

Simulação Computacional do Deslocamento de Espuma Considerando a Adsorção de Surfactante

Filipe F. de Paula¹

LAMAP/UFJF, Juiz de Fora, MG

Iury Igreja²

DCC/UFJF, Juiz de Fora, MG

Grigori Chapiro³

DM/UFJF, Juiz de Fora, MG

Resumo. Este trabalho estuda numericamente a influência da adsorção de surfactante em escoamentos bifásicos líquido-gás em meios porosos heterogêneos. Neste contexto, um modelo de espuma em equilíbrio local é adotado e a espuma é tratada como um fluido não-Newtoniano. Incluindo os efeitos do surfactante na fase líquida e levando em conta os efeitos de adsorção cinética e em equilíbrio do surfactante, uma formulação de fluxo fracionário baseada na pressão global é utilizada, resultando em um sistema que acopla o problema de Darcy com as equações do transporte para as saturações de fluido e concentração de surfactante. Essas equações são divididas em dois subsistemas que são resolvidos por um algoritmo numérico sequencial que combina um método híbrido de elementos finitos para aproximar o sistema de Darcy com um método de volumes finitos de alta ordem para encontrar as saturações de fluido e concentração de surfactante. Um método de diferenças finitas implícitas é adotado para a discretização no tempo e os problemas hidrodinâmico e hiperbólico são resolvidos usando um algoritmo escalonado em diferentes escalas de tempo. Os resultados numéricos mostram o impacto negativo dos efeitos de adsorção na eficiência de varredura do gás em escoamentos bifásicos em meios porosos heterogêneos.

Palavras-chave. Surfactante, Adsorção, Espuma, Métodos mistos híbridos, Métodos de volumes finitos, Meios porosos heterogêneos.

1 Introdução

As técnicas de recuperação avançada de petróleo (*Enhanced Oil Recovery* – EOR), desenvolvidas para melhorar a produção de petróleo, são caracterizadas pela injeção de materiais que normalmente não estão presentes no reservatório. Os métodos de EOR podem ser especialmente úteis quando algum gás é injetado no reservatório, pois a eficiência de varredura do gás pode ser limitada pelo fenômeno de segregação gravitacional e pelo *fingering* viscoso [8]. O uso de espuma para controlar a mobilidade do gás é uma técnica de EOR eficaz que pode reduzir as limitações anteriormente citadas [8].

A espuma em meios porosos pode ser definida como uma dispersão de um gás em um líquido, de modo que a fase líquida seja contínua e a fase gasosa seja descontínua. Para que a espuma seja gerada, a tensão superficial entre as fases líquida e gasosa deve ser suficientemente baixa. Os surfactantes são substâncias capazes de reduzir a tensão superficial [8]. Assim, esta técnica de EOR consiste em injetar surfactante em solução aquosa para reduzir a tensão interfacial, induzindo a formação de espuma na fase gasosa e, conseqüentemente, a redução da mobilidade do gás.

¹fylype.depaula@gmail.com

²iury.igreja@ufjf.br

³grigori.chapiro@ufjf.br

Ao injetar uma solução de surfactante em um meio poroso, surge um efeito importante: a adsorção. Este fenômeno é um processo no qual a massa de surfactante dissolvido na fase líquida adere e se acumula na superfície de um sólido [2]. Uma consequência desse fenômeno é a redução da quantidade de surfactante disponível na fase líquida para geração de espuma, afetando diretamente a eficácia da espuma no escoamento em meios porosos. A adsorção pode impactar significativamente nos custos e na eficiência dos processos de inundação química, ditando a viabilidade econômica dessa técnica [11]. Na modelagem é levado em conta a adsorção em equilíbrio e a cinética. O caso em equilíbrio é caracterizado pelo balanço entre as quantidades de surfactante adsorvido e na solução. Na adsorção cinética, a taxa de adsorção e dessorção do surfactante é descrita ao longo do tempo.

Visando o uso de espuma, uma técnica de injeção em meios porosos que se destaca [16] é a injeção alternada de gás e surfactante, conhecida como SAG (*surfactant alternating gas*). No SAG, a espuma é formada quando o gás injetado encontra a solução de surfactante previamente injetado e quando a solução de surfactante encontra o gás previamente injetado. Por outro lado, quando o surfactante não é adicionado à solução aquosa, a técnica de injeção alternada recebe o nome de WAG (*water alternating gas*).

Em relação à modelagem matemática da injeção de espuma em meios porosos, o modelo adotado consiste em acoplar a lei de Darcy com as equações de conservação de massa para as fases, combinada com a equação de transporte de surfactante como um componente dissolvido na solução aquosa. Para simular o modelo matemático é adotada a metodologia numérica e computacional desenvolvida em [6, 7, 14]. A hidrodinâmica é resolvida por um método de elementos finitos mistos híbrido localmente conservativo que aproxima simultaneamente os campos de velocidade e pressão. Um esquema de volumes finitos central e *upwind* é aplicado às equações hiperbólicas para encontrar aproximações para as saturações de fluido e a concentração de surfactante. Finalmente, após a discretização no espaço, o sistema resultante é integrado no tempo usando o esquema implícito BDF (*Backward Differentiation Formula*). Os problemas hidrodinâmicos e hiperbólicos são resolvidos usando um algoritmo escalonado em diferentes escalas de tempo [5–7, 14].

Neste contexto, usando a metodologia numérica proposta para o modelo bifásico incluindo efeitos de espuma e surfactante, estudamos a influência da adsorção no deslocamento de espuma em meios porosos heterogêneos utilizando a técnica de injeção SAG. Os resultados numéricos, comparando cenários com e sem adsorção, comprovam o impacto negativo da adsorção na eficiência de varredura do gás e consequentemente na curva de produção da solução aquosa.

2 Modelagem Matemática e Numérica

O modelo matemático assume um meio poroso rígido totalmente saturado, fases incompressíveis e efeitos térmicos e gravitacionais desprezíveis. Definindo o domínio espacial $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2$ ou 3 , com contorno de Lipschitz $\Gamma = \partial\Omega$, e o intervalo de tempo $(0, T]$, apresentamos o sistema que descreve o escoamento imiscível das fases água e gás em um meio poroso, incluindo efeitos de espuma e surfactante [6, 7, 14]

$$\mathbf{u} = -\kappa\lambda\nabla p \quad \text{e} \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\phi \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} + (1 - \phi)\rho \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial (\mathbf{f}u_i)}{\partial x_i} + \nabla \cdot (\mathbb{C}\nabla \mathbf{S}) = \Phi, \quad (2)$$

$$f_{w \rightarrow s}^{\text{kin}} = (1 - \phi)\rho \frac{dC_s^{\text{kin}}}{dt}, \quad (3)$$

onde i denota a direção espacial. Definimos ϕ como a porosidade do meio, \mathbf{u}_β denota a velocidade superficial da fase β (com $\beta = g$ para a fase gasosa e $\beta = w$ para a fase aquosa), com $\mathbf{u} = \sum \mathbf{u}_\beta$, p

é a pressão global [4, 5], $\rho = \rho_s/\rho_w$ é a densidade adimensional, com ρ_s sendo a densidade da rocha e ρ_w sendo a densidade da água, C_s^{kin} é a concentração de surfactante adsorvido por mecanismo cinético e $f_{w \rightarrow s}^{\text{kin}}$ é a taxa líquida de transferência de massa do meio aquoso para a fase sólida via adsorção (cinética). Os termos $\lambda_w = k_{rw}/\mu_w$ e $\lambda_g = k_{rg}/\mu_g^f$ denotam a mobilidade das fases água e gás, e $\lambda = \lambda_w + \lambda_g$ denota a mobilidade total, onde a viscosidade da água, a viscosidade do gás na presença de espuma e a permeabilidade relativa da água e do gás são dadas por μ_w , μ_g^f , k_{rw} e k_{rg} , respectivamente. Além disso, $\kappa = \kappa(\mathbf{x})$ é a permeabilidade absoluta isotrópica e

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_w \\ S_w C_s \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 \\ C_s^{\text{eq}} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_w \\ C_s f_w \end{bmatrix}, \quad \mathbf{\Phi} = \begin{bmatrix} 0 \\ -f_{w \rightarrow s}^{\text{kin}} \end{bmatrix}, \quad \mathbb{C} = \kappa \lambda_g f_w \frac{dP_c}{dS_w} \mathbb{B}, \quad \mathbb{B} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ C_s & 0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

onde S_β é a saturação da fase β , C_s é a concentração de surfactante na água, C_s^{eq} é a concentração do surfactante adsorvido nos locais de equilíbrio no meio poroso, $f_w = \lambda_w/\lambda$ é a função de fluxo fracionário da água e P_c é a pressão capilar. Os termos C_s^{eq} e $f_{w \rightarrow s}^{\text{kin}}$ são definidos usando o modelo de Langmuir [13], como segue:

$$C_s^{\text{eq}} = \frac{K_1^{\text{eq}} C_s}{1 + K_2^{\text{eq}} C_s}, \quad f_{w \rightarrow s}^{\text{kin}} = \frac{K_1^{\text{kin}} C_s}{1 + K_2^{\text{kin}} C_s} - K_{\text{des}} C_s^{\text{kin}}, \quad (5)$$

onde K_1^{eq} , K_2^{eq} , K_1^{kin} e K_2^{kin} são parâmetros empíricos e K_{des} é a taxa de dessorção.

Os efeitos não-Newtonianos da espuma são incluídos no sistema (1)-(3) através da definição da viscosidade efetiva do gás [10]

$$\mu_g^f = \mu_g + \frac{\alpha n_{\text{max}}}{|\mathbf{v}_g|^{\frac{1}{3}}} n_D, \quad \text{onde} \quad n_D = \begin{cases} \frac{\sqrt[3]{\zeta}}{\sqrt[3]{18}} - \frac{\sqrt[3]{\frac{2}{3}} a}{\sqrt[3]{\zeta}}, & P_c < P_c^*, \\ 0, & P_c \geq P_c^*, \end{cases} \quad (6)$$

onde $n_D = n_f/n_{\text{max}}$ e n_{max} referem-se à textura de espuma normalizada e à textura de espuma de referência máxima, respectivamente, $\mathbf{v}_g = \mathbf{u}_g/(\phi S_g)$ é a velocidade intersticial do gás, μ_g é a viscosidade do gás na ausência de espuma, α é uma constante empírica, $\zeta = \sqrt{12a^3 + 81} + 9$ e $a = \frac{k_{-1} |\mathbf{v}_g|^{\frac{2}{3}} n_{\text{max}}}{k_1^0 |\mathbf{v}_w|}$, sendo $\mathbf{v}_w = \mathbf{u}_w/(\phi S_w)$ a velocidade intersticial da água.

As permeabilidades relativas da água e do gás e a pressão capilar são definidas por [3]

$$k_{rw} = k_{rw}^0 \left(\frac{S_w - S_{wc}}{1 - S_{wc} - S_{gr}} \right)^{n_w}, \quad k_{rg} = k_{rg}^0 \left(\frac{1 - S_w - S_{gr}}{1 - S_{wc} - S_{gr}} \right)^{n_g}, \quad P_c = \sigma \sqrt{\frac{\phi}{\kappa}} \left(\frac{0,022}{S_w - 0,15} \right)^{0,2}, \quad (7)$$

com σ denotando a tensão da interface gás-líquido, considerada constante.

2.1 Metodologia Numérica

O algoritmo sequencial proposto por [6, 7, 14] é usado para resolver (1)-(3). O problema é desacoplado em dois subproblemas: um conjunto de equações descrevendo a hidrodinâmica (1), com o passo de tempo Δt_u , e um sistema de equações descrevendo o transporte (2), com o passo de tempo $\Delta t_s < \Delta t_u$. Neste contexto, são adotados métodos numéricos específicos para cada subproblema. As equações da hidrodinâmica (1) são aproximadas usando um método de elementos finitos mistos híbridos naturalmente estável introduzido por Raviart e Thomas em [15] e o sistema de transporte (2) é resolvido usando um esquema *central-upwind* de volumes finitos conservativo, de alta ordem, com difusão numérica reduzida, proposto por Kurganov, Noelle e Petrova (KNP) em

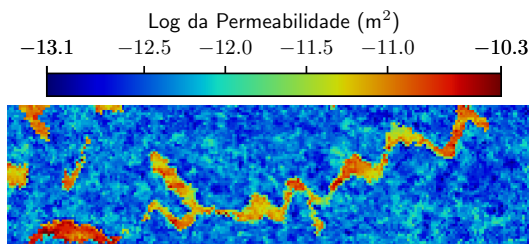


Figura 1: Campo de permeabilidade da camada 36 do projeto SPE10. Fonte: Preparado pelo autor.

[12]. O algoritmo para resolver o problema de hidrodinâmica foi implementado usando a biblioteca `deal.II` [1], enquanto que para a integração do tempo nas equações de transporte foi adotada a implementação do esquema BDF do pacote CVODE, disponível na biblioteca SUNDIALS [9]. A combinação dessas abordagens deu origem ao simulador interno, denominado FOSSIL, validado a partir da reprodução de diversos resultados analíticos e experimentais [6, 7, 14].

3 Resultados Numéricos

Nesta seção, usando a metodologia numérica e computacional apresentada na Seção 2.1, estudamos a influência da adsorção de surfactante no escoamento bifásico em meios porosos heterogêneos. Adotando a técnica de injeção SAG, na qual após a injeção de solução de surfactante somente gás é injetado, e a camada 36 do 10º projeto SPE (ver Fig. 1), as simulações são realizadas por 50.000 segundos em um domínio bidimensional medindo $3,67 \times 1,0$ m, com uma malha de 220×60 células. O meio é pré-saturado com água e a solução aquosa injetada contém surfactante na concentração 1,0 wt.%. Os demais parâmetros estão descritos na Tabela 1.

Tabela 1: Parâmetros de simulação adaptados de [3, 7, 14].

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
Viscosidade da água (μ_w) [Pa s]	$1,0 \cdot 10^{-3}$	Permeabilidade [mD]	300
Viscosidade do gás (μ_g) [Pa s]	$1,8 \cdot 10^{-5}$	k_1^0 [$s^{1/3}m^{-13/3}$]	$1,65 \cdot 10^{15}$
Saturação residual de água (S_{wc})	0,38	k_{-1}^0 [m^{-1}]	10,0
Saturação residual do gás (S_{gr})	0,0	$P_{c,max}^*$ [Pa]	$3,0 \cdot 10^4$
Máximo k_{rg} (k_{rg}^0)	1,0	K_1^{eq} [-]	0,1
Máximo k_{rw} (k_{rw}^0)	0,7	K_2^{eq} [wt. % $^{-1}$]	4,0
Expoente para k_{rg} (n_g)	3	K_{des} [s^{-1}]	$2,0 \cdot 10^{-4}$
Expoente para k_{rw} (n_w)	3	α [$Pa s^{2/3}m^{1/3}$]	$7,4 \cdot 10^{-18}$
Max. foam texture (n_{max}) [m^{-3}]	$1,0 \cdot 10^{12}$	C_s de referência (C_s^{ref}) [wt. %]	0,083
Velocidade de injeção (\bar{u}) [$m s^{-1}$]	$1,41 \cdot 10^{-5}$	Tensão de interface (σ) [N/m]	0,033
C_s de injeção [wt. %]	1,0	K_1^{kin} [s^{-1}]	$3,5 \cdot 10^{-3}$
Saturação de água inicial (S_w^0)	1,0	K_2^{kin} [wt. % $^{-1}$]	100
Porosidade (ϕ)	0,18	Densidade adimensional (ρ)	2,4

Os resultados para a concentração de surfactante na fase aquosa, textura de espuma e saturação de água são mostrados, respectivamente, nas Figuras 2, 3 e 4. A penetração do surfactante no meio poroso, especialmente na região de alta permeabilidade, é maior no caso sem adsorção, como pode ser visto na Figura 2. O fenômeno de adsorção reduz a concentração de surfactante na fase aquosa, o que impacta diretamente na eficácia da espuma, conforme modelado em (6). Mais diretamente,

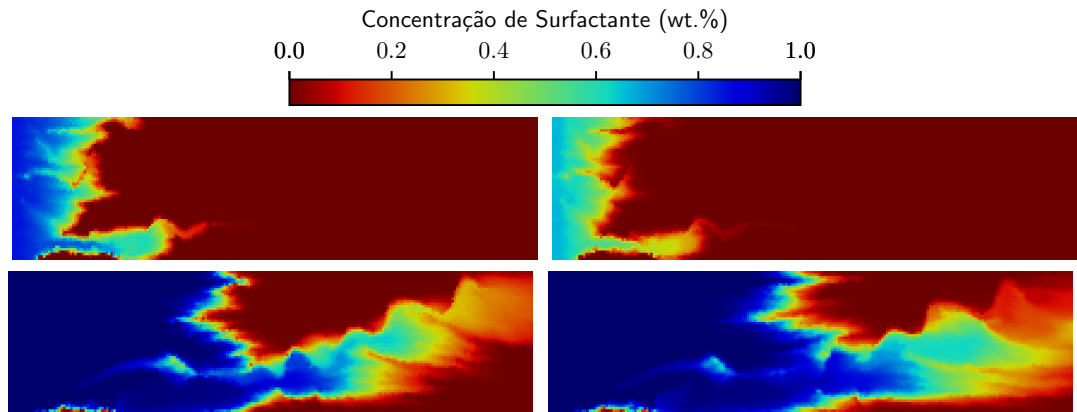


Figura 2: Concentração de surfactante na fase aquosa (C_s) em $t = 25.000$ s (esquerda) e $t = 45.000$ s (direita), para os casos com adsorção (em cima) e sem adsorção (embaixo). Fonte: Preparado pelo autor.

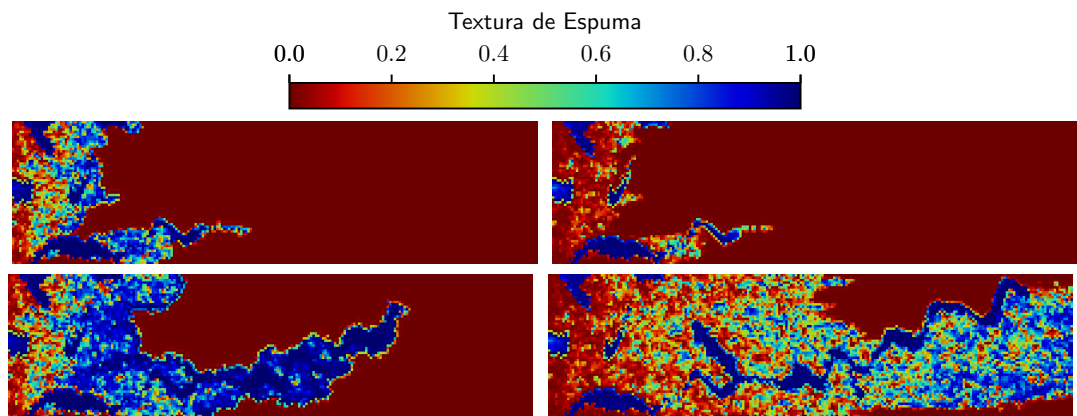


Figura 3: Textura de espuma (n_D) em $t = 25.000$ s (esquerda) e $t = 45.000$ s (direita), para os casos com adsorção de surfactante (em cima) e sem adsorção de surfactante (embaixo). Fonte: Preparado pelo autor.

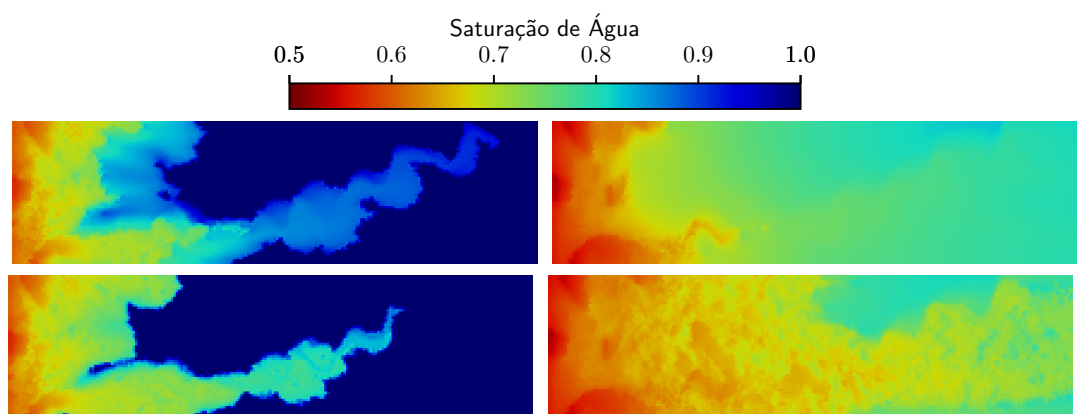


Figura 4: Saturação de água (S_w) em $t = 25.000$ s (esquerda) e $t = 45.000$ s (direita), para os casos com adsorção de surfactante (em cima) e sem adsorção de surfactante (embaixo). Fonte: Preparado pelo autor.

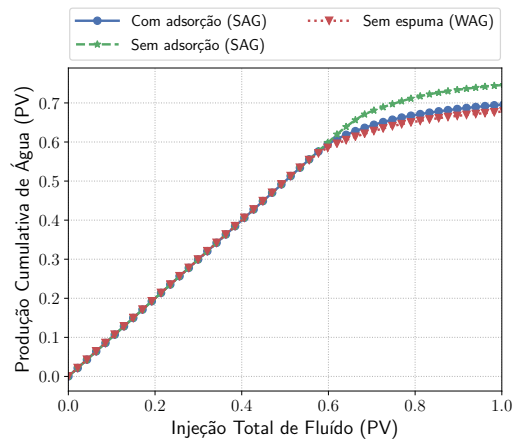


Figura 5: Produção cumulativa de água para SAG (com e sem adsorção) e WAG (sem espuma). Fonte: Preparado pelo autor.

a textura da espuma é afetada pela concentração do surfactante, pois a geração de espuma é mais proeminente no experimento numérico sem adsorção (Fig. 3). Por fim, as características do escoamento de espuma anteriores resultam em uma redução da mobilidade do gás, levando a um melhor deslocamento da fase aquosa quando a adsorção não é contabilizada (ver Figura 4).

Na Figura 5, a produção cumulativa de água para as simulações usando SAG (com e sem adsorção) pode ser observada juntamente com os resultados para a estratégia de injeção WAG, que não inclui efeitos de espuma. A simulação sem adsorção gera maior produção de água, enquanto a curva de produção de adsorção fica muito próxima da curva WAG devido à perda de surfactante para a matriz sólida do meio poroso.

4 Conclusões

A metodologia numérica proposta para resolver o modelo matemático que inclui fenômenos de adsorção cinética e em equilíbrio mostrou-se robusta, estável e capaz de simular cenários complexos em meios porosos heterogêneos. Os resultados numéricos evidenciaram que o fenômeno de adsorção pode influenciar diretamente no escoamento de espuma em meios porosos, reduzindo a quantidade de surfactante na fase aquosa e, conseqüentemente, afetando a geração de espuma. Para mitigar o efeito de adsorção, a solução de surfactante pode ser pré-injetada no meio poroso, permitindo que a adsorção ocorra apenas no estágio de pré-injeção [3]. No entanto, o surfactante ainda é perdido para a matriz sólida do meio, ainda impactando os custos de operação. Outra forma de reduzir os efeitos da adsorção é escolher um tipo de surfactante apropriado, considerando a química da superfície da rocha e a estrutura do surfactante, de forma que a atração físico-química que leva à adsorção seja reduzida [11].

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da Shell Brasil por meio do projeto “Avançando na modelagem matemática e computacional para apoiar a implementação da tecnologia ‘Foam-assisted WAG’ em reservatórios do Pré-sal” (ANP 23518-4) na UFJF e o importante apoio estratégico dado pela ANP de acordo com os regulamentos de P&D.

Chapiro foi apoiado em parte por bolsas do CNPq 306970/2022-8, e FAPEMIG APQ-00206-24.

Referências

- [1] D. Arndt et al. “The deal.II Library, Version 9.2”. Em: **Journal of Numerical Mathematics** (2020). DOI: 10.1515/jnma-2020-0043.
- [2] J. Bear. **Modeling Phenomena of Flow and Transport in Porous Media**. Theory and Applications of Transport in Porous Media. Springer International Publishing, 2018. DOI: 10.1007/978-3-319-72826-1.
- [3] Q. Chen, M. G. Gerritsen e A. R. Kovscek. “Modeling foam displacement with the local-equilibrium approximation: theory and experimental verification”. Em: **SPE Journal** 15.01 (2010), pp. 171–183. DOI: 10.2118/116735-PA.
- [4] Z. Chen e R. E. Ewing. “Fully discrete finite element analysis of multiphase flow in groundwater hydrology”. Em: **SIAM J. Numer. Anal.** 34.6 (1997), pp. 2228–2253. DOI: 10.1137/S0036142995290063.
- [5] F. F. de Paula et al. “A Numerical Algorithm to Solve the Two-Phase Flow in Porous Media Including Foam Displacement”. Em: **Lecture Notes in Computer Science**. Vol. 12143. Springer. 2020, pp. 18–31. DOI: 10.1007/978-3-030-50436-6_2.
- [6] F. F. de Paula et al. “A numerical investigation into the influence of the surfactant injection technique on the foam flow in heterogeneous porous media”. Em: **Advances in Water Resources** (2022), p. 104358. ISSN: 0309-1708. DOI: 10.1016/j.advwatres.2022.104358.
- [7] F. F. de Paula et al. “Numerical simulation of foam displacement impacted by kinetic and equilibrium surfactant adsorption”. Em: **Advances in Water Resources** 188 (2024), p. 104690. DOI: 10.1016/j.advwatres.2024.104690.
- [8] H. Hematpur et al. “Foam flow in porous media: Concepts, models and challenges”. Em: **Journal of Natural Gas Science and Engineering** 53 (2018), pp. 163–180. ISSN: 1875-5100. DOI: 10.1016/j.jngse.2018.02.017.
- [9] A. C. Hindmarsh et al. “SUNDIALS: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers”. Em: **ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)** 31.3 (2005), pp. 363–396. DOI: 10.1145/1089014.1089020.
- [10] G. J. Hirasaki e J. B. Lawson. “Mechanisms of foam flow in porous media: apparent viscosity in smooth capillaries”. Em: **SPE Journal** 25.02 (1985), pp. 176–190. DOI: 10.2118/12129-PA.
- [11] S. Kalam et al. “A review on surfactant retention on rocks: mechanisms, measurements, and influencing factors”. Em: **Fuel** 293 (2021), p. 120459. DOI: 10.1016/j.fuel.2021.120459.
- [12] A. Kurganov, S. Noelle e G. Petrova. “Semidiscrete central-upwind schemes for hyperbolic conservation laws and Hamilton-Jacobi equations”. Em: **SIAM Journal on Scientific Computing** 23.3 (2001), pp. 707–740. DOI: 10.1137/S1064827500373413.
- [13] I. Langmuir. “Chemical Reactions at Low Pressures”. Em: **Journal of the American Chemical Society** 37.5 (1915), pp. 1139–1167. ISSN: 0002-7863. DOI: 10.1021/ja02170a017.
- [14] F. F. de Paula. “Conservative Numerical Methods to Solve the Two-Phase Flow in Porous Media Including Foam Displacement”. Tese de doutorado. UFJF, 2022.
- [15] P. A. Raviart e J. M. Thomas. “A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems”. Em: ed. por I. Galligani e E. Magenes. Vol. 606. Springer, 1977, pp. 292–315. DOI: 10.1007/BFb0064470.
- [16] W. R. Rossen e C. S. Boeije. “Fitting foam simulation model parameters for SAG foam applications”. Em: **SPE Enhanced Oil Recovery Conference**. OnePetro. 2013. DOI: 10.2118/165282-MS.