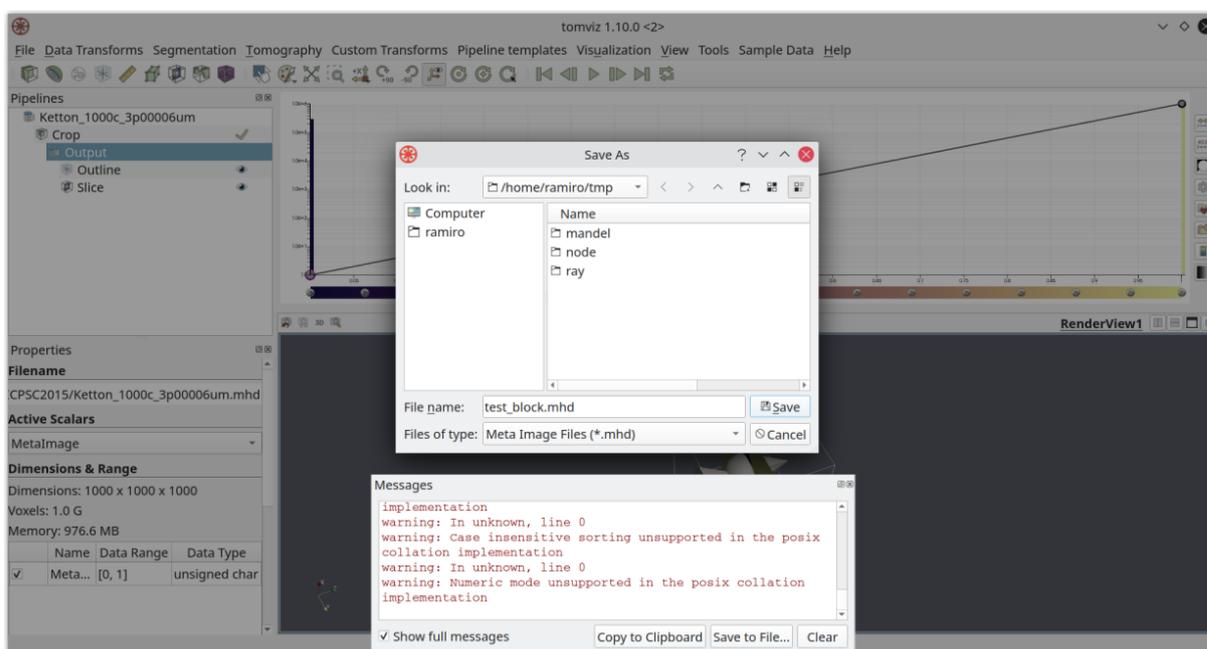
Figura 36 – Extrair amostra: limites da amostra.



Fonte: Autoria própria.

Ao aplicar o filtro o resultado é criado e fica disponível na coluna esquerda, com o nome padrão "*Crop*". Você pode dar um zoom e percorrê-lo com a fatia para ver se está tudo certo. Para salvar em um novo arquivo, clique com o botão direito sobre "*Output*", logo abaixo de "*Crop*", e selecione "*Save Data*" (Figura 37) Escolha o formato "*Meta Image Files (\*.mhd)*" e insira um nome de arquivo e o diretório onde quer salvá-lo. Antes de salvar o arquivo certifique-se de que no quadro de baixo da coluna esquerda com o rótulo "*Active Scalars*" está aparecendo "*MetaImage*", como mostrado na figura abaixo.

Figura 37 – Extrair amostra: salvar arquivo.



Fonte: Autoria própria.

Escolha "Save", e depois carregue o novo arquivo para ver se deu tudo certo. Então é possível usar este arquivo como dado de entrada para o PoreFOAM.