Universidade Federal
do Rio de Janeiro
Escola Politécnica

DESENVOLVIMENTO DE UM ALGORITMO COMPUTACIONAL PARA RECONSTRUÇÃO DA MICROPOROSIDADE UTILIZANDO A TÉCNICA DE *PORE NETWORK MODEL*

Rafael Augusto Bastos
Rodrigues Alves

Projeto de Graduação apresentado ao Curso de Engenharia de Petróleo da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Engenheiro de Petróleo.

Orientador: William Godoy de Azevedo Lopes da Silva, M.Sc.

Co-orientador: Prof. Paulo Couto, D.Eng.

Rio de Janeiro

Março 2018

DESENVOLVIMENTO DE UM ALGORITMO COMPUTACIONAL PARA RECONSTRUÇÃO DA MICROPOROSIDADE UTILIZANDO A TÉCNICA DE *PORE NETWORK MODEL*

Rafael Augusto Bastos Rodrigues Alves

PROJETO DE GRADUAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO CURSO DE ENGENHARIA DO PETRÓLEO DA ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE ENGENHEIRO DO PETRÓLEO.

Examinada por:

_____

William Godoy Azevedo Lopes da Silva, M.Sc.

_____

Prof. Paulo Couto, D.Eng.

_____

Prof. Santiago Gabriel Drexler, M.Sc.

_____

Mateus Getirana Ramirez, M.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MARÇO de 2018

Alves, Rafael Augusto Bastos Rodrigues

Desenvolvimento de um Algoritmo Computacional para Reconstrução da Microporosidade Utilizando A Técnica de *Pore Network Model* / Rafael Augusto Bastos Rodrigues Alves. – Rio de Janeiro: UFRJ/ Escola Politécnica, 2018.

X, 79p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: William Godoy Azevedo Lopes da Silva

Co-orientador: Paulo Couto

Projeto de Graduação – UFRJ/ Escola Politécnica/ Curso de Engenharia do Petróleo, 2018.

Referências Bibliográficas: p.67-69.

1. *Pore Network Model* 2. Simulação Numérica. 3. Engenharia de Reservatórios 4. Coquinas. I. Silva, William Godoy Azevedo Lopes da. & Couto, Paulo. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola Politécnica, Curso de Engenharia do Petróleo. III. Desenvolvimento de um Algoritmo Computacional para Reconstrução da Microporosidade Utilizando A Técnica de *Pore Network Model* / Rafael Augusto Bastos Rodrigues Alves. – Rio de Janeiro: UFRJ/ Escola Politécnica, 2018.

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer a minha família por todo apoio durante não apenas este trabalho mas toda minha vida. Sei que nunca poderia ter chego a conclusão de minha graduação sem o esforço de meus familiares, sem os conselhos que recebi e as pelas palavras de tranquilização e incentivo que me foram ditas. Acima de tudo agradeço ao carinho que me deram e a esperança que depositaram em mim quando escolhi o caminho que seguiria ao fim do ensino médio. São inúmeros os motivos que pelos quais gostaria de agradecer, mas espero que essas simples palavras sejam o suficiente para expressar minha gratidão: “muito obrigado por tudo”.

Agradeço também a todos os meus amigos, tanto aqueles com os quais divido minha vida desde quando aprendia a escrever meu nome quanto aqueles que vim a conhecer durante minha graduação. Choramos e rimos juntos, reclamamos, discutimos, nos entendemos, vivemos dias preguiçosos jogando conversa fora em um bar e vivemos dias de absoluto caos e estresse com vestibular, trabalhos e provas. Escolhemos caminhar juntos em nossas vidas, e a todos aqueles que compartilham comigo essa escolha, agradeço profundamente.

Agradeço ao meu orientador William Godoy por toda ajuda durante este projeto de graduação, sem o qual este trabalho não poderia sequer ter começado. Sua paciência em ouvir e ensinar, tanto quanto sua determinação em me guiar para a execução de um bom trabalho, foram um dos principais motivos pelos quais pude concluí-lo com satisfação e orgulho. Esta vitória é uma conquista tanto minha quanto dele e espero que este trabalho possa honrar todo esforço que ele depositou em mim.

Agradeço ao meu co-orientador e coordenador de meu curso, Paulo Couto, pelo indispensável encaminhamento acadêmico. Agradeço pelos conselhos que busquei durante a graduação, sem os quais não poderia ter encontrado o melhor caminho a seguir. Sua disposição e empenho em tornar as vidas dos estudante de engenharia de petróleo na UFRJ melhor e mais simples, nos ajudando a resolver todos os problemas que surgiram e nos dando alternativas para concluirmos nosso curso da melhor forma possível apesar de todas as limitações que encontramos, são dignas de muito mais do que apenas meus sinceros agradecimentos. Felizmente, tenho certeza que, como eu, muito de seus alunos sentem grande gratidão por tudo que fez por nós.

Também preciso agradecer ao professor Santiago Drexler pela motivação que me deu em estudar o escoamento de fluidos, assunto que agora perseguirei em meu mestrado, e pelo incentivo em me dedicar à graduação não com foco em obter um diploma, mas sim como uma forma de começar a compreender os fenômenos que me fascinam. Sua postura como professor, que engloba muito mais que a excelente qualidade de suas aulas, foi grande motivo de inspiração para mim e acredito que também o foi para muitos outros de seus alunos e colegas.

Muito obrigado também ao Mateus Ramirez por aceitar compor minha banca, assim como pelos conselhos e opiniões que me deu durante a execução deste trabalho.

Agradeço também aos pesquisadores Enno T. de Vries e Elizabeth Pontedeiro, professor Amir Raoof e professor M. T. van Genuchten, por ajudarem a traçar as diretrizes iniciais deste trabalho e disponibilizarem o código desenvolvido para criação de agregados em modelos de PNM.

Gostaria de agradecer ao Laboratório de Recuperação Avançada - DEI/UFRJ pela oportunidade de estagiar e de trabalhar com profissionais de excelência durante a confecção deste projeto de graduação, assim como pela disponibilização de um dos computadores fundamentais para as simulações realizadas neste trabalho.

Por fim, mas não menos importante, preciso agradecer do fundo do meu coração à Universidade Federal do Rio de Janeiro, a quem chamo carinhosamente de fundão. A oportunidade de estudar em uma universidade de tamanho prestígio por si só é algo de valor imensurável, mas todas as pessoas que conheci e todos os caminhos que se abriram para mim durante estes anos estudando em seus corredores deixarão um marca ainda mais profunda em quem sou. Símbolo de tudo o que podemos ser e, mais ainda, de tudo o que o Brasil pode ser, a UFRJ me moldou, assim como fez com tantos outros alunos. Se a grandeza de uma nação se define pelas pessoas que a formam, tenho certeza que a UFRJ, assim como as demais instituições de ensino deste país, foram e são peça fundamental no engrandecimento de nossa pátria.

"*The true test of civilization is, not the census,*

nor the size of cities, nor the crops - no,

but the kind of man the country turns out."

Ralph Waldo Emerson

Resumo do Projeto de Graduação apresentado à Escola Politécnica/ UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro de Petróleo.

DESENVOLVIMENTO DE UM ALGORITMO COMPUTACIONAL PARA RECONSTRUÇÃO DA MICROPOROSIDADE UTILIZANDO A TÉCNICA DE *PORE NETWORK MODEL*

Rafael Augusto Bastos Rodrigues Alves

Março/2018

Orientador: William Godoy Azevedo Lopes da Silva, M.Sc

Co-orientador: Paulo Couto, D.Eng.

Curso: Engenharia de Petróleo

Fenômenos de transporte em meios porosos são um aspecto crucial em diversas áreas das Ciências da Terra e com o início da exploração das reservas do pré-sal brasileiro o aprimoramento desse campo de estudo é ainda mais impulsionado. Em especial, o melhor entendimento do escoamento em rochas carbonáticas é essencial, porém esses meios representam um grande desafio devido à sua heterogeneidade e interação entre macro e microporosidade. Mesmo com o avanço da petrofísica avançada, a reconstrução digital desses sistemas porosos encontra dificuldades relacionadas ao limite de resolução das técnicas de imageamento e a dimensão do volume elementar representativo. Neste trabalho, busca-se desenvolver um algoritmo para recuperar a microporosidade não identificada durante o imageamento de amostras de coquinas, utilizando-se a técnica de *Pore Network Model* (PNM), com o objetivo de melhorar as estimativas de permeabilidade obtidas por simulação numérica.

Palavras-chave: Microporosidade, *Pore Network Model* (*PNM*), Coquinas, Simulação Numérica.

Abstract of Undergraduate Project presented to POLI/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Petroleum Engineer.

DEVELOPMENT OF A COMPUTATIONAL ALGORITHM BASED ON PORE NETWORK MODEL TO RECONSTRUCT THE MICROPOROSITY

Rafael Augusto Bastos Rodrigues Alves

March/2018

Advisor: William Godoy Azevedo Lopes da Silva, M.Sc

Co-advisor: Paulo Couto, D.Eng.

Course: Petroleum Engineering

Transport phenomena in porous medium are a crucial aspect in many areas of Earth Sciences and the begging of exploration in Brazilian pre-salt reservoirs further promotes the development of this research field. Especially, a better understanding of flow in carbonate rocks is essential. These media, however, are still challenging due to their heterogeneity and the interaction of their macro and microporosity. Despite digital rock petrophysics improvements, the digital reconstruction of carbonates is still difficult as result of resolution limit of current imaging techniques and dimension of representative elementary volume. Given those challenges, this work aims to present a methodology for recovering the microporosity which was not identified during imaging procedures of coquina samples, using Pore Network Model (PNM) based, in order to achieve better estimation of permeability with numerical simulation.

Keywords: Microporosity, Pore Network Model (PNM), Coquinas, Numerical Simualtion.

Sumário

1. Introdução....1
1.1. Contexto....1
1.2. Motivação....2
1.3. Objetivos....3
1.4. Estrutura do Trabalho....3
2. Contexto de Estudo....5
2.1. Definição de Parâmetros....5
2.1.1. Porosidade....5
2.1.2. Permeabilidade....7
2.1.3. Volume Elementar Representativo....9
2.2. Técnicas de Imageamento....10
2.2.1. Microtomografia Computadorizada de Raios X (micro CT)....11
2.3. Segmentação e Análise das Imagens....12
2.4. Modelagem da Rede Porosa....13
2.5. Simulação Utilizando PNM....14
2.5.1. Equações Governantes, Escoamento Monofásico....15
3. Metodologia....17
3.1. Características da Amostra....17
3.1.1. Medição Laboratorial da Porosidade e Permeabilidade....18
3.2. Desenvolvimento....19
3.2.1. Geração Aleatória Guiada Dentro de Um Volume Limitado....20
3.2.1.1. Características do Input....22
3.2.1.2. Características do Output....22
3.2.1.3. Características da Microporosidade....23
3.2.1.4. Definição das Redes Desconectadas....25
3.2.1.5. Seleção dos Pares de Poros....27
3.2.1.6. Delimitação do Volume Inter-Poros....29
3.2.1.7. Segmentação do Volume Inter-Poros....32
3.2.1.8. Definição dos Possíveis Centros....33
3.2.1.9. Criação dos Microporos....34
3.2.2. Verificação das Condições....35

3.2.2.1. Interseção do Tipo 1.....36
3.2.2.2. Interseção do Tipo 2.....37
3.2.3. Alternativa para a Seleção das Redes.....42
3.3. Configuração dos Computadores.....44
3.4. Análise do Desempenho Computacional.....45
3.4.1. Número de Tentativas Falhas.....45
3.4.2. Tempo de Execução Individual.....46
3.4.3. Tempo de Execução por Etapa.....46
3.5. Características da Rede de PNM.....47
3.6. Considerações para a Execução da Metodologia.....49
3.6.1. Teste de Hipóteses.....50
4. Resultados e Discussão.....52
4.1. Resultados da Estimativa de Permeabilidade.....52
4.1.1. Resultados – Experimento 1.....53
4.1.2. Resultados – Experimento 1.....56
4.2. Resultados de Custo Computacional.....60
4.2.1. Efeito do Número de Redes Consideradas.....60
4.2.2. Efeito da Natureza das Conexões.....63
5. Conclusões e Trabalhos Futuros.....65
6. Referências Bibligráficas.....67
Apêndice.....70

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contexto

Fenômenos de fluxo e transporte em meios porosos são um aspecto crucial em diversas áreas das Ciências da Terra, sendo estudados para aplicações se estendendo desde a produção de hidrocarbonetos e sequestro de CO_2 até o gerenciamento de resíduos radioativos e contaminação de águas subterrâneas. Igualmente vastas são as características desses meios, abrangendo desde solos argilosos pouco compactados a rochas sedimentares altamente pressurizadas. O próprio mecanismo propulsor do escoamento pode variar em cada caso, podendo ser, entre outros, a ação da gravidade, capilaridade, expansão térmica, aplicação de pressão hidráulica ou suas combinações [1].

Na indústria do petróleo, rochas carbonáticas possuem considerável importância por serem encontradas como reservatórios de óleo e gás, em especial com as descobertas na seção pré-sal das bacias de Santos e Campos, como em Tupi, Libra e Carcará [2]. Entretanto, esses são sistemas ainda pouco compreendidos e que se diferenciam consideravelmente de rochas com propriedades aproximadamente homogêneas, como boa parte dos arenitos. Assim, correlações clássicas como a lei de Archie para resistividade, a estimativa de permeabilidade de Kozeny-Carman e a parametrização de Brooks-Corey da permeabilidade relativa não são aplicáveis a esse grupo de rochas [3][4].

Ao mesmo tempo, compreender o complexo comportamento desses sistemas é essencial para uma previsão acurada e aplicação eficiente de procedimentos industriais [1][5]. As características geométricas da rede porosa são de especial importância, sendo um dos principais elementos na manifestação das propriedades hidráulicas efetivas do meio, como a relação pressão capilar-saturação [6]. As dimensões dos poros, os estrangulamentos que os ligam, sua área superficial, sua conectividade e distribuição são algumas das propriedades que regem o comportamento do material [1]. A composição mineralógica e tamanho dos grãos que compõem a rocha também afetam significativamente a resposta do meio, em especial por sua interação com o fluido, como a característica de molhabilidade e reações associadas (dissolução e precipitação) [7]. Alguns desses fenômenos agem modificando não apenas as características do escoamento e do fluido, mas também a própria geometria dos poros, afetando propriedades macroscópicas do transporte, como permeabilidade e difusividade [5][7]. Existe,

portanto, uma intrínseca relação entre a microestrutura, composição química e propriedades macroscópicas do material [1].

Métodos experimentais para a medição dos parâmetros relevantes ao fluxo existem, sendo que em alguns casos são de difícil execução, custosos e demorados [1][5]. Aliado ao custo de obtenção de amostras, essas dificuldades tendem a reduzir sua aplicação quando um número vasto de condições precisa ser testado, como no caso de reservatórios altamente heterogêneos ou de grande extensão [5]. Simulações na escala de poro, baseados na reconstrução digital do meio poroso, são uma alternativa possível para suplementar os experimentos existentes. Algumas de suas vantagens são a capacidade de gerar previsões relativamente acuradas e a custos menores, ao mesmo tempo que permitem a variação sistemática de parâmetros, como geometria e dimensão dos poros, propriedades dos fluidos e condições de contorno[5]. Modelos na escala de poros também permitem melhor avaliar e compreender a relação entre propriedades macroscópicas de transporte e os parâmetros da estrutura porosa [5]. Essa dependência em geral não pode ser capturada pela abordagem experimental, uma vez que esta se baseia na medição de propriedades médias da amostra.

1.2 Motivação

Dado o contexto de estudo, as motivações para o presente trabalho são:

- A importância dos fenômenos de fluxo e transporte em meios porosos e sua aplicação em diversos campos do conhecimento;
- A necessidade de melhor compreender o escoamento em rochas carbonáticas, tendo em vista a ampla presença de carbonatos como reservatórios de petróleo, em especial no cenário brasileiro de exploração do pré-sal; e
- O efeito dominante que a microporosidade exerce sobre as propriedades petrofísicas das rochas carbonáticas e a dificuldade desta ser detectada e caracterizada por parte das técnicas de imageamento existentes.

1.3 Objetivos

O presente trabalho foi desenvolvido com foco no impacto da microporosidade em redes modeladas pela técnica de *Pore Network Model* (PNM), a partir de imagens obtidas por microtomografia computadorizada de raios X, tendo como objetivos:

- Recuperar as características da rede poroso real pela reconstrução da microporosidade, presente na amostra, através de PNM e pela reconexão de sistemas erroneamente modelados como isolados;
- Aprimorar a estimativa de parâmetros petrofísicos obtidos por simulação numérica, sem comprometer sua viabilidade do ponto de vista de esforço computacional; e
- Comprovar a aplicabilidade do algoritmo elaborado, do ponto de vista computacional, para volumes de rocha tipicamente estudados no contexto de modelagem de carbonatos.

Apesar de aparentemente limitado quanto ao objeto de estudo, as diferenças dos processos e forças propulsoras em diferentes meios não impedem que conceitos e técnicas usadas e desenvolvidas para estudar o fenômeno de transporte na escala de poros possam ser levados de uma aplicação a outra [1]. Dessa maneira, o presente estudo em coquinas é realizado não apenas pela relevância do estudo da petrofísica avançada (digital) e do escoamento de fluidos em carbonatos, mas também na esperança de contribuir para desenvolvimento de futuros trabalhos nessa área.

1.4 Estrutura do Trabalho

O capítulo 2 apresenta uma contextualização do estudo, abordando os conceitos básicos e definição dos parâmetros petrofísicos avaliados neste trabalho, assim como uma descrição das principais etapas para a reconstrução digital da amostra. Entre elas, encontram-se apresentadas as técnicas de imageamento, com destaque para a microtomografia computadorizada de raios X, métodos de segmentação e análise de imagens, modelagem da rede porosa e simulação utilizando a técnica de *PNM*.

No capítulo 3, aborda-se em detalhes a metodologia empregada neste trabalho, iniciando com a caracterização da amostra e medição laboratorial de suas propriedades de interesse,

seguindo para as etapas e considerações da técnica empregada para a geração de microporosidade. Nesta seção também são apresentados a configuração dos computadores empregados e os parâmetros utilizados para avaliar o desempenho computacional do código elaborado.

No capítulo 4 apresenta-se os resultados obtidos pela metodologia abordada quanto às modificações do modelo original, medidas de permeabilidade e eficiência dos algoritmos desenvolvidos .

O capítulo 5 trata da discussão e relevância dos resultados, apontando os possíveis caminhos a serem seguidos em trabalhos futuros.

Por fim, o Capítulo 6 apresenta as referências bibliográficas, encontrando-se ao final deste trabalho os apêndices.

2. CONTEXTO DE ESTUDO

2.1 Definição de Parâmetros

Antes de estudar o fenômeno de transporte em meios porosos, faz-se necessário a definição dos parâmetros de interesse, que são analisados, obtidos e estimados a partir de amostras de coquinas, focos deste trabalho. Outro conceito de grande relevância é o do volume elementar representativo (REV, em inglês) e sua relação com as propriedades estudadas, assim como as limitações que impõe nas etapas de imageamento, reconstrução e modelagem digitais, e simulação.

2.1.1 Porosidade

Meios porosos, como rochas reservatórios, são constituídas de material sólido (i.g grãos que formam a matriz rochosa) e espaços porosos (i.e poros) intersticiais, caracterizados pela inexistência do material sólido [8]. A razão entre o volume de poros e o volume total da rocha é o que define a porosidade, sendo esta comumente expressa em porcentagem, como apresentado na equação 2.1:

$$\phi = \left(\frac{Vp}{Vt}\right).100 \tag{2.1}$$

onde a porosidade é representada por ϕ, Vp representa o volume dos poros e Vt o volume total da rocha, sendo calculada como:

$$Vt = Vp + Vs \tag{2.2}$$

onde Vs o volume do total dos sólidos.

Uma vez que os poros podem ou não estar conectados, define-se porosidade conectada ou efetiva (ϕ_e) a fração da porosidade total que está interconectada e, portanto, é capaz de permitir o escoamento de fluidos. Conforme apresentado por AHR [8], as medidas realizadas em laboratório para se obter o volume de poros, na realidade obtém a porosidade conectada da amostra, uma vez que dependem da ocupação dos poros por

algum fluido conhecido. Os poros não conectados formam a porosidade residual (ϕ_r), definida por:

$$\phi = \phi_e + \phi_r \tag{2.3}$$

Os próprios poros podem ser estudados utilizando uma grande variedade de técnicas, partindo desde a avaliação da superfície original ou polida da rocha por microscópios ópticos até o uso de microscopia eletrônica de varredura. Outras técnicas envolvem impregnar a rocha com uma resina plástica apropriada e, em seguida, dissolver a rocha com o uso de algum solvente, obtendo indicações do tamanho e formato dos poros e suas conexões (i.e gargantas de poro) através da análise da estrutura resultante [9]. O resultado dessas análises comprova a existências de diferentes tipos de sistemas porosos, que podem ser classificados utilizando características descritivas, diagenéticas e/ou petrografia da rocha [9].

Segundo SELLEY [9], os principais tipos de porosidade podem ser separados em:

i. Porosidade primária ou deposicional: definida como aquela associada à deposição dos próprios sedimentos e partículas que os compõem, podendo ainda ser subdividida em:
    a. Intergranular ou interpartícula: ocorre nos espaços entre os grãos ou detritos que formam a trama ou arcabouço (*framework*) de um sedimento;
    b. Intragranular ou intrapartícula: presente particularmente em carbonatos com origem em restos esqueletais, como o de corais ou moluscos, se caracteriza como a porosidade presente dentro dos grãos ou detritos que compõe um sedimento.
ii. Porosidade Secundária ou pós-deposicional: definida como aquela que formada após a deposição de um sedimento, sendo mais comumente encontrada em rochas carbonáticas do que em siliciclásticas, devido à maior mobilidade dos minerais carbonáticos na subsuperfície em comparação ao quartzo. Essa porosidade é, em geral, mais diversa em morfologia que a primária e pode ser subdividida em:
    a. Porosidade intercristalina: ocorre entre os cristais individuais de uma rocha cristalina, sendo característica de carbonatos que passaram por cristalização;

b. Porosidade fenestral: resultante de aberturas na estrutura das rochas maiores e mais largas do que interstícios suportados pelos grãos e em grande parte podem ser atribuídas a presença de organismos ou as rotas de fuga de gás e biogás. Esta porosidade é típica de carbonatos;
c. Porosidade móldica: formada pela dissolução de grãos da deposição primária. Por ser seletiva do tipo de grão, essa dissolução é confinada a partículas individuais e tipicamente todos os grãos de um tipo específico são dissolvidos;
d. Porosidade Vugular: também formada por dissolução e típica de carbonatos, se diferencia da móldica por atravessarem a fábrica deposicional primária da rocha, tendo dimensões maiores. Com o aumento no tamanho dos vugs há também a denominação de porosidade do tipo caverna;
e. Porosidade fratural: formada por fraturas, essa porosidade caracteriza rochas que estão fortemente litificadas e é formada posteriormente aos outros tipos de porosidade;

Outra classificação importante refere-se ao trabalho de LUCIA [10], que separa os poros em duas categorias principais: vugular (separado ou conectado) e interpartícula, definindo vugs como os poros com dimensões maiores que os grãos do arcabouço circundante. Um dos objetivos desta classificação é fornecer um método, laboratorial e de campo, prático para descrição visual da porosidade em amostras carbonáticas, mantendo ênfase nos significados petrofísicos dos vugs separados e conectados. Esta classificação é uma separação mais objetiva que genética, não fornecendo, portanto, informações acerca das características das rochas e dos poros com origem geológica comum. Entretanto, conforme destacado por AHR [8], é um método prático excelente que foca principalmente na relação entre as rochas e suas propriedades petrofísicas.

2.1.2 Permeabilidade

Durante o século XIX, os engenheiros Henri Darcy e Charles Ritter conduziram experimentos para estabelecer as leis que governam o fluxo de água através de areia. Para tal, eles utilizaram uma coluna cilíndrica recheada com areia e cascalho compactados, através da qual passaram água pura a pressão atmosférica para determinar a taxa de

fluxo [8]. O experimento foi conduzido de forma que as principais variáveis seriam as características texturais da areia e cascalho, possuindo taxas de fluxo e diferencial de pressão pequenos, se comparados aos de reservatórios de hidrocarbonetos, apresentando um fluxo laminar. Outras considerações feitas são que o meio poroso é homogêneo e isotrópico, sendo a velocidade do fluido constante durante seu escoamento.

A equação derivada viria a ser conhecida como Lei de Darcy e pode ser representada por:

$$\frac{Q}{A} = -k\left(\frac{h_1 - h_2}{L}\right) \tag{2.4}$$

onde Q é vazão e A é a área da seção transversal ao fluxo, k é a condutividade hidráulica, ($h_1 - h_2$) é a carga hidráulica e L é o comprimento da trajetória por onde passa o fluxo.

A expressão 2.4, teria de ser modificada para sua aplicação em reservatórios de hidrocarbonetos, devido às diferenças no fluido escoado e a grande faixa de variação de pressão. Para essa aplicação, a Lei de Darcy modificada é escrita como:

$$\frac{Q}{A} = -\frac{k}{\mu}\left(\frac{dP}{dL}\right) \tag{2.5}$$

onde dL é um infinitésimo do comprimento de uma amostra de rocha de secção transversal de área A, μ é a viscosidade dinâmica do fluido, que escoa em regime estacionário com vazão Q, e dP é o infinitésimo de pressão correspondente ao segmento dL. A variável k, presente em 2.4 e 2.5, é chamada de permeabilidade absoluta ou específica e representa as propriedades da rocha, tendo dimensão de área. Essa equação pressupõe que o fluxo é unidirecional e paralelo ao comprimento da amostra e que não há reação entre fluido e rocha, além da consideração de meio homogêneo.

Na indústria do petróleo, tipicamente se utiliza a unidade *darcy* (D) ou *milidarcy* (mD) para a permeabilidade, sendo a permeabilidade de 1 *darcy* definida como aquela quando um fluido de viscosidade unitária (1 Pa.s) escoa a uma taxa de 1 cm^3/s por uma amostra de rocha com secção de 1 cm^2, sob um diferencial de pressão de 1 atm/cm. Em reservatórios carbonáticos, a permeabilidade pode variar desde valores menores que 0.1 mD até acima de 10 D, no caso de fraturas ou sistemas de vugs [8].

A permeabilidade pode ser expressa de acordo com a seguinte classificação:

i) Permeabilidade Específica ou Absoluta: característica intrínseca de uma rocha ou meio poroso, relacionada ao escoamento monofásico, podendo ser medida em amostras ou testemunhos em laboratório;
ii) Permeabilidade Efetiva: medida da permeabilidade da rocha ou meio poroso a outro fluido, quando o meio está saturado, de tal forma que a presença de um fluido molhante impede a entrada do fluido não molhante em parte dos poros do meio poroso e, portanto, seu valor é menor que o encontrado para a permeabilidade absoluta;

Permeabilidade Relativa: é a razão entre a permeabilidade efetiva a uma dada saturação de um fluido e a permeabilidade absoluta a uma saturação de 100% deste mesmo fluido.

Diferente da porosidade, a permeabilidade varia tanto com o tamanho de grãos, quanto com grau de empacotamento e seleção [8]. A geometria e dimensão das gargantas e poros, o grau de interconexão entre os poros e a presença de fissuras impactam fortemente essa propriedade [8]. Apesar da hipótese original de que a permeabilidade é uma constante particular do meio poroso, ela tipicamente não é espacialmente uniforme, como observado em rochas heterogêneas, e é dependente da direção (i.e apresenta anisotropia). As condições de tensão as quais a rocha encontra-se submetida e a composição eletrolítica dos fluidos, assim como a quantidade e respectiva distribuição das fases destes fluidos, também interferem na permeabilidade [11].

2.1.3 Volume Elementar Representativo

Tradicionalmente, parâmetros petrofísicos utilizados em modelos e simuladores numéricos de escoamento de fluidos em reservatórios são determinados a partir de experimentos laboratoriais realizados com amostras das formações estudadas. Desta maneira, a descrição petrofísica acurada de um reservatório depende da obtenção de dados representativos em laboratório [12]. Por outro lado, a utilização de amostras com dimensões abaixo da escala das heterogeneidades tipicamente resulta em considerável variação das propriedades medidas [12], não viabilizando a correta correlação entre laboratório e campo.

O volume elementar representativo (*Representative Elementary Volume* - REV) denota o volume de uma amostra que é grande o suficiente para capturar uma quantidade representativa de sua heterogeneidade [7]. Dessa maneira, as propriedades medidas em um volume com dimensões de REV apresentam flutuações desprezíveis e são consideradas estatisticamente representativas do meio, conforme apresentado na figura 2-1. O REV também pode ser interpretado como o volume em que uma dada propriedade macroscópica (e.g permeabilidade) é relativamente insensível a pequenas mudanças no volume ou na localização da região de interesse dentro da amostra [13]. Entretanto, esse volume pode diferir em dimensão de acordo com a propriedade petrofísica que se deseje mensurar [12], de tal forma que uma escala representativa adequada pode depender diretamente da propriedade avaliada.

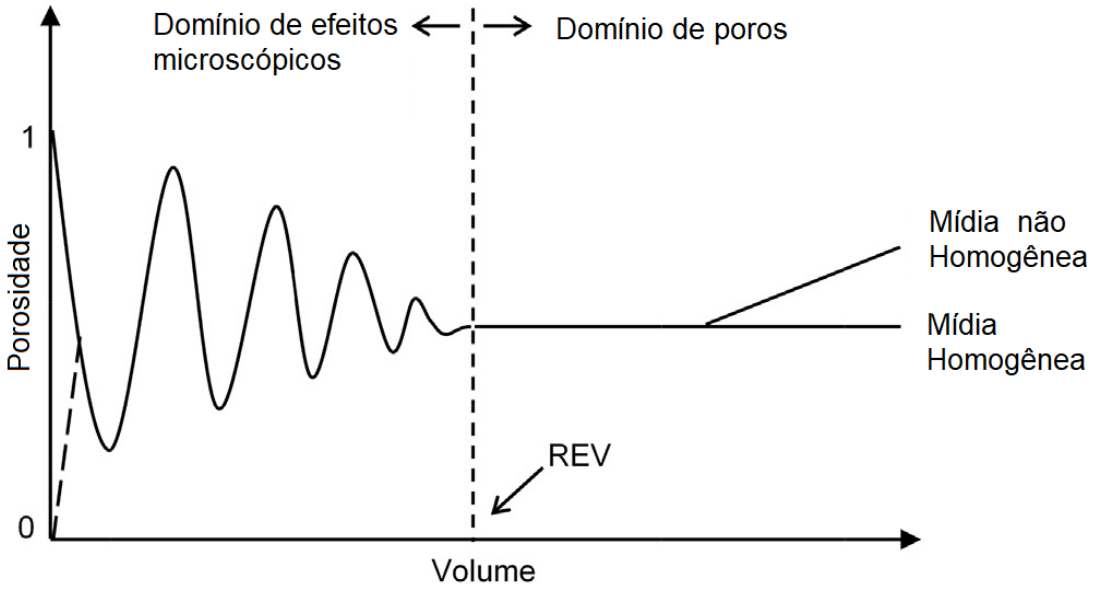

Figura 2-1 – Caracterização do REV em uma amostra. Ao atingir o REV, a porosidade torna-se estável.(Fonte: Modificado de BEAR, 1972)

2.2 Técnicas de Imageamento

A construção de um modelo na escala de poros que seja realista requer primeiramente a caracterização da rede porosa do material, o que pode ser obtido na forma de imagens 2D (e.g. microscopia eletrônica de varredura) ou 3D (e.g. microtomografia computadorizada de raios X). Técnicas de imageamento baseadas na microtomografia, entretanto, são limitadas pelo tamanho do pixel, que está relacionado com a resolução, tornando impossível a detecção de poros abaixo desse limite, e possuem zonas em que não é possível diferenciar vazios de rocha sólida, normalmente referidas como zonas de cinza.

Ao mesmo tempo, rochas heterogêneas, como o carbonato estudado neste trabalho, podem apresentar poros desde a dimensão de alguns milímetros (i.e. *vugs*) até menores que um mícron. Esses poros na escala de sub-resolução, referidos daqui em diante como microporos, muitas vezes possuem um efeito dominante nas propriedades petrofísicas, mas dificilmente são detectados e caracterizados pelas técnicas de imageamento [3], podendo ser interpretados como parte da matriz da rocha.

A microtomografia computadorizada de raios X foi a técnica aplicada à amostra deste trabalho e por isso seu funcionamento e características serão brevemente explicados, apesar de técnicas como a de feixe de íons focalizados também poderem ser utilizadas [5].

2.2.1 Microtomografia Computadorizada de Raios X (micro CT)

A técnica de micro CT possui como principais vantagens neste estudo o fato de ser um método não destrutivo e capaz de fornecer informações 3D do material em uma escala variando de mícron até milímetro. A ampla faixa de trabalho quanto ao tamanho da amostra e tamanho de pixel também é interessante por permitir a caracterização multi-escala do carbonato [5], que, conforme discutido, apresenta propriedades importantes em uma abrangente faixa de dimensão de poros.

Seu funcionamento se baseia na forma como fótons interagem com materiais sólidos, em particular quando são absorvidos. De maneira simplificada, a absorção de um fóton, proveniente do raio X incidente sobre a amostra, resulta na ejeção de elétrons das camada eletrônicas mais internas do átomo, ionizando-o. As vacâncias dessas camadas eventualmente são completadas retornando o átomo ao seu estado natural, processo que ocorre, frequentemente, associado com a emissão de uma faixa de raio X característica do átomo [14].

A medida que atravessa o material, um feixe puramente monocromático de raios-X é atenuado seguindo a lei de Lambert-Beer, apresentada na equação 2.6:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \tag{2.6}$$

onde: I é a intensidade atenuada após a passagem do raio X pelo objeto, x é a espessura do objeto atravessado; I_0 é a intensidade da radiação incidente e μ é o coeficiente de atenuação linear.

A partir da equação 2.6, notamos que I decresce com o aumento da distância x e/ou de μ, mostrando que o feixe é atenuado à medida que percorre a amostra e materiais com alto coeficiente de atenuação permitem uma menor penetração do raio X. Através da medição de I_0 e I, o coeficiente de atenuação linear médio de um material pode ser calculado, permitindo sua identificação.

Entretanto, as fontes de raio X, com exceção do laser de elétrons livre (*free electron laser*) são policromáticas, ou seja, apresentam um espectro de energia e comprimento de onda para os fótons [14]. Como o coeficiente de atenuação varia com a energia do fóton, em geral diminuindo com seu aumento, fótons de menor energia serão mais absorvidos enquanto os de maior energia possuem maior capacidade de penetrar o material. Esse fenômeno, conhecido como *beam hardening*, resulta em um espectro relativamente depletado em baixas energias. Como o feixe vai sendo progressivamente "enriquecido" em fótons com maior penetração, ele aparenta possuir coeficiente de atenuação maior no início de sua passagem pelo material, isto é, a maior presença de fótons de baixa energia resulta numa maior proporção de fótons do feixe sendo absorvidos. Dessa forma, mesmo um material homogêneo pareceria mais atenuado próximo de suas extremidades. Diversos métodos de correção parcial do *beam hardening* existem, entre elas o uso de pré-filtração do feixe, para remover os componentes de menor energia, e pós processamento da tomografia [14].

2.3 Segmentação e Análise das Imagens

Na imagem resultante da microtomografia, cada voxel está associado a um valor, em uma escala de cinza, proporcional a atenuação do raio X, que é função da densidade, número atômico e energia do feixe incidente. A partir dessa imagem de escala de cinza, medidas como a construção de um variograma (função de correlação de 2 pontos) e o cálculo da primeira ou segunda derivada dos valores de cinza (função gradiente ou matriz hessiana) podem ser realizadas diretamente. A primeira medida é tipicamente utilizada para avaliar a heterogeneidade da amostra e as dimensões do volume representativo, enquanto a segunda é empregada para avaliar a isotropia [1]. Entretanto, ruídos na imagem, presença

de artefatos e falta de nitidez podem se mostrar problemáticos, além da presença de minerais altamente atenuantes gerarem pequenos pontos claros de difícil medida e interpretação [1][14].

Neste trabalho iniciou-se o processo de análise pela etapa de segmentação, ou seja, a identificação discreta dos materiais na imagem ou binarização da mesma em apenas dois materiais [14], representando poro e rocha. Esta escolha se deve ao interesse no sistema pororo, que deve ser isolado para fins de quantificação (porosidade) e simulação do escoamento de fluidos (permeabilidade), e não na determinação da composição mineralógica da rocha. Isso pode ser feito pela escolha de um valor limiar (*threshold)* de intensidade, sendo todos os voxels com valores abaixo do mesmo designados como sendo do sistema poroso. A utilização de um valor limiar, entretanto, possui um problema de intolerância quanto às características da imagem, particularmente o ruído [14].

Os programas comerciais *Avizo Fire*® e *Matlab R2017*® e o programa livre *Fiji/ImageJ* foram utilizados para o tratamento, pré-processamento (i.g aplicação de filtros) e análise, sendo ambos amplamente utilizados em pesquisas e na indústria. A escolha do valor limiar foi realizada com base no estudo desenvolvido por HOERLLE *et. al* [15], que avaliou diferentes métodos de determinação do *threshold* para a amostra de coquina abordada neste trabalho.

2.4 Modelagem da Rede Porosa

Uma vez obtidas as imagens necessárias, binarizadas em voxels de poro e material sólido, diversas metodologias para a construção do modelo podem ser utilizadas. Uma primeira classe corresponde aos algoritmos que agem diretamente nas imagens 3D da rede porosa, preservando assim toda a morfologia detectada na etapa de imageamento. Alguns exemplos incluem *lattice-Boltzman*, fluidodinâmica computacional clássica (*Classical Computational fluid dynamics - CFD*) e hidrodinâmica direta [1]. Esses métodos, apesar de adequados para a análise na escala de poros, tornam-se ineficientes em escalas maiores, como na meso-escala, com o aumento no número de poros interconectados [5]. Outra dificuldade enfrentada é o volume de poros que pode ser, do ponto de vista computacional, efetivamente trabalhado. Essa limitação torna esses métodos aplicáveis apenas a meios porosos cujo volume representativo elementar (*REV*), é suficientemente pequeno, da ordem de poucos milímetros cúbicos ou 1000^3 voxels, para permitir uma

resolução apropriadamente alta dos menores poros [6]. Carbonatos, por outro lado, comumente requerem REVs de dimensões maiores, na ordem de poucos centímetros cúbicos ou maiores que 1000^3 voxels, para capturar as características da porosidade vugular e ao mesmo tempo requerem alta resolução para caracterizar sua microporosidade [16].

A segunda classe de algoritmos, conhecida como *Pore Network Models*, primeiro simplifica a geometria do espaço poroso, buscando manter as características principais que regem o fenômeno de transporte. Por reduzir o esforço computacional, essa abordagem permite o uso de volumes maiores e a incorporação de mais heterogeneidades que os métodos da primeira classe, sendo, portanto, muito interessante para a análise de carbonatos e outros meios heterogêneos [5][3]. A simplificação consiste em tratar poros e gargantas como formas geométricas mais simples (e.g. esferas e cilindros, como feito neste trabalho) que se interconectam mantendo algumas das informações da topologia (e.g. conectividade dos poros) e geometria (e.g. volume dos poros) da malha real [3].

A escolha pelo PNM teve como motivação não apenas as vantagens apresentadas anteriormente, mas também a natureza das simplificações que o modelo possui. O procedimento de recriar a microporosidade por sí só é uma tarefa complexa e exigiria um conhecimento considerável de sua morfologia caso essa não fosse aproximada por uma esfera. Ao utilizar essa técnica, o problema de criação dos novos poros torna-se uma questão de selecionar um centro e um raio para o mesmo, reduzindo em muito a carga computacional e matemática necessária para sua abordagem.

2.5 Simulação Utilizando PNM

Mediante a apropriada reconstrução do sistema poroso e correto entendimento da influência do REV nos parâmetros petrofísicos de interesse, é possível calcular os parâmetros relativos ao escoamento, monofásico ou multifásico, de diferentes fluidos através de simulações numéricas.

No presente trabalho, a simulação do escoamento monofásico em nível de poros é realizada a partir do sistema construído pela técnica de PNM, com o intuito de obter uma estimativa da permeabilidade absoluta da amostra. Baseando-se nos trabalhos de RAOOF et al. [17] e JOEKAR-NIASAR & HASSANIZADEH [18], o cálculo da estimativa de

parâmetros da macroescala é possível a partir de informações da microescala, especificamente da rede obtida por PNM.

Duas abordagens podem ser utilizadas para a resolução das equações pertinentes a simulação de um ou mais fluidos utilizando PNM: modelagem de escoamento quase-estático (*quase-static flow modelling*), para o cálculo da permeabilidade absoluta, e a modelagem de escoamento dinâmico (*dynamic flow modelling*), para o cálculo e estimativa de pressões capilares e permeabilidades relativas em função da saturação de água. Como o parâmetro de interesse deste estudo é a permeabilidade absoluta, a primeira abordagem é a adequada.

2.5.1 Equações Governantes, Escoamento Monofásico

O escoamento é estabelecido na rede pela imposição de um diferencial de pressão aplicado sobre a mesma, sendo todos as outras fronteiras da rede, paralelas a direção do fluxo, tratadas como fronteiras sem fluxo. Assumindo fluxo laminar dentro do sistema poroso, o fluxo volumétrico através de uma garganta de poro pode ser assumido como descrito pela equação de Hagen-Poiseuille [17]:

$$Q_{ij} = g_{ij}\left(P_j - P_i\right) \tag{2.7}$$

onde Q_{ij} é a vazão volumétrica através da garganta de poro entre dois corpos porosos adjacentes, i e j, conectados, P_j e P_i são as pressões destes dois corpos adjacentes e g_{ij} é a condutância da garganta de poro, com formato cilíndrico, cujo valor pode ser obtido através da seguinte equação:

$$g_{ij} = \frac{\pi\, R_{ij}^4}{8\mu l_{ij}} \tag{2.8}$$

sendo R_{ij} o raio da garganta de poro que conecta os corpos i e j, μ a viscosidade dinâmica do fluido e l_{ij} o comprimento da garganta de poro.

Para um escoamento incompressível e em regime permanente, a soma das vazões volumétricas adentrando e saindo de um cada poro deve ser zero. Dessa maneira, a equação da continuidade para um poro pode ser escrita como:

$$\sum_{j=1}^{N_i} Q_{ij} = 0; \qquad i = 1,2,3,\dots,N_i \tag{2.9}$$

onde Q_{ij} é a vazão volumétrica dentro da garganta de poro indo do corpo poroso *i* para o corpo *j*, e N_i é o número de coordenação do poro *i*.

A equação 2.9 pode ser aplicada a todos os poros, com exceção daqueles nas duas fronteiras de fluxo em que a pressão é especificada. As equações 2.7-2.9 podem ser resolvidas através de um sistema linear de equações com uma matriz de coeficientes esparsa, simétrica e definida positiva, que será resolvida para a obtenção das pressões nos corpos porosos. Considerando que a rede estudada como um REV da amostra, a média da velocidade de um fluido no poro, $\bar{v}$, pode ser calculada como [17]:

$$\bar{v} = \frac{Q_{tot}\, L}{V_f} \tag{2.10}$$

onde Q_{tot} é a vazão total através da rede de poros, que pode ser determinada na entrada ou saída da rede de poros como a soma de todas os fluxos, *L* é o comprimento da rede de poros e V_f é o volume total da fase líquida dentro da rede de poros.

A permeabilidade absoluta *k* da amostra é então calculada utilizando-se a equação de Darcy:

$$k = \frac{\mu Q_{tot}\, L}{A\Delta \mathrm{P}} \tag{2.11}$$

onde μ é a viscosidade do fluido, ΔP é o diferencial de pressão entre a entrada e a saída da rede de poros e *A* é a área da seção transversal da rede porosa.

3 METODOLOGIA

3.1 Caracterização da Amostra

A amostra utilizada neste trabalho é uma coquinas proveniente da formação Morro do Chaves, Bacia Sergipe-Alagoas. Essa coquina possue importante analogia com as coquinas da formação Coqueiros devido ao fato de que ambas formações representam a deposição do mesmo tipo de sedimento (coquinas) durante o mesmo intervalo de tempo (Barremiano-Aptiano) [19]. A formação Coqueiros está localizada na Bacia de Campos e pertencente ao Grupo Lagoa Feia, principal gerador da bacia, sendo, portanto de grande interesse em estudos petrofísicos e geológicos.

Das amostras inicialmente coletadas, foi selecionado um plugue (figura 2-2) com base no trabalho de ESTRELLA [20]: 1-4. Este plugue possuía formato cilíndrico com 3,81 centímetros (1,5 polegadas) de diâmetro e foi cortado de forma a possuír 3,81 centímetros de altura, mantendo o diâmetro original. As dimensões para o corte foram arbitradas para que a amostra pudesse ser analisada no microtomógrafo computadorizado de raios X utilizando-se o menor tamanho de pixel possível (resolução máxima permitida).

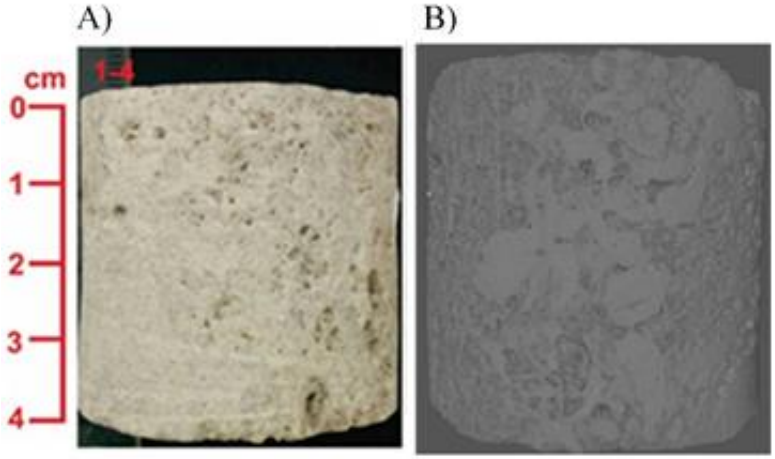

Figura 2-2 – Plugue 1-4 (A) proveniente da formação Morro do Chaves. Esta amostra de coquinas é considerada análoga da formação Coqueiros, parte do principal grupo gerador da Bacia de Campos. Em (B) observa-se o modelo 3D reconstruído da amostra através do software *Avizo Fire® 8.1*.

Devido às grandes dimensões da amostra, foi necessário a utilização de um tamanho de pixel de aproximadamente 9,97 µm, acabando por reduzir sua resolução espacial.

A tabela 3.1, apresenta a relação entre o tamanho de pixel e a resolução para alguns valores padrões do microtomógrafo utilizado (modelo *Bruker Skyscan 1173*).

Tabela 3.1 – Resolução espacial para diferentes tamanhos de pixel utilizando-se o microtomógrafo modelo *Bruker Skyscan 1173* com matriz de 2240x2240 pixels [21]

Tamanho de Pixel (µm)	**Resolução Espacial (µm)**
7	19
14	37
21	54
28	74
35	93

Com base na relação apresentada na tabela 3.1, pode-se elaborar um gráfico que correlacione o tamanho de pixel das imagens obtidas através do microtomógrafo e a resolução espacial possível de ser alcançada. Este parâmetro é de grande importância pois representa as limitações da etapa de imageamento e uso do micro-CT. Para o tamanho de pixel utilizado, a resolução espacial obtida é de aproximadamente 26,25 µm.

3.1.1 Medição Laboratorial da Porosidade e Permeabilidade

Como forma de avaliar os resultados obtidos, as medidas de permeabilidade absoluta e porosidade estimadas e calculadas serão sempre balizadas e comparadas com os valores encontrados nas medições realizadas em laboratório usando a amostra com dimensões totais.

A quantificação da porosidade e permeabilidade absoluta foi feita utilizando o Sistema Avançado Automatizado de Permeâmetro-Porosímetro DV-4000 (*DV-4000 Advanced Automated Permeameter Porosimeter System*) da Weatherford Laboratories, pertencente ao Laboratório de Recuperação Avançada de Petróleo (LRAP), da COPPE/UFRJ.

Utilizou-se a técnica de Expansão de Gás Hélio aplicando a Lei de Boyle e Lei de Charles para medir a porosidade efetiva da amostra. Essa escolha se baseou no trabalho de LUCIA [22], que considera o método como sendo o mais preciso para a obtenção dos valores de porosidade conectada em amostras. O gás hélio utilizado é direcionado a uma câmara calibrada à prova de vazamento onde a rocha está localizada (*Matrix Cup* ou *Core Holder*), podendo-se determinar volume de grãos, densidade e volume poroso, podendo-se medir sistemas porosos que variam entre 0,1% e 40%.

A permeabilidade absoluta é medida através da permeabilidade a gás, neste caso nitrogênio, utilizando-se a lei de Darcy para regime permanente de escoamento. Um fluxo constante de nitrogênio passa através da amostra, criando-se uma pressão de entrada, e o programa do equipamento automaticamente computa a pressão de fluxo e de saída, calculando a permeabilidade absoluta. A utilização do nitrogênio é por conta do pequeno volume da molécula, capaz de avançar por pequenos sistemas porosos conectados, e principalmente pelo baixo custo de operação, o que inviabiliza a utilização de hélio.

3.2 Desenvolvimento

Baseando-se no artigo de VRIES *et. al* [23] e em seu algoritmo para criação de agregados em meios porosos, algumas alternativas para conectar as vizinhanças isoladas a matriz principal de poros foram estudadas antes de se obter a metodologia apresentada neste trabalho. Entre elas, a possibilidade de moldar os agregados esféricos propostos no artigo para adquirirem forma elipsoidal ou alinhar os microporos criados entre pontos das zonas a serem conectadas. A primeira alternativa foi abandonada pela motivação teórica de que a grande quantidade de microporos conectados nas zonas de indeterminação do carbonato não ser necessariamente representativa [1]. Outras desvantagens dessa abordagem eram a complexidade de impedir que esses elipsoides se interceptassem e o grande custo computacional esperado para a simulação de escoamento, dado a introdução expressiva de corpos porosos e gargantas na rede. A segunda opção, apesar de interessante por sua simplicidade, não permitiria incluir no modelo a tortuosidade típica dos canais de fluxo, característica determinante, segundo SELLY [9], no escoamento de meios poroso. Desta maneira, apesar de conservar, simplificadamente, o fenômeno de expansão e estrangulamento dos canais, dificilmente permitiria uma descrição adequada do meio.

Buscando conservar ao máximo os atributos principais do sistema poroso que regem o escoamento neste tipo de meio, como topologia e geometria dos poros e gargantas, desenvolveu-se o algoritmo, apresentada neste trabalho, de geração aleatória guiada dentro de um volume limitado.

3.2.1 Geração Aleatória Guiada Dentro De Um Volume Limitado

Primeiramente são definidas as vizinhanças (redes porosas) desconectadas, intercaladas por uma zona de indeterminação em escala de cinza nas imagens de microtomografia e com indícios de conectividade. A determinação e comprovação de conjuntos de poros com essas características formam uma área de estudo ainda em desenvolvimento e de grande complexidade, ligada em parte ao problema de determinação do *threshold* [1] [16] [15] e geração e simulação multi-escala da rede porosa [1]. A obtenção do valor de limiar (threshold) está fora do escopo do presente trabalho e é considerada dado de entrada (*inputs*) proveniente de fontes externas. O algoritmo proposto inicia definindo os pares de macro (ou meso) poros, um pertencente a vizinhança a ser conectada e outro a rede principal, que serão interligados pelos microporos introduzidos. Os critérios para essa seleção estão apresentados em 3.2.1.5. Em seguida, um volume imaginário entre esses pares é delimitado por um hexaedro (tronco de pirâmide quadrangular) e segmentado em partes iguais segundo os critérios descritos em 3.2.1.6 e 3.2.1.7. Um ponto dentro de cada segmento é eleito aleatoriamente para ser o centro de um dos microporos que, após interligados, formarão o canal de conexão entre os pares de poros originalmente presentes e detectados na amostra. Apesar dessa determinação aleatória dos centros, o processo das ligações em si é guiado pela obrigatoriedade de certas condições serem cumpridas, entre elas a conectividade pré-determinada e posição dos poros adequada para impedir a sobreposição de gargantas, conforme descrito em 3.2.1.2.

Uma vez obtido um conjunto de microporos que satisfaçam as condições estabelecidas, a conexão em questão é considerada completa e o algoritmo reinicia o procedimento para o próximo par de poros, encerrando uma vez que o número exigido de novas conexões seja atingido ou não seja possível formar novas conexões. Caso alguma das conexões não permita a introdução de novos poros que respeitem as condições, ela é descartada e um novo par de poros é eleito, sendo procedimento refeito. A figura 3-1 apresenta o fluxograma deste trabalho, que será discutido em maiores detalhes nas próximas sessões.

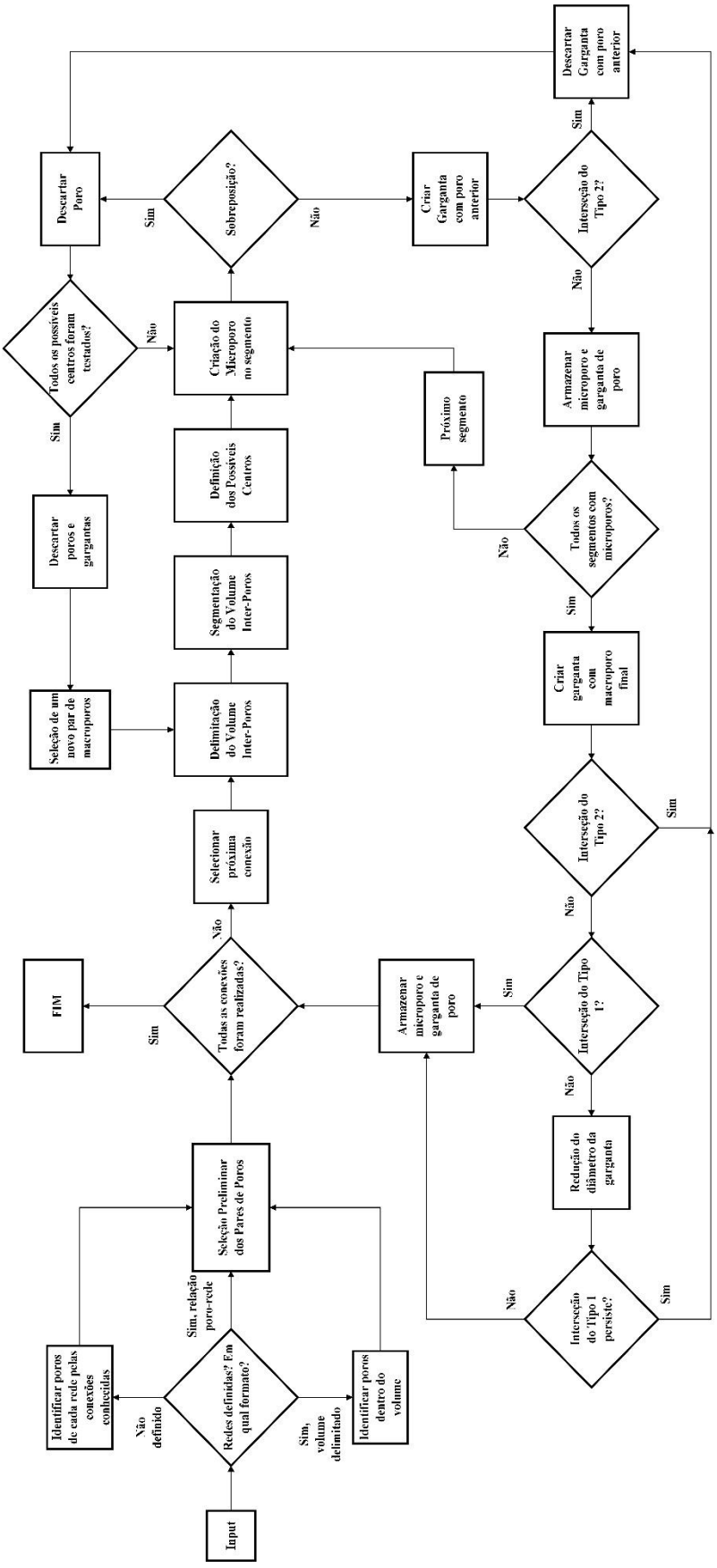

Figura 3-1 – Fluxograma detalhado do funcionamento do algoritmo proposto.

3.2.1.1 Características do *Input*

As informações necessárias para iniciar o código estão listadas a seguir, sendo seus detalhes de formatação apresentados no apêndice A:

- Centro dos poros na rede de PNM original;
- Pares de poros conectados por uma garganta;
- Raio dos poros;
- Raio das gargantas;
- Poros pertencentes a cada rede desconectada ou espaço que delimita cada rede; e
- Pares de redes a serem conectadas;

No caso da impossibilidade de delimitar visualmente cada rede ou fornecer os poros que as formam, um algoritmo foi implementado para determinar todas as redes (vizinhanças) desconectadas presentes no modelo original. Entretanto, torna-se necessário nomear manualmente cada vizinhança da maneira apropriada para manter a relação de conexão desejada.

3.2.1.2 Características do *Output*

A nova malha de poros obtida deve garantir que certas condições sejam cumpridas tendo em vista a etapa posterior de simulação do escoamento. Para tanto, algumas verificações são feitas para cada novo poro introduzido no decorrer da execução do programa, sendo descartados aqueles que falharem em algum dos critérios. Algumas das características exigidas são o não cruzamento das gargantas de poros e não sobreposição dos poros, mas outras propriedades, como a distribuição dos raios de poro, também são consideradas durante o processo, conforme discutido na seção 3.2.1.3.

Como resultado final, obtem-se os dados listados a seguir, sendo os detalhes da formatção dos arquivos gerados descrita no apêndice A:

- Centros dos microporos;
- Diâmetro dos microporos;
- Ligações estabelecidas entre os poros; e
- Diâmetro das microgargantas

O resultado pode ser em seguida analisado em programas livres, como o *ParaView 5.3.0* utilizado neste trabalho.

3.2.1.3 Características da Microporosidade

Não existe, até a conclusão deste trabalho, uma relação clara que permita determinar com exatidão algumas das características da microporosidade a ser introduzida, como comprimento das gargantas, número de poros ou sua posição. A aleatoriedade desses parâmetros, portanto, não poderia ser evitada, mas ainda sim poderia ser regulada por parâmetros conhecidos dos poros detectados na amostra (macro e mesoporos).

O diâmetro dos novos poros possui, obrigatoriamente, como limite superior o tamanho de pixel escolhido e utilizado durante microtomografia computadorizada de raios X, uma vez que teriam sido detectados durante o imageamento se possuíssem dimensões maiores. Seu limite inferior, entretanto, não pode ser facilmente estimado geometricamente, mas como o intuito é um sistema que descreva de maneira adequada o comportamento da rede e não sua estrutura propriamente dita, o diâmetro não poderia ser tão pequeno que comprometesse a posterior simulação. Dimensões muito reduzidas dos microporos e microgargantas poderiam gerar, durante o escoamento, regiões de alta pressão e consequente alta velocidade, aumentando significativamente o número de Reynolds e afastando-se do regime de escoamento laminar, que é uma das premissas das equações resolvidas durante a simulação. Tendo em vista estas considerações e buscando manter um campo de pressões e velocidade condizentes com as premissas físicas do escoamento, a estimativa para ambos os limites, presente na tabela 3.2, foi de aproximadamente 8,8 µm e 9,1 µm, para os máximos e mínimos respectivamente, e foi considerada uma distribuição uniforme dada a inexistência de uma distribuição conhecida.

Tabela 3.2 – Características da Microporosidade

Característica	Mínimo	Máximo	Distribuição Adotada
raio de poro	8,7717	9,1030	Uniforme
raio de garganta	8,3340	9,0748	Log-Normal

Para o diâmetro das gargantas, optou-se pela utilização dos limites 8,3 µm e 9,1 µm (aproximadamente), que correspondem respectivamente a 90% e 98% do menor valor de

diâmetro de garganta encontrada no modelo, pelos mesmos motivos elucidados anteriormente. Partindo da premissa de que as microestruturas possuem padrões semelhantes as da escala meso e macro, a distribuição escolhida foi a log-normal com parâmetros -4,71 e 0,0087 para μ e σ respectivamente, pelo fato da rede da amostra possuir uma distribuição semelhante para essa característica entre as macrogargantas (figura 3-2). Infelizmente, o teste de chi-quadrado resultou, para um índice de confiabilidade de 5%, na recusa da aderência da distribuição log-Normal, com parâmetros ajustados pelo pacote estatístico do *MatLab R2017*® aos dados. Outras distribuições, entre elas a gaussiana inversa e Weibull, também foram ajustadas e recusadas. A escolha foi, apesar dos resultados, mantida pela falta de uma distribuição conhecida mais adequada.

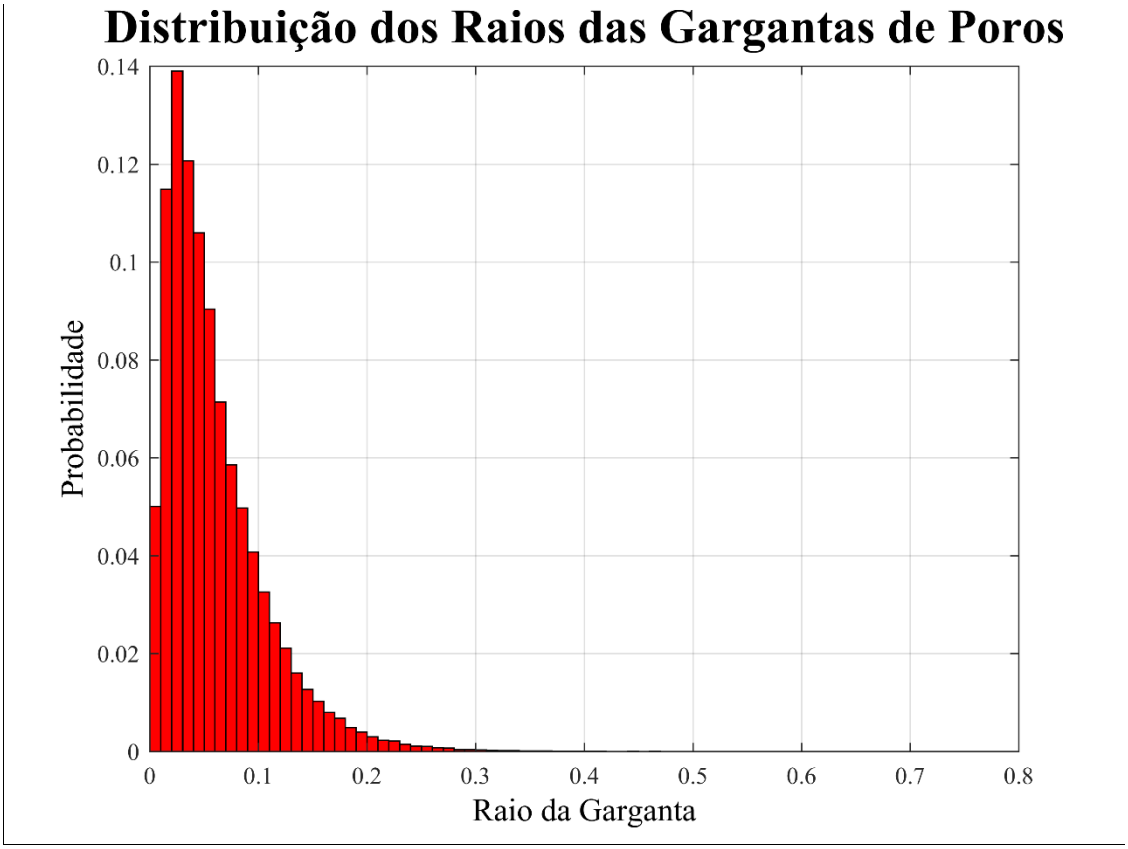

Figura 3-2 – A distribuição do raio das gargantas presentes no modelo aparenta seguir uma distribuição log-normal, apesar do teste de aderência de chi-quadrado resultar na recusa desta distribuição mesmo após ajuste de seus parâmetros.

O comprimento necessário das gargantas dos microporos introduzidos é função principalmente da posição dos poros, que por usa vez é aleatória. Dessa maneira, atribuir

uma distribuição para esse parâmetro seria inconsistente com a abordagem escolhida. Ainda assim, comprimentos muito maiores que os comumente encontrados na amostra não seriam, estatisticamente realistas, tornando necessário algum tipo de limite superior. Esse limite foi escolhido arbitrariamente como sendo o dobro da média observada na rede original, o que correspondia a um valor igual ou inferior a cerca de 88% das observações.

3.2.1.4 Definição das Redes Desconectadas

Antes de determinar os pares de poros que devem ser conectados, é preciso primeiro definir quais as redes desconectadas presentes no modelo que se acredita pertencerem a um sistema maior. Essas redes, chamadas neste trabalho também de vizinhanças, são um conjunto de poros que se interconectam formando um sistema fechado e sem comunicação com o resto da rede porosa do modelo, chamada aqui também de rede principal. A distância entres essas vizinhanças e a rede principal muitas vezes possui dimensão de garganta de poro e o espaço que as separa é uma região de indeterminação com grande possibilidade de apresentar microporos não detectados na etapa de imageamento, por conta do limite de resolução, ou desprezados na etapa de segmentação, devido ao processo de identificação de rocha e poro.

A informação de quais poros formam cada rede pode ser recebida pelo programa de duas maneiras: como um conjunto de listas de poros, correspondentes a cada vizinhança, ou como o espaço delimitado (paralelepípedo) que incorpora esses poros. Para o primeiro caso, nenhum trabalho adicional é necessário e a etapa de seleção dos pares, descrita em 3.2.1.5, pode ser iniciada. No segundo, primeiramente é preciso determinar quais poros estão envoltos por cada poliedro, o que pode ser feito utilizando o algoritmo 1 – Apêndice B. Como o volume é delimitado por um paralelepípedo cujas faces são paralelas a um dos planos euclidianos, definir quais poros encontram-se em seu interior torna-se uma simples tarefa de verificar a posição de seus centros. Definindo um valor máximo e mínimo em cada eixo como o respectivo valor máximo e mínimo dos vértices do poliedro, pode-se verificar se as coordenadas de cada centro se encontram dentro desses limites e, portanto, estão dentro do paralelepípedo. Uma consideração feita nesta abordagem é que um poro não precisa encontrar-se completamente dentro do espaço delimitado para ser agrupado em sua respectiva rede. Os motivos para essa medida são simplificar o código e facilitar a delimitação dos volumes, feita visualmente com o auxílio do programa *ParaView 5.3.0*.

Tendo em vista a possibilidade de ausência de conhecimento prévio quanto a relação poro-vizinhança aliada com a dificuldade de se realizar a delimitação descrita anteriormente, um algoritmo auxiliar foi desenvolvido para suprir as informações necessárias. Este algoritmo necessita apenas da informação de como os poros estão interligados, ou seja, o conjunto de pares de poros que formam uma ligação (variável *Conf*). Seu funcionamento pode ser encarado como o processo de se percorrer uma árvore de decisão, em que cada nó é um poro e cada ramificação representa uma conexão, sendo todos esses poros pertencentes a uma única rede. Na prática, esse procedimento descarta as conexões entre dois ou mais poros de um mesmo nível hierárquico da árvore, assim como aquelas que possuem em comum um poro do nível seguinte. Uma vez que o interesse está em encontrar todos os nós (i.e poros) que estejam interconectados e não na topologia dessas conexões, basta determinar uma das ramificações (i.e gargantas de poro) que os ligam à árvore. A figura 3-3 apresenta, esquematicamente, as iterações do algoritmo enquanto determina uma rede desconectada hipotética, mostrando as conexões descartadas.

Em maiores detalhes, o procedimento encontra-se apresentado no pseudocódigo algoritmo 2 – Apêndice B, tendo como principais etapas:

1) Seleção inicial de um poro arbitrário do conjunto de pares (linha 1) como sendo a "origem"/"refência",
2) Identificação dos poros ligados a essa origem (linha 13) e armazenamento de seus índices (linha 17), para evitar repetições.
3) Definição de cada um dos poros identificados na etapa anterior como a nova origem.
4) Identificação e armazenamento dos poros ligados a pelo menos uma das novas origens, caso já não o tenham sido.
5) Repetição das etapas 3 e 4 até ocorrer uma iteração em que não sejam encontrados novos poros (linha 21), indicando, portanto, o fim da conectividade de uma rede.
6) Todos os poros previamente identificados são classificados como pertencentes a uma vizinhança, já que estão interligados, e o procedimento é reiniciado a partir de um novo poro arbitrário que não pertença a nenhuma vizinhança conhecida (linha 27).
7) A execução do algoritmo se encerra quando não existem mais poros não agrupados (linha 24), retornando a relação poro-vizinhança.

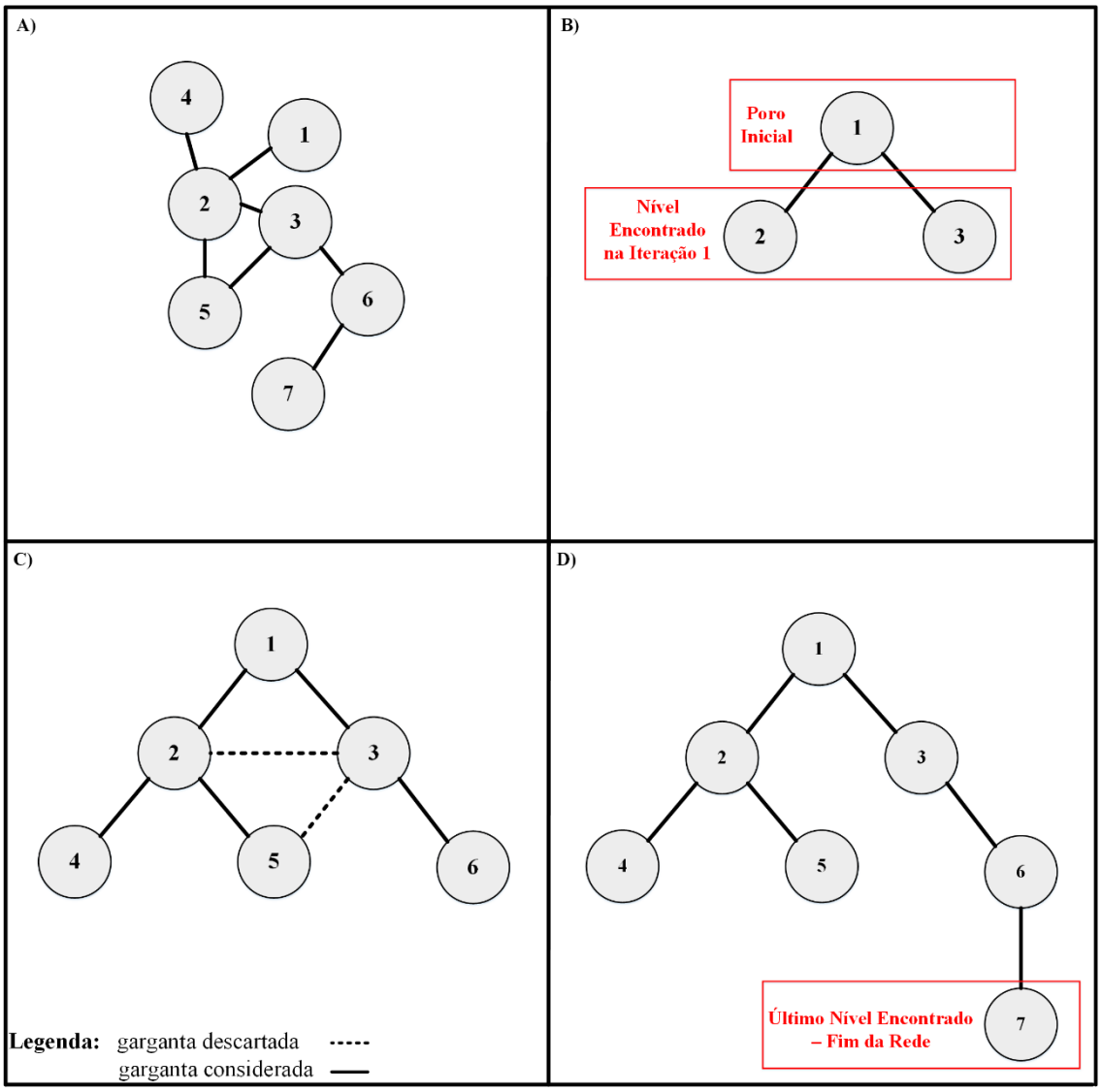

Figura 3-3 – Funcionamento Esquemático do Algoritmo de Determinação de Redes. (A) Conexões reais da rede. (B) Primeira iteração. (C) Segunda Iteração, sendo descartadas as gargantas redundantes. (D) Última Iteração, dada a inexistência de conexões a partir do poro 7, e determinação da rede.

3.2.1.5 Seleção dos Pares de Poros

Vários critérios para definir os pontos pelos quais as vizinhanças devem ser conectadas podem ser aplicados, partindo desde uma seleção aleatória em uma dada distribuição até o uso de alguma relação entre os poros da vizinhança e sistema poroso principal.

Dada a natureza heterogênea das rochas carbonáticas e a dificuldade de descrever a topologia dos poros, não existe uma metodologia bem definida para relacionar as

características do poro com sua conectividade. Uma abordagem simples e teoricamente aceitável é de que as vizinhanças se conectem umas às outras preferencialmente pelos poros mais próximos de cada rede.

Baseando-se nessa suposição, um algoritmo para definir os pares de poros, um pertencente a cada rede a ser conectada, foi desenvolvido usando a distância dos centros como parâmetro de decisão, sendo os pares mais próximos selecionados. O raio dos poros não foi considerado por não ser expressivo, perante a distância dos centros, para a amostra testada. Por tratar-se de distâncias euclidianas, seu cálculo é expresso pela equação:

$$d(p,q) = \sqrt{(q_1 - p_1)^2 + (q_2 - p_2)^2 + (q_3 - p_3)^2} \qquad (3.1)$$

Onde p e q são pontos em um espaço euclidino tais que, em coodenadas cartesianas, $p = (p_1 , p_2 , p_3)$ e $q = (q_1 , q_2 , q_3)$ e d é a distância entre esses pontos

Para esse cálculo utilizou-se o algoritmo "IPDM: *Inter-Point Distance Matrix*", elaborado e fornecido como software aberto por John D'Errico [24], por oferecer maior acurácia e melhor desempenho que a implementação direta da equação 3.1.

O algoritmo 3 – Apêndice B descreve o funcionamento dessa etapa de seleção, que é considerada preliminar dada a possibilidade de alguns pares selecionados não serem apropriados para as conexões (i.e. não viabilizarem uma microestrutura condizente com os critérios apresentados em 3.2.1.2 e 3.2.1.3) e, portanto, precisarem ser mudados.

As conexões são computadas e armazenadas na variável $Nhood_{con}$ (linha 1) de forma a preservar a característica de estarem sequenciadas pelos pares de redes desconectadas, ou seja, todas as ligações entre um par de vizinhanças são estabelecidas antes de se iniciar o processo para o próximo par.

Uma vez constatado a necessidade de estabelecer um novo par de poros, algumas mudanças são aplicadas sob o algoritmo 3, visando diminuir o esforço computacional de calcular todas as distâncias, ao mesmo tempo que se impede a seleção de pares anteriormente descartados. A primeira mudança existe na natureza do *output* retornado pela função IPDM, que agora trata-se de uma matriz cujas linhas remetem aos poros de uma rede, aqui nomeada *rede partida*, enquanto as colunas se relacionam com os poros da outra rede, *rede chegada*. Isso significa dizer que, após a devida correção dos índices,

a posição linha *n* e coluna *m* apresenta a distância entre o poro *n* de *rede partida* até o poro *m* de *rede chegada*.

Dado que as conexões serão formadas seguindo a ordem com que aparecem na variável $Nhood_{con}$, a mudança nas vizinhanças envolvidas significa obrigatoriamente que todas as suas conexões foram concluídas. Essa característica permite que a matriz de distâncias entre os poros seja computada apenas uma vez por par de regiões.

Mantendo o critério de menor distância para a seleção dos pares de poros, o problema se torna então encontrar o valor mínimo da matriz de distâncias, o que pode ser feito determinando o vetor dos mínimos de cada coluna e em seguida o mínimo valor deste vetor.

A garantia de que um par descartado não seja novamente selecionado vêm da substituição de sua referente distância, na matriz, pelo valor simbólico *Not-A-Number*, marcando assim o par como inadequado.

3.2.1.6 Delimitação do Volume Inter-Poros

Dado dois poros originalmente detectados na amostra e que foram eleitos como as extremidades da conexão a ser estabelecida entre duas redes porosas desconectadas, poros P_1 e P_2, é preciso delimitar entre eles um volume no qual os microporos podem ser introduzidos. Essa delimitação tem como objetivos impedir a criação de microporos muito distantes dos poros que devem interligar, evitar a tortuosidade excessiva das gargantas criadas e reduzir o número de possibilidades para a criação dos novos poros. Os dois primeiros estão relacionados com improbabilidade desse tipo de configuração na realidade, uma vez que exigiriam a criação de gargantas com comprimentos muito acima dos valores típicos da amostra. Uma tortuosidade muito expressiva, em conjunto com as dimensões reduzidas das gargantas, também poderia resultar em problemas numéricos na etapa de simulação, como falta de convergência causada por um gradiente de pressões elevado e pela geometria do meio. O terceiro objetivo é proveniente da necessidade de reduzir o tempo de execução do programa, buscando uma maior eficiência sem comprometer a qualidade dos resultados.

Conforme previamente mencionado em 3.2, optou-se neste trabalho pela utilização da figura geométrica de um tronco de pirâmide quadrangular. O principal fator para essa

escolha foi a extensão do espectro de diâmetro de poros constatado na amostra, possuindo entre 9,26 e 827,23 μm, tornando provável a seleção de pares de poros com dimensões muito discrepantes. Para atingir os objetivos anteriormente enumerados, fez-se necessário a capacidade de o volume estreitar ou expandir à medida que se aproximava dos macroporos. Outra consideração para a escolha dessa forma geométrica foi a simplicidade matemática que oferecia e os bons resultados obtidos por sua construção utilizando a função *AlphaShape*, pertencente ao pacote *MatLab R2017*®.

O hexaedro escolhido pode ser definido a partir dos vértices que formam suas faces opostas e paralelas. Como o intuito inicial é permitir a criação de microporos em qualquer ponto próximo à superfície dos poros originais, optou-se por definir essas faces como o quadrado que circunscreve a seção de círculo máximo de cada poro. Dada a possibilidade de grande diferença nas dimensões desses quadriláteros, um fator arbitrário de correção é empregado, visando reduzir ou expandir suas áreas para que sejam mais equiparáveis. O valor numérico desse fator foi definido como sendo tal que os lados dos quadrados nunca sejam 7,5 vezes inferior ou 30 vezes superiores ao raio dos microporos a serem introduzidos, porém não buscou-se, no presente trabalho, ajustar um valor ideal.

Por simplicidade matemática nas etapas posteriores, a orientação inicial das faces é dada de forma que seu vetor normal seja paralelo ao eixo de coordenadas *Z* (figura 3-4 A) e em seguida uma delas é deslocada de maneira que os centros das faces seja colinear ao vetor normal a face de um dos poros (figura 3-4 B). A distância entre os centros das faces deve ser mantida igual a distância entre os centros dos poros (*dz*). Esse artifício está descrito nas linhas 10 a 16 no algoritmo 4 – Apêndice B, sendo que os vértices são facilmente obtidos por combinações de soma e subtração das coordenadas *X* e *Y* dos centros e os raios, figura 3-5.

Na etapa de criação dos poros, descrita na sessão 3.2.1.9, o hexaedro sofre rotação em relação ao centro do poro de menor coordenada em Z, de maneira a tornar o vetor normal colinear ao segmento de reta que liga os centros de ambos os poros, conforme figura 3-4 C. A condição imposta na linha 4 do Algoritmo 4 advêm da necessidade de garantir que, após a rotação, o centro de cada face coincida com o centro de seu respectivo poro, ou seja, impedir a situação em que os vetores sejam colineares, porém com sentidos opostos, após a rotação.

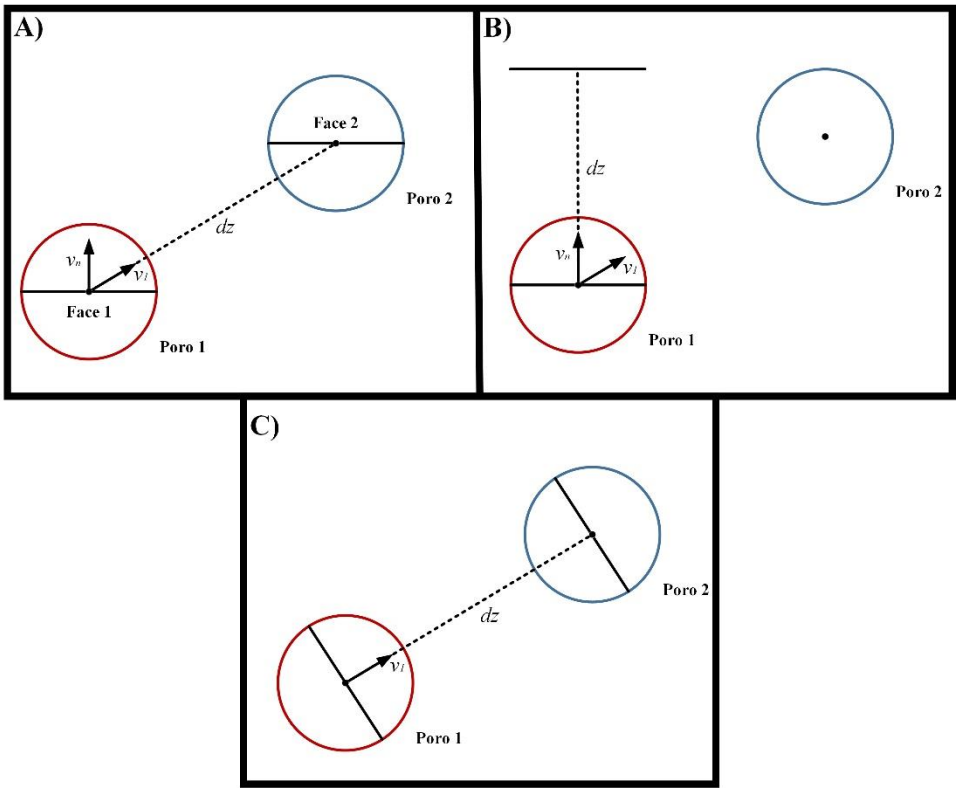

Figura 3-4 – Projeção sob o plano *XZ* mostrando a orientação inicial das faces (A), após serem deslocadas para a posição em que formarão o hexaedro na vertical (B) e após rotação (C).

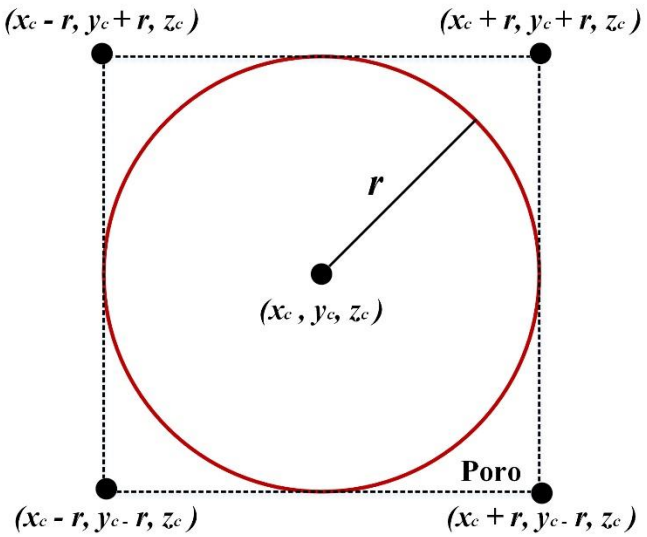

Figura 3-5 – Determinação dos vértices de uma face para um poro de centro (x_c , y_c , z_c) e raio *r*

3.2.1.7 Segmentação do Volume Inter-Poros

Como a redução do custo computacional, tanto na etapa de introdução dos novos poros quanto na etapa final de simulação da rede, era uma das metas do presente trabalho, o menor número possível de microporos deveria ser introduzido, sem comprometer a representatividade do sistema. Portanto, o micro-sistema criado não poderia apresentar interligações além das mínimas necessárias para completar a ligação entre um par de macroporos. Uma alternativa simples para esse fim seria conectar os microporos de maneira sequencial e ordenada, criando um caminho único que sempre se aproxima de um dos poros do par. Adotada essa metodologia, o comprimento das gargantas relacionada aos novos poros torna-se função apenas da quantidade e posição desses poros.

Originalmente optou-se pelo posicionamento aleatório desses poros dentro da totalidade do volume delimitado, descrito anteriormente, mas essa abordagem mostrou significativa tendência a acumular poros em uma dada região, resultando em gargantas excessivamente curtas ou longas. A solução adotada foi segmentar o volume e, na etapa de geração de poros, permitir apenas um novo poro por segmento, mantendo a posição desse poro, dentro de seu respectivo segmento, aleatória. Para reduzir a chance de que a garganta se estendesse para além do limite estabelecido, na seção anterior deste trabalho, cada segmento deveria ter no máximo comprimento igual a metade desse limite. Apesar dessa medida não garantir que o limite fosse respeitado, os resultados obtidos nos 114 testes realizados com o programa, menos que 0,3% de todas as novas gargantas superaram o limite. Como o limite é arbitrário e não foram observados casos de comprimentos acima do maior valor observado na amostra, não se mostrou necessário maior rigidez quanto ao comprimento máximo de cada sessão.

Dadas essas considerações, definir o número de poros a serem introduzidos para formar cada conexão entre as redes torna-se um problema de definir o comprimento de cada segmento do volume entre os pares de macroporos. Definindo L como a distância entre o par de macroporos, L_{max} como a média dos comprimentos das gargantas no modelo original, n_{seg} e L_{seg} como o número de segmentos e seu comprimento, respectivamente, pode-se estabelecer as seguintes relações:

$$n_{seg} = \begin{cases} \dfrac{L}{L_{max}}, & L \geq L_{max} \\ 1, & L < L_{max} \end{cases} \tag{3.2}$$

$$L_{seg} = \frac{L}{n_{seg}} \tag{3.3}$$

O número de segmentos(n_{seg}) é arredondado para um número inteiro, pois não há sentido físico em criar uma fração de microporo.

3.2.1.8 Definição dos Possíveis Centros

Dada a existência de infinitos pontos dentro de cada segmento é necessário limitar o número de pontos a serem testados como centros para os microporos. Para esse fim, decidiu-se selecionar aleatoriamente um dado número de pontos pertencentes a cada seção do hexaedro (seção 3.2.1.7) como sendo um possível centro para os novos poros, essencialmente discretizando o espaço em que há possibilidade de se selecionar os novos centros.

Entretanto, o formato de cada segmento não permitia a aplicação direta de ferramentas oferecidas no pacote *MatLab R2017*® e tornava o procedimento complexo do ponto de vista matemático e de implementação do código. A alternativa escolhida para superar essas dificuldades está apresentada no algoritmo 5 – Apêndice B. Essa solução se baseia em sortear pontos dentro de um paralelepípedo que englobava cada segmento (linha 4) e em seguida verificar se o ponto sorteado se encontrava dentro do respectivo segmento fazendo uso da função *inShape* (linha 6), natural do *MatLab R2017*®.

O algoritmo proposto demonstrou ser adequado, sendo em média responsável por menos que 2 % do tempo total de execução referente a criação e introdução da microporosidade. A possibilidade de utilizar métodos matemáticos que resultem em um algoritmo mais eficiente não foi explorada, em vista do resultado satisfatório mencionado anteriormente.

3.2.1.9 Criação dos Microporos

Gerar um microporo e introduzi-lo na rede significa, em termos práticos do programa, selecionar um centro para o novo poro, atribuir-lhe um raio, criar as gargantas que o ligam a rede e atribuir um raio para essas conexões, mantendo as condições estabelecidas no item 3.2.1.2. Uma vez definido os possíveis centros (seção 3.2.1.8), escolhido os raios dentro da distribuição considerada representativa (seção 3.2.1.3) e estabelecido as conexões conforme seção 3.2.1.5, resta garantir as características anteriormente explicitadas em 3.2.1.2. Essa tarefa, entretanto, é extremamente complexa do ponto de vista teórico e matemático. Na impossibilidade de abordar o problema de maneira determinística, optou-se por fazer uso da grande capacidade de processamento disponível nos computadores atuais para repetidamente gerar uma solução, verificar sua adequabilidade (i.e respeitar as condições) e descartá-la caso seja inapropriada.

Como algumas condições já são garantidas pelas etapas anteriores, restam mais duas que precisam ser respeitadas para a criação de um poro ser considerada válida: não sobreposição dos poros e não interseção das gargantas. Dada a diferença em como pode ser verificada dependendo dos poros envolvidos, esta última etapa pode ser subdividida em duas:

- Interseção das gargantas sem poros em comum (tipo 1): essa interseção pode ser verificada considerando a menor distância entre os eixos relacionados a cada garganta envolvida.
- Interseção das gargantas com poros em comum (tipo 2): essa interseção não pode ser verificada da mesma maneira que a do tipo 1, pois os eixos obrigatoriamente se interceptam no centro do poro comum. Isso, entretanto, não significa obrigatoriamente a interseção da conexão, pois na prática ela se estende apenas até a superfície do poro.

O procedimento de criação dos poros se inicia com a seleção de um dos possíveis centros e a atribuição de um raio ao novo poro. Caso não seja detectado sobreposição, a garganta que o liga ao microporo anteriormente criado ou a um dos macroporos é estabelecida com um dado raio. Neste momento, seria possível verificar as interseções dos tipos 1 ou 2, entretanto a primeira apresenta custo computacional significativamente superior e mostrou-se mais rara durante as simulações, sendo desejável, portanto, realizar primeiro a do tipo 2. A verificação do tipo 1 é feita apenas depois de todos os poros e gargantas,

que formariam a conexão entre um par de macroporos, terem sido criados. Para diminuir as chances de o arranjo escolhido falhar na última etapa de verificação, caso ocorra a colisão das gargantas, o teste é refeito com uma redução de 5% no raio da nova garganta criada que ocasionou o problema. Se essa modificação for suficiente, ela é mantida e o processo é continuado, do contrário, um dos novos poros ligados pela garganta é recriado em um novo ponto e com um novo raio, refazendo-se a verificação.

Caso todas as possibilidades de centros, de pelo menos um segmento, sejam testadas sem ser possível criar o respectivo poro dessa seção de maneira adequada, todos os poros e gargantas que formariam a respectiva conexão entre as redes são desprezados e um novo par de poros é eleito para ser conectado. O novo par é selecionado pela metodologia discutida em 3.2.1.5 e todo o procedimento desde a delimitação do volume até a criação dos poros é repetido.

3.2.2 Verificação das Condições

A sobreposição dos poros, além de não possuir sentido físico no modelo (e.g. um poro envolvendo outro), resulta em problemas na etapa de simulação por gerar inconsistência nos cálculos. Alguns algoritmos podem ser utilizados para desprezar um dos poros que se sobrepõem, resolvendo a sobreposição, porém, na metodologia do presente trabalho, isso significaria eliminar as conexões criadas e, portanto, desfazer o esforço do método.

Pelo modelo de rede de poros adotado, todos os poros são tratados como esferas perfeitas de raio e centro conhecidos. Uma vez não havendo interesse em obter os pontos em que dois poros interceptam (i.e. a curva de interseção), o problema pode ser abordado como verificar se os centros estão suficientemente afastados para acomodar os raios de poro. Essa condição pode ser então representada pela desigualdade 3.4:

$$d \geq r_1 + r_2 \tag{3.4}$$

Onde *d* é a distância entre os centros dos dois poros, calculado pela equação 3.1, e r_1 *e* r_2 são seus raios. Caso a desigualdade 3.4 seja verdadeira, os dois poros verificados não se interceptam no modelo.

3.2.2.1 Interseção do Tipo 1

Uma vez que todas as gargantas são consideradas cilindros circulares retos e, novamente, o interesse está em detectar a interseção e não seus pontos, o problema pode ser modelado, quando não há poros em comum, como garantir que a menor distância entre os eixos dos dois cilindros seja suficiente para acomodar seus raios. Entretanto, computar a distância entre segmentos requer algumas etapas adicionais de cálculo em comparação a mesma situação envolvendo retas. O algoritmo empregado para tal foi adaptado a partir do algoritmo de DAN SUNDAY [25], cujo embasamento matemático será discutido a seguir.

Considerando duas gargantas, enumeradas 1 e 2, cujo centro das faces opostas (i.e. o centro do poro que conectam) sejam os pontos P_0 e P_1, para o cilindro 1, e Q_0 e Q_1, para o 2. As equação das retas colineares a esses segmentos podem ser escritas na notação vetorial como $R_1: P(s) = P_0 + s(P_1 - P_0)$ e $R_2: Q(t) = Q_0 + s(Q_1 - Q_0)$, onde $s, t \in \mathbb{R}$. Sendo $W(s,t) = P(s) - Q(t)$ o vetor que liga dois pontos quaisquer de R_1 e R_2 e sabendo que as retas encontram-se mais próximas em dois únicos pontos, dados por $P(s_c)$ e $Q(t_c)$, o problema torna-se encontrar $W_c(s_c, t_c) = P(s_c) - Q(t_c)$. Se R_1 e R_2 não são paralelos e não se interceptam, W_c é o único segmento entre as retas que é simultaneamente perpendicular a ambas, portanto:

$$(P_1 - P_0).W_c = 0 \tag{3.5}$$

$$(Q_1 - Q_0).W_c = 0 \tag{3.6}$$

Fazendo as devidas substituições nas equações 3.5 e 3.6, pode-se resolver as equações para s_c e t_c, para então determinar a distância como sendo a norma de W_c.

Os eixos das gargantas (segmentos de reta S_1 e S_2) são descritos pelas mesmas equações de R_1 e R_2, salvo a condição de que $0 \leq t, s \leq 1$. Caso os valores encontrados de s_c e t_c estejam fora desse intervalo, esses pontos não estão presentes no segmento e é preciso encontrar novos pontos que minimizem $W(s,t)$. Isso significava encontrar um valor mínimo global no plano (s,t), ponto $C(s_c, t_c)$, enquanto que para os segmentos é preciso encontrar o mínimo de uma sub região *G* desse plano, mostrada na figura 3-6.

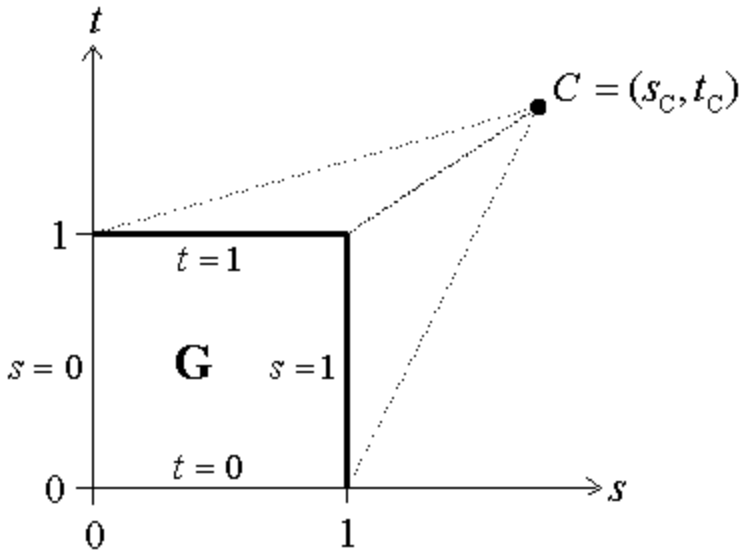

Figura 3-6 – Plano (s,t) e sub região *G*, para um caso em que o mínimo global encontra-se fora dos segmentos R_1 e R_2 [26]

Mesmo que o ponto C encontre-se fora dessa sub-região, o mínimo sempre ocorrerá na fronteira de *G*, mais especificamente em um dos vértices. Substituindo os pontos referentes a esses vértices na equação anterior, pode-se encontrar o mínimo de interesse.

De posse da distância dos eixos, a condição de não Interseção do tipo 1, pode ser escrita pela desigualdade a seguir:

$$d_{seg} \geq r_1 + r_2 \tag{3.7}$$

Onde d_{seg} é a menor distância dos segmentos descritos e r_1 *e* r_2 são os raios dos cilindros 1 e 2, que se verdadeira significa a inexistência de interseção do tipo 1 entre as gargantas verificadas.

3.2.2.2 Interseção do Tipo 2

O problema de interseção das gargantas que chegam ou partem de um mesmo poro se traduz matematicamente como determinar se a curva gerada pela interseção de um par cilindro-esfera cruza a curva gerada por um outro par. Determinar essas curvas e em seguida verificar se existe algum ponto comum a ambas seria computacionalmente custoso e poderia se mostrar demasiadamente complexo de ser implementado. Ao mesmo

tempo, não existe real utilidade na determinação dessas curvas ou nos pontos de cruzamento e sim na existência ou não da interseção. Tendo em vista algumas peculiaridades do sistema, percebeu-se a possibilidade de empregar algumas relações trigonométricas simples na análise de suas projeções, que permitiram estabelecer um parâmetro limite para a verificação desejada.

As características mais relevantes sobre o conjunto poro-garganta para essa abordagem são: os poros são esferas de centros e raios conhecidos; e as gargantas são cilindros circulares retos de raio conhecido e cujo centro das faces opostas coincide com o centro dos poros que ligam. As figuras 3-7 A e 3-7 B mostram uma visão tridimensional e uma projeção em *XY* de um poro arbitrário nomeado 1, com centro em (x_1 e y_1 e z_1) e raio r_1, que se liga aos poros 2 e 3 (centros em *x*, *y* e *z* com respectivo índice) pelas gargantas *A* e *B*, de raios r_a e r_b, respectivamente.

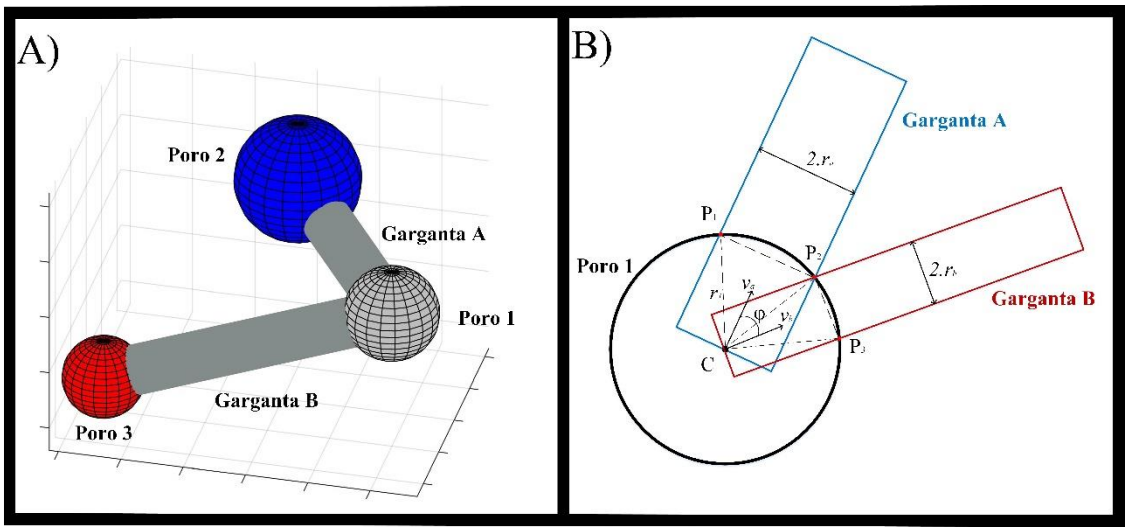

Figura 3-7 – Visão tridimensional de 3 poros hipotéticos e suas gargantas (A). Esquema da projeção no plano *XY* do Poro 1, destacando-se os parâmetros de maior relevância para as relações matemáticas do sistema (B).

Neste exemplo temos a situação limite em que *A* e *B* se tocam em apenas um ponto e o objetivo é estabelecer alguma relação matemática que permita afirmar para quais configurações *A* e *B* se interceptam na superfície do poro 1.

Primeiramente, definimos os vetores v'_a e v'_b apontando para fora do poro 1 e com origem em (x_1 e y_1 e z_1), sendo o primeiro com extremidade apontando para o centro do poro 2 e o segundo para o centro de 3 (figura 3-7 B):

$$v_a = (x_2 - x_1 , y_2 - y_1 , z_2 - z_1) \quad (3.8)$$

$$v_b = (x_3 - x_1 , y_3 - y_1 , z_3 - z_1) \quad (3.9)$$

Nota-se que os vetores v'_a e v'_b são colineares aos eixos dos cilindros *A* e *B*. Suas projeções ortográficas podem ser obtidas descartando uma das coordenadas, no exemplo, a coordenada *Z* será descartada, e as projeções são:

$$v'_a = (x_2 - x_1 , y_2 - y_1) \quad (3.10)$$

$$v'_b = (x_3 - x_1 , y_3 - y_1) \quad (3.11)$$

Seja $\hat{v}'_a$ e $\hat{v}'_b$ os vetores unitários, o ângulo entre os vetores nessa situação pode ser calculado por:

$$\varphi = \arccos(\hat{v}'_a \, . \, \hat{v}'_b) \quad (3.12)$$

Por outro lado, consideremos os pontos *P1*, *P2* e *P3*, gerados pela interseção da projeção dos cilindros e da esfera, apresentados na figura 3-7 B. O comprimento das cordas que ligam os pontos *P1* e *P2* (corda l_a), assim como *P2* e *P3* (corda l_b), corresponde ao raio do cilindro, mas também pode ser expresso pela relação:

$$l_a = 2\, r_1 \operatorname{sen}\left(\frac{\gamma}{2}\right) = \, r_a \quad (3.13)$$

$$l_b = 2\, r_1 \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \, r_b \quad (3.14)$$

Onde γ e α são os ângulos apresentados em 3-8, que correspondem ao arco associado as cordas.

Pelas equações 3.13 e 3.14 podemos calcular os valores de γ e α como:

$$\gamma = 2 \operatorname{arcsen}\left(\frac{r_a}{(2\, r_1)}\right) \quad (3.15)$$

$$\alpha = 2 \operatorname{arcsen}\left(\frac{r_b}{(2\, r_1)}\right) \quad (3.16)$$

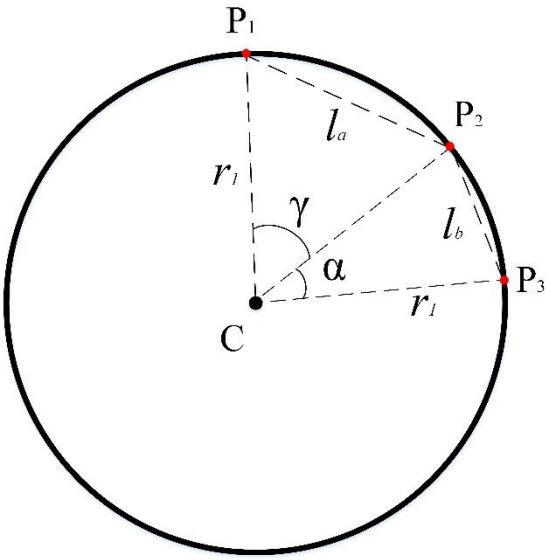

Figura 3-8 – Geometria em estudo, sendo destacada a relação entre os ângulos γ e α com as cordas formados pelos pontos P_1, P_2 e P_3. Essa configuração permite a aplicação da lei dos cossenos para relacionar os comprimentos das cordas, que é conhecido, com o raio da circunferência e os ângulos.

Ao mesmo tempo, os vetores $\hat{v}'_a$ e $\hat{v}'_b$ passam pelo ponto médio de l_a e l_b, respectivamente, formando os ângulos θ_a e θ_b com o segmento $\overline{CP_2}$ (figura 3-9).

Esses ângulos equivalem, para tal configuração, a metade de γ e α, respectivamente, e a soma de θ_a e θ_b é o ângulo calculado entre os vetores (φ), ou seja:

$$\theta_a = \frac{1}{2}\,\gamma \tag{3.17}$$

$$\theta_b = \frac{1}{2}\,\alpha \tag{3.18}$$

$$\theta = \theta_a + \theta_b = \frac{1}{2}\,(\gamma+\alpha) = \varphi \tag{3.19}$$

Substituindo 3.15 e 3.16 em 3.19, obtemos o ângulo entre a projeção de v'_a e v'_b em função apenas de variáveis conhecidas e para a situação limite em que as projeções dos cilindros tangenciam.

$$\theta = 2\left(\text{arcsen}\left(\frac{r_a}{(2\,r_1)}\right) + \text{arcsen}\left(\frac{r_b}{(2\,r_1)}\right)\right) \tag{3.20}$$

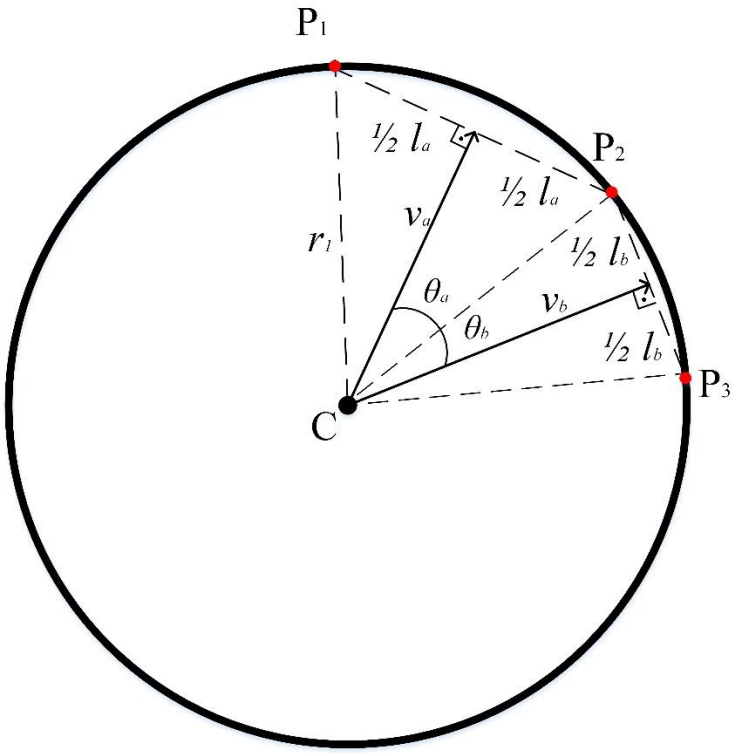

Figura 3-9 – A relação dos ângulos θ_a e θ_b, entre os vetores e o segmento $\overline{CP_2}$, permite relacionar o ângulo dos vetores com as cordas da circunferência.

Concluímos assim que se o ângulo entre os vetores fosse maior que o ângulo θ calculado por 3.20, não se visualizaria interseção entre os cilindros (i.e. gargantas) para a projeção ortogonal estudada, no caso a do plano *XY*. Apesar de particular, o mesmo procedimento pode ser realizado para as outras projeções ortogonais. Caso o ângulo entre as projeções dos vetores seja maior que θ calculado por 3.20 para cada plano, não existe interseção entre as gargantas, enquanto se ao menos um dos ângulos for menor, ocorre a interseção.

Uma ressalva importante para a aplicação desse procedimento é a possibilidade de divisão por zero durante o cálculo do ângulo entre as projeções dos vetores, que ocorre em casos

envolvendo os vetores que formam a base canônica, em que uma de suas projeções é um vetor (0,0). Entretanto, estes casos são resolvidos considerando as demais projeções, que obrigatoriamente não apresentam essa peculiaridade e não oferecem complicações nos cálculos.

3.2.3 Alternativa para a Seleção das Redes

Conforme apresentado em 3.2.1, a definição de quais redes do modelo devem ser conectadas é um dos parâmetros de entrada fundamentais para a inicialização do programa e aplicação das demais etapas discutidas. Entretanto, inferir sobre essa conectividade na amostra de rocha é uma tarefa complexa e sem uma metodologia bem definida e comprovada, embora algumas tenham sido apresentadas [1][23]. Na impossibilidade de identificar parâmetros petrofísicos capazes de justificar a escolha das redes, decidiu-se aplicar o mesmo critério de seleção utilizado para a seleção dos poros (seção 3.2.1.5), ou seja, selecionar os pares de rede baseado em sua proximidade. Ao contrário da distância entre poros, que é bem definida como a distância entre seus centros, a distância entre redes está aberta múltiplas definições. Algumas alternativas seriam considerar uma média entre as distâncias dos poros de ambas as redes, considerar a distância entre os centros geométricos da rede, que podem ser determinados pela média dos centros geométricos dos poros que a compõem, ou considerar como a menor distância entre os poros de uma rede a outra. Tendo em vista que o número de canais de conexão criados é muito menor que o número de poros nas redes e que os poros envolvidos nessas conexões são os que apresentam menor distância, uma definição que priorize as menores distância encontradas entre os poros tende a ser mais adequada, frente à definição que leva em consideração a totalidade da rede. Dessa forma, optou-se neste trabalho pelo critério de menor distância observada entre os poros das vizinhanças desconectadas.

A obtenção desse parâmetro de decisão significa resolver a matriz de distância entre todas os pares de redes desconectadas do modelo, ou seja, obter todas as distâncias entre cada poro em uma vizinhança em relação a uma outra e, em seguida, encontrar o mínimo valor calculado. Mesmo utilizando o algoritmo IPDM, armazenar essas matrizes na memória RAM do computador enquanto se realiza os cálculos necessários é um fator limitante. Para o caso de duas redes, uma com ordem de 10^5 poros e outra com ordem de 10^4, a matriz calculada possuiria 10^9 elementos de ponto flutuante (*floating-point*),

correspondentes a cerca de 40 Gb de memória ocupada apenas para seu armazenamento (estimativa para *MatLab R2017*® em *Windows*™ *10* de 64 bits). Estando muito além da capacidade do computador disponível para a execução do código (configuração em 3.3), seria necessário fazer uso do disco rígido da máquina durante essa etapa de cálculo, exigindo as devidas modificações no código e possivelmente afetando o desempenho, ou encontrar uma maneira de subdividir o problema para reduzir as dimensões das variáveis manipuladas.

Tendo-se decidido pela segunda abordagem, a solução elaborada foi o desenvolvimento de um algoritmo para dividir as redes com mais que 10^4 poros em oito partes, repetindo a divisão para as frações que continuassem acima do limite estabelecido. O funcionamento deste algoritmo se baseia em encontrar os vértices do paralelepípedo que engloba todos os centros dos poros da rede, o que é facilmente obtido pela identificação das coordenadas máxima e mínimas dos centros para cada eixo. Em seguida, o volume é dividido em oito octantes, de mesmo volume, e os poros interiores a cada um (i.e cujo centro encontra-se dentro do octante) são agrupados. Para a etapa do cálculo das distâncias, esses octantes, assim como suas subsequentes divisões, são tratados como redes desconectadas, porém durante a escolha de quais pares de redes conectar são tratados como uma única rede. Isso significa dizer que, dada uma rede A, subdividida nas redes A1 a A8, e outra rede B, original do modelo, as conexões entre um dos octantes de A e a rede B são possíveis, porém aquelas entre dois octantes de A não são. Suponha que A é a rede mais próxima de B e que esse par foi selecionado para ser conectado, existe, portanto, um par de poros (um poro em A e um em B) que apresenta a menor distância. Uma vez A sendo subdividido, o poro, originalmente de A, responsável por essa menor distância se encontrará em um dos octantes, por exemplo o de nome A6. Para fins da seleção do par de redes, o par selecionado seria o formado pelas redes A6 e B, que essencialmente seria o mesmo que selecionar A e B, uma vez que A6 está, na prática, conectado aos demais octantes. Dessa maneira, a subdivisão não afeta o processo de seleção e permite trabalhar com matizes que são apenas uma fração do tamanho original, viabilizando a tarefa em computadores com menor disponibilidade de memória.

3.3 Configuração dos Computadores

Todas as atividades relacionadas ao procedimento de recuperação da microporosidade no modelo de PNM foram executadas utilizando um computador, que será definido como Micro1, com as seguintes configurações:

1 processador *Intel® Core™ i5-6600K*

Placa mãe *Asus Maximus VIII Hero* para processadores *Intel® Core™*, *chipset Intel® Z170*

16 GB de RAM DDR4 (2 pentes de 8GB, *G.SKill Trident Z*, velocidade *SPD* 2133MHz)

Placa de vídeo *GeForce® GTX 1070 G1 Gaming* com 8GB GDDR5

Sistema operacional *Microsoft® Windows™ 10 Pro* de 64 bits;

Nota-se que esta configuração, apesar de superior a um computador pessoal convencional, encontra-se muito abaixo das especificações comumente encontradas em estações de trabalho (*workstation*) de laboratórios ou empresas relacionados com simulação de escoamento. Portanto, acredita-se que se a execução dos algoritmos elaborados neste trabalho em uma máquina mais apropriada resultará em tempos de processamento significativamente inferiores aos apresentados na seção 4.2 deste trabalho. Os códigos também não foram preparados tendo em vista a paralelização entre processadores ou do processador com a placa de vídeo, sendo que esta última não foi utilizada durante as execuções dada a inexistência de gerenciamento automático por parte do pacote *Matlab*.

A etapa de simulação, por outro lado, foi realizada utilizando uma máquina de maior poder computacional disponibilizada pelo Laboratório de Recuperação Avançada de Petróleo - DEI/UFRJ. As configurações deste computador, definido como Micro2, estão apresentadas a seguir:

1 processador *Intel® Core™ i7-5920K*

Placa mãe *Gigabyte X99 Gamer* para processadores *Intel® Core™*

64 GB de RAM DDR4 (4 pentes de 16GB, *Kingston HyperX Fury*, velocidade *SPD* 2133MHz)

Placa de vídeo *GeForce® GTX 980* com 8GB GDDR5

Sistema operacional *Microsoft® Windows™ 10 Pro* de 64 bits;

3.4 Análise do Desempenho Computacional

Além de obter um resultado razoável, o tempo de execução dos algoritmos desenvolvidos também é um fator de extrema importância, pois limitaria sua aplicabilidade. Para auxiliar nesta tarefa, a abordagem escolhida foi de primeiramente mapear o custo computacional do programa para obter indícios de que etapas deveriam ser modificadas e aprimoradas buscando o maior impacto sob o tempo despendido para concluir todo o processo. Esse mapeamento resultou em três categorias: número de tentativas falhas, tempo de execução individual e tempo de execução por etapa.

3.4.1 Número de Tentativas Falhas

Essa categoria está associada com a quantidade de vezes em que uma configuração de conexão é descartada (i.e falha) por não possuir as características apresentadas em 3.2.1.2. Os tipos de falhas contabilizados são: falha por intercessão do tipo 1, falha por intercessão do tipo 2, falha por sobreposição de poros e falha de conexão (i.e não foi encontrada uma solução para conectar um dado par de macroporos).

Sua importância se deve a natureza de *backtracking* do programa elaborado, que apresenta um grande desafio entre testar um número suficientemente grande de possibilidades para atingir uma configuração adequada e realizar todo o procedimento em um tempo razoável. Considerando ainda que os pares de poros propostos inicialmente para serem conectados (seção 3.2.1.5) podem não oferecer a possibilidade de encontrar uma solução, existe uma concorrência entre aumentar o número de tentativas para um dado par, minimizando as chances de descartá-lo e recomeçar o processo desnecessariamente, e insistir excessivamente em um par que não é promissor. Monitorar, portanto, o número de falhas relacionadas a cada etapa, permite identificar uma abordagem ineficiente. Um importante exemplo observado neste trabalho foi a ordem

com que as verificações de interseção do tipo 1 e tipo 2 deveriam ser realizadas, discutida previamente em 3.2.1.9.

A quantificação dessa categoria também permite avaliar a necessidade de modificações no código. Por exemplo, se um dado procedimento é muito eficiente e possui um tempo de execução extremamente curto, porém acontece com uma frequência elevada devido a quantidade de vezes que resulta em uma falha, provavelmente é mais interessante estudar uma alternativa que reduza as chances da configuração ser inadequada do que reduzir o tempo de cada execução individual.

3.4.2 Tempo de Execução Individual

Essencialmente, essa categoria permite avaliar a eficiência e constância de um dado algoritmo utilizado, pois contabiliza o tempo despendido para sua execução uma única vez. Esse tempo não é constante, uma vez que os parâmetros de entrada e a situação da rede mudam com o decorrer do programa. Ao analisar a variação desse tempo, pode-se observar tendências relacionadas com as alterações da rede ou região em que as conexões estão sendo realizadas. Um caso marcante foi observado na etapa inicial de desenvolvimento do código, no qual o tempo necessário para concluir a etapa de "Definição dos Possíveis Centros" (seção 3.2.1.8) era muito elevado quando um dos pares de macroporos selecionados possuia dimensões muito pequenas. Esse fenômeno resultava na dificuldade de sortear pontos dentro dos segmentos mais próximos do macroporo, estendendo o tempo de execução significativamente. Essa peculiaridade foi um dos motivos que incentivou o uso do fator de correção apresentado em 3.2.1.6.

Os algoritmos monitorados de maior relevância são os relacionados a verificação do tipo 1 e 2, sobreposição de poros e cálculo da matriz de distâncias.

3.4.3 Tempo de Execução por Etapa

Apesar de semelhante a categoria anterior, esta se diferencia por englobar um conjunto de algoritmos, permitindo avaliar em um nível superior a eficiência do programa e atribuir a cada macro etapa sua porcentagem de participação no tempo total. O programa é

analisado através de quatro macro etapas principais, que podem ou não se sobreporem parcialmente:

1. Obtenção dos possíveis centros: englobando a delimitação e segmentação do volume entre os macro poros e todos os procedimentos necessários para tal;
2. Criação dos Microporos: englobando todas as verificações realizadas, assim como o cálculo dos parâmetros da microporosidade;
3. Mudança de pares de macroporos a conectar: incluindo o cálculo da matriz de distâncias;
4. Tempo de cada *loop*: tempo necessário para a conclusão de todas as etapas entre selecionar um par de macroporos até a conclusão da conexão.

3.5 Características da Rede de PNM

A rede gerada a partir da técnica de *Pore Network Model*, utilizada como base neste trabalho, possui dimensões na escala de plugue, com um número total de 249.988 poros e 301.469 gargantas. Entretanto, grande parte dos poros encontravam-se em redes desconectadas, não contribuindo portanto para a o cálculo de permeabilidade absoluta. Dada as dimensões da rede completa do modelo, incluindo tanto sistemas conectados quanto isolados, e as limitações oferecidas pelos computadores disponíveis para a execução do programa discutido em 3.2.1, fez-se necessário limitar a extensão com que a metodologia seria aplicada na amostra (seção 3.2.3) . Os principais fatores identificados como limitantes do tamanho da rede com a qual se poderia trabalhar eram o número de poros, o número de redes desconectadas e o número de poros nas redes de maior dimensão.

O primeiro fator advém do número de cálculos de verificações necessários para impedir a sobreposição entre os microporos introduzidos e os poros originais do modelo, além de interferir nas chances de uma conexão ser inviabilizada. Esta interferência é causada pela presença de um poro intermediário entre o par de poros que estão sendo conectados pela microporosidade, tornando necessário que a micro estrutura criada contorne tal obstáculo. Mesmo essa complicação sendo reduzida pela seleção dos pares privilegiar a conexão entre poros mais próximos, não são incomuns casos de um desses poros não possuir espaço em sua superfície para aceitar uma micro garganta. Dessa forma, ocorre a seleção

de um poro mais distante e, possivelmente, mais interior a sua rede, aumentando as chances de existir um obstáculo ao caminho de criação da microporosidade.

O número de redes do modelo, por sua vez, aumenta o número de conexões que precisam ser estabelecidas para obter um sistema devidamente conectado, essencialmente aumentando a carga de trabalho em cada etapa da metodologia. Outro desafio existe na etapa anterior a seleção dos pares de poros propriamente dita, que diz respeito a determinação de quais redes serão conectadas. O critério para essa determinação, caso esta não seja especificada como um dado de entrada, é a distância entre as vizinhanças de poros e envolve um número considerável de cálculos, conforme discutido em 3.2.3.

Por fim, o número de poros em cada rede mostrou-se o principal desafio no gerenciamento de memória RAM das máquinas devido às dimensões das variáveis armazenadas e manipuladas durante a execução dos algoritmos, em especial no que diz respeito ao cálculo das matrizes de distância mencionadas em 3.2.1.5. Outras complicações decorrentes desse fator são semelhantes às apresentadas quanto ao número de poros na amostra.

Conforme discutido em 3.2.1.3, a distribuição dos tamanhos de raio de poro e garganta, assim como o comprimento desta última, são de grande importância para a definição dos parâmetros da microporosidade. Desta maneira, tais características foram estudadas na rede original de PNM e encontram-se apresentadas, junto dos parâmetros discutidos anteriormente, na tabela 3.3.

Tabela 3.3 – Características do Modelo (malha) Original

Características	Malha Original
Redes	
redes desconectadas	22236
máximo número de poros	139846
mínimo número de poros	2
média número de poros	11,2418
Poros	
nº de poros	249988
máximo raio (μm)	827,2273
mínimo raio (μm)	9,26
média raio (μm)	56,3166
Gargantas	
nº de gargantas	301469
máximo raio (μm)	9,075
mínimo raio (μm)	7,894
média raio (μm)	8,9074
máximo comprimento (μm)	694,3218
mínimo comprimento (μm)	10,4487
média comprimento	197,4945

3.6 Considerações para a Execução da Metodologia

Conforme mencionado em 3.5, a aplicação direta da metodologia apresentada neste trabalho para a rede de PNM escolhida e fazendo uso do computador Micro1 (seção 3.3), apesar de possível, seria inviável do ponto de vista do tempo de execução necessário para completar toda a tarefa. Considerando os fatores limitantes apresentados em 3.5, as alternativas mais interessantes para reduzir o custo computacional seriam reduzir o tamanho da malha original (i.e cortar uma fração de seu volume) ou não considerar parte das redes desconectadas como elegíveis a uma conexão, desprezando-as, portanto, na simulação de escoamento. A primeira opção agiria diretamente sobre todos os três principais fatores limitantes observados, porém recairia no problema de realizar o estudo em um volume possivelmente abaixo do REV da amostra, afetando a qualidade das estimativas realizadas posteriormente. A segunda alternativa, por outro lado, continuaria

considerando todos os poros e gargantas da amostra, impactando apenas no número de redes que precisariam ser conectadas e, dependendo do critério adotado, na dimensão média dessas redes. A escolha adotada neste trabalho foi a de desconsiderar as redes desconectadas que apresentassem um número de poros inferior a um limiar estabelecido, balanceando o limite computacional e o impacto dessas redes na resposta da amostra. Outra motivação que levou a se optar pela segunda alternativa foi a possibilidade de estudar, a partir da variação desse limiar, tanto o desempenho do código elaborado quanto a significância do tamanho das redes consideradas.

3.6.1 Teste de Hipóteses

Define-se por experimento, neste trabalho, a combinação das três variáveis de maior impacto na rede resultante ao final da execução do programa e, por consequência, na estimativa de permeabilidade na etapa de simulação de escoamento. Esses três parâmetros são: o número de conexões a serem realizadas entre os pares de rede, o número mínimo de redes a que cada vizinhança deve ser conectada e o número mínimo de poros que uma rede deve possuir para ser elegível a uma conexão. Além de sua relevância quanto ao tempo de execução do código, cada um desses parâmetros afeta de uma maneira peculiar as características da rede resultante após a introdução da microporosidade.

O número de conexões afeta a interconexão entre duas redes, propiciando um maior número de caminhos abertos ao fluxo entre os pares e, portanto, acredita-se influenciar mais intensamente o escoamento em uma dada localidade da amostra. Por outro lado, como o critério de seleção dos pares de redes é baseado em sua proximidade, o número de vizinhanças a que cada uma deve se conectar interfere mais globalmente no escoamento, pois possibilita a criação de caminhos de microporosidade através de extensões maiores na malha, além de afetar o grau de conectividade das redes. Por fim, as dimensões (i.e número de poros) mínimos de uma rede para que seja considerada determina o número de redes e o número de poros possíveis de serem conectados, possivelmente afetando a topologia da amostra. Independente do limiar adotado, nenhum dos poros e gargantas da rede de PNM original é removido ou alterado, sendo portanto a tabela 3.3 válida para todos os experimentos.

Os experimentos foram nomeados seguindo o seguinte critério: o número seguido do termo “Malha” denota o limiar de número de poros nas redes e o par de números entre

parênteses, precedido pelo termo “Tipo” refere-se ao número de conexões por par de rede e seu grau de conectividade mínimo, respectivamente. Assim, o “Experimento Malha 100 Tipo (1,2)” denota a rede gerada considerando um valor limiar mínimo de 100 poros na rede, sendo cada rede conectada apenas uma vez a outras duas. A tabela 3.4 apresenta os principais dados referentes as malhas de experimentos.

Tabela 3.4 – Características das Malhas

	Experimentos						
Características	**Malha 10**	**Malha 15**	**Malha 25**	**Malha 50**	**Malha 100**	**Malha 250**	**Malha 500**
Redes Consideradas							
redes desconectadas	730	425	235	108	38	13	4
máximo número de poros	$1{,}40.10^5$	$1{,}40.10^5$	$1{,}40.10^5$	$1{,}40.10^5$	$1{,}40.10^5$	$1{,}40.10^5$	$1{,}40.10^5$
mínimo número de poros	10	15	25	50	100	255	989
média número de poros	$2{,}76.10^2$	$4{,}65.10^2$	$8{,}26.10^2$	$1{,}76.10^2$	$4{,}87.10^3$	$1{,}39.10^4$	$4{,}45.10^4$

Um outro grupo de experimentos se baseiou em um modelo base simplificado, ainda com dimensões de plugue, contando com 169 redes desconectadas, possibilitando assim que todas as redes fossem consideradas elegíveis a conexões. Esses experimentos foram denotados por “Experimento 1” e “Experimento 2” e neles optou-se por conectar cada rede a vizinhança mais próxima por 4 conexões (primeiro) e conectar cada rede as 5 vizinhanças mais próximas por 3 conexões cada (segundo), formando em ambos um único sistema poroso.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Resultados da Estimativa de Permeabilidade

A simulação numérica do escoamento monofásico apresentou convergência apenas para os Experimentos 1 e 2, sendo portanto os únicos com uma estimativa de permeabilidade. Os motivos para a dificuldade de convergência encontrada para as demais redes não foram, até a conclusão deste trabalho, completamente definidos, porém algumas hipóteses foram levantadas. O aumento no número de redes consideradas acarreta uma maior quantidade de conexões necessárias para conectar todo o sistema, que por sua vez aumenta as chances de uma estrutura inadequada, do ponto de vista da simulação, ser criada pelo algoritmo proposto. Essas estruturas podem comprometer a convergência devido a presença de várias gargantas com diâmetro muito próximo do limite inferior e/ou que possuam angulação muito expressiva uma com as outras, levando a uma variação do gradiente de pressão muito intensa nessas regiões, dificultando a convergência. Apesar da metodologia empregada buscar reduzir a possibilidade dessas configurações, essa não garante a impossibilidade de suas ocorrências dado um número suficientemente grande de tentativas. Caso esse seja o motivo para os problemas de simulação, um novo conjunto de verificações deve ser introduzido à metodologia para garantir que estruturas com essas características indesejáveis sejam corretamente descartadas.

Uma diferença marcante dos Experimentos 1 e 2 para os demais é estes serem os únicos em que não existe, após as conexões, redes isoladas. Conforme discutido anteriormente, o modelo base dos demais experimentos possuía uma quantidade de redes elevada demais para a conclusão do programa em um tempo razoável, caso parte das redes não fosse desprezadas e, portanto, mantidas isoladas. Dessa maneira, existe a possibilidade da falta de convergência estar relacionada com um comportamento inesperado do algoritmo de simulação diante da presença de tais redes. Outra hipótese é quanto a possibilidade de mal condicionamento das matrizes resolvidas para a determinação da permeabilidade absoluta. Desta forma, o problema de convergência estaria ligado à propagação significativa dos erros de arredondamento durante a inversão das matrizes, resultando na obtenção de soluções consideravelmente distintas a cada iteração.

4.1.1 Resultados - Experimento 1

Em comparação a rede base dos demais experimentos, a dos Experimentos 1 e 2 apresenta um grande volume de rocha que afasta consideravelmente dois grandes grupos de redes desconectadas (figura 4-1 B). Por outro lado, no caso em que todas as redes são observadas, este espaço de sólido é menos predominante e nele são encontradas inúmeras pequenas redes (figura 4-1 A).

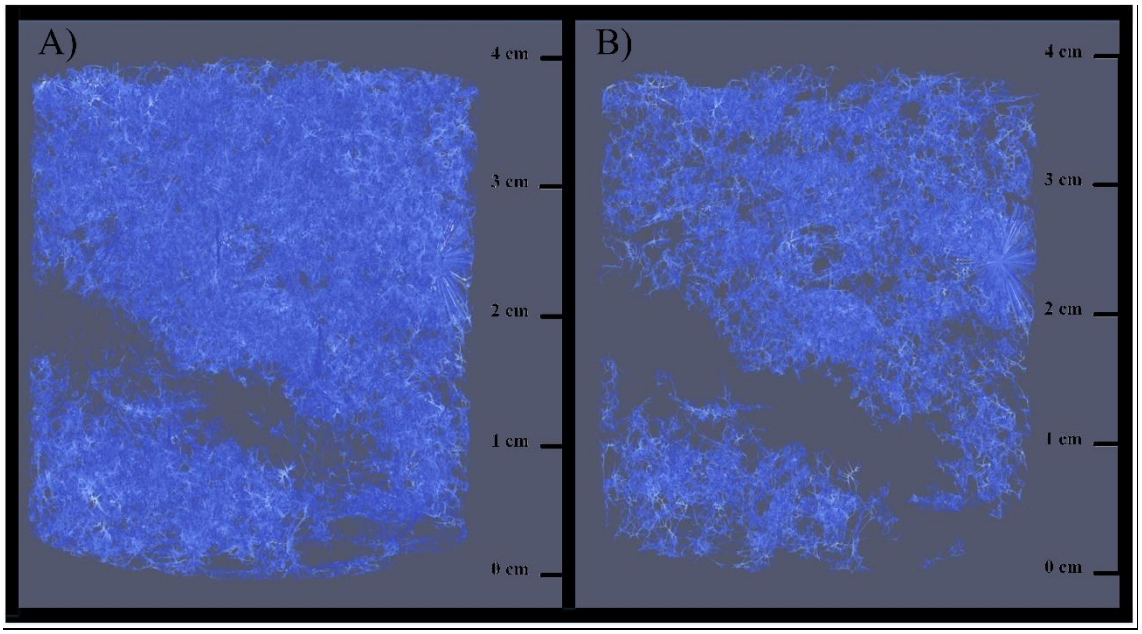

Figura 4-1 – Malhas da amostra 1-4, conforme observadas com o auxílio do *software ParaView 5.3.0*. Malha utilizada para todos os experimentos, salvo o Experimento 1 (A). Malha utilizada nos Experimentos 1 e 2 (B).

Dessa forma, o uso da metodologia discutida neste trabalho resulta nas conexões entre os dois principais grupos sendo realizadas por redes intermediárias localizadas na extremidade da malha, conforme destacado na figura Figura 4-2, onde se apresenta a rede obtida com o algoritmo no caso do Experimento 1. Apesar de garantir a conectividade entre todas as redes, a área aberta ao fluxo de uma extremidade a outra da amostra é muito pequena em uma das seções, naturalmente prejudicando o escoamento e levando a uma estimativa uma ordem de grandeza abaixo do valor encontrado em laboratório, estimando-se o valor de 4,2016 x 10^{-16} m^2, contra 33 x 10^{-15} m^2 (33 mD) encontrado experimentalmente.

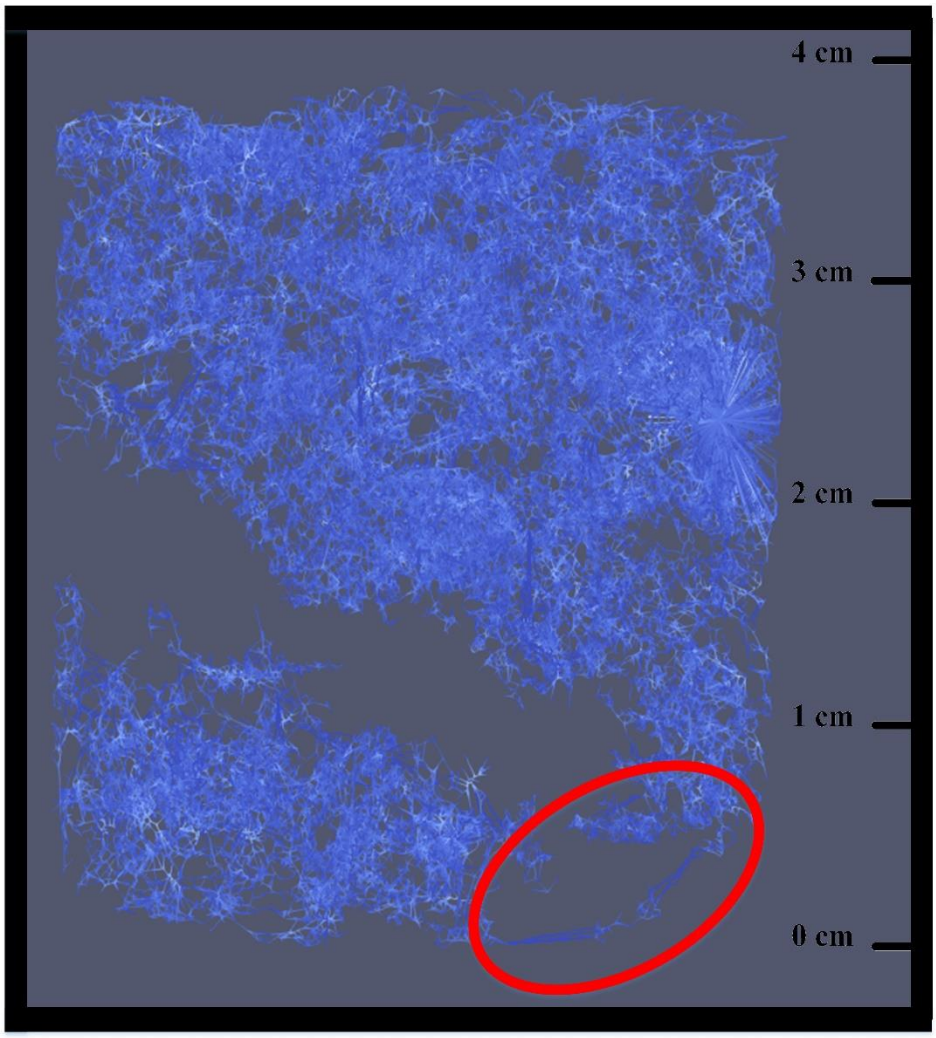

Figura 4-2 – Malha final, sendo destacadas as conexões entre os dois principais grupos de redes anteriormente desconectadas. Notamos que como as vizinhanças são conectadas apenas as imediatamente mais próximas, os grupos de redes na parte superior e inferior encontram-se conectados apenas pela região lateral do modelo, prejudicando o escoamento e subestimando a permeabilidade.

Comparando as figuras 4-1 e 4-2, pode-se observar outros canais de microporosidade pela sua coloração mais intensa de azul, que está associada ao seu menor diâmetro de garganta. A figura 4-3 A e B apresentam uma aproximação da região anteriormente destacada, comparando o modelo antes (A) e depois da introdução da micro porosidade (B). Na figura, entretanto, observa-se na realidade as gargantas de poro e não a microporosidade em sí, devido as suas dimensões muito menores que a dos macro poros próximos.

Ao contrário do que a as imagens apresentadas podem levar a concluir, existem no modelo original 169 redes desconectadas, que, apesar de muitas estarem extremamente próximas, seriam desconsideradas caso o modelo fosse levado diretamente a um simulador numérico de escoamento. Com o intuito de ilustrar esse fenômeno, algumas das maiores redes desconectadas da amostra foram destacadas na figura 4-4, sendo as demais mantidas em um tom branco parcialmente transparente.

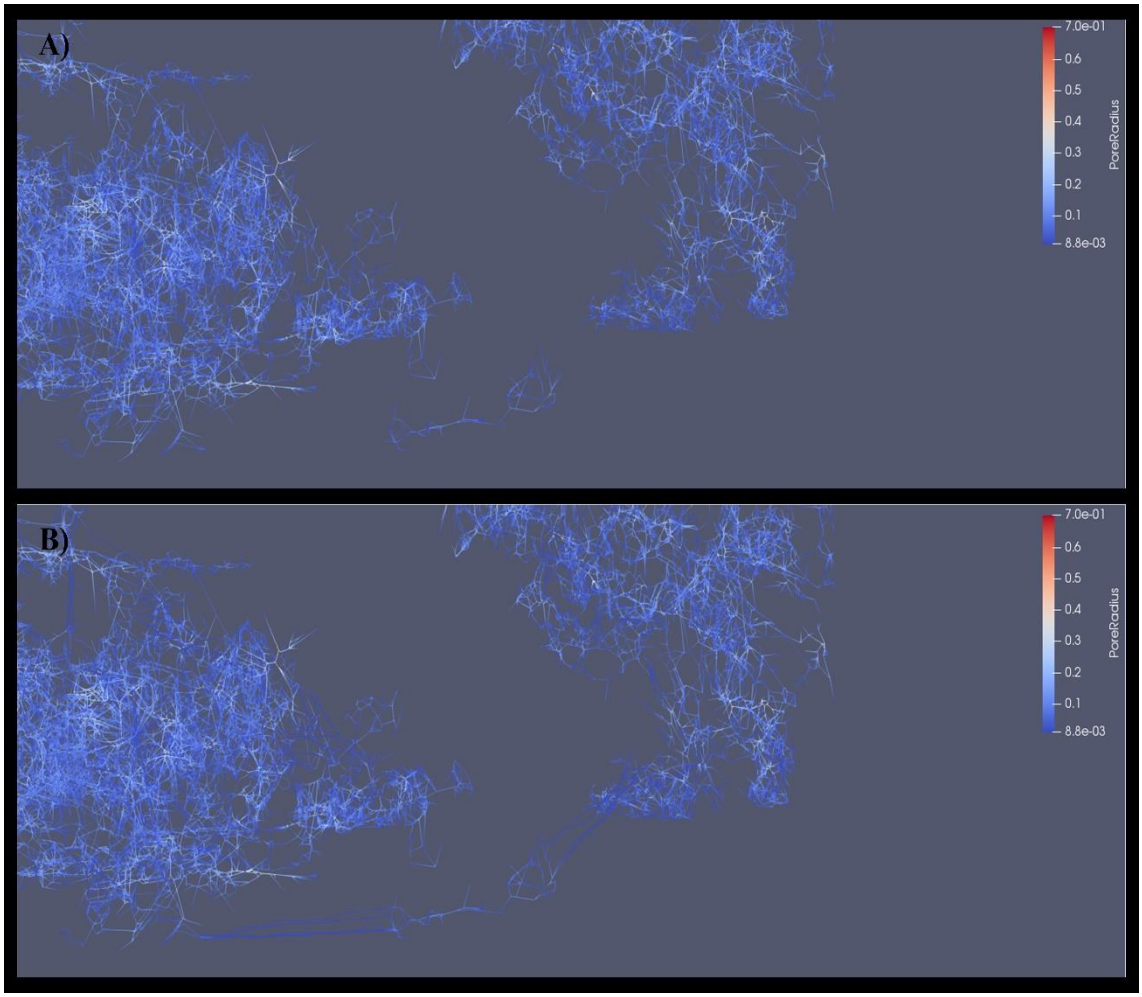

Figura 4-3 – Topologia da área destacada, sendo as cores relacionadas ao raio de poro envolvido nas conexões, em milimetros. No modelo original (A) observa-se duas grandes redes desconectadas, intercaladas por uma menor. Apesar da proximidade dessas vizinhanças, a falta de gargantas conectando-as impede sua simulação, pois não haveria caminho aberto ao fluxo. Por outro lado, após a aplicação do algoritmo de Geração Aleatória Guiada Dentro de um Volume Limitado, essas redes passam a estar conectadas (B), possibilitando a simulação.

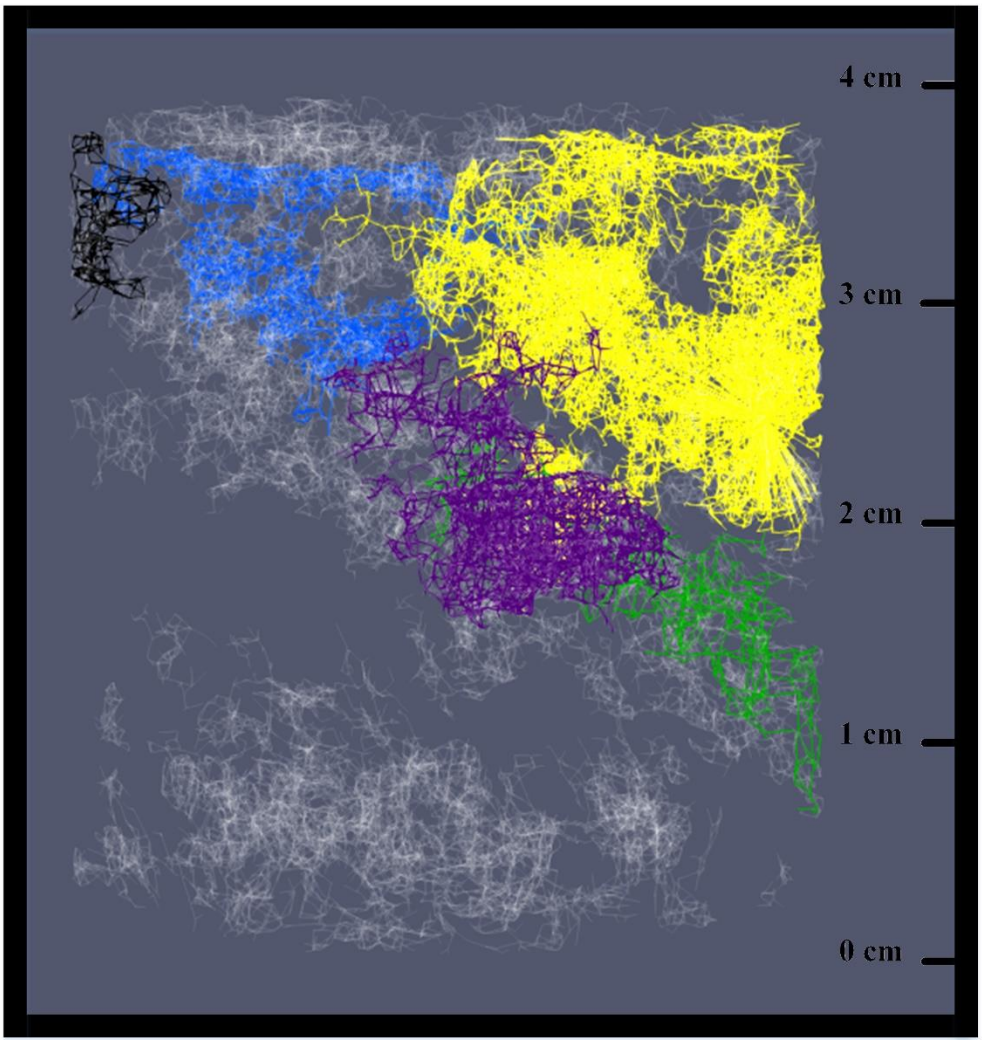

Figura 4-4 – Exemplos de redes desconectadas no modelo base. Cada tom indica uma das maiores redes, sendo as demais representadas pela cor branca semi-transparente.

Apesar das conexões estabelecidas pelo algoritmo terem sido insuficientes para garantir uma topologia próxima da esperada na amostra real, o método apresentado foi capaz de reintegrar as redes e melhorar a estimativa de permeabilidade em comparação ao modelo original, no qual não seria possível a simulação do escoamento para todo o plugue por conta da não conectividade das redes apresentadas na figura 4-4.

4.1.2 Resultados - Experimento 2

Sendo realizado de maneira semelhante ao Experimento 1, este experimento considera um número menor de conexões entre as redes, porém considera que cada uma se conecte as 5 outras redes mais próximas. Isto significa que, a tendência será um menor agrupamento das conexões criadas, reduzindo as chances dos dois principais grupos destacados anteriormente se conectarem apenas por uma extremidade da amostra.

Conforme se observa pela figura 4-5, o resultado é um modelo mais nitidamente interconectado, frente ao modelo gerado no Experimento 1, o que tende aumentar a permeabilidade estimada.

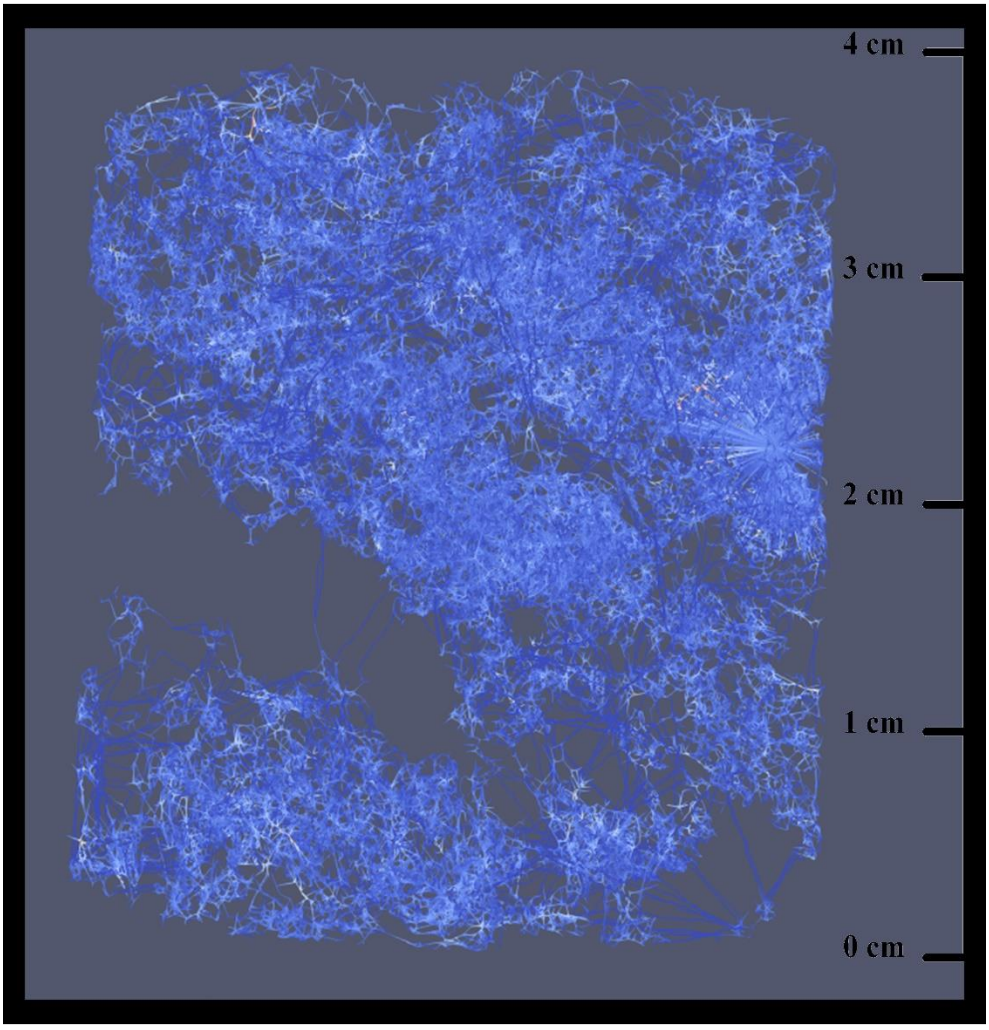

Figura 4-5 – Modelo gerado pelo algoritmo para o Experimento 2. O aumento do número de redes a que cada vizinhança deve ser conectada e as consequentes conexões entre redes mais distantes resultaram na obtenção de um modelo mais complexo e mais interconectado, criando inclusive canais pela região central da amostra, ao envés de apenas pela lateral da mesma.

A mesma região destacada na figura 4-2 é observada na figura 4-6, porém agora comparando o modelo do Experimento 1 e 2. A maior complexidade das conexões é evidente, assim como seu maior entrelaçamento, assemelhando-se mais as redes originais da amostra.

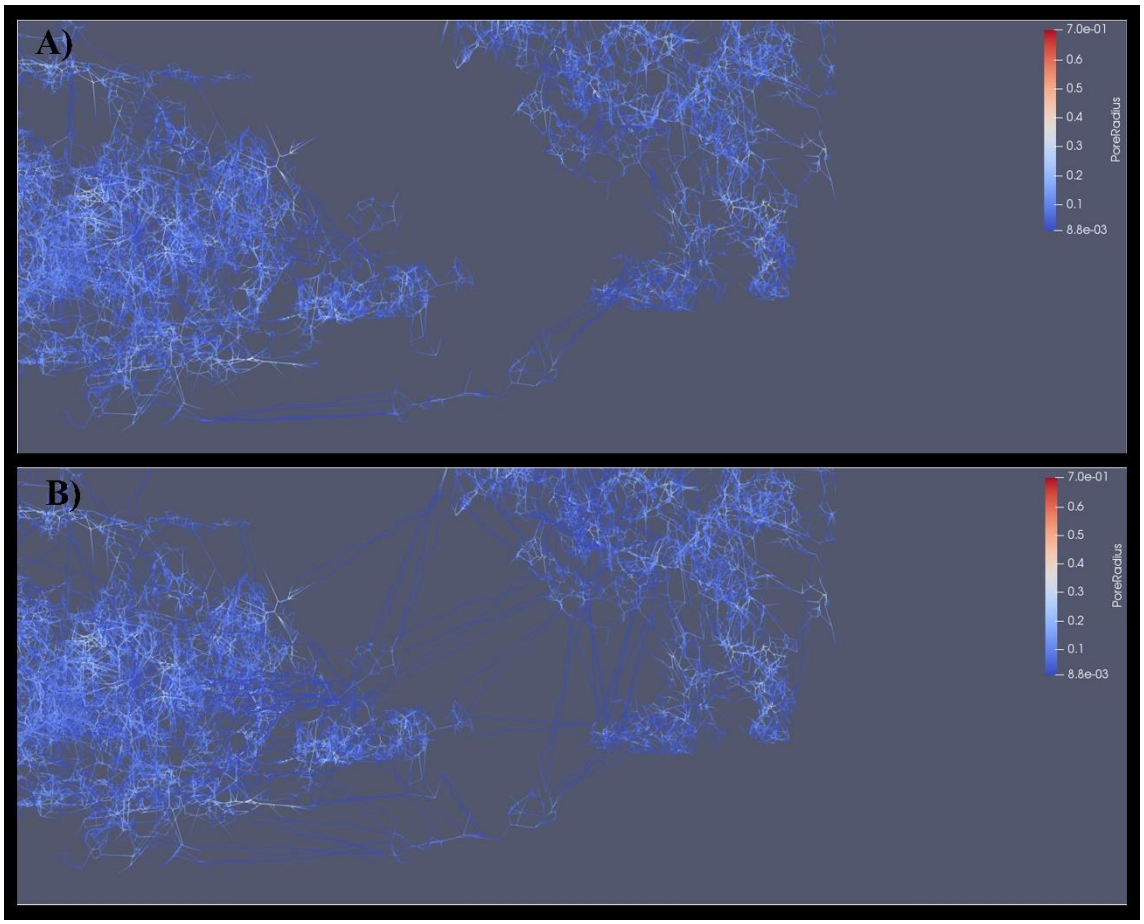

Figura 4-6 – Comparação da topologia gerada pelo Experimento 1 (A) e 2 (B). Apesar do Experimento 2 realizar um número menor de conexões entre um par de redes, este considera que as conexões devam ser realizadas com um número maior de vizinhos, resultando em uma topologia mais complexa.

O modelo pode ser observado também pelos gradiente de pressão obtido pelo simulador, resultando na figura 4-7. Conforme esperado, a variação do gradiente na região central da amostra, onde existem canais de fluxo propiciados apenas pela microporosidade, é mais intenso, resultado do número menor de canais e de suas dimensões.

O resultado final da estimativa de permeabilidade para o modelo gerado no Experimento 2 foi de 1,2297 . 10^{-15}, significativamente maior que o apresentado em 4.1.1, conforme esperado. Apesar da diferença em relação ao valor real (33 . 10^{-15}), este resultado pode ser considerado, para fins de simulação, o mesmo valor que a permeabilidade medida em laboratório, sendo, portanto, um resultado promissor. Um fato importante a ser ressaltado é que o escoamento simulado para a rede pode ser consideravelmente diferente do que

ocorre no meio poroso real, mesmo que a permeabiliade absoluta esteja próxima. Sendo assim, um estudo mais aprofundado e envolvendo uma maior variedade de amostras e calibradores precisaria ser desenvolvido para averiguar a capacidade do algoritmo gerar um modelo representativo.

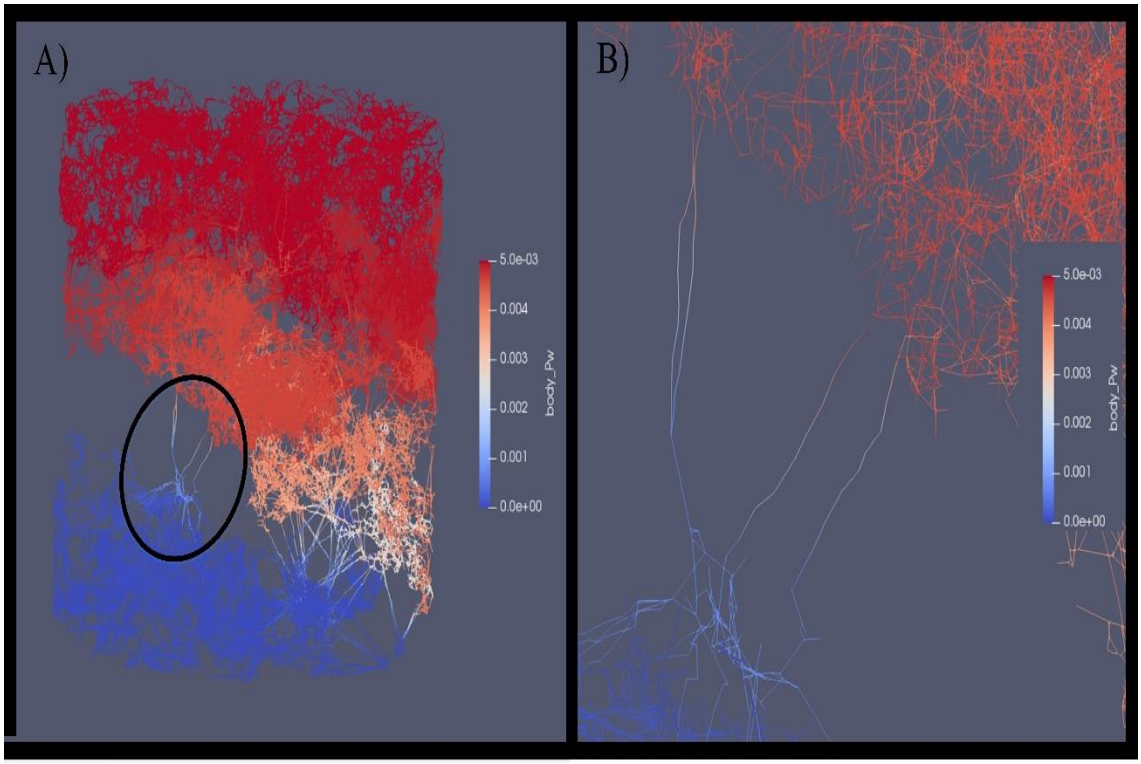

Figura 4-7 – Gradiente de pressão obtido após a simulação do escoamento monofásico, sendo a pressão apresentada em Pa. Na região central do modelo, destacada em (A), onde o escoamento entre a base e topo ocorre apenas pela microporosidade, a variação da pressão é muito mais intensa, dada o menor número de canais de escoamento e o menor diâmetro das gargantas (B).

Na tabela 4.1 encontram-se as estimativas obtidas pela simulação, assim como o valor obtido em laboratório, conforme descrito em 3.1.1, e a discrepância absoluta tendo como base o resultado do permeâmetro.

Tabela 4.1 – Resumo dos resultados obtidos para permeabilidade via simulação e experimento laboratorial.

	Permeabilidade Absoluta (mD)	**Discrepância Absoluta (mD)**
Laboratório	33	-
Experimento 1	0,42016	32,58
Experimento 2	1,2297	31,77

4.2 Resultados de Custo Computacional

O estudo do desempenho do computacional para os diferentes experimentos é uma ferramenta fundamental para avaliar as escolhas realizadas durante o desenvolvimento da metodologia e código. Ao mesmo tempo, este estudo oferece a possibilidade de identificar as áreas críticas que mais podem se beneficiar com melhorias e modificações nos algoritmos, servindo como ponto de partida para trabalhos futuros e apontando as áreas de maior dificuldade. Com esses intuitos, a presente seção abordará os principais aspectos observados em relação ao tempo de execução do programa elaborado.

4.2.1 Efeito do Número de Redes Consideradas

Conforme discutido em 3.4, as medidas de tempo de cada etapa do código devem ser analisadas considerando não apenas o tempo de execução propriamente dito, mas também o número de vezes que cada etapa foi refeita devido a uma tentativa falha. Seguindo a classificação apresentada nessa seção, os resultados obtidos para os experimentos tipo (1,1) estão dispostos na tabela 4.2. Mesmo para este caso em que são elaboradas poucas conexões por rede, o tempo total de execução das iterações (i.e total descontado o tempo referente a etapa de definição das conexões entre redes) aumentou em 23 vezes ao passar da Malha 500 a Malha 10. Apesar do valor absoluto ainda estar dentro de um intervalo razoável de duração, o aumento do número de conexões, que caracteriza os demais experimentos, rapidamente eleva a ordem de grandeza para escala de dias, inviabilizando a realização de todas as combinações experimentais de Malhas e Tipos.

O tempo médio de conclusão de uma iteração ponderado pelo número de conexões realizadas mostrou-se relativamente estável, não sendo presenciada mudança na grandeza dos valores, conforme apontado na tabela 4.2. Acredita-se que as variações observadas sejam decorrentes do processo de criação da microporosidade, que pode envolver redes e poros diferentes, e a aleatoriedade do método.

Observando exclusivamente a participação percentual das etapas de verificação, poder-se-ia concluir erroneamente que o tempo de execução do algoritmo de verificação de interseção tipo 2 é significativamente superior, estando seu valor absoluto em média uma ordem de grandeza acima. Entretanto, observa-se que ao dividir o tempo total de cada verificação pelo número de falhas, obtém-se o tempo médio por execução que, conforme mostrado na figura 4.4, é superior para o tipo 1 em quase todos os casos. Considerando ainda que a verificação de interseção do tipo 2 acontece com frequência significativamente maior, justifica-se assim a ordenação com que as verificações são realizadas durante o programa (seção 3.2.1.9).

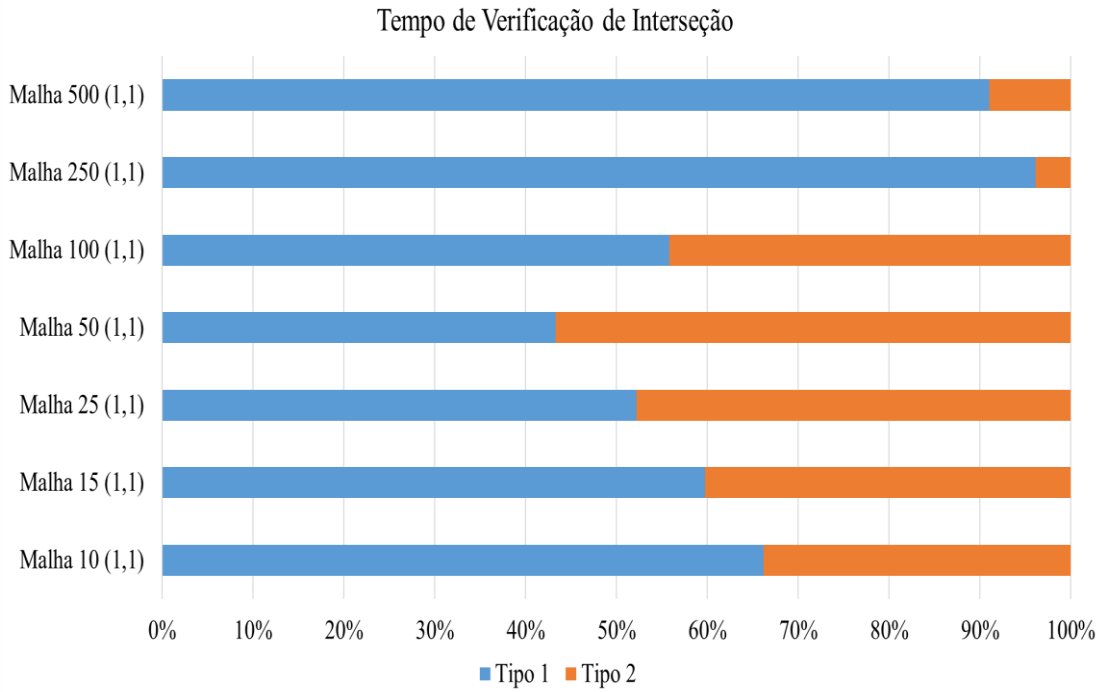

Figura 4.4 – Porcentagem de tempo médio despendido para a verificação de interseção para os tipos 1 e 2. Nota-se que para os casos envolvendo apenas redes de maior dimensão (malhas 500 e 250) a proporção de tempo para verificar-se a interseção do tipo 1 (cruzamento das gargantas sem poros em comum) é muito maior que nos demais casos. Essa proporção apresenta tendência de se reduzir com a diminuição do tamanho médio das redes consideradas (malhas 100 e 50), porém atinge um ponto de inflexão a partir do qual o número de redes envolvidas torna-se mais significativo que seu tamanho médio (tendência entre as malhas 50 e 10).

Tabela 4.2– Tempo e número de falhas para os Experimentos tipo (1,1)

	Experimentos						
	(1,1)	**(1,1)**	**(1,1)**	**(1,1)**	**(1,1)**	**(1,1)**	**(1,1)**
Características	**Malha 10**	**Malha 15**	**Malha 25**	**Malha 50**	**Malha 100**	**Malha 250**	**Malha 500**
Tempo de Execução (min)							
Total	86.23 (100 %)	48.1 (100 %)	27.78 (100 %)	10.62 (100 %)	7.38 (100 %)	4.5 (100 %)	3.75 (100 %)
Definir Conexão das Redes	11.2 (12.98 %)	5.31 (11.04 %)	4.25 (15.31 %)	3.88 (36.56 %)	3.94 (53.41 %)	3.56 (79.04 %)	3.49 (93.05 %)
Obter Possíveis Centros	0.22 (0.25 %)	0.12 (0.24 %)	0.06 (0.2 %)	0.02 (0.22 %)	0.01 (0.15 %)	0.01 (0.15 %)	<0.01 (0.12 %)
Criar Microporos	74.8 (86.74 %)	42.66 (88.68 %)	23.46 (84.46 %)	6.7 (63.14 %)	3.42 (46.34 %)	0.93 (20.68 %)	0.25 (6.67 %)
Total das Iterações	75.03 (87.02 %)	42.79 (88.96 %)	23.53 (84.69 %)	6.73 (63.44 %)	3.44 (46.59 %)	0.94 (20.96 %)	0.26 (6.95 %)
Verificar Interseção Tipo1	6.48 (7.52 %)	4.45 (9.26 %)	2.78 (10.02 %)	0.76 (7.14 %)	0.3 (4.06 %)	0.01 (0.13 %)	<0.01 (0.13 %)
Verificar Interseção Tipo 2	65.12 (75.52 %)	36.52 (75.93 %)	19.8 (71.28 %)	5.68 (53.49 %)	2.97 (40.29 %)	0.88 (19.56 %)	0.23 (6.08 %)
Verificar Interseção Tipo 1 - Média	4.88E-07	1.43E-06	4.59E-06	1.86E-05	1.50E-04	1.99E-02	4.98E-02
Verificar Interseção Tipo 2 - Média	2.50E-07	9.63E-07	4.20E-06	2.43E-05	1.18E-04	8.11E-04	4.94E-03
Total das Iterações - Ponderado	9.02E-02	8.93E-02	8.85E-02	5.70E-02	9.30E-02	7.83E-02	8.67E-02
Tempo médio por Iteração (*loop*)	0.07 (0.08 %)	0.06 (0.13 %)	0.07 (0.25 %)	0.04 (0.41 %)	0.05 (0.72 %)	0.04 (0.84 %)	0.03 (0.7 %)
Falhas							
Conexão	2.26E+05	8.20E+04	1.83E+04	4.06E+03	886	177	40
Sobreposição	1.03E+07	3.76E+06	1.18E+06	5.58E+04	1.51E+04	3	0
Interseção Tipo 1	1.33E+07	4.53E+06	1.41E+06	3.49E+05	4.33E+04	325	130
Interseção Tipo 2	2.61E+08	6.76E+07	1.55E+07	2.68E+06	5.51E+05	8.03E+04	1.32E+04

4.2.2 Efeito da Natureza das Conexões

Considerando uma única malha, porém variando o número de conexões entre as redes e o número de redes a que cada uma deve ser conectada, pode-se avaliar e estimar o tempo necessário para o algoritmo realizar todas as conexões estipuladas em diferentes situações. Na figura 4.5 estão presentes os valores obtidos para cada experimento realizado, sendo que nem todos os tipos de experimentos foram realizados para todas as malhas devido ao tempo necessário para tal.

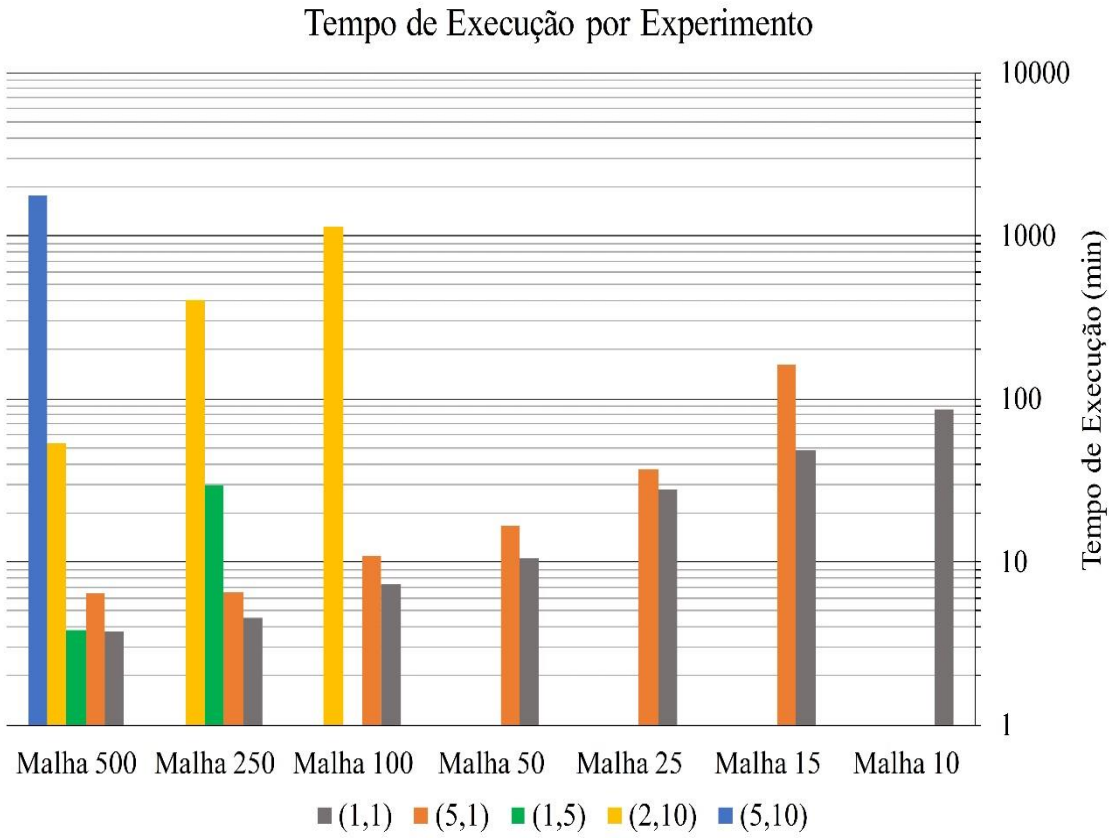

Figura 4.5 – Tempo despendido para completar cada experimento. O menor limite mínimo de poros pertencente a uma rede para esta ser considerada (valor seguido pelo termo “Malha”) significa maior número de redes presentes no sistema que devem ser conectadas pelo algorítmo. Apesar do aumento do tempo de execução ser, portanto, esperado, a tendência de crescimento exponencial observada nos experimentos de tipo (1,1), (5,1) e (2,10) tornou inviável, com os computadores disponíveis, a realização dos tipos de experimentos em que se exigia um número maior de conexões, como o tipo (5,10).

Mesmo empregando rotinas para reduzir o tempo total de execução, modificando a ordem com que as verificações são realizadas e buscando otimizar o algoritmo, este ainda sofre com um incremento expressivo do tempo despendido a medida que o número de conexões ou número de redes cresce. O princípio de *backtracking* empregado na metodologia e código, apesar de apresentar resultados satisfatórios para os experimentos de menor porte, é incapaz de lidar, de maneira eficiente, com os casos mais complexos, tornando necessária a inclusão de outras rotinas para seu adequado funcionamento. Algumas das alternativas levantadas que podem resultar em um considerável aprimoramento em trabalhos futuros são: mudanças no critério de seleção dos poros, evitando-se testar poros mais interiores a rede e, portanto, mais propícios a presença de obstáculos; aplicação de algum método inteligente de busca pelos possíveis centros para os microporos, reduzindo as chances de falhas de interseção do tipo 2 e sobreposição; e elaboração de alguma rotina de mudança das redes a serem conectadas, baseada na estrutura dessas redes e dificuldade esperada para conectar seus poros.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho foram apresentados os conceitos básicos de escoamento em meio poroso, assim como o significado e importância da utilização do volume elementar representativo em estimativas e medições dos parâmetros petrofísicos, em especial no caso de rochas com grande heterogeneidade, como carbonatos. As técnicas de imageamento, segmentação, análise de imagem e reconstrução de modelos de sistemas porosos também foram abordados, dando-se destaque a microtomografia computadorizada de raios-X, por ser a técnica utilizada para obter os dados utilizados para a reconstrução, e ao *Pore Network Model*, por ser o modelo adotado no desenvolvimento do presente trabalho. As principais equações utilizadas durante a simulação do escoamento monofásio em PNM também foram apresentadas, com o intuito de expor, em sua totalidade, o processo para a estimativa da permeabilidade absoluta em petrofísica digital.

Uma vez tendo contextualizado o trabalho, apresentou-se as características do estudo realizado, como a caracterização da amostra, e breve descrição dos ensaios laboratoriais pertinentes. As considerações quanto aos parâmetros utilizados para a microporosidade reconstruída, assim como as dificuldades encontradas na adequada descrição desse microssistema também foram discutidas, para então se abordar em detalhes o algoritmo desenvolvido.

A importância e relevância da compreensão e caracterização do escoamento em meios porosos se estendem para diversas áreas do conhecimento, encontrando na indústria do petróleo posição fundamental na engenharia de reservatórios. Para esses fins, a construção de modelos representativos, capazes de incluir as heterogeneidades inerentes dos sistemas estudos, ao mesmo tempo em que oferecem simplificações suficientes para viabilizarem sua utilização em simulações, é uma das peças chave e necessita o esforço conjunto da geologia, física, química, engenharia e ciência da computação. Desta forma, mesmo em princípio, o algoritmo desenvolvido e sua referente metodologia são apenas uma pequena fração do esforço que envolve o estudo do escoamento em meios porosos.

O algoritmo proposto e descrito neste trabalho (Geração Aleatória Guiada Dentro de um Volume Limitado) apresenta potencial em auxiliar na construção de modelos de PNM, contribuindo para a obtenção de redes mais adequadas para a simulação desses modelos, além de permitir uma maior incorporação da microporosidade, uma das características determinantes de rochas carbonáticas. Sua aplicabilidade em modelos em escala de

plugue foi demostrada, mesmo considerando a limitação de processamento imposta pelas rotinas do código e os computadores utilizados. Dito isso, melhorias e alternativas às abordagens selecionadas no desenvolvimento deste trabalha ainda são abundantes e promissoras.

Dentre os muitos campos ainda em aberto ao final deste trabalho, destacam-se três que se acredita serem os mais significativos para o desenvolvimento de trabalhos futuros. O primeiro é a melhor compreensão dos parâmetros da microporosidade, como a distribuição das dimensões de poros e gargantas, assim como um maior entendimento de sua topologia. A caracterização da microporosidade através da análise petrográfica pode ser uma ferramenta fundamental no entendimento e quantificação dessas estruturas, permitindo, talvez, sua melhor tradução para o modelo, o que em muito beneficiaria sua representatividade.

Um segundo campo de grande importância é a elaboração de critérios mais realistas para a seleção das redes a serem conectadas, permitindo um direcionamento mais acurado do esforço computacional do programa, além de conferir às conexões criadas maior significado estatístico. Para esse fim, a petrografia e o conhecimento do processo diagenético das estruturas porosas da rocha carbonática podem oferecer indícios da conectividade da amostra.

A terceira grande área de estudo que ainda pode ser explorada em continuidade a este trabalho é a avaliação da representatividade do modelo gerado. Avaliando não apenas as características físicas do modelo, mas também sua resposta relacionada a parâmetros petrofísicos de interesse, como a permeabilidade relativa em escoamento bifásico e a porosidade.

Por fim, melhorias quanto ao funcionamento do algoritmo propriamente dito, como desenvolvimento de rotinas inteligentes para limitar o universo explorado pelo código, contribuiria para sua maior eficiência, possivelmente ampliando sua atuação para um número maior de redes desconectadas.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] BULTREYS, TOM, WESLEY DE BOEVER, VEERLE CNUDDE , "Imaging and image-based fluid transport modeling at the pore scale in geological materials: A practical introduction to the current state-of-the-art", **Earth-Science Reviews** v. 155, pp. 93-128, Apr. 2016.

[2] QUEIROZ GALVÃO. "Tipos de Rochas", 2018. Disponível em: http://www.qgep.com.br/static/ptb/tipos-de-rochas.asp?idioma=ptb. Acesso em: 22 Jan. 2018, 18:24:31.

[3] PRODANOVIĆ, MAŠA, AYAZ MEHMANI, ADRIAN P. SHEPPARD, "Imaged-based multiscale network modelling of microporosity in carbonates" **Geological Society, London, Special Publications**, v. 406, n. 1, pp. 95-113, Jun. 2015.

[4] JENNINGS JR, JAMES W., F. JERRY LUCIA, 2001. "Predicting permeability from well logs in carbonates with a link to geology for interwell permeability mapping", **SPE Annual Technical Conference and Exhibition**, 71336-MS, New Orleans, Louisiana, USA, 30 September – 3 October.

[5] XIONG, QINGRONG, TODOR G. BAYCHEV, ANDREY P. JIVKOV, "Review of pore network modelling of porous media: Experimental characterisations, network constructions and applications to reactive transport", **Journal of Contaminant Hydrology** v. 192, pp. 101-117, Sept. 2016.

[6] VOGEL, H-J., et al. , "Comparison of a lattice-Boltzmann model, a full-morphology model, and a pore network model for determining capillary pressure–saturation relationships" **Vadose Zone Journal** v. 4, n. 2, pp. 380-388, May. 2005.

[7] BEAR, JACOB, **Dynamics of fluids in porous media**. 1 ed. New York, Dover Publications inc., 1972.

[8] AHR, W. M. **Geology of Carbonate Reservoirs: The Identification, Description, and Characterization of Hydrocarbon in Carbonate Rocks**, 1 ed. New Jersey, Wiley, 2008.

[9] SELLEY, RICHARD C. **Applied sedimentology**, 2 ed. San Diego, Elsevier, 2000.

[10] LUCIA , F. J., "Petrophysical parameters estimated from visual descriptions of carbonate rocks: a field classification of carbonate pore space" . Journal of Petroleum Technology" v. 35, n. 3, pp. 629 – 637, Mar. 1983.

[11] BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. **Transport Phenomena**, 2 ed. New York, John Wiley & Sons, 1960.

[12] VIK, B., E. BASTESEN, A. SKAUGE, "Evaluation of representative elementary volume for a vuggy carbonate rock—Part: Porosity, permeability, and dispersivity", **Journal of Petroleum Science and Engineering** v. 112, pp. 36-47, Dec. 2013.

[13] CORBETT, P. W. M., ANGGRAENI, S., BOWDEN, D., "The use of the probe permeameter in carbonates-addressing the problems of permeability support and stationarity", **The Log Analyst** v.40, n. 5, pp. 316–326, Sept. 1999.

[14] WILDENSCHILD, DORTHE, ADRIAN P. SHEPPARD, "X-ray imaging and analysis techniques for quantifying pore-scale structure and processes in subsurface porous medium systems", **Advances in Water Resources** v. 51, pp. 217-246, Jan. 2013.

[15] HOERLLE, F. O., SILVA, W. G. A. L., RIOS, E. H., SILVEIRA, T. M. G., COUTO, P.; ALVES, J. L. D., LIMA, M. C. O., BORGHI, L., CORBETT, P. W. M., 2017. "Evaluation of segmentation procedures using X-ray computed microtomography images of coquinas from Morro do Chaves Formation - NE Brazil", **XXXVIII IberianLatin American Congress on Computational Methods in Engineering**, Florianopolis, Santa Catarina, Brasil.

[16] BLUNT, MARTIN J., et al., "Pore-scale imaging and modelling." **Advances in Water Resources** v. 51, pp. 197-216, Jan. 2013.

[17] RAOOF, A., et al., "PoreFlow: A complex pore-network model for simulation of reactive transport in variably saturated porous media", **Computers & Geosciences** v. 61, pp. 160-174, Dec. 2013.

[18] JOEKAR-NIASAR, VAHID, S. MAJID HASSANIZADEH, "Effect of fluids properties on non-equilibrium capillarity effects: Dynamic pore-network modeling", **International Journal of Multiphase Flow** v. 37, n. 2, pp. 198-214, Mar. 2011.

[19] NOGUEIRA, M. S., LEMOS, V.B., S. TERRA, G. J., "As 'coquinas' do membro Morro do Chaves, cretáceo inferior da bacia de alagoas, e seu potencial para reservatório de petróleo". In: **2º Congresso Brasileiro P&D em Petróleo e Gás**, Rio de Janeiro, Jun. 2003.

[20] ESTRELLA, R. R., **Variação da Porosidade e da Permeabilidade em Coquinas da Formação Morro do Chaves (Andar Jiquiá), Bacia Sergipe-Alagoas**. Monografia, Geologia – Instituto de Geologia (IGEO), Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2015

[21] TELES, A. P. **Aplicação da Microtomografia Computadorizada de Raios X por Dupla-Energia na Caracterização de Materiais Porosos**. Tese de D.Sc., Programa de Pós-Graduação em Engenharia Nuclear – COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ – Brasil, 2016.

[22] LUCIA, F. J. **Carbonate reservoir characterization: an integrated approach**. 2 ed. Springer Science & Business Media, 2007. [NAO SEI O LOCAL]

[23] DE VRIES, ENNO T., AMIR RAOOF, MARTINUS TH VAN GENUCHTEN, "Multiscale modelling of dual-porosity porous media; a computational pore-scale study for flow and solute transport", **Advances in water resources** v. 105, pp. 82-95, Jul. 2017.

[24] JOHN D'ERRICO. "IPDM: Inter-Point Distance Matrix". Disponível em: https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/18937-ipdm--inter-point-distance-matrix. Acesso em: 15 Oct. 2017.

[25] DAN SUNDAY. "Distance Between 3D Lines & Segments". Disponível em: http://geomalgorithms.com/a07-_distance.html. Acesso em: 10 Dec. 2017.

APÊNDICE

APÊNDICE A – Formatação dos Arquivos de *Input* e *Output*

Todos os arquivos de *input* são fornecidos no formato de arquivo de texto (*.txt*), sendo importados e estruturados conforme descrito a seguir:

- Centro dos poros: matriz de três colunas, correspondentes as coordenadas X, Y e Z do plano cartesiano;
- Pares de poros conectados: matriz de duas linhas, em que cada coluna corresponde a um par de poros;
- Raio dos poros: matriz de uma coluna, ordenada de acordo com o centro dos poros;
- Raio das gargantas: matriz de uma coluna, ordenado de acordo com pares de poros conectados;
- Pares de redes a serem conectadas: matriz de duas linhas, em que cada coluna corresponde a um par de redes;

Os arquivos de *output* são gerados em formato de arquivo de texto (*.txt*), com a informação do centro e diâmetro dos microporos, suas ligações e o diâmetro dessas gargantas. Um arquivo de extensão *.vtu* também é elaborado, permitindo a análise do resultado em programas livres, como o *ParaView 5.3.0* utilizado neste trabalho.

APÊNDICE B – Pseudocódigos

Algorithm 1 Definição das Redes Desconectadas - alternativa 1

Require: Spherical macro pores x, y, z centers (C),
x, y and z limits of each neighborhood (A_{lim})
Ensure: Macro pores that comprise each neighborhood ($Nhood$)

```
1: Nhood ← ∅
2: for j = 1 to length(C) do
3:     x ← C[j][1]
4:     y ← C[j][2]
5:     z ← C[j][3]
6:     for i = 1 to length(A_lim) do
7:         x_lim ← A_lim[i][1], A_lim[i][2]
8:         y_lim ← A_lim[i][3], A_lim[i][4]
9:         z_lim ← A_lim[i][5], A_lim[i][6]
10:        if x_lim[1] <= x <= x_lim[2] and y_lim[1] <= y <= y_lim[2] and
   z_lim[1] <= z <= z_lim[2] then
11:            Nhood[i][end] ← j
12: break
13:        end if
14:    end for
15: end for
```

Algorithm 2 Definição das Redes Desconectadas - alternativa 2

Require: Spherical macro pores x, y, z centers (C),
Pairs of connections ($Conf$)

Ensure: Macro pores that comprise each neighborhood ($Nhood$)

1: $start \leftarrow Conf[1][1]$
2: $pores_checked \leftarrow start$
3: $old_tree_slice \leftarrow start$
4: $tree_slice \leftarrow \varnothing$
5: $full_tree \leftarrow start$
6: $connection_possible \leftarrow true$
7: $Nhood \leftarrow \varnothing$
8: **while** $connection_possible$ **do**
9: **for** $i = 1$ to $length(old_tree_slice)$ **do**
10: $start \leftarrow old_tree_slice[i]$
11: $connection_list \leftarrow$ [all connections in $Conf$ including $start$]
12: **for** $connection$ in $connection_list$ **do**
13: $pore \leftarrow connection.match(start)$
14: **if** $pore$ not in $pores_checked$ **then**
15: $tree_slice.append(pore)$
16: $full_tree.append(pore)$
17: $pores_checked.append(pore)$
18: **end if**
19: **end for**
20: **end for**
21: **if** $tree_slice$ is empty **then**
22: $Nhood.append(full_tree)$ ▷ saving $full_tree$
23: $pores_not_checked \leftarrow$ [all pores in $Conf$ and not in $pores_checked$]
24: **if** $pores_not_checked$ is empty **then**
25: $connection_possible \leftarrow false$ ▷ end the while loop
26: **else**
27: $start \leftarrow pores_not_checked[1]$
28: restart variables to iteration in line 8
29: **end if**
30: **else**
31: $old_tree_slice \leftarrow tree_slice$
32: $tree_slice \leftarrow \varnothing$
33: **end if**
34: **end while**

Algorithm 3 Seleção Preliminar dos Pares de Poros

Require: Macro pores in each neighborhood ($Nhood$)
List of zone's pairs to connect ($Zone_{CONF}$)
Number of desired connections between neighborhood (n_{con})
Ensure: Preliminary pairs of macro pores to be connected ($Nhood_{con}$)

$Nhood_{con} \leftarrow \varnothing$
for $zone_pair$ in $Zone_{CONF}$ **do**
    $ClosestPairs, distances \leftarrow$ IPDM($Nhood[zone_pair]$, "closest")
    $sort(distances)$
    for $i = 1$ to n_{con} **do**
        $pair \leftarrow ClosestPairs$ related to $distances[i]$
        $Nhood_{con}.append(pair)$
    end for
end for

Algorithm 4 Delimitação do Volume Inter-Poros

Require: Pair of macro pores to connect ($pair$)
Macro pores center x, y, z centers (C)
Radius of macro pores (R)
Volume correction factor (Vol_{cor})
Ensure: Alpha shape of the hexahedron ($hexahedron$)

$Vol_{cor} \leftarrow$ VolumeCorrector($Nhood_{con}$) ▷ function that gets the volume correction factor (See XXX)
$pore1 \leftarrow pair[1]$
$pore2 \leftarrow pair[2]$
if $C_{pore2}[3] < C_{pore1}[3]$ **then** ▷ position 3 is the Z coordinate
    Swap $pore1$ and $pore2$
end if
$R_{pore1} * Vol_{cor}[1]$
$R_{pore2} * Vol_{cor}[2]$

▷ Finding the vertexes that form the hexahedron
for $pore$ in $[pore1, pore2]$ **do**
    $r \leftarrow R_{pore}$
    $pt1 \leftarrow [x + r, y + r, z]$
    $pt2 \leftarrow [x + r, y - r, z]$
    $pt3 \leftarrow [x - r, y + r, z]$
    $pt4 \leftarrow [x - r, y - r, z]$
    $vertexes.append(pt1, pt2, pt3, pt4)$
end for
$hexahedron \leftarrow$ alphaShape($vertexes$) ▷ fuction that connect the vertexes creating a polyhedron

Algorithm 5 Definição dos Possíveis Centros

Require: Alpha shape of the hexahedron (*hexahedron*)
Vertexes of the hexahedron in (x,y,z) format (*vertexes*)
Number of sections (num_{sec})

Ensure: Possible micropores centers (*PossiblePoints*)
Number of points in each section (*PointsPerSec*)

Divide *hexahedron* in num_{sec} sections
$i \leftarrow 1$
while $i <= num_{sec}$ **do**
    random_centers $\leftarrow$ 1000 random generated points inside parallelepiped arround section i
    for *point* in *random_centers* **do**
        if *point* in *hexahedron* **then** ▷ checked using *inShape*() function
            $PossiblePoints.append(point)$
            $PointsPerSec[i] = PointsPerSec[i] + 1$
        end if
    end for
    if $PointsPerSec[i] >= 500$ **then** ▷ go to next iteration only after getting 500 points
        $i = i + 1$
    end if
end while

APÊNDICE C – Resultados de Custo Computacional para experimentos tipos (5,1), (1,5), (2,10) e (5,10)

	(5,1)	(5,1)	(5,1)	(5,1)	(5,1)	(5,1)	(5,1)
Características	**Malha 25**	**Malha 50**	**Malha 100**	**Malha 200**	**Malha 300**	**Malha 400**	**Malha 500**
Microporos							
nº de microporos	N/A	1193	399	185	144	72	42
máximo raio (mm)	N/A	0.00906	0.00906	0.00906	0.00906	0.00906	0.00906
mínimo raio (mm)	N/A	0.008811	0.008833	0.008811	0.008811	0.008811	0.008811
média raio (mm)	N/A	0.0089855289	0.008983609	0.008973659	0.008962438	0.00895697	0.00895698
Micro Gargantas							
nº de gargantas	N/A	1761	584	265	199	97	57
máximo raio (mm)	N/A	0.009075	0.009075	0.009075	0.009075	0.009075	0.009075
mínimo raio (mm)	N/A	0.007894	0.007894	0.007894	0.007894	0.007894	0.007894
média raio (mm)	N/A	0.0088973896	0.008893483	0.008887706	0.008879452	0.00886515	0.00884832
mínimo comprimento (mm)	N/A	0.6578221	0.6550105	0.6550105	0.5592777	0.524512	0.524512
máximo comprimento (mm)	N/A	0.002376088	0.01456956	0.01456956	0.03336513	0.035783	0.035783
média comprimento (mm)	N/A	0.21831811	0.226268	0.2329373	0.2335119	0.238305	0.241473

	(5,1)	(5,1)	(5,1)	(5,1)	(5,1)	(5,1)	(5,1)
Características	**Malha 25**	**Malha 50**	**Malha 100**	**Malha 200**	**Malha 300**	**Malha 400**	**Malha 500**
Tempo de Execução							
Total	N/A	162.5 (100 %)	37.01 (100 %)	16.55 (100 %)	10.87 (100 %)	6.5 (100 %)	6.44 (100 %)
Definir Conexão das Redes	N/A	4.42 (2.72 %)	4.34 (11.72 %)	4.15 (25.05 %)	3.99 (36.69 %)	3.89 (59.76 %)	4.01 (62.29 %)
Obter Possíveis Centros	N/A	0.23 (0.14 %)	0.09 (0.24 %)	0.03 (0.2 %)	0.03 (0.24 %)	0.01 (0.19 %)	0.01 (0.16 %)
Criar Microporos	N/A	157.8 (97.1 %)	32.53 (87.9 %)	12.35 (74.6 %)	6.83 (62.88 %)	2.59 (39.8 %)	2.4 (37.32 %)
Total das Iterações	N/A	158.09 (97.28 %)	32.67 (88.28 %)	12.41 (74.95 %)	6.88 (63.31 %)	2.62 (40.24 %)	2.43 (37.71 %)
Tempo médio por Iteração (*loop*)	N/A	0.11 (0.07 %)	0.07 (0.18 %)	0.07 (0.41 %)	0.06 (0.54 %)	0.05 (0.75 %)	0.06 (0.94 %)
		NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)
Verificar Sobreposição	N/A	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)
Verificar Interseção Tipo1	N/A	7.61 (4.68 %)	1.23 (3.32 %)	0.58 (3.49 %)	0.13 (1.18 %)	0.02 (0.29 %)	0.02 (0.27 %)
Verificar Interseção Tipo 2	N/A	144.97 (89.21 %)	30.04 (81.17 %)	11.32 (68.41 %)	6.44 (59.24 %)	2.47 (37.98 %)	2.29 (35.6 %)
Falhas							
Conexão	N/A	541503	64678	9334	3539	873	533
Sobreposição	N/A	11576092	778973	136429	16548	5730	3864
Interseção Tipo 1	N/A	19072600	1274751	221278	31001	1728	1110
Interseção Tipo 2	N/A	514756896	42665271	4824683	1873065	399256	242451

	(1,5)	(1,5)
Características	**Malha 250**	**Malha 500**
Tempo de Execução		
Total	29.76 (100 %)	3.85 (100 %)
Definir Conexão das Redes	3.35 (11.25 %)	3.26 (84.8 %)
Obter Possíveis Centros	0.66 (2.22 %)	0.01 (0.33 %)
Criar Microporos	25.72 (86.43 %)	0.56 (14.56 %)
Total das Iterações	26.41 (88.75 %)	0.58 (15.2 %)
Tempo médio por Iteração (*loop*)	0.08 (0.25 %)	0.02 (0.58 %)
	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)
Verificar Sobreposição	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)
Verificar Interseção Tipo1	0.22 (0.73 %)	0.01 (0.14 %)
Verificar Interseção Tipo 2	23.92 (80.36 %)	0.52 (13.55 %)
Falhas		
Conexão	53206	239
Sobreposição	843266	0
Interseção Tipo 1	148275	338
Interseção Tipo 2	57789469	131958

	(1,5)	(1,5)
Características	**Malha 250**	**Malha 500**
Microporos		
nº de microporos	245	37
máximo raio (mm)	0.00906	0.00906
mínimo raio (mm)	0.008809	0.008811
média raio (mm)	0.008934339	0.00894135
Micro Gargantas		
nº de gargantas	298	47
máximo raio (mm)	0.009075	0.008993
mínimo raio (mm)	0.007894	0.007894
média raio (mm)	0.008882752	0.00886989
mínimo comprimento (mm)	0.5487143	0.499499
máximo comprimento (mm)	0.02483089	0.0527763
média comprimento (mm)	0.2451848	0.254194

	(2,10)	(2,10)	(2,10)	(5,10)
Características	**Malha 100**	**Malha 250**	**Malha 500**	**Malha 250**
Microporos				
nº de microporos	7939	3075	976	8403
máximo raio (mm)	0.009102	0.009102	0.009102	0.009102
mínimo raio (mm)	0.008783	0.008783	0.008809	0.008783
média raio (mm)	0.0089220325	0.0089216751	0.008921133	0.008921575
Micro Gargantas				
nº de gargantas	8702	3351	1057	9144
máximo raio (mm)	0.009075	0.009075	0.009075	0.009075
mínimo raio (mm)	0.007894	0.007894	0.007894	0.007819
média raio (mm)	0.0088784752	0.0088786494	0.0088786254	0.008878678
mínimo comprimento (mm)	0.9069164	0.6765817	0.5569508	0.6765817
máximo comprimento (mm)	0.003633566	0.007679899	0.01604857	0.007166206
média comprimento (mm)	0.26408767	0.26481873	0.26768343	0.26518648

	(2,10)	(2,10)	(2,10)	(5,10)
Características	**Malha 100**	**Malha 250**	**Malha 500**	**Malha 250**
Tempo de Execução				
Total	1136.97 (100 %)	403.59 (100 %)	52.94 (100 %)	1776.85 (100 %)
Definir Conexão das Redes	3.57 (0.31 %)	3.33 (0.83 %)	3.22 (6.09 %)	4.19 (0.24 %)
Obter Possíveis Centros	27.49 (2.42 %)	11.02 (2.73 %)	1.8 (3.4 %)	27.99 (1.57 %)
Criar Microporos	1104.6 (97.15 %)	388.69 (96.31 %)	47.69 (90.08 %)	1730.35 (97.38 %)
Total das Iterações	1133.4 (99.69 %)	400.26 (99.17 %)	49.72 (93.91 %)	1772.65 (99.76 %)
Tempo médio por Iteração (*loop*)	0.1 (0.01 %)	0.08 (0.02 %)	0.06 (0.12 %)	0.13 (0.01 %)
	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)	NaN (NaN %)
Verificar Sobreposição	5.89 (0.52 %)	4.09 (1.01 %)	0.27 (0.52 %)	23.71 (1.33 %)
Verificar Interseção Tipo1	30.22 (2.66 %)	14.34 (3.55 %)	0.7 (1.32 %)	23.6 (1.33 %)
Verificar Interseção Tipo 2	988.15 (86.91 %)	349.72 (86.65 %)	43.75 (82.64 %)	1590.05 (89.49 %)
Falhas				
Conexão	57842167	10785841	268060	81558696
Sobreposição	1538554069	401519041	505598	1905754696
Interseção Tipo 1	229061167	30800953	339300	218735938
Interseção Tipo 2	95846944212	14961942704	283853034	1.08694E+11